



Associação Instituto de Tecnologia de Pernambuco – ITEP OS
Mestrado Profissional em Tecnologia Ambiental

Hugo Anderson Coelho Veras de Sousa

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE CENÁRIOS DE
CONTAMINAÇÃO E REMEDIAÇÃO RESULTANTES DE UM
VAZAMENTO DE ÓLEO DIESEL EM UM POSTO DE COMBUSTÍVEIS**

Recife
Maio / 2006

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Hugo Anderson Coelho Veras de Sousa

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE CENÁRIOS DE
CONTAMINAÇÃO E REMEDIAÇÃO RESULTANTES DE UM
VAZAMENTO DE ÓLEO DIESEL EM UM POSTO DE COMBUSTÍVEIS**

Dissertação apresentada ao Instituto de
Tecnologia de Pernambuco – ITEP como
parte dos requisitos para obtenção do
título de Mestre em Tecnologia
Ambiental.

Orientador: Prof. Dr. Alexandre Duarte Gusmão

Recife
Maio / 2006

S729m

Sousa, Hugo Anderson Coelho Veras de, 1979 -
Modelagem e simulação numérica de cenários de contaminação
e remediação resultantes de um vazamento de óleo diesel em um
posto de combustíveis / Hugo Anderson Coelho Veras de Sousa.
- Recife: Ed. do Autor, 2006.

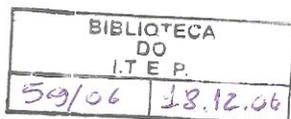
129f. :il.

Inclui bibliografia

Orientador: Prof. Dr. Alexandre Duarte Gusmão.
Dissertação (Mestrado) – Associação Instituto de Tecnologia de
Pernambuco – ITEP-OS, 2006.

1.COMBUSTÍVEIS DIESEL – VAZAMENTO. 2.
COMBUSTÍVEIS – CONTAMINAÇÃO E REMEDIAÇÃO. 3.
COMBUSTÍVEL LÍQUIDO. I. Gusmão, Alexandre Duarte. II.
Título

CDU 665.75



INSTITUTO DE TECNOLOGIA DE PERNAMBUCO – ITEP

MESTRADO PROFISSIONAL EM TECNOLOGIA AMBIENTAL

HUGO ANDERSON COELHO VERAS DE SOUSA

MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE CENÁRIOS DE CONTAMINAÇÃO E
REMEDIAÇÃO RESULTANTES DE UM VAZAMENTO DE ÓLEO DIESEL EM UM
POSTO DE COMBUSTÍVEIS.

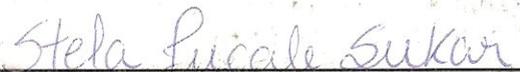
Dissertação apresentada e aprovada pela banca examinadora:

Orientador:



Dr. Alexandre Duarte Gusmão
Instituto de Tecnologia de Pernambuco - ITEP

Examinadores:



Dra. Stela Fucale Sukar
Universidade de Pernambuco - UPE



Dr. Jaime Joaquim da Silva Pereira Cabral
Universidade Federal de Pernambuco - UFPE

Recife – PE
5 de maio de 2006

*A Deus, por permitir minha chegada até aqui;
A meu pai, por me dar inspiração pessoal e profissional;
A minha mãe, por sempre acolher e cuidar de mim;
Aos meus irmãos, pela lealdade de sangue;
A minha esposa, pelo amor, companheirismo e força no convívio;
A meu filho, por dar sentido à minha vida;
A uma criança ainda desconhecida: só sei que sou pequeno diante do amor por ela;*

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Alexandre Duarte Gusmão, pela clareza e eficiência na orientação desta pesquisa. De fato, não mediu esforços para dispor ao meu favor tudo aquilo que estivesse ao seu alcance, sempre visando o melhor para o nosso trabalho.

Aos professores do corpo docente do Mestrado do ITEP, por sempre transmitirem com empenho e dedicação o conhecimento necessário à conclusão do curso.

Aos funcionários que integram o Mestrado do ITEP, pela generosidade e presteza ao nosso dispor. Em especial, para a Cris.

À professora Stela Fucale, da Universidade de Pernambuco, pela grande empenho e ajuda nas correções finais do trabalho.

Ao Professor Sílvio Romero, da Universidade Católica de Pernambuco, por disponibilizar o uso dos programas SEEP/W e CTRAN/W para a elaboração desta pesquisa.

Ao Professor Carlos, da British and American, por me ajudar na revisão do resumo em língua estrangeira.

À Pressa Engenharia, por ter me propiciado meios de acesso ao conhecimento, além de todo o suporte necessário à conclusão do curso.

À Carolina Knust, por me transmitir os relatórios de investigação de campo relacionados ao caso em estudo. Foi providencial.

A todos os colegas do Mestrado do ITEP, pela carinhosa convivência durante nossa jornada, além da ajuda de sempre nas horas mais difíceis. Em especial ao Edmilson, Galiza, Ivaldo, Nancy e Walmir: jamais esquecerei cada favor que vocês me fizeram.

Aos meus amigos, por completarem minha felicidade. Vocês foram verdadeiros “suportes” quando a carga pesou demais.

*No final, a diferença é notória,
Vivi uma vida oposta,
Dor que virou prazer,
Sacrifício que virou vitória,
Porém nada de anormal,
Porque se fez o que se gosta.*

O Autor.

RESUMO

O presente estudo teve como objetivo modelar e simular numericamente cenários de contaminação e remediação resultantes de um vazamento de óleo diesel em um posto de combustíveis. A partir de dados disponibilizados nos relatórios de investigação e diagnóstico do incidente, complementados por visitas do autor ao local, foram elaborados, através dos softwares SEEP/W e CTRAN/W, modelos conceituais para a solução dos respectivos problemas de fluxo hidrogeológico das águas subterrâneas e do transporte de contaminantes na fase dissolvida em meio poroso. O composto alvo da simulação foi o benzeno, presente no óleo diesel vazado. Nas simulações dos cenários de contaminação, estudos paramétricos avaliaram os efeitos inerentes ao transporte de contaminantes: (a) dimensão da piscina do contaminante na origem; (b) dispersividades longitudinais e transversais; (c) adsorção; (d) degradação; (e) adsorção com degradação. Os resultados mostraram que os efeitos da dimensão da piscina do contaminante e da adsorção contribuíram mais intensamente nos valores finais das concentrações. Nas simulações dos cenários de remediação, foram avaliadas: (a) aplicação da técnica de bombeamento para remoção de massa de contaminantes; (b) eficiência de contenção hidráulica de uma vala construída; (c) aplicação da técnica de remediação por atenuação natural monitorada. Os resultados mostraram que, para o caso do bombeamento, mesmo sob circunstâncias de dissolução favoráveis, após cerca 480 dias de operação, resquícios de contaminantes poderiam estar ainda presentes no sítio; para o caso da vala, mesmo após o início da operação de bombeamento nos dois poços de extração, o avanço da migração da pluma poderia não ser contido; e para o caso da atenuação natural monitorada, a técnica poderia ser adotada, desde que o sítio possuísse características moderadamente favoráveis ao processo de atenuação natural e que ações complementares fossem providas para diminuir a massa do contaminante na origem do vazamento.

Palavras-chave: Hidrocarbonetos, Petróleo, Benzeno, BTEX, Postos de Combustíveis, Contaminação, Remediação, Águas subterrâneas, Modelagem Numérica.

ABSTRACT

The aim of the present study was numerically modeling and simulating resultings contamination and remediation sceneries from a diesel fuel leakage in a gas station. From available data of the incident's investigation and diagnostic reports, complemented by visits of the author to the place, conceptual models were elaborated through programs SEEP/W and CTRAN/W, for the solution of the respective problems of hydrogeologic groundwater flow and the transport of dissolved contaminants in porous medium. The simulated compound was benzene, present in the spilled diesel fuel. In the simulations of the contamination sceneries, parametric studies had evaluated the inherent effect to the transport of contaminants: (a) dimension of contaminant pool in the source; (b) longitudinal and transversal dispersivities; (c) adsorption; (d) degradation; (e) adsorption with degradation. The results showed that the effect of the dimension of the contaminant pool and the adsorption had contributed more intensely in the final values of the concentrations. In the simulations of the remediation sceneries, were evaluated: (a) application of pumping technique for removal of contaminant mass; (b) efficiency of hydraulic containment of a built trench; (c) application of the monitored natural attenuation remediation technique. The results showed that, for the pumping case, in spite of favorable circumstances of dissolution, after approximately 480 days of operation, contaminants vestiges would still be present on site; for the trench case, even after the beginning of the pumping operation in the two extraction wells, plume migration could be not contained; and for the monitored natural attenuation case, the technique could be adopted, since the site had moderated favorable characteristics for natural attenuation process and complementary actions were provided to diminish the contaminant mass in the leakage source.

Key words: Hydrocarbons, Petroleum, Benzene, BTEX, Gas Station, Contamination, Remediation, Groundwater, Numerical Modeling.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1: Principais grupos de contaminantes encontrados nas áreas contaminadas entre Maio de 2002 e Novembro de 2005 (CETESB, 2005).	4
Figura 2.1: Migração de um LNAPL em um aquífero (adaptado de GUSMÃO, 2002).	11
Figura 2.2: Fases de contaminação por LNAPL no subsolo (adaptado de AZAMBUJA et al., 2000).	13
Figura 2.3 (a) e (b): Efeito da advecção e dispersão no processo de transporte de contaminante (adaptado de Krahn, 2004b).	15
Figura 2.4: Exemplo de discretização em malha regular (Krahn, 2004a).	18
Figura 2.5: Exemplo de discretização em malha irregular (Krahn, 2004a).	19
Figura 2.6: Típica função de variação umidade volumétrica da água para uma areia fina uniforme (adaptado de KRAHN, 2004a).	23
Figura 2.7: Balanço de massa através de um volume elementar de poro em uma dimensão (adaptado de KRAHN, 2004b).	28
Figura 2.8: Relação entre Adsorção e Concentração (adaptado de KRAHN, 2004b).	32
Figura 2.9: Ilustração dos fenômenos da oscilação e dispersão numéricas (adaptado de KRAHN, 2004b).	35
Figura 3.1 (a) e (b): Registros fotográficos do empreendimento (Penedo - AL, 2005).	39
Figura 3.2: Planta baixa do empreendimento: detalhe da origem do vazamento.	40
Figura 3.3: Perfil geotécnico típico do local (adaptado de CETREL, 2005).	42
Figura 3.4: Distribuição dos poços de monitoramento, extração e injeção.	43
Figura 3.5: Mapa potenciométrico do local (HAZTEC, 2005).	45
Figura 3.6: Delimitação de pluma de fase livre estimada (HAZTEC, 2005).	46
Figura 3.7: Seção transversal da vala de contenção implantada.	47
Figura 3.8: Registro fotográfico do sistema em construção (Penedo – AL, 2005).	47
Figura 4.1: Discretização retangular da área modelada.	49
Figura 4.2: Mapa potenciométrico com as linhas equipotenciais resultantes	52

Figura 4.3: Gráfico da Velocidade Modular versus Distância para as Seções A-A e B-B.	53
Figura 5.1: Dissolução da fase residual de um NAPL na água subterrânea (GUSMÃO, 2002).	58
Figura 5.2: Estimativa dos nós abrangidos pela área de interface entre a piscina de combustíveis e o nível do aquífero livre.	59
Figura 5.3: Fluxo de entrada de contaminante (Q_m) nos respectivos nós, em resposta à condição inicial imposta $C=1.780$ ppm.	61
Figura 5.4: Fluxo acumulado de entrada de massa (Q_{ac}) nos nós atingido pelo vazamento em resposta à condição inicial imposta $C=1.780$ ppm.	62
Figura 5.5: Nova condição de contorno aplicada aos respectivos nós: função do fluxo unitário de entrada pelo tempo.	64
Figura 5.6: Fluxo acumulado de entrada de massa (Q_{ac}) nos nós atingido pelo vazamento em resposta à nova condição de contorno imposta (Q versus T).	65
Figura 5.7: Concentração (C) versus tempo (T) nos nove nós afetados pelo vazamento, em resposta à nova condição de contorno imposta (Q_m versus T).	66
Figura 6.1: Planta baixa do empreendimento, contendo a indicação da seção longitudinal de interesse para as simulações (seção A-A).	70
Figura 6.2: Área inicial de nós abrangidos pela piscina considerada em cada cenário.	71
Figura 6.3: Pluma de contaminação do benzeno no tempo $T=450$ dias para as diferentes dimensões de piscina.	72
Figura 6.4: Resultados das concentrações versus distância na seção A-A da Figura 6.1, para os três cenários simulados.	73
Figura 6.5: Fluxo acumulado de entrada de contaminantes a partir dos nós, para os diferentes cenários.	74
Figura 6.6: Pluma de contaminação do benzeno no tempo $T=450$ dias para os diferentes cenários de dispersividades	76
Figura 6.7: Gráficos de concentração versus distância para os diferentes cenários, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.	77
Figura 6.8: Gráficos de função de S versus C para os cenários 2 e 3.	78
Figura 6.9: Pluma de contaminação do benzeno no tempo $T=450$ dias para os diferentes cenários de adsorção.	80
Figura 6.10: Gráfico de concentração versus distância para os diferentes cenários de adsorção, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.	81

Figura 6.11: Gráfico da função adsorção versus distância para os diferentes cenários de adsorção, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.....	81
Figura 6.12: Gráfico da massa adsorvida versus distância para os diferentes cenários de adsorção, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.	82
Figura 6.13: Gráfico da massa no fluido versus distância para os diferentes cenários de adsorção, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.....	82
Figura 6.14: Pluma de contaminação do benzeno no tempo $T=450$ dias para os diferentes cenários de degradação.	84
Figura 6.15: Gráfico de concentração versus distância para os diferentes cenários de degradação, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.....	85
Figura 6.16: Pluma de benzeno no tempo $T=450$ dias para os diferentes cenários de adsorção com degradação.....	87
Figura 6.17: Gráfico de concentração versus distância para os diferentes cenários de adsorção com degradação, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.	88
Figura 6.18: Gráfico da adsorção versus distância para os diferentes cenários de adsorção com degradação, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.	89
Figura 6.19: Gráfico da massa adsorvida versus distância para os diferentes cenários de adsorção com degradação, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.	90
Figura 6.20: Gráfico da massa no fluido versus distância para os diferentes cenários de adsorção com degradação, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.	91
Figura 6.21: Gráficos comparativos das concentrações versus distâncias para cada grupo de simulação, entre os Cenários (a) 1 e 2 e (b) 1 e 3.	92
Figura 7.1: Pluma de contaminação do benzeno para uma simulação com tempo total de 525 dias, sem efeitos de adsorção nem degradação.	95
Figura 7.2: Linhas do caminho percorrido por partículas devido ao componente de fluxo advectivo, para os tempos (a) $T=500$ dias e (b) $T=1.000$ dias.....	97
Figura 7.3: Fluxo acumulado de entrada de massa (Q_{ac}) a partir da piscina de interface entre contaminantes e aquífero (origem do vazamento, Figura 3.1).	99
Figura 7.4: Planta baixa do empreendimento, contendo a indicação da seção longitudinal e dos pontos fixos de interesse.	101
Figura 7.5: Pluma de contaminação do benzeno no tempo $T=1.005$ dias para os diferentes cenários de bombeamento	102
Figura 7.6 (a), (b), (c) e (d): Variação das concentrações (C) versus tempo (T) nos respectivos pontos de interesse (P1 a P4).....	105

Figura 7.7: Planta baixa do empreendimento, contendo a indicação vala de contenção hidráulica com os poços de extração nas extremidades.....	108
Figura 7.8: Linhas do caminho percorrido por partículas devido ao componente de fluxo advectivo, para o tempo $T=2.300$ dias.....	109
Figura 7.9: Pluma de contaminação do benzeno para os diferentes cenários de eficiência de contenção da vala.	112
Figura 7.10: Planta baixa do empreendimento, contendo a indicação dos pontos fixos de interesse para esta simulação.	117
Figura 7.11 (a) e (b): Concentrações (C) versus tempo (T) para os respectivos cenários nos pontos de interesse (P1 a P3).....	119
Figura 7.12: Pluma de contaminação do benzeno para os respectivos cenários de atenuação, no tempo final da simulação, $T=7.305$ dias (aproximadamente 20 anos), sob condições estacionárias.	120

LISTA DE TABELAS

Tabela 1.1: Dados estatísticos sobre tanques subterrâneos nos Estados Unidos (USEPA, 2005).....	3
Tabela 1.2: Distribuição das ocorrências de contaminações no Estado de São Paulo por atividade entre Maio de 2002 e Novembro de 2005 (CETESB, 2005).	4
Tabela 2.1: Especificação do óleo diesel utilizado como padrão nos ensaios de consumo de combustível e emissões veiculares (ANP, 2004).....	9
Tabela 3.1: Relação planialtimétrica entre as cotas dos poços instalados e dos níveis de águas subterrâneas (HAZTEC, 2005).	44
Tabela 3.2: Poços com constatação de fase livre (adaptado de HAZTEC, 2005)....	45
Tabela 4.1: Unidades adotadas para a modelagem do fluxo das águas subterrâneas	49
Tabela 4.2: Parâmetros utilizados na modelagem do fluxo das águas subterrâneas	50
Tabela 5.1: Unidades adotadas para a modelagem do transporte de contaminantes dissolvidos.....	55
Tabela 5.2: Cálculo da quantidade em massa de benzeno oriunda do vazamento ..	60
Tabela 5.3: Valores obtidos para os Números de Peclet e Courant.....	67
Tabela 6.1: Grupos de simulações criados para os estudos paramétricos dos cenários de contaminação.....	68

Tabela 6.2: Valores dos parâmetros utilizados nas simulações.....	69
Tabela 7.1: Valores obtidos para os Números de Peclet e Courant.....	100
Tabela 7.2: Distribuição final de massa remanescente no sistema modelado para os diferentes cenários simulados.....	103
Tabela 7.3: Valores obtidos para os números de Peclet e Courant	110
Tabela 7.4: Valores obtidos para os Números de Peclet e Courant.....	117

LISTA DE SIGLAS

ANM	Atenuação Natural Monitorada
ANP	Agência Nacional do Petróleo
ASTM	American Society for Testing and Materials
BTEX	Benzeno, Tolueno, Etilbenzeno e Xileno
CETESB	Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental do Estado de São Paulo
DNAPL	Dense Nonaqueous Phase Liquids
LNAPL	Light Nonaqueous Phase Liquids
NAPL	Nonaqueous Phase Liquids
OUST	The Office of Underground Storage Tanks
PAH	Hidrocarbonetos Poliaromáticos
PE	Poço de Extração
PI	Poço de Injeção
SRS	Syracuse Research Corporation
USEPA	United States Environmental Protection Agency

LISTA DE SÍMBOLOS

(L)	Unidade de comprimento
(T)	Unidade de tempo
(F)	Unidade de força
(M)	Unidade de massa
{H}	Vetor das cargas hidráulicas totais nos nós
{Q}	Vetor das quantidades de fluxo nos nós
v	Velocidade de Darcy
K	Condutividade hidráulica
i	Gradiente hidráulico
Θ_w	Umidade volumétrica de água
n	Porosidade do solo
St	Grau de saturação do solo
H	Carga Hidráulica
K _x	Condutividade hidráulica na direção x
K _y	Condutividade hidráulica na direção y
t	Tempo
{C}	Vetor das concentrações totais nos nós
{Q _m }	Vetor do fluxo de contaminantes nos nós
A	Área seccional
v _e	Velocidade efetiva linear média da água
C	Concentração
D	Dispersão hidrodinâmica
x	Coordenada na direção cartesiana x
D*	Coefficiente de difusão
α_x	Dispersividade na direção x
λ	Taxa de degradação
C ₀	Concentração inicial do contaminante
T _m	Tempo de meia-vida do contaminante
S	Adsorção
ρ_d	Densidade do solo seco
M _s	Massa de soluto aderida às partículas sólidas

P_x	Número de Peclet na direção x
P_y	Número de Peclet na direção y
C_x	Número de Courant na direção x
C_y	Número de Courant na direção y
Δx	Distância máxima entre os nós do elemento na direção x
Δy	Distância máxima entre os nós do elemento na direção y
D_{11}	Coeficiente de dispersão hidrodinâmica na direção x
D_{22}	Coeficiente de dispersão hidrodinâmica na direção y
$ v $	Magnitude da velocidade linear média efetiva
v_x	Velocidade linear média efetiva na direção x
v_y	Velocidade linear média efetiva na direção y
Δt	Escala de tempo incremental
C_s	Concentração da fração molar do composto na fase dissolvida
C_N	Concentração da fração molar do composto na fase não aquosa (piscina)
K_p	Coeficiente de partição dos compostos entre as fases
Q_m	Fluxo de massa de contaminantes
Q_{ac}	Fluxo acumulado de massa de contaminantes
α_y	Dispersividade na direção y
C_p	Comprimento da pluma
K_d	Coeficiente de distribuição
K_{oc}	Coeficiente de partição com o carbono orgânico
f_{oc}	Fração de carbono orgânico no solo

SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS	IV
RESUMO	VI
ABSTRACT	VII
LISTA DE FIGURAS	VIII
LISTA DE TABELAS	XI
LISTA DE SIGLAS	XII
LISTA DE SÍMBOLOS	XIII
1 - INTRODUÇÃO	1
1.1 - Relevância do assunto	1
1.1.1 - Importância das águas subterrâneas.....	1
1.1.2 - Áreas contaminadas.....	2
1.1.3 - Postos de combustíveis.....	3
1.2 - Objetivos	5
1.2.1 - Objetivo Geral.....	5
1.2.2 - Objetivos Específicos.....	5
1.3 - Metodologia	6
2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	7
2.1 - Os Hidrocarbonetos derivados de petróleo	7
2.2 - Transporte de contaminantes	10
2.2.1 - Aspectos gerais.....	10
2.2.2 - Fases dos hidrocarbonetos no subsolo.....	12
2.2.3 - Mecanismos de transporte dos contaminantes.....	14
2.2.4 - Modelagem do fluxo de águas subterrâneas.....	16
2.2.5 - Modelagem numérica do transporte de contaminantes dissolvidos.....	24
3 - CARACTERIZAÇÃO DO SÍTIO	39
3.1 - Histórico do empreendimento	39
3.2 - Caracterização física	41
3.3 - Geologia	41
3.4 - Hidrogeologia	41

3.5 -	Pluma de fase livre.....	45
3.6 -	Remediação	46
4 -	MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO FLUXO DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS.....	48
4.1 -	Aspectos gerais	48
4.2 -	Discretização do meio	48
4.3 -	Unidades.....	49
4.4 -	Propriedades dos materiais	50
4.5 -	Condições de contorno	50
4.6 -	Resultados.....	51
4.6.1 -	– Mapa potenciométrico	51
4.6.2 -	– Gráfico da Velocidade Modular versus Distância.....	52
5 -	MODELAGEM DO TRANSPORTE DE CONTAMINANTES DISSOLVIDOS	54
5.1 -	Aspectos gerais	54
5.2 -	Unidades.....	54
5.3 -	Condições de contorno	55
5.3.1 -	Aspectos gerais sobre o comportamento dos LNAPs no subsolo	55
5.3.2 -	Aspectos gerais sobre a dissolução dos LNAPs na água subterrânea.	56
5.3.3 -	Estudo da condição de contorno aplicada	59
5.3.4 -	Critérios de Peclet e Courant	67
6 -	SIMULAÇÃO DE CENÁRIOS DE CONTAMINAÇÃO – ESTUDOS PARAMÉTRICOS.....	68
6.1 -	Efeito da dimensão da piscina de combustível.....	71
6.1.1 -	Resultados	71
6.2 -	Efeito da dispersividade longitudinal e transversal.....	75
6.2.1 -	Resultados	75
6.3 -	Efeito da adsorção	77
6.3.1 -	Resultados	79
6.4 -	Efeito da degradação	83
6.4.1 -	Resultados	83
6.5 -	Efeito da adsorção com degradação.....	86
6.5.1 -	Resultados	86
6.6 -	Gráficos comparativos	91

7 -	SIMULAÇÃO DE CENÁRIOS DE REMEDIAÇÃO.....	93
7.1 -	Bombeamento e tratamento (“Pump and Treat”).....	93
7.1.1 -	Aspectos gerais da técnica.....	93
7.1.2 -	Taxa de bombeamento nos poços de extração	94
7.1.3 -	Condições iniciais de contorno para o transporte de contaminantes sob efeito do bombeamento.....	98
7.1.4 -	Simulação dos cenários de remediação por bombeamento simultâneo.....	99
7.1.5 -	Resultados	101
7.1.6 -	Considerações finais	106
7.2 -	Vala de contenção hidráulica.....	107
7.2.1 -	Aplicação da técnica.....	107
7.2.2 -	Taxa de bombeamento nos poços de extração	108
7.2.3 -	Simulação dos cenários de eficiência de contenção da vala.....	110
7.2.4 -	Resultados	111
7.2.5 -	Considerações finais	113
7.3 -	Simulação de cenários de remediação por atenuação natural monitorada	114
7.3.1 -	Aspectos gerais da técnica.....	114
7.3.2 -	Simulação dos cenários de remediação por Atenuação Natural Monitorada	116
7.3.3 -	Resultados	118
7.3.4 -	Considerações finais	121
8 -	CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	122
9 -	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	125

1 - INTRODUÇÃO

1.1 - Relevância do assunto

1.1.1 - Importância das águas subterrâneas

A água é um componente essencial do meio ambiente e fundamental à vida. Ocupa aproximadamente 70% da superfície terrestre, sendo que, de todo o volume de água existente na Terra, 97,6% é salgado e apenas 2,4% é doce. Deste total de água doce, 78,1% aparece na forma de gelo, 21,5% corresponde às águas subterrâneas e apenas 0,4% é água superficial (lagos, rios, etc). Excluídas as águas congeladas nas calotas polares, conclui-se que a quase totalidade da água doce disponível se encontra no subsolo (98%), e apenas uma pequena parcela na superfície (GUSMÃO, 2002).

A utilização da água subterrânea para fins de abastecimento doméstico e/ou industrial vem crescendo em escala acentuada. Alguns exemplos da grande e crescente utilização da água subterrânea para fins de abastecimento urbano serão enfocados com a finalidade de salientar sua importância.

A água subterrânea é a fonte de água potável para muitas pessoas em todo o mundo, especialmente nas áreas rurais. Segundo Fetter (1993), nos Estados Unidos, mais da metade da população depende da água subterrânea como fonte de água potável.

No Estado de São Paulo, apesar de somente 13% do volume total de água consumida provir dos recursos subterrâneos, mais de 70% dos núcleos urbanos são atendidos completa ou parcialmente por águas subterrâneas. Até 1990 existiam cerca de 35.000 poços tubulares no estado, com uma vazão total estimada de pouco mais de 900 milhões de metros cúbicos por ano (LEITE, 1996).

A tendência pela busca da sustentabilidade nas atividades humanas, principalmente no que tange à preservação do meio ambiente, reforça, portanto, a importância das águas subterrâneas como um preciso recurso natural para todas as gerações.

1.1.2 - Áreas contaminadas

A Contaminação de solos e águas subterrâneas tem sido objeto de grande preocupação nas três últimas décadas em países industrializados, especialmente nos Estados Unidos e Europa (CETESB, 2001b).

Uma área contaminada pode ser definida como um local ou terreno onde há comprovadamente poluição ou contaminação, causada pela introdução de quaisquer substâncias ou resíduos que nela tenham sido depositados, acumulados, armazenados, enterrados ou infiltrados de forma planejada, acidental ou até mesmo natural. Nessa área, os contaminantes podem concentrar-se em subsuperfície nos diferentes compartimentos do ambiente, por exemplo, no solo, nos sedimentos, nas rochas, nos materiais utilizados para aterrar os terrenos, nas águas subterrâneas ou, de uma forma geral, nas zonas vadosa e saturada, além de poderem concentrar-se nas paredes, nos pisos e nas estruturas de construções. Os contaminantes podem ser transportados a partir desses meios, propagando-se por diferentes vias, como, por exemplo, o ar, o próprio solo, as águas subterrâneas e superficiais, alterando suas características naturais ou qualidades e ocasionando impactos negativos e/ou riscos sobre os bens a proteger, localizados na própria área ou em seus arredores (CETESB, 2001b).

As áreas contaminadas e os problemas gerados devido à existência destas podem ser originados a partir de uma enorme variedade de tipos de fontes potenciais de contaminação, pois na maioria das atividades humanas são geradas substâncias, resíduos e/ou efluentes com potencial para contaminar os diferentes compartimentos do meio ambiente, destacando-se, neste estudo, o solo e as águas subterrâneas (CETESB, 2001b).

Segundo Sánchez (1998 *apud* CETESB, 2001b), vários são os problemas gerados pelas áreas contaminadas. Este autor aponta quatro problemas principais: existência de riscos à segurança das pessoas e das propriedades; riscos à saúde pública e dos ecossistemas; restrições ao desenvolvimento urbano; e redução do valor imobiliário das propriedades.

1.1.3 - Postos de combustíveis

Os postos de combustíveis são reconhecidamente atividades comerciais potencialmente poluidoras. Segundo Guiguer (1996), nestes estabelecimentos, os vazamentos são geralmente provenientes de:

- Derramamentos na operação de abastecimento dos tanques;
- Vazamento nas tubulações, devido a falhas estruturais e/ou corrosão;
- Instalações inadequadas;
- Vazamento nos tanques devido a corrosão ou falha estrutural (maioria dos casos) – destaque especial para tanques com idade avançada.

A agência federal de proteção ambiental americana, “United States Environmental Protection Agency (USEPA)”, através do seu departamento de gerenciamento de tanques subterrâneos, “The Office of Underground Storage Tanks - OUST” revela que, nos Estados Unidos, existem cerca de 680.000 sistemas de tanques subterrâneos ativos que armazenam petróleo e outras substâncias tóxicas que podem degradar o meio ambiente e a saúde humana no caso de vazamentos (USEPA, 2005).

A Tabela 1.1 lista alguns dados referentes ao número de tanques ativos, desativados, casos de vazamentos confirmados, remediações iniciadas, concluídas e a iniciar, no período de 1985 até 2005, em todo território dos Estados Unidos.

Tabela 1.1: Dados estatísticos sobre tanques subterrâneos nos Estados Unidos (USEPA, 2005).

TANQUES SUBTERRÂNEOS					
Dados Estatísticos dos Estados Unidos - 1985 a 2005					
Tanques Ativos	Tanques Desativados	Tanques com Vazamentos Confirmados	Tanques com Remediação Iniciada	Tanques com Remediação Concluída	Tanques com Remediação a Concluir
653.621	1.618.920	452.041	421.924	332.799	119.242

Existem, no Estado de São Paulo, cerca de oito mil postos de combustíveis, sendo que dois mil estão localizados na região metropolitana de São Paulo. A atividade foi responsável por aproximadamente 73% dos casos de contaminação registrados entre Maio de 2002 e Novembro de 2005. No mesmo período, os combustíveis líquidos e os Hidrocarbonetos Poliarmáticos (PAHs) estão entre os principais grupos de contaminantes registrados nas ocorrências oficiais (CETESB, 2005). A Tabela 1.2 apresenta a distribuição das ocorrências de contaminações por atividade no Estado de São Paulo. A Figura 1.1 mostra os principais grupos de contaminantes encontrados nas áreas contaminadas.

Tabela 1.2: Distribuição das ocorrências de contaminações no Estado de São Paulo por atividade entre Maio de 2002 e Novembro de 2005 (CETESB, 2005).

CADASTRO DE ÁREAS CONTAMINADAS					
Dados Estatísticos do Estado de São Paulo - Maio de 2002 a Novembro de 2005					
Comercial	Industrial	Resíduos	Postos de Combustíveis	Desconhecidos	TOTAL
95	254	64	1.164	19	1.596

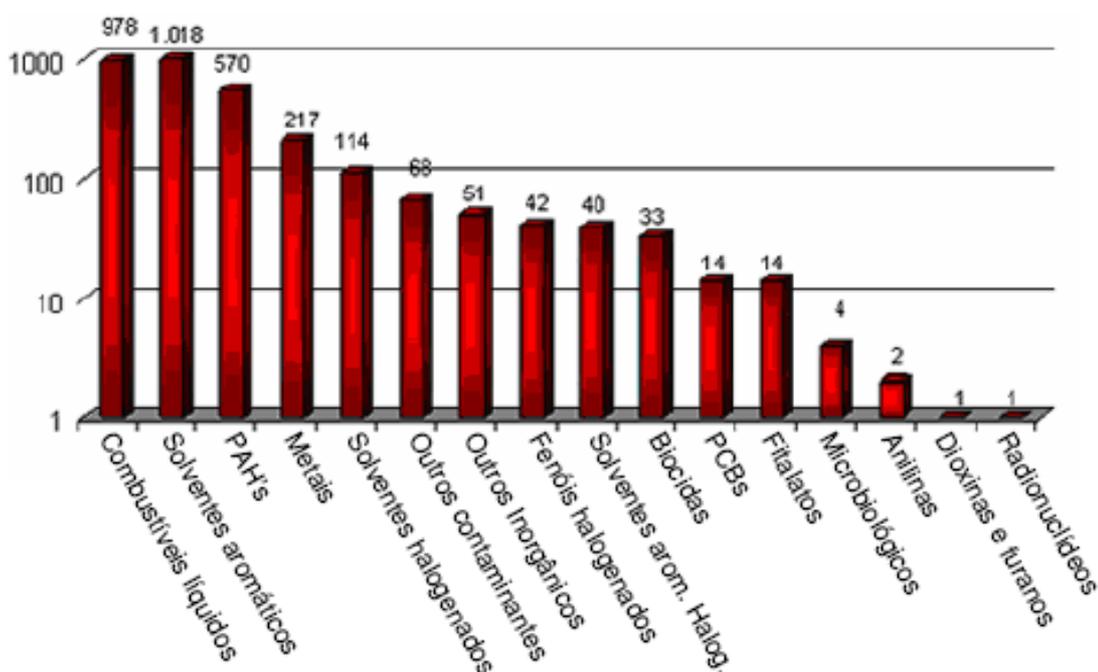


Figura 1.1: Principais grupos de contaminantes encontrados nas áreas contaminadas entre Maio de 2002 e Novembro de 2005 (CETESB, 2005).

1.2 - Objetivos

1.2.1 - Objetivo Geral

O presente trabalho tem por objetivo geral modelar e simular numericamente cenários de contaminação e remediação resultantes de um vazamento de óleo diesel em um posto de combustíveis.

1.2.2 - Objetivos Específicos

a) Estudos Paramétricos de Cenários de Contaminação

Avaliação da influência dos parâmetros de transporte de contaminantes nos resultados finais:

- Efeito da dimensão da piscina de combustível
- Efeito da dispersividade longitudinal e transversal
- Efeito da adsorção
- Efeito da degradação
- Efeito da adsorção com degradação

b) Simulação dos Cenários de Remediação

Avaliação da eficiência da eventual aplicação das técnicas de remediação:

- Bombeamento e tratamento ("Pump and Treat")
- Vala de contenção hidráulica
- Atenuação natural monitorada

c) Mostrar que a modelagem matemática do transporte de contaminantes é uma valiosa ferramenta no processo de gerenciamento de áreas contaminadas, na medida em que poderá atuar dando suporte nas tomadas de decisões, levando-se em conta as peculiaridades e cenários envolvidos em cada modelo de caso e

buscando-se, através das simulações, a melhor solução a um problema existente ou futuro.

1.3 - Metodologia

A elaboração desta pesquisa seguiu as seguintes etapas executivas:

- a) Revisão Bibliográfica do Tema*
- b) Elaboração do Modelo Conceitual do Sítio*
- c) Construção do Modelo de Fluxo das Águas Subterrâneas*
- d) Construção do Modelo de Transporte de Contaminantes Dissolvidos*
- e) Simulação dos Cenários de Contaminação Através de Estudos Paramétricos*
- f) Simulação dos Cenários de Remediação*

2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 - Os Hidrocarbonetos derivados de petróleo

Os hidrocarbonetos derivados de petróleo são misturas complexas de compostos orgânicos (predominantemente hidrocarbonetos – ligações hidrogênio-carbono). São obtidos através de reservas naturais de petróleo bruto, originados a partir dos restos orgânicos de antigas plantas e animais (COLE, 1994).

Destacam-se ainda algumas características gerais comuns aos hidrocarbonetos derivados de petróleo, como por exemplo:

- Pouca solubilidade em meio aquoso;
- As misturas são geralmente menos densas que a água;
- Relativamente voláteis;
- Não se acumulam na cadeia alimentar;
- Alguns são tóxicos ao ser humano;
- Relativa resistência à degradação bacteriológica.

Os compostos orgânicos presentes no petróleo bruto podem ser divididos em três grupos principais (DOMENICO et al., 1998).

- a) Alcanos ou parafinas;
- b) Alcenos ou alquenos;
- c) Aromáticos;

Os alcanos são hidrocarbonetos alifáticos saturados, de fórmula geral C_nH_{2n+2} . Estão presentes na maioria dos produtos derivados de petróleo, como por exemplo: metano, etano, propano, butano, pentano, etc (DOMENICO et al., 1998).

Os alcenos ou alquenos, também conhecidos como olefinas são hidrocarbonetos insaturados por apresentar pelo menos uma ligação dupla na molécula. Essas moléculas possuem fórmula geral do tipo C_nH_{2n} , estando inclusos neste conjunto

compostos como eteno e propeno (DOMENICO et al., 1998).

Os hidrocarbonetos aromáticos possuem pelo menos um anel aromático (anel benzênico) além de suas outras ligações. São encontrados naturalmente no petróleo bruto, apresentando toxicidade em sua grande maioria. Os principais compostos de interesse, para fins de investigações de passivos ambientais, são: Benzeno (C_6H_6), Tolueno (C_7H_8), Etilbenzeno (C_8H_{10}) e Xileno (C_8H_{10}), que constituem um grupo denominado BTEX, de acordo com Cole (1994).

O benzeno apresenta características particulares como razoáveis solubilidade e adsorção, resistência à oxidação com reagentes químicos naturais e alta toxicidade, inclusive com efeitos cancerígenos e degenerativos ao sistema nervoso central. Já o tolueno, etilbenzeno e xileno são menos solúveis, mais reagentes e menos tóxicos. Mesmo assim, a exposição a estes componentes deve ser monitorada contra riscos à saúde (COLE, 1994).

Os Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (PAH) podem ser encontrados em diversos produtos derivados de petróleo, como o diesel, e também em óleos de resíduos de combustão. São resistentes à degradação microbial e adsorvem fortemente às partículas do solo, em especial a argila, aumentando as dificuldades para remediação. Além disso, apresentam toxicidade à saúde humana, podendo causar efeitos cancerígenos (COLE, 1994).

No Estado de São Paulo, o procedimento de investigação e identificação de passivos ambientais em postos de combustíveis, elaborado pela Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental – CETESB, determina que as amostras de solos e água subterrânea devem ser submetidas à análise laboratorial para determinação dos compostos BTEX e PAH (CETESB, 2006).

O óleo diesel é constituído, na sua maioria, por hidrocarbonetos médio-destilados, ou seja, aqueles que, após o processo de refinamento do petróleo bruto, situam-se em uma escala mediana de peso molecular (COLE, 1994).

A Agência Nacional do Petróleo - ANP, no uso de suas atribuições, estabeleceu, através da RESOLUÇÃO ANP Nº 21 de 25.10.2004, a especificação do óleo diesel utilizado como padrão nos ensaios de consumo de combustível e emissões veiculares (Tabela 2.1).

Tabela 2.1: Especificação do óleo diesel utilizado como padrão nos ensaios de consumo de combustível e emissões veiculares (ANP, 2004).

ESPECIFICAÇÕES DO ÓLEO DIESEL PADRÃO PARA ENSAIOS DE CONSUMO E EMISSÕES				
CARACTERÍSTICAS	UNIDADES	LIMITES	MÉTODOS	
			ABNT NBR	ASTM D
Aspecto		aprovado (1)	14954 (2)	4176 (2)
Cor ASTM, máx.		3	14483	1500
Enxofre total, máx.	% massa	0,03	14875	1552
				2622
			14533	4294
				5453
Destilação	°C		9619	86
50% vol. recuperado, mín.		245		
90 % vol. recuperado		320,0 - 340,0		
PFE (Ponto Final de Ebulição), máx.		370		
Massa específica a 20 °C	kg/m ³	835,0 - 845,0	7148	1298
			14065	4052
Ponto de fulgor, mín.	°C	38	7974	56
			14598	93
			-	3828
Viscosidade a 40 °C	(mm ² /s) cSt	2,5 - 3,5	10441	445
Ponto de entupimento de filtro a frio, mín.	°C	3	14747	6371
Número de Cetano		49 - 52	-	613
Resíduo de carbono Ramsbottom no resíduo dos 10% finais da destilação, máx.	% massa	0,2	14318	524
Carbono aromático, máx.	volume	25	-	3238
Cinzas, máx.	% massa	0,01	9842	482
Corrosividade ao cobre, 3h a 50°C, máx.	-	1	14359	130
Água e sedimentos, máx.	% volume	0,05	14647	1796

- (1) Límpida e isenta de água ou material em suspensão, conforme condições determinadas nos métodos especificados para avaliação do Aspecto.
- (2) Procedimento 1 da norma utilizada.

2.2 - Transporte de contaminantes

2.2.1 - Aspectos gerais

O termo “contaminante” é geralmente usado como referência tanto a compostos dissolvidos como a não miscíveis em meio aquoso (Nonaqueous Phase Liquids - NAPL) adicionados à água como consequência das atividades humanas. Exemplos de NAPLs : gasolina, óleo, solventes industriais, etc. (DOMENICO et al., 1998).

Os NAPLs são classificados de acordo com sua densidade relativa à água. Dense Nonaqueous Phase Liquids – DNAPLs, têm densidade específica maior que a da água, enquanto os Light Nonaqueous Phase Liquids – LNAPLs, têm densidade específica menor que a da água.

A propagação de NAPLs através de meio poroso constitui um processo de fluxo multifásico. Propriedades como densidade, viscosidade, tensões interfaciais, solubilidade e pressão de vapor são importantes para o entendimento do transporte de NAPLs, bem como para a constituição de modelos e previsões das tendências futuras de uma contaminação (KIM & CORAPCIOGLU, 2001).

Quando um LNAPL vaza sob uma superfície de solo (tanque de armazenamento subterrâneo), o contaminante migrará através da zona vadosa como uma fase separada, sob a influência dominante das forças gravitacionais. Nesta ocasião, alguns gânglios do líquido são aderidos às partículas de solo, criando uma fase denominada residual, como mostra a Figura 2.1 (GUSMÃO, 2002).

Algumas variáveis como volume de vazamento, profundidade do lençol freático, capacidade de adsorção e permeabilidade do solo determinarão se o contaminante atingirá ou não o lençol freático (GUIGUER, 1996).

Uma vez que alcança o nível freático, os LNAPLs formam uma piscina de fase livre que fica flutuando na água. A partir de então, ocorre algum espalhamento lateral e o contaminante migra a jusante, na direção do gradiente hidráulico do aquífero, originando uma pluma de fase livre (Figura 2.1). A piscina de LNAPL estará sempre

em contato com o solo, ar e a água subterrânea. Portanto, um LNAPL migrando na água subterrânea estará sujeito tanto ao processo de volatilização quanto de dissolução. Uma vez volatilizados, os contaminantes se moverão através da zona vadosa, por difusão e advecção (KIM & CORAPCIOGLU, 2001).

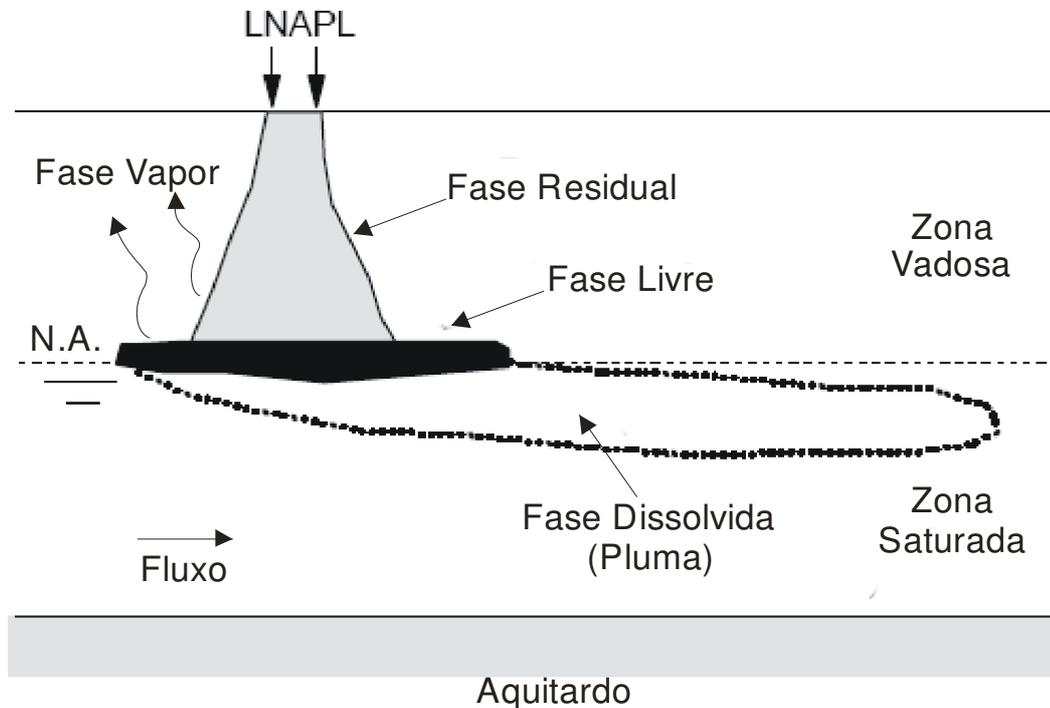


Figura 2.1: Migração de um LNAPL em um aquífero (adaptado de GUSMÃO, 2002).

Subsequentemente, tanto a fase livre quanto a residual irão dissolver os contaminantes na água subterrânea, formando uma pluma de contaminação de fase dissolvida. A duração da dissolução depende da massa do NAPL e da sua taxa de dissolução na água subterrânea, que é afetada por diversos fatores, tais como solubilidade do contaminante, velocidade de fluxo do aquífero, arranjo e tamanho dos poros, composição da mistura dos fluidos. (GUSMÃO, 2002).

Os vapores e solutos emanados a partir das piscinas de LNAPLs podem atuar como fontes contínuas de contaminação por longos períodos de tempo (KIM & CORAPCIOGLU, 2001).

2.2.2 - Fases dos hidrocarbonetos no subsolo

No subsolo, os hidrocarbonetos podem estar dispostos sob diversas situações. Concentram-se nos mais variados compartimentos do ambiente: aderidos às partículas dos solos, às rochas, nas águas subterrâneas ou de uma forma geral nas zonas saturadas e insaturadas. Podem transportar-se a partir desses meios, usando diferentes vias, como o ar, o próprio solo ou as águas subterrâneas, aumentando assim os riscos sobre os bens a proteger (SUTHERSAN, 1997).

Segundo Azambuja et al. (2000), os hidrocarbonetos no subsolo estão presentes em cinco fases de estado físico:

a) Fase líquida ou livre

Resíduos líquidos no solo apresentando mobilidade. Constitui em um véu sobre o topo do freático livre e que pode ser mais ou menos espesso, dependendo da quantidade de produto derramado e da dinâmica do lençol freático.

b) Fase adsorvida ou residual

Caracteriza-se por uma fina película de hidrocarbonetos envolvendo partículas de solo, sendo mais importante para os produtos mais viscosos como o diesel. Devido às variações freáticas inerentes, a fase adsorvida ocupa uma banda sobre o topo da fase livre. Essa banda pode ser mais ou menos significativa, dependendo da viscosidade do produto, da porosidade do solo e das oscilações do freático.

c) Fase dissolvida

Presente na água subterrânea do solo geralmente como películas dissolvidas. Constitui em contaminações por dissolução de aditivos polares e por uma fração emulsionada de hidrocarbonetos que possui maior mobilidade e dissipa-se abaixo do nível freático livre, sendo mais importante para fluidos menos viscosos como a gasolina. A quantidade de hidrocarbonetos dissolvidos depende das condições de degradação do produto, estando muito mais relacionada à participação da fase adsorvida e muito menos ligada à espessura da fase livre propriamente dita.

d) *Fase vapor*

Constitui uma fase gasosa dos componentes voláteis dos combustíveis e que ocupa vazios do solo ou rocha, sendo mais importante para os hidrocarbonetos de menor ponto de vaporização, como aqueles que compõem a gasolina. A fase gasosa é mais significativa na região vadosa do subsolo.

e) *Fase condensada*

Típica de áreas urbanas onde a pavimentação do solo é intensa e pouco permeável, caracterizando-se pela acumulação de produtos condensados sob os pavimentos. Na verdade, é semelhante à fase adsorvida, porém com composição diferente do produto original em virtude do fracionamento seletivo da vaporização.

Na maioria dos casos de contaminação por combustíveis em postos de abastecimento, a preocupação do diagnóstico tem se pautado pela delimitação das fases adsorvida e livre, onde as ações de remediação podem ser mais efetivas. Entretanto, os marcos referenciais sugeridos pelas análises de risco indicam que a fase dissolvida possui repercussões ambientais tão ou mais relevantes que as demais fases (AZAMBUJA et al., 2000). As típicas zonas de ocorrência de cada fase são apresentadas na Figura 2.2.

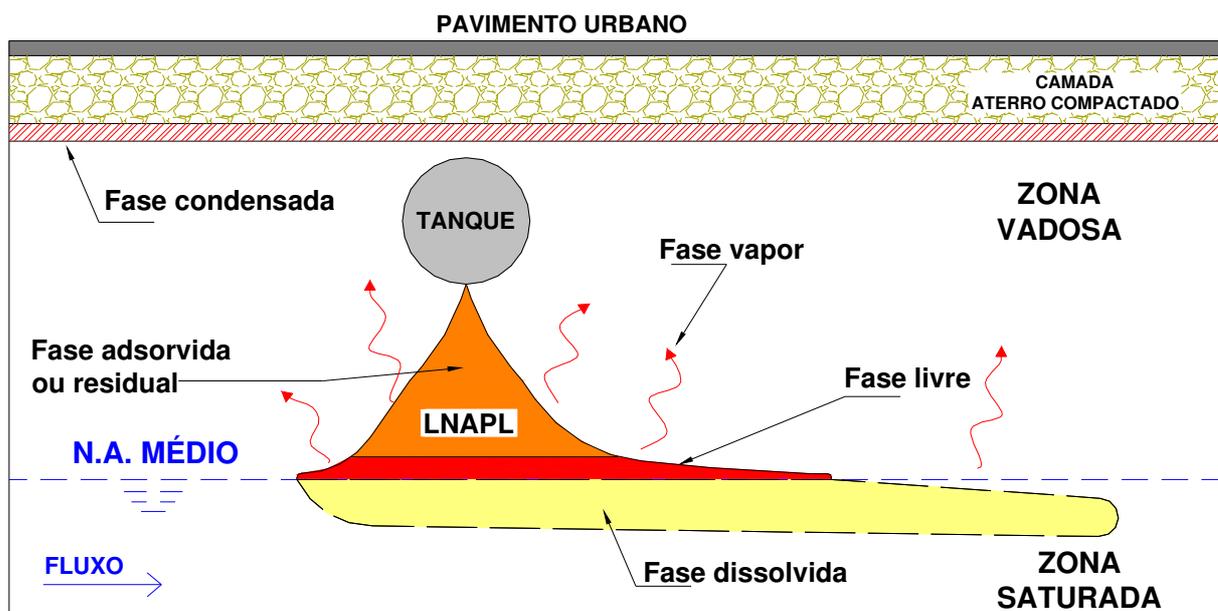


Figura 2.2: Fases de contaminação por LNAPL no subsolo (adaptado de AZAMBUJA et al., 2000).

2.2.3 - Mecanismos de transporte dos contaminantes

O comportamento dos hidrocarbonetos em solos é regido pelas propriedades físicas e químicas dos combustíveis líquidos e pelas características dos solos por onde esses contaminantes migram. As propriedades físicas dos solos que mais influenciam o comportamento dos combustíveis líquidos são: porosidade, condutividade hidráulica e a heterogeneidade do solo. Existem várias propriedades dos combustíveis líquidos que podem influenciar a mobilidade e a retenção destes contaminantes nos solos: densidade, viscosidade dinâmica, solubilidade e pressão de vapor (GUIGUER, 1996).

A dinâmica do transporte de contaminantes no solo costuma ser explicada através de três mecanismos de transferência de massa, a saber: advecção, dispersão e atenuação. Esses mecanismos podem ser subdivididos em subprocessos (a dispersão pode ser dividida em dispersão mecânica e difusão molecular, enquanto que a atenuação pode ser compartimentada em adsorção físico-química, sorção química e biodegradação). Essa conceituação é que fundamenta os modelos analíticos ou numéricos que são empregados para prever ou avaliar a dinâmica dos contaminantes em um sistema (AZAMBUJA et al., 2000).

Segundo Suthersan (1997), os principais mecanismos de transporte de massa que regem o comportamento de contaminantes na zona saturada do solo são:

a) Advecção

O Fluxo dos contaminantes é governado pelo gradiente hidráulico das águas subterrâneas. Geralmente é o principal mecanismo de transporte, sendo preponderante na formação e na mobilização da fase livre de hidrocarbonetos.

b) Dispersão mecânica

Consiste na migração do soluto pelo meio poroso, responsável pela ocorrência de plumas maiores do que as determinadas apenas por advecção. Pode ocorrer no sentido transversal e longitudinal da pluma de contaminação.

c) *Difusão molecular*

O soluto dissolvido em água desloca-se de uma área de maior concentração para uma área de menor concentração, visando equalizar a concentração em toda a massa de fluido. Geralmente é mais relevante em zonas de baixas permeabilidades.

As Figuras 2.3 (a) e (b) ilustram o efeito da advecção e dispersão no processo de transporte de contaminantes quando uma fonte contínua de massa é injetada dentro de um tubo. Em certo ponto, após a origem da injeção, a concentração inicial do contaminante aparece em baixos valores e depois cresce gradativamente até que o valor total da concentração inicial seja alcançado, a exemplo da Figura 2.3 (b). Se apenas o processo de advecção fosse considerado, o contaminante chegaria a um determinado ponto no interior do tubo com concentração imediatamente igual à da origem, como na Figura 2.3 (a). Devido à dispersão, entretanto, a concentração total é alcançada em um tempo maior do que se apenas considerado o efeito da advecção.

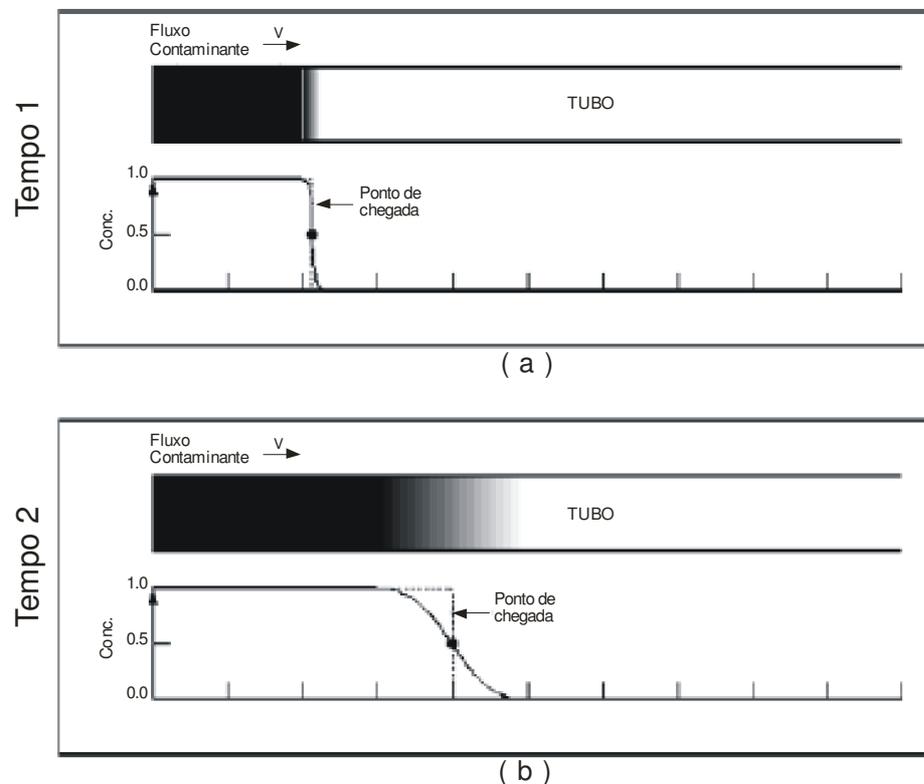


Figura 2.3 (a) e (b): Efeito da advecção e dispersão no processo de transporte de contaminante (adaptado de KRAHN, 2004b).

d) Sorção

Processo pelo qual ocorre atração devido à afinidade existente entre as partículas sólidas do solo e os contaminantes, fazendo com que parte da massa inicial fique retida ou acumulada nos grãos do solo (ex: troca catiônica em minerais como argilas). Salienta-se que é um mecanismo de retardo da migração de um contaminante.

e) Processos biológicos

Trata-se de outra parcela de atenuação dos transportes de massa, onde os microrganismos naturalmente presentes no solo reagem com os contaminantes diminuindo sua concentração inicial e gerando subprodutos como: CO₂, N₂, H₂S e Metano.

Os mecanismos de dispersão e atenuação são complexos, o que torna a modelagem numérica dos processos de transferência de massa uma atividade igualmente complexa, devido à dificuldade de estabelecer parâmetros para os fenômenos de natureza bioquímica (AZAMBUJA et al., 2000).

2.2.4 - Modelagem do fluxo de águas subterrâneas

a) Aspectos gerais

Na maioria dos casos reais de transporte de contaminantes, onde possam existir sistemas operantes de poços de bombeamento e injeção, condutividades e cargas hidráulicas de campo variadas, as velocidades podem ser também extremamente variáveis, de modo que tanto a magnitude quanto a direção dos componentes de fluxo subterrâneo possam mudar no tempo e no espaço. Em termos de modelagem de transporte de contaminantes, faz-se previamente necessária uma representação razoável das velocidades de campo e suas variações (DOMENICO et al., 1998).

Esta representação pode ser obtida apenas por simulação com um modelo de fluxo. As velocidades são calculadas através da aplicação da Lei de Darcy, considerando-

se os valores das cargas hidráulicas especificadas e outros parâmetros conhecidos, como a distribuição da condutividade hidráulica, a configuração do aquífero e mais outras condições de contorno. O modelo de transporte de contaminantes é, portanto, geralmente dependente da resolução prévia do problema de fluxo de águas (DOMENICO et al., 1998).

Por mais de 50 anos, a orientação quantitativa da hidrogeologia tem diferenciado este campo de outros das geociências. Modelos matemáticos eficazmente projetados e construídos podem formar a base para visões futuras com resultados satisfatórios. Modelos numéricos têm levado os hidrogeologistas a deixarem de lado os tradicionais modelos analíticos e suas limitações. Eles detêm ferramentas que tratam o sistema hidrogeológico da maneira como eles ocorrem na natureza, onde propriedades de transmissividade dos aquíferos não são constantes, onde as recargas são distribuídas espacialmente, e onde muitos poços podem operar ao mesmo tempo com taxas de bombeamento diferentes (DOMENICO et al., 1998).

b) Modelo conceitual

Um modelo conceitual é formado a partir da avaliação e levantamento de dados hidrogeológicos que proverão uma “fotografia” das configurações hidrogeológicas da região de interesse. Normalmente, as informações coletadas são relativas à forma, espessura, propriedades hidráulicas (condutividade, etc.), distribuição das cargas hidráulicas e distribuição das taxas de recarga dos aquíferos (DOMENICO et al., 1998).

c) Discretização do meio

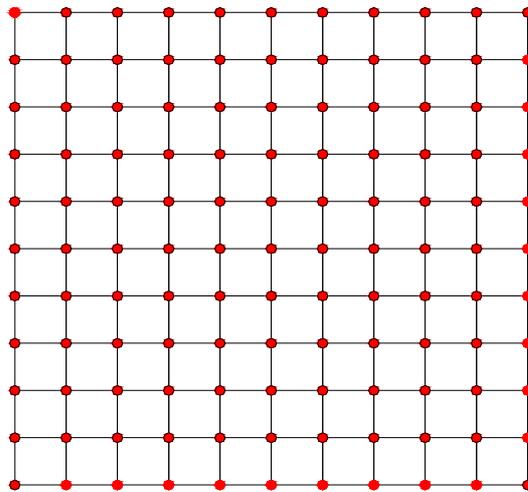
A resposta de um aquífero a uma determinada condição de contorno pode ser calculada através de soluções numéricas para a equação diferencial de fluxo das águas subterrâneas. O termo “numérico” implica dizer que métodos numéricos, ao invés de aproximações matemáticas analíticas, são utilizados para resolver a equação parcial-diferencial do fluxo. Na equação diferencial do fluxo das águas subterrâneas, a variável a ser calculada é a carga hidráulica. As aproximações numéricas mais usadas hoje, na prática, para solucionar estas equações são os

métodos das diferenças finitas e dos elementos finitos. Ambos são métodos sofisticados que, de maneira distinta, substituem a equação diferencial de fluxo da água subterrânea por um sistema de equações algébricas (DOMENICO et al., 1998).

Os métodos numéricos são baseados no conceito de subdividir uma área contínua em pequenos “pedaços”, descrevendo então o comportamento individual de cada um destes “pedaços” e depois reconectando-os, representando assim o comportamento geral da área modelada. O termo discretização é usado para designar este processo de subdivisão (KRAHN, 2004a).

A discretização é um dos três aspectos básicos da modelagem numérica. Os outros dois são as propriedades dos materiais e as condições de contorno. A discretização implica em trabalhar-se a geometria, distância, área e volume. É a componente que trata das dimensões físicas do domínio a ser modelado, conforme Krahn (2004a).

O método das diferenças finitas utiliza discretização regular, onde o aquífero é subdividido em uma série de blocos-célula retangulares. Num modelo bi-dimensional, em cada célula é assumida uma espessura m . Então, cada um dos blocos representará um volume de aquífero $m \Delta x \Delta y$. Associados a cada bloco estão os nós (Figura 2.4), que representam os pontos onde as variáveis de cargas hidráulicas serão calculadas (DOMENICO et al., 1998).



• Nó

Figura 2.4: Exemplo de discretização em malha regular (KRAHN, 2004a).

Os métodos dos elementos finitos possibilitam um arranjo muito maior em termos de pontos nodais e formato da malha. A discretização com elementos triangulares (Figura 2.5) ilustra a facilidade com que se podem definir condições de contorno para formatos irregulares e de assegurar que os nós coincidam com pontos de interesse, como poços de monitoramento e/ou bombeamento.

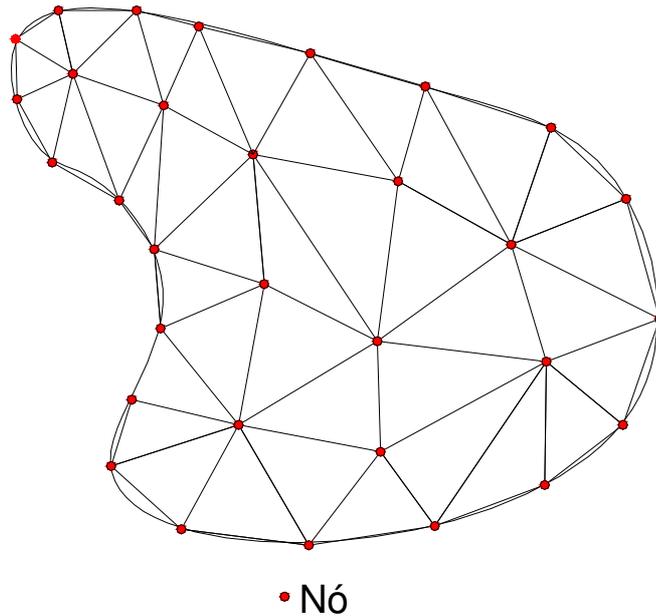


Figura 2.5: Exemplo de discretização em malha irregular (KRAHN, 2004a).

d) Unidades

Qualquer sistema de unidades pode ser utilizado para a solução das equações diferenciais de fluxo das águas subterrâneas. O único requerimento é que elas sejam consistentes entre si. Fundamentalmente, devem-se definir as unidades de comprimento (L), tempo (T) e massa (M). Uma vez selecionadas estas unidades, todas as outras terão de ser consistentes (KRAHN, 2004a).

e) Condições de contorno

São expressões matemáticas que especificam a variável dependente ou fluxo nos contornos do domínio. A principal função é “separar” a região do modelo do resto do mundo. Em outras palavras, as condições de contorno apontam para a influência no

sistema modelado das condições de fluxo fora do domínio da simulação. Portanto, impor condições de contorno ao problema é imprescindível para a solução de qualquer equação de fluxo subterrâneo (DOMENICO et al., 1998).

Existem três tipos básicos de condições de contorno para modelagem hidrogeológica (FILHO & COTA 2003; WIEDEMEIER, et al., 1995 *apud* CORDAZZO, 2000):

- 1) Carga hidráulica especificada (H), também conhecida como Tipo Um ou Condição de Contorno de Dirichlet;
- 2) Fluxo especificado (Q), também conhecida como Tipo Dois ou Condição de Contorno de Neumann.
- 3) Mista, também conhecida como Tipo Três ou Condição de Contorno de Cauchy, onde o fluxo através do contorno é calculado a partir do valor da carga hidráulica.

Segundo Krahn (2004a), as soluções adotadas pelos métodos numéricos às variáveis de algum problema são obtidas a partir da resolução preliminar da Equação 2.1:

$$[K] * \{X\} = \{A\} \quad \text{Equação (2.1)}$$

Onde:

[K] = Matriz dos coeficientes relacionados com a geometria e propriedade dos materiais;

{X} = Vetor das variáveis, que geralmente são chamadas de variáveis de campo;

{A} = Vetor das ações nos nós, impostas pelas condições de contorno.

Para o caso da modelagem hidrogeológica, utiliza-se a Equação 2.2:

$$[K] * \{H\} = \{Q\} \quad \text{Equação (2.2)}$$

Onde:

[K] = Matriz dos coeficientes relacionados com a geometria e propriedade dos materiais;

{H} = Vetor das cargas hidráulicas totais nos nós (L);

{Q} = Vetor das quantidades de fluxo nos nós (L³/T).

Ressalta-se, assim, a importância da associação entre os dois tipos de condições de contorno. Quando se especifica a carga hidráulica em um nó (H), a solução proverá o fluxo (Q) naquele nó. Alternativamente, quando é imputado o valor do fluxo (Q) num determinado nó, então a carga hidráulica (H) será a solução obtida (KRAHN, 2004a).

f) Equações e particularidades do programa SEEP/W 2002.

O SEEP/W é um software que utiliza o método dos elementos finitos para modelar o movimento e a distribuição das pressões de água nos poros de materiais como solos e rochas. Sua formulação possibilita a análise de ambos simples e altamente complexos problemas de fluxo e escoamento (KRAHN, 2004a).

- Equação da Lei de Darcy (fluxo)

O SEEP/W é formulado com base no fluxo de água através de meios saturado e não saturado, seguindo os princípios da Lei de Darcy, que descreve a velocidade como sendo proporcional ao gradiente hidráulico:

$$v = K \times i \qquad \text{Equação (2.3)}$$

Onde:

v = Velocidade (L/T)

K = Condutividade hidráulica (L/T)

i = Gradiente hidráulico (adimensional)

- Umidade volumétrica de água no solo

É importante conhecer-se a relação entre a pressão da água nos poros e o índice de volumétrico da água em uma análise de fluxo hidrogeológico. O solo consiste em um conjunto de partículas sólidas e espaços intersticiais vazios. Os espaços vazios podem ser preenchidos tanto com ar, quanto com água, ou com uma combinação dos dois. Em solo saturado, todos os vazios estarão preenchidos com água, de sorte que a umidade volumétrica da água coincide com a porosidade do solo, de acordo com expressão a seguir (KRAHN, 2004a):

$$\Theta_w = nSt \quad \text{Equação (2.4)}$$

Onde:

Θ_w = Umidade volumétrica de água (adimensional);

n = Porosidade do solo (adimensional);

St = Grau de saturação do solo (em solos saturados, $St=1,0$ ou 100%).

Em solo insaturado, o volume de água armazenado nos vazios variará dependendo da pressão negativa da água (ou sucção) nos poros. Não existem valores fixos de umidade volumétrica de água no tempo e no espaço, sendo, portanto, necessária uma função que descreva a variação da umidade volumétrica de água com os respectivos valores de pressão nos solos.

A função de umidade volumétrica da água descreve, portanto, a capacidade do solo de armazenar água sob mudanças das pressões nos poros. A Figura 2.6 mostra uma típica função de variação da umidade volumétrica da água para um material caracterizado como areia uniforme fina (KRAHN, 2004a).

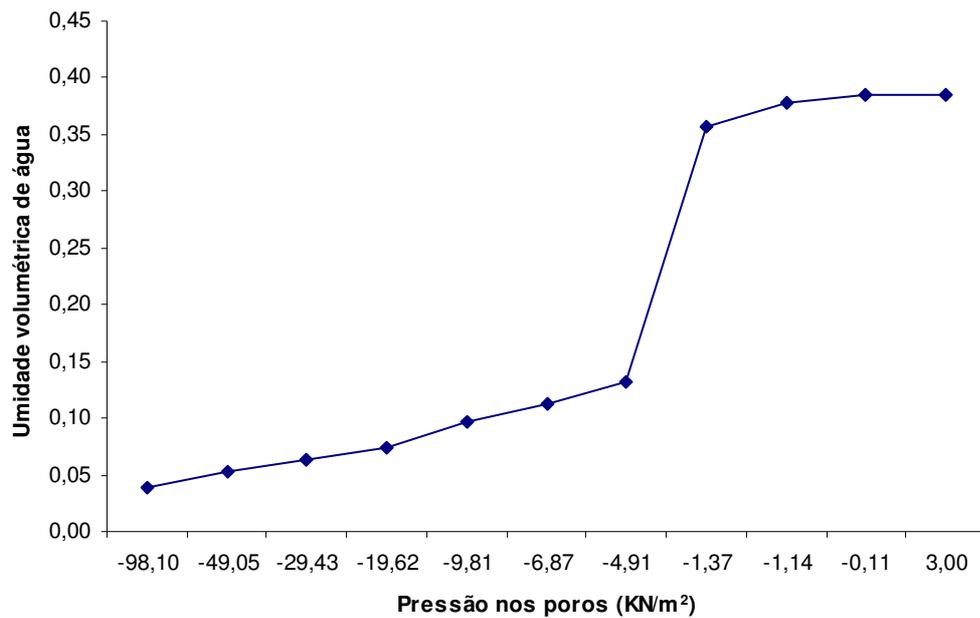


Figura 2.6: Típica função de variação umidade volumétrica da água para uma areia fina uniforme (adaptado de KRAHN, 2004a).

- Equações diferenciais do fluxo das águas subterrâneas

A equação diferencial para o fluxo das águas subterrâneas em meio poroso utilizada pelo SEEP/W é:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{K_x \partial H}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{K_y \partial H}{\partial y} \right) + Q = \frac{\partial \Theta_w}{\partial t} \quad \text{Equação (2.5)}$$

Onde:

H = Carga Hidráulica (L);

K_x = Condutividade hidráulica na direção x (L/T);

K_y = Condutividade hidráulica na direção y (L/T);

Q = Condição de fluxo de contorno aplicada (L³/T);

Θ_w = Umidade volumétrica de água (adimensional);

t = tempo (T).

Esta equação determina que a diferença entre o fluxo entrando e saindo de um volume elementar, em um ponto, em um determinado tempo, é igual à variação da

umidade volumétrica da água. Mais fundamentalmente, determina que a soma das taxas de variação dos fluxos nas direções x e y mais a condição de contorno externa aplicada é igual à taxa de variação da umidade volumétrica da água no respectivo tempo (KRAHN, 2004a).

Sob condições de tempo estacionário, o fluxo entrando e saindo de um volume elementar é o mesmo em todos os tempos. Logo, a relação $\partial\Theta/\partial t$ da Equação 2.5 desaparece, podendo então ser escrita segundo a Equação 2.6:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{K_x \partial H}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{K_y \partial H}{\partial y} \right) + Q = 0 \quad \text{Equação (2.6)}$$

2.2.5 - Modelagem numérica do transporte de contaminantes dissolvidos

a) Aspectos Gerais

As equações diferenciais que regem o transporte de contaminantes só podem ser resolvidas analiticamente para casos simplificados, envolvendo condições de contorno específicas e hipóteses de homogeneidade (TUCCI, 1995).

As aproximações numéricas são um conjunto de técnicas computacionais para solucionar equações de transporte de contaminantes. Elas aproximam a equação de advecção-dispersão a um sistema algébrico de equações, ou, alternativamente, simulam o transporte através do espalhamento de diversas partículas de referência (DOMENICO et al., 1998).

As aproximações numéricas permitem uma grande flexibilidade em relação a alguns parâmetros de fluxo e transporte (condutividade hidráulica, porosidade, dispersividade, sorção, etc.). Esta flexibilidade facilita a modelagem de sistemas simples e complexos, através de imposição das mais variadas condições de contorno. As aproximações analíticas não permitem esta variedade de parâmetros. Os modelos numéricos são, portanto mais bem adaptados para solucionarem-se problemas específicos e peculiares de um determinado local, o que os torna uma ferramenta útil e poderosa na prática (DOMENICO et al., 1998).

Em muitos casos na prática, são empregadas soluções numéricas por meio de modelos numéricos, constituídos por uma série de equações algébricas geradas por aproximação das equações diferenciais. Estes modelos utilizam métodos de diferenças finitas ou métodos de elementos finitos. Dentre os modelos computacionais disponíveis para simulação, destacam-se os seguintes: Aquifem, 3DFEMFAT, Femwater, Flownet/Trans, GMS, Micro-FEM, Modflow, Modpath, entre outros (CETESB, 2001b).

Os custos envolvidos na remediação de aquíferos podem ser altos e às vezes superdimensionados quando não se leva em consideração a atuação de fatores atenuantes como a degradação natural e adsorção, que podem vir a impedir a contaminação das águas efetivamente utilizadas. A simulação da migração dos compostos poderá servir como subsídio à análise dos riscos e tomadas de decisões (CORDAZZO, 2000).

b) Condições de Contorno

As soluções dos problemas numéricos são respostas diretas às condições de contorno impostas dentro do domínio a ser modelado. Sem as condições de contorno não é possível obter-se solução. São, portanto, a força-guia destes tipos de problema.

Às vezes, especificar condições de contorno é uma tarefa razoavelmente direta, como definir a concentração ou fluxo de um contaminante que existe há um ano baseado num determinado ponto de vazamento abaixo de uma lagoa superficial. Por outro lado, muitas vezes pode ser uma tarefa um pouco complexa, requerendo mais cuidado e planejamento. Podem ocorrer, inclusive, casos onde as condições de contorno corretas façam parte da solução do problema, como, por exemplo, o fluxo de contaminantes através de uma face onde o escoamento de água não é constante ou estacionário (KRAHN, 2004b).

Conforme descrito no item 2.2.4, tópico (e), as soluções adotadas pelos métodos numéricos às variáveis de algum problema são obtidas a partir da resolução preliminar da Equação 2.1.

Para o caso de uma análise de transporte de massa, tem-se:

$$[K]*\{C\}=\{Q_m\} \quad \text{Equação (2.7)}$$

Onde:

[K] = Matriz dos coeficientes relacionados com a geometria e propriedade dos materiais;

{C} = Vetor das concentrações totais nos nós (M/L³);

{Q_m} = Vetor do fluxo de contaminantes nos nós (M/T).

O objetivo é calcular os valores das variáveis primárias, que, em transporte de contaminantes, são as concentrações em cada nó. As variáveis serão computadas em relação às concentrações estabelecidas ao(s) nó(s) e/ou os fluxos de contaminantes estabelecidos. Sem especificar C ou Q_m ao(s) nó(s), a solução para a equação dos elementos finitos não poderá ser obtida (KRAHN, 2004b).

Ressalta-se, assim, a importância da associação entre os dois tipos de condições de contorno. Quando se especifica a concentração (C), a solução proverá o fluxo (Q_m) de contaminantes naquele(s) nó(s). Alternativamente, quando é imputado o valor do fluxo (Q_m), então a concentração (C) será a resposta obtida (KRAHN, 2004b).

c) Equações e particularidades do programa CTRAN/W 2002

O CTRAN/W é um software que utiliza o método dos elementos finitos para modelar o movimento de contaminantes através de materiais porosos como solos e rochas. Sua formulação possibilita a análise de problemas variando desde o simples rastreamento de partículas em resposta ao movimento da água a complexos processos envolvendo difusão molecular, dispersão mecânica, adsorção, degradação e dependência de densidade (KRAHN, 2004b).

- Velocidade de fluxo dos contaminantes

Os dados resultantes da simulação de fluxo hidrogeológico das águas subterrâneas e computados pelo SEEP/W são relativos à descarga específica ou velocidade de Darcy. A descarga específica pode ser definida como o fluxo total Q dividido por uma área seccional completa, preenchida por vazios e partículas sólidas do solo ao mesmo tempo (KRAHN, 2004b).

No entanto, a verdadeira área seccional disponível é menor do que a área completa considerada nos cálculos da velocidade de Darcy, devido à presença das partículas sólidas ocupando um determinado espaço. Conseqüentemente, a verdadeira velocidade da água é maior que a de Darcy. Por definição, a porosidade é a relação entre o volume de vazios e o volume total de solo. A área seccional disponível para o fluxo de água é, portanto, a porosidade vezes a área seccional total (KRAHN, 2004b).

Conseqüentemente, a velocidade efetiva linear média dos fluidos em meio poroso é, segundo Freeze e Cherry (1979 *apud* KRAHN, 2004b), definida pela Equação 2.8:

$$v_e = \frac{Q}{n \times A} \quad \text{Equação (2.8)}$$

Ou,

$$v_e = \frac{v}{n} \quad \text{Equação (2.9)}$$

Onde:

v = Velocidade de Darcy (L/T);

n = Porosidade (adimensional);

Q = Fluxo total (L³/T);

A = Área seccional (L²);

v_e = Velocidade efetiva linear média da água.

Sob condições saturadas, a umidade volumétrica da água (Θ_w) no solo é igual à porosidade. Logo, a velocidade efetiva é também igual a:

$$ve = \frac{v}{\Theta} \quad \text{Equação (2.10)}$$

Onde:

Θ_w = Umidade volumétrica de água no solo.

- Equação diferencial do balanço de massa

O programa CTRAN/W utiliza as velocidades de fluxo da água computados pelo SEEP/W para calcular os constituintes dissolvidos através dos poros. As equações que governam o transporte de contaminantes são baseadas no balanço de massa através de um volume elementar de poro, ilustrado na Figura 2.7 por meio da adição da componente de fluxo (dq/dx) ao volume de poro elementar.

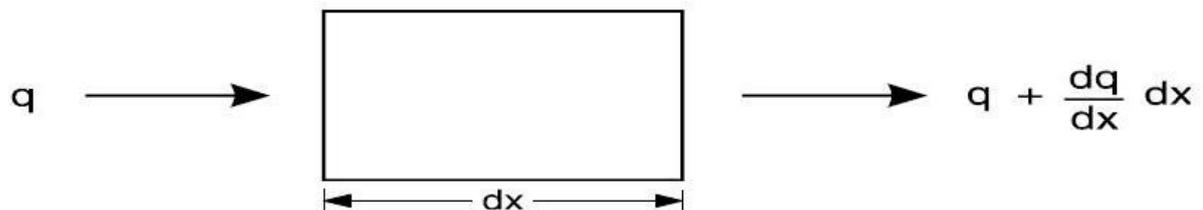


Figura 2.7: Balanço de massa através de um volume elementar de poro em uma dimensão (adaptado de KRAHN, 2004b).

Para que haja conservação de massa, a variação total de massa no tempo ∂t deve ser igual ao fluxo de massa no elemento. Logo, a equação diferencial do balanço de massa em um volume elementar de poro pode ser representada de acordo com a Equação 2.11 (KRAHN, 2004b):

$$\frac{\partial M}{\partial t} dx = -\frac{\partial q}{\partial x} dx \quad \text{Equação (2.11)}$$

Onde,

M = Massa total no volume elementar do poro (M);

q = Fluxo de massa no poro (M/L^3).

- Equação diferencial unidimensional básica para o transporte advectivo-dispersivo

Para efeito de apresentação, a equação diferencial para o transporte advectivo-dispersivo será descrita em termos unidimensionais. Para o caso de um sistema bidimensional, a exemplo do modelado neste trabalho, o programa CTRAN/W utiliza a mesma equação acrescentando apenas os devidos componentes dimensionais complementares.

A equação diferencial unidimensional básica para o transporte advectivo-dispersivo é definida por Freeze e Cherry (1979 *apud* KRAHN, 2004b) como se verifica na Equação 2.12:

$$\Theta \frac{\partial C}{\partial t} = \Theta D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} \quad \text{Equação (2.12)}$$

Onde,

C = Concentração (M/L³);

D = Dispersão hidrodinâmica (L²/T);

Θ_w = Umidade volumétrica da água (adimensional);

v = Velocidade de Darcy (L/T);

t = Tempo (T);

x = Coordenada na direção cartesiana x (L).

Dividindo-se a Equação 2.12 por Θ_w , tem-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - ve \frac{\partial C}{\partial x} \quad \text{Equação (2.13)}$$

Onde,

ve = Velocidade efetiva linear média do contaminante (L/T).

A dispersão hidrodinâmica relaciona-se com a dispersividade, velocidade efetiva linear média e o coeficiente de difusão D* conforme a Equação 2.14:

$$D = \alpha x \cdot ve + D^* \quad \text{Equação (2.14)}$$

Onde,

D^* = Coeficiente de difusão (L^2/T)

αx = Dispersividade na direção x (L)

D = Dispersão hidrodinâmica (L^2/T).

- Equação diferencial unidimensional básica para o transporte advectivo-dispersivo com degradação.

Para o transporte com degradação exponencial, onde a massa de contaminantes pode ser reduzida, tanto na fase dissolvida (água), quanto na fase adsorvida (às partículas do solo), tem-se, em termos de concentração inicial:

$$C = C_0 \cdot e^{-\lambda \cdot t} \quad \text{Equação (2.15)}$$

Onde,

t = Tempo decorrido (T);

λ = Taxa de degradação (T^{-1});

C = Concentração final do contaminante decorrido o tempo t (M/L^3);

C_0 = Concentração inicial do contaminante (M/L^3).

Por definição, o tempo de meia-vida de um contaminante (T_m) é o período em que ele leva para alcançar uma concentração final igual a metade da concentração inicial C_0 (KRAHN, 2004b). Logo:

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} = e^{-\lambda \cdot T_m} \quad \text{Equação (2.16)}$$

Ou,

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_m} = \frac{0,693}{T_m} \quad \text{Equação (2.17)}$$

Onde,

T_m = Tempo de meia-vida do contaminante (T);

C = Concentração final do contaminante decorrido o tempo T (M/L^3);

C_0 = Concentração inicial do contaminante (M/L^3).

Diferenciando-se a Equação 2.15 em relação ao tempo e calculando-se os componentes de massa decaída tanto para a fase dissolvida quanto para a fase adsorvida de contaminantes (KRAHN, 2004b), obtém-se a equação diferencial unidimensional para o transporte advectivo-dispersivo com degradação (Equação 2.18):

$$\Theta \frac{\partial C}{\partial t} = \Theta D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda \Theta C - \lambda S \rho_d \quad \text{Equação (2.18)}$$

Onde,

S = Adsorção (M/M);

ρ_d = Densidade do solo seco. (M/L^3).

- Equação diferencial unidimensional básica para o transporte advectivo-dispersivo com degradação e adsorção.

A adsorção S é definida como a quantidade de massa de soluto aderida às partículas do solo dividida pela massa de sólidos. A massa sólida por unidade de volume de um solo é a sua densidade seca ρ_d . Logo, a adsorção pode ser assim descrita em termos da Equação 2.19:

$$S = \frac{M_s}{\rho_d} \quad \text{Equação (2.19)}$$

Ou ainda:

$$M_s = S \rho_d \quad \text{Equação (2.20)}$$

Onde,

M_s = Massa de soluto aderida às partículas sólidas (M);

S = Adsorção (M/M);

ρ_d = Densidade do solo seco (M/L^3)

Portanto, a taxa de mudança da massa adsorvida será, segundo a Equação 2.21:

$$\frac{\partial Ms}{\partial t} = \rho_d \frac{\partial S}{\partial t} \quad \text{Equação (2.21)}$$

A adsorção é uma função da concentração C . Resultados experimentais são plotados usualmente como gráficos S versus C , como ilustrado na Figura 2.8. A inclinação da função S versus C é $\partial S / \partial C$ (KRAHN, 2004b). No caso de uma relação linear, a inclinação é chamada de coeficiente de distribuição, K_d . Desta maneira, a Equação 2.21 pode ser assim escrita:

$$\frac{\partial Ms}{\partial t} = \rho_d \frac{\partial S}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} \quad \text{Equação (2.22)}$$

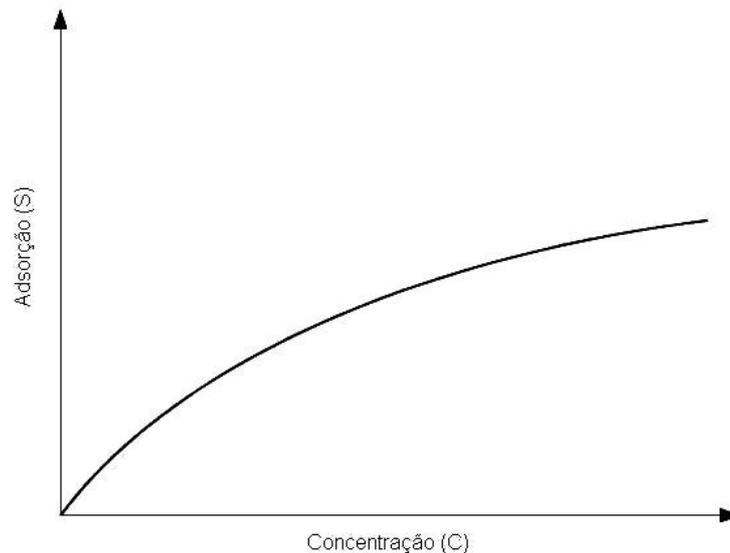


Figura 2.8: Relação entre Adsorção e Concentração (adaptado de KRAHN, 2004b).

Por fim, adicionando-se o termo da Equação 2.22 à Equação 2.18, tem-se a equação diferencial unidimensional para o transporte advectivo-dispersivo com degradação e adsorção (Equação 2.23 e 2.24):

$$\Theta \frac{\partial C}{\partial t} + \rho_d \frac{\partial S}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} = \Theta D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda \Theta C - \lambda S \rho_d \quad \text{Equação (2.23)}$$

Ou ainda:

$$\left(\Theta + \rho_d \frac{\partial S}{\partial C} \right) \frac{\partial C}{\partial t} = \Theta D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda \Theta C - \lambda S \rho_d \quad \text{Equação (2.24)}$$

d) Aspectos relevantes de ordem numérica do programa CTRAN/W

- Convergência

O objetivo na solução das equações dos elementos finitos em uma análise de transporte de contaminantes é determinar a concentração em cada nó. Para análises lineares, onde as propriedades dos materiais são constantes, as concentrações nodais podem ser computadas diretamente. Entretanto, em casos de análises não lineares onde contenha adsorção como uma função da concentração, as propriedades dos materiais não são completamente conhecidas ao início da análise. Conseqüentemente, o programa usa um esquema iterativo para resolver as equações (KRAHN, 2004b).

Esse processo consiste no uso de uma técnica repetitiva de substituição. Para a primeira iteração, as concentrações especificadas são utilizadas para definirem-se as propriedades dos materiais. As propriedades dos materiais vão sendo então atualizadas em subseqüentes e repetitivas iterações, usando sempre as concentrações computadas da iteração anterior (KRAHN, 2004b).

Convergência significa repetir-se a solução das equações de transporte nodais até que os valores finais computados não variem mais do que um valor instituído para as sucessivas iterações (KRAHN, 2004b).

O programa CTRAN/W não utiliza concentrações nodais individuais para fazer a comparação entre iterações sucessivas. Ao invés, ele usa a variação percentual do vetor normal – um processo que considera todas as concentrações nodais simultaneamente. O vetor normal é calculado de acordo com a Equação 2.25:

$$N = \sqrt{\sum_{i=1}^n C_i^2} \quad \text{Equação (2.25)}$$

Onde,

- N = Vetor normal (L^2/T);
- i = Seqüenciador;
- n = Número total de nós;
- Ci = Concentração individual em cada nó.

A variação percentual do vetor normal é simplesmente a mudança do valor de N entre duas iterações sucessivas. Se a variação em N for zero, então não haverá variação na solução entre iterações sucessivas. Em geral, existem diferenças muito pequenas entre as iterações de forma que não é razoável esperar-se variações nula no vetor normal (KRAHN, 2004b).

Portanto, durante o processo de iteração, o programa CTRAN/W calcula a diferença percentual no vetor normal, que representa a diferença percentual na concentração de todos os nós entre duas iterações consecutivas. Numa análise onde não exista adsorção, o problema é linear e é resolvido em uma iteração sendo, neste caso, ignorados os parâmetros de convergência (KRAHN, 2004b).

- Dispersão e oscilação numéricas

Dispersões e oscilações numéricas são fatores inerentes ao processo de solução das equações diferenciais de advecção-dispersão pelo método dos elementos finitos. Esses dois fenômenos estão ilustrados graficamente na Figura 2.9. A dispersão numérica tende a espalhar o contaminante em maior escala do que as predições de modelos analíticos. As oscilações numéricas produzem valores de concentrações maiores ou menores do que as máximas e mínimas especificadas (KRAHN, 2004b).

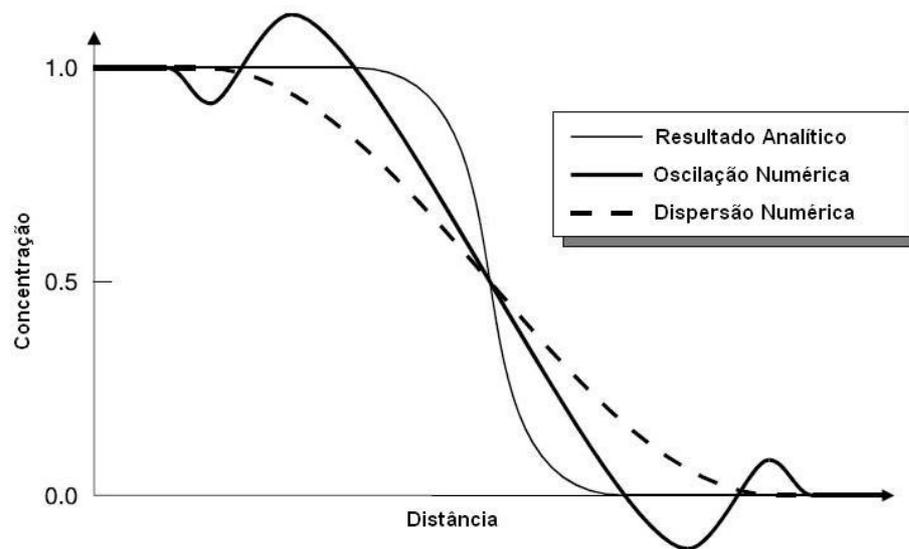


Figura 2.9: Ilustração dos fenômenos da oscilação e dispersão numéricas (adaptado de KRAHN, 2004b)

Dispersões e oscilações numéricas não podem ser completamente eliminadas; podem ser apenas controladas ou minimizadas. Os dois critérios largamente utilizados para esta finalidade são os números de Peclet e Courant (FRIND et al., 1982 *apud* KRAHN, 2004b; DAUS et al., 1983 *apud* KRAHN, 2004b).

- O critério dos números de Peclet e Courant

Numa análise bidimensional, o programa CTRAN/W computa os números de Peclet e Courant em cada ponto gaussiano de um elemento usando as seguintes equações:

$$P_x = \frac{|v|\Delta x}{D_{11}} \leq 2 \rightarrow \text{(Número de Peclet na direção x)} \quad \text{Equação (2.26)}$$

$$P_y = \frac{|v|\Delta y}{D_{22}} \leq 2 \rightarrow \text{(Número de Peclet na direção y)} \quad \text{Equação (2.27)}$$

$$C_x = \frac{v_x \Delta t}{\Delta x} \leq 1 \rightarrow \text{(Número de Courant na direção x)} \quad \text{Equação (2.28)}$$

$$C_y = \frac{v_y \Delta t}{\Delta y} \leq 1 \rightarrow \text{(Número de Courant na direção y)} \quad \text{Equação (2.29)}$$

Onde,

- Δx = Distância máxima entre os nós do elemento na direção x;
- Δy = Distância máxima entre os nós do elemento na direção y;
- D_{11} = Coeficiente de dispersão hidrodinâmica na direção x;
- D_{22} = Coeficiente de dispersão hidrodinâmica na direção y;
- $|v|$ = Magnitude da velocidade linear média efetiva;
- v_x = Velocidade linear média efetiva na direção x;
- v_y = Velocidade linear média efetiva na direção y;
- Δt = Escala de tempo incremental.

Os critérios dos números de Peclet e Courant apresentam condições necessárias para o dimensionamento do formato da malha dos elementos finitos e para a seleção do incremento de tempo na modelagem do transporte. O critério de Peclet requer que a discretização espacial do regime de fluxo não seja superior a duas vezes o potencial de dispersão do meio poroso. O critério de Courant requer que a distância percorrida pelo contaminante por advecção durante um incremento de tempo não seja maior que um incremento ou dimensão espacial (KRAHN, 2004b).

Por fim, seria conveniente, ao término da modelagem, checar os valores dos números de Peclet e Courant no fluxo usando desenhos de contornos. Como regra geral, quando o número de Peclet está acima do critério, o tamanho do elemento deveria ser reduzido, ou alternativamente, a dispersividade do material deveria ser aumentada. Quando o número de Courant está acima do critério, o incremento de tempo deveria ser reduzido. A obediência a estes critérios garantem, em geral, uma solução estável para o transporte de contaminantes com o mínimo de oscilações e dispersões numéricas (KRAHN, 2004b).

- Integração do tempo por diferença central ou retrógrada

A dispersão e oscilações numéricas também são afetadas pelo esquema de integração do tempo. O método de aproximação de diferença retrógrada (Backward Difference Approximation – BDA) resulta em menos oscilação numérica, porém em mais dispersão numérica. Por outro lado, o método de aproximação de diferença

central (Central Difference Approximation – CDA) resulta em menos dispersão numérica, porém mais oscilação. Uma solução mais estável pode ser obtida usando o método da diferença retrógrada. Entretanto, se a estabilidade numérica puder ser controlada, uma solução mais precisa é obtida através do método da diferença central (KRAHN, 2004b).

- Solucionador de equações

O programa CTRAN/W possui dois tipos de solucionadores de equação: um solucionador de equações direto e um solucionador de equações iterativo.

A velocidade de processamento dos cálculos no solucionador direto é dependente da diferença máxima do número dos nós de todos os elementos num domínio. Em outras palavras, o solucionador direto é bastante rápido para resolução de problemas simples, mas pode ser muito lento para os mais complexos.

Já a solução pelo processo iterativo é independente da diferença máxima do número dos nós de todos os elementos num domínio, podendo ser mais vagarosa do que a apresentada pelo processo direto no caso de problemas simples, porém muito mais rápida para os problemas complexos (grandes diferenças do número de nós).

e) Alguns trabalhos de modelagem numérica aplicada ao transporte de contaminantes

Parker & Islam (2000) conduziram um trabalho de comparação da simulação do tempo de migração de uma pluma de contaminação por hidrocarbonetos, utilizando-se métodos analíticos e numéricos computacionais. Os autores concluíram que os resultados são bastante aproximados, desde que sejam bem determinadas as características do solo e do contaminante. Salienta-se que a simulação vertical na zona insaturada foi comprovadamente desconsiderada para fins práticos.

Kim & Corapcioglu (2001) propuseram um modelo bidimensional para simular o espalhamento de uma pluma originada por vazamento em tanques. Este modelo foi

utilizado em um sítio contaminado por gasolina de avião. Concluiu-se que a maior parte do produto vazado há cerca de 20 anos continua como fase livre, contaminando tanto o solo como as águas subterrâneas.

Khan & Husain (2003) simularam o processo de atenuação natural de uma pluma de contaminantes gerada por vazamento de combustível utilizando os softwares BIOPLUME-II e BIOSCREEN, e comparando-se os resultados de saída. Concluíram que os valores são coerentes entre os programas e que a atenuação é viável no tempo $t=15$ anos, porém medidas iniciais devem ser tomadas para minimizar os riscos dos trabalhadores do estabelecimento em questão.

Cordazzo (2000) propôs uma modelagem numérica para simular a migração de um vazamento de gasolina acrescida de etanol. Partiu-se da hipótese de que o etanol adicionado à gasolina brasileira altera as propriedades de migração. Este efeito foi levado em consideração na modelagem. Salieta-se que a simulação vertical na zona insaturada foi comprovadamente desconsiderada para fins práticos. Concluiu que o modelo matemático para previsão de contaminantes no lençol freático considerando sorção, retardamento, biodegradação e, principalmente, a influência do etanol na biodegradação de 1a. ordem e na co-solvência dos BTEX, pode ser resolvido eficientemente com o método dos volumes finitos, e sugeriu ainda que a presença do etanol na gasolina influenciou em alguns resultados finais das simulações.

3 - CARACTERIZAÇÃO DO SÍTIO

3.1 - Histórico do empreendimento

O empreendimento tem uma área aproximada de 540 m² e fica localizado na cidade de Penedo, estado de Alagoas, em zona considerada urbana, de alta movimentação de pessoas e veículos, tendo uma ocupação vizinha predominantemente comercial, como mostra a Figura 3.1 (a) e (b). Funciona neste ramo de atividade desde 1951, sendo que em 1996 sofreu uma reforma onde foram promovidas as substituições de todos os componentes do sistema de armazenamento subterrâneo de combustíveis. Atualmente, armazena e revende gasolina, álcool e óleo diesel, (CETREL, 2005).



(a)



(b)

Figura 3.1 (a) e (b): Registros fotográficos do empreendimento (Penedo - AL, 2005).

Durante todo o ano de 2004, ocorreu um vazamento de óleo diesel na linha que une a bomba de diesel B1 ao filtro de diesel F1 (Figura 3.2), havendo uma perda de aproximadamente quatorze mil litros de produto (CETREL, 2005).

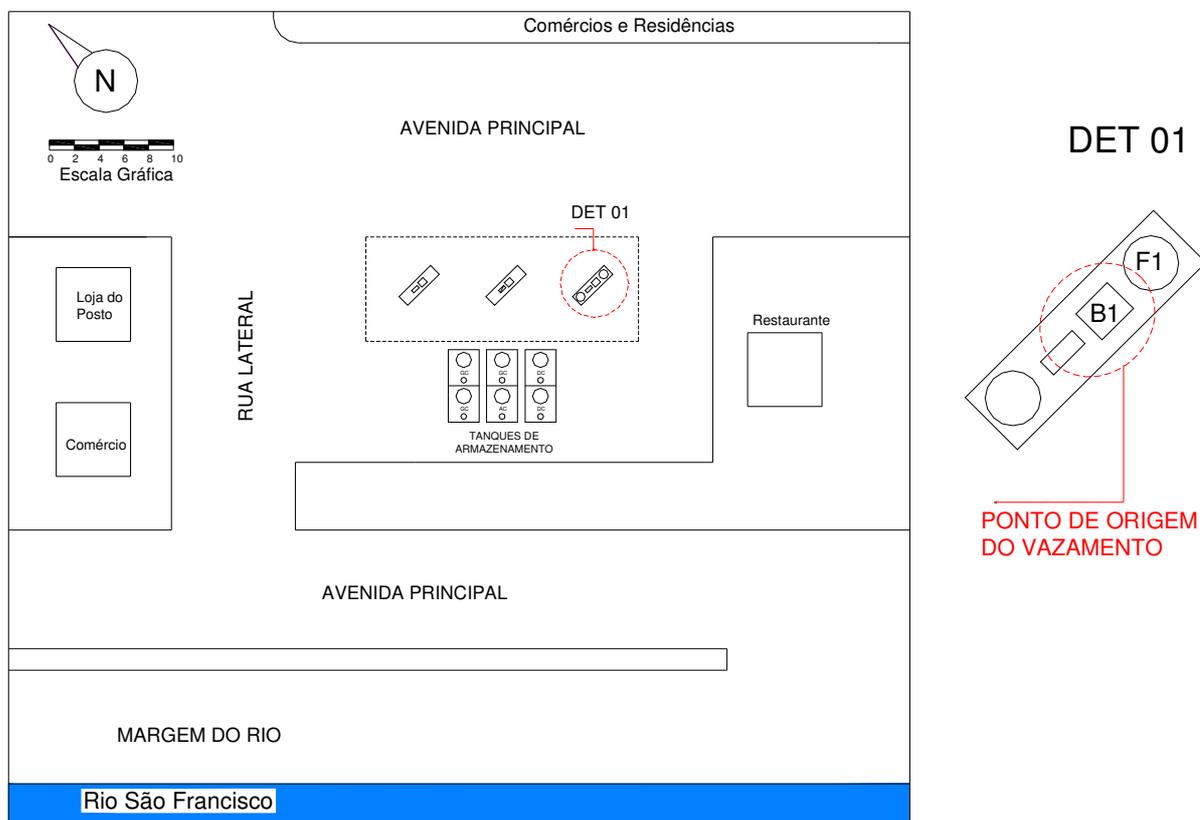


Figura 3.2: Planta baixa do empreendimento: detalhe da origem do vazamento.

Em Novembro de 2004, foi promovido o reparo no trecho de tubulação danificado, momento no qual o Autor teve a oportunidade, por meio de visitas em campo, de acompanhar o trabalho e constatar a presença de produto nas imediações do ponto de origem, num raio de abrangência de aproximadamente dois metros. Confirmada a suspeita do vazamento, foram realizados dois estudos:

- 1) Relatório de Avaliação Ambiental de Fase II, em Fevereiro de 2005, descrito em CETREL (2005), com o intuito de diagnosticar preliminarmente os impactos ambientais decorrentes da contaminação, através de levantamentos de campo, sondagens investigativas, análises laboratoriais, entre outros;

2) Instalação do Sistema de Saneamento de Lençol Freático, em Maio de 2005 (HAZTEC, 2005), com o intuito de implantar o sistema de saneamento e remediação do sítio, levando-se em conta novas informações coletadas no campo e as já adquiridas no relatório anterior.

3.2 - Caracterização física

Todas as áreas (abastecimento, tanques e pátio de operações) são pavimentadas com paralelepípedos, não existindo canaletas periféricas de drenagem na projeção da cobertura de bombas. A água para consumo humano do empreendimento é fornecida pela concessionária pública. Distante cerca de 50 metros a sudoeste do empreendimento localiza-se o Rio São Francisco, uma das principais fontes de abastecimento de água, comércio, recreação e turismo de toda a região (HAZTEC, 2005).

3.3 - Geologia

Com base nas sondagens executadas, caracterizou-se o subsolo da área investigada como sendo do tipo argilo-arenoso, de coloração cinza a marrom, com gradação para solo argiloso coloração cinza e bege, por vezes homogêneo nas porções finais da perfuração. Os níveis da águas subterrânea nos poços das sondagens estão praticamente todos inseridos nesta camada, a uma profundidade média de 3,32 metros medidos da superfície do terreno. A Figura 3.3 representa do perfil geotécnico típico do local. (CETREL, 2005).

3.4 - Hidrogeologia

Para caracterização hidrogeológica, foi realizado um levantamento planialtimétrico com a finalidade de determinar as cargas hidráulicas nos poços de monitoramento instalados, a partir da correlação planialtimétrica entre os poços, constando de leituras realizadas diretamente na régua graduada, a partir da boca do poço. Posteriormente, as cotas lidas são transformadas em cotas corrigidas em relação a um nível de referência topográfica, para efeito de cálculo.

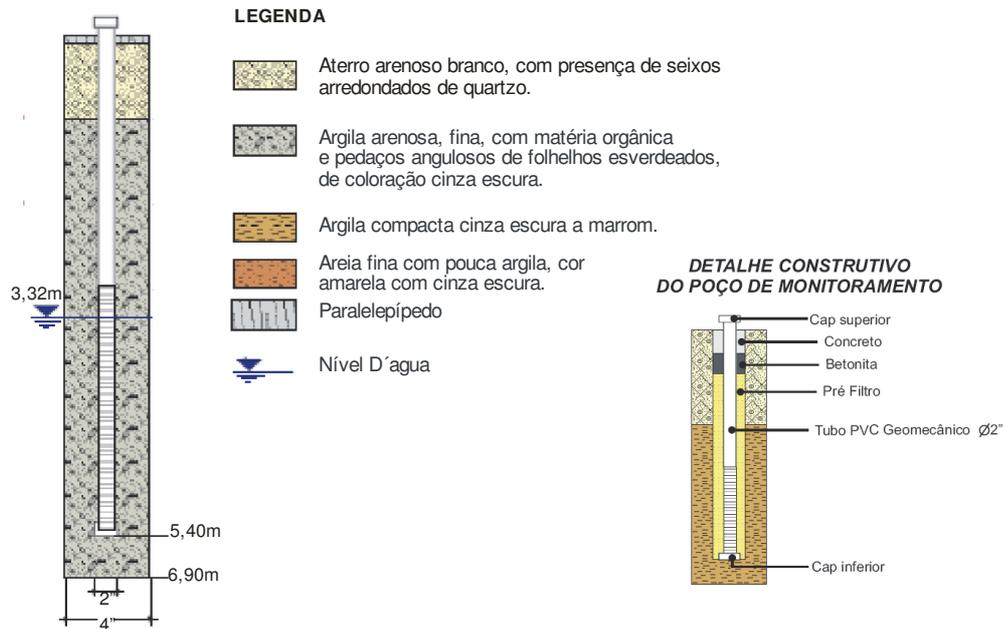


Figura 3.3: Perfil geotécnico típico do local (adaptado de CETREL, 2005).

As cargas hidráulicas foram então calculadas subtraindo-se as profundidades do nível de água dos poços de monitoramento das respectivas cotas relativas corrigidas, considerando que ambas as medidas são lidas a partir da boca dos tubos. A Figura 3.4 mostra a distribuição dos poços de monitoramento, extração e injeção. A Tabela 3.1 mostra as relações planialtimétricas entre os níveis de água subterrânea e as cotas da superfície dos poços instalados.

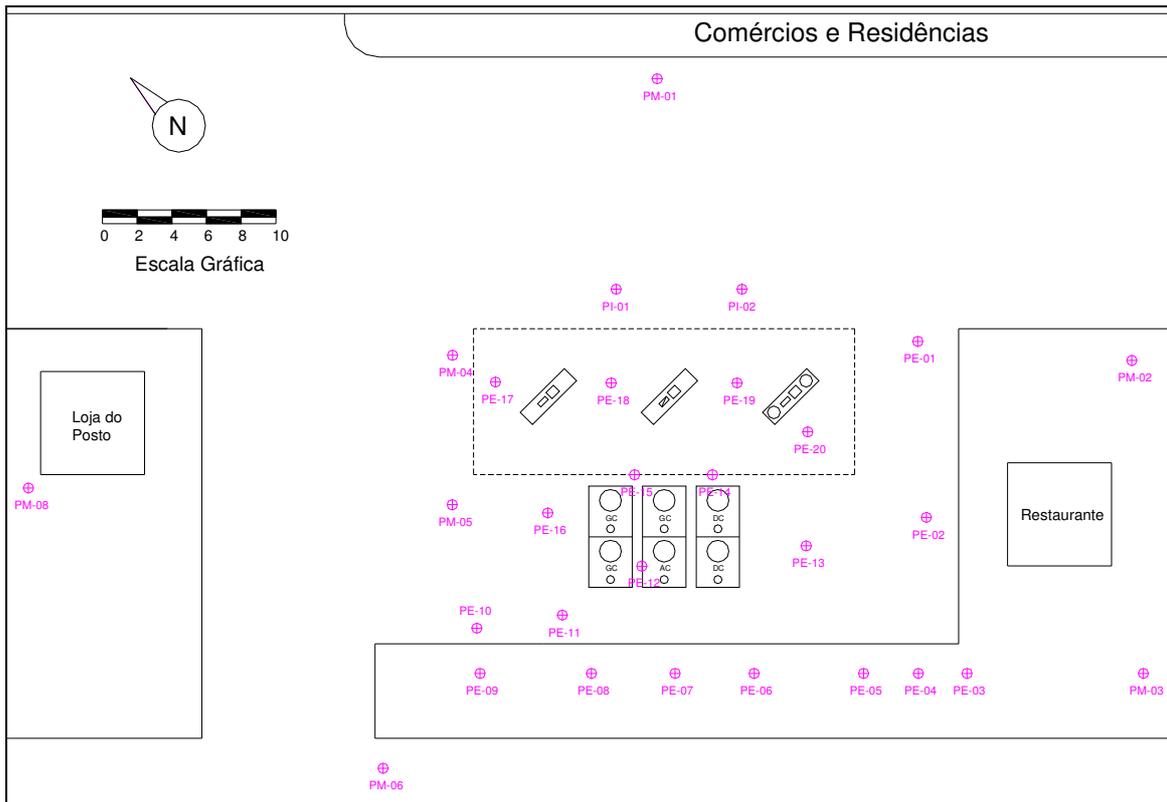


Figura 3.4: Distribuição dos poços de monitoramento, extração e injeção.

Posteriormente, realizou-se um ensaio com a finalidade de determinar o coeficiente de permeabilidade do terreno investigado. O ensaio foi realizado no PM-02, sendo do tipo recuperação a nível variável, com diferencial de pressão negativa aplicado ao aquífero, e recuperação superior a 63% da carga inicial. Neste ensaio, o nível da água natural é alterado para uma posição que pode ser denominada de nível inicial do ensaio. A tendência do nível da água voltar à posição original é acompanhada ao longo do tempo do ensaio ABGE (1996 *apud* HAZTEC, 2005). No presente caso, este nível inicial foi estabelecido através da retirada de água, medindo-se em seguida sua velocidade de recuperação.

Tabela 3.1: Relação planialtimétrica entre as cotas dos poços instalados e dos níveis de águas subterrâneas (HAZTEC, 2005).

LEVANTAMENTO PLANIALTIMÉTRICO ENTRE OS POÇOS INSTALADOS				
REFERÊNCIA DO POÇO	FINALIDADE	COTA CORRIGIDA (CC) EM METROS	PROF. DO NÍVEL DE ÁGUA (NA) EM METROS	CARGA HIDRÁULICA (CC-NA) EM METROS
PM-01	Monitoramento	99,13	2,18	96,95
PM-02	Monitoramento	99,13	2,68	96,45
PM-03	Monitoramento	99,17	4,09	95,08
PM-04	Monitoramento	98,99	2,90	96,09
PM-05	Monitoramento	99,04	3,81	95,23
PM-06	Monitoramento	99,00	4,28	94,72
PM-08	Monitoramento	99,09	3,63	95,46
PE-01	Extração	99,77	2,39	97,38
PE-02	Extração	98,80	2,80	96,00
PE-03	Extração	99,11	3,90	95,21
PE-04	Extração	99,07	4,01	95,06
PE-05	Extração	99,01	3,72	95,29
PE-06	Extração	99,03	4,60	94,43
PE-07	Extração	98,99	4,45	94,54
PE-08	Extração	99,01	4,75	94,26
PE-09	Extração	99,00	4,38	94,62
PE-10	Extração	98,83	3,65	95,18
PE-11	Extração	98,71	3,50	95,21
PE-12	Extração	98,80	3,27	95,53
PE-13	Extração	98,75	3,19	95,56
PE-14	Extração	98,74	3,20	95,54
PE-16	Extração	98,69	3,10	95,59
PE-17	Extração	98,70	2,57	96,13
PE-18	Extração	98,73	2,68	96,05
PE-19	Extração	98,83	2,50	96,33
PE-20	Extração	98,75	2,30	96,45
PI-01	Injeção	98,86	2,35	96,51
PI-02	Injeção	98,79	2,25	96,54

As leituras obtidas ao longo do ensaio foram processadas para obtenção da condutividade hidráulica, K , sendo calculado o valor de $5,23 \times 10^{-5}$ cm/s (HAZTEC, 2005). Este resultado é compatível com a ordem de grandeza da condutividade hidráulica ($k = 10^{-6}$ a 10^{-4} cm/s) apresentado por Domenico et al. (1998), para terrenos compostos por areias argilosas. A partir desta classificação, admitiu-se uma porosidade efetiva de 21% para o material em questão, conforme Fetter (1993).

A Figura 3.5 ilustra o mapa potenciométrico do local constante no relatório de investigação (HAZTEC, 2005).

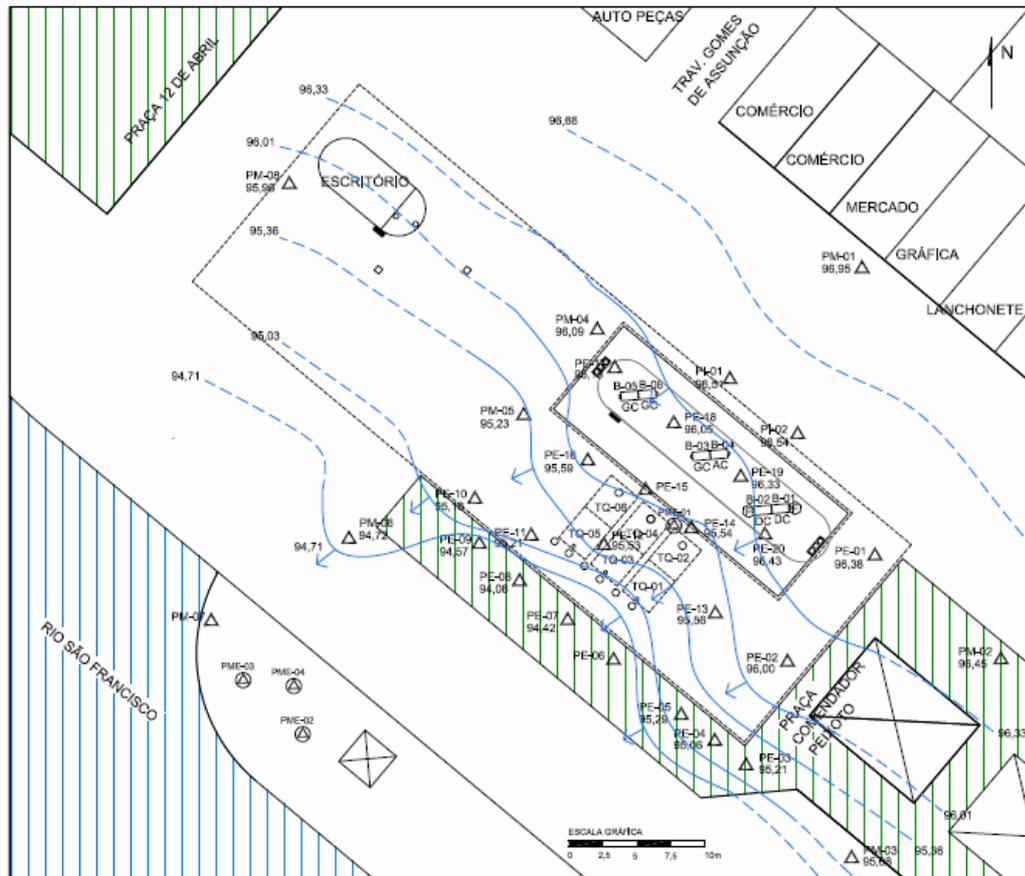


Figura 3.5: Mapa potenciométrico do local (HAZTEC, 2005).

3.5 - Pluma de fase livre

Quando da execução das sondagens, foi constatada a presença de hidrocarbonetos em fase livre em alguns poços, listados a seguir na Tabela 3.2.

Tabela 3.2: Poços com constatação de fase livre (adaptado de HAZTEC, 2005).

POÇOS COM PRESENÇA DE FASE LIVRE	
REFERÊNCIA DO POÇO	ESPESSURA MEDIDA DA FASE LIVRE EM CENTÍMETROS
PE-06	50,00
PE-07	50,00
PE-08	79,00
PE-09	19,00
PE-10	0,30
PE-13	2,00
PE-20	0,10

A representação da pluma de fase livre que consta no relatório de investigação está ilustrada na Figura 3.6. A partir da escala gráfica do desenho, pôde-se estimar o

comprimento desta pluma como sendo de aproximadamente 20 metros (entre o ponto de origem do vazamento e o limite mais extremo da mesma).



Figura 3.6: Delimitação de pluma de fase livre estimada (HAZTEC, 2005).

3.6 - Remediação

Em fevereiro de 2005 foi construída, a título de ação emergencial, uma vala de contenção hidráulica às margens do rio São Francisco, no alinhamento frontal ao posto (Figura 7.7). Trata-se da escavação de uma trincheira com profundidade suficiente para alcançar o nível freático, preenchida com material de granulometria graúda (tipo pedra britada) e possibilitando desta maneira a captação e bombeamento de uma eventual presença de produto. A Figura 3.7 detalha a seção transversal da vala de contenção implantada. Na figura 3.8, tem-se um registro fotográfico do sistema em construção.

Em maio de 2005 foi instalado um sistema de remediação por bombeamento, onde os contaminantes e água são bombeados conjuntamente através dos poços de extração PE-01 a PE-20, sendo então encaminhados a um tanque de tratamento e

separação de fases. Depois de separadas as fases, a água tratada é re-injetada através dos poços de injeção PI-01 e PI-02 e o contaminante armazenado para uma destinação final (HAZTEC, 2005).

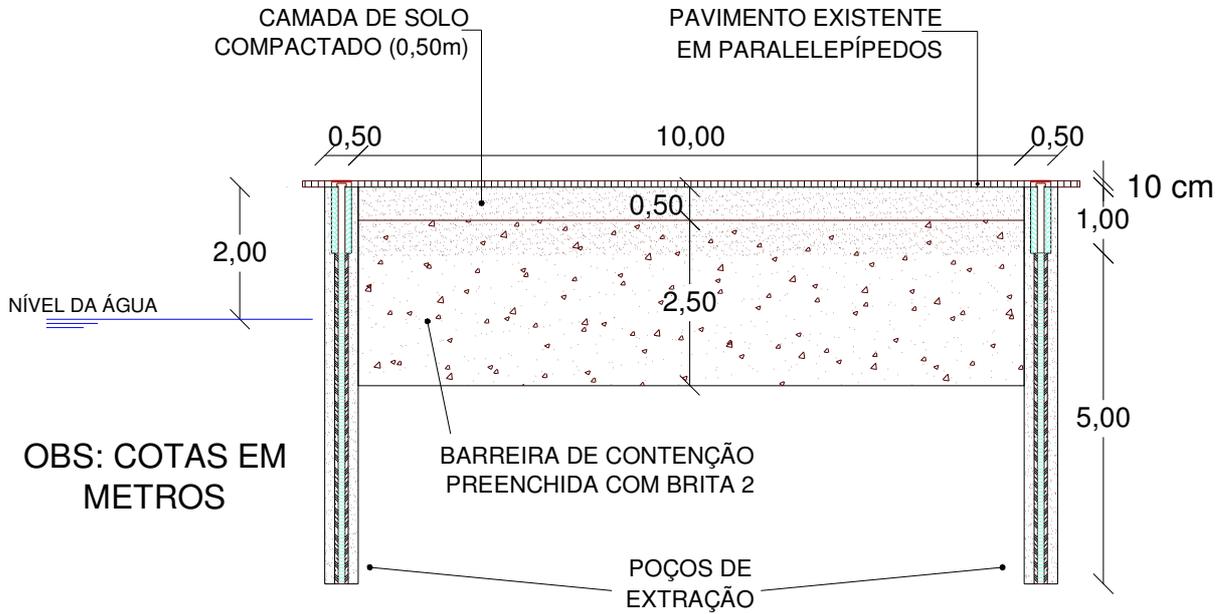


Figura 3.7: Seção transversal da vala de contenção implantada.



Figura 3.8: Registro fotográfico do sistema em construção (Penedo – AL, 2005).

4 - MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO FLUXO DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

4.1 - Aspectos gerais

A modelagem de transporte de contaminantes é dependente da solução prévia do problema de fluxo das águas subterrâneas (DOMENICO et al., 1998).

Para a modelagem e simulação do fluxo das águas subterrâneas foi utilizado o programa SEEP/W versão 2002, da Geo-Slope International Ltd, de propriedade da Universidade Católica de Pernambuco.

Os dados de entrada necessários para elaboração do modelo conceitual foram obtidos através dos estudos ambientais aplicados ao local descritos no capítulo 3 e complementados pelas visitas de campo do Autor.

4.2 - Discretização do meio

Para a modelagem do fluxo das águas subterrâneas, foi elaborada uma rede de malha retangular com dimensões de um metro por um metro, representada na Figura 4.1, totalizando 4.140 elementos finitos com 4.270 nós.

Antes de estabelecer estas dimensões e formatos, fez-se uma verificação prévia da malha considerando os critérios de Peclet e Courant por meio da estimativa de cálculo destes parâmetros. Para tanto, utilizou-se valores médios para a velocidade de escoamento das águas subterrâneas ($3,84 \times 10^{-3}$ m/dia) e o coeficiente de dispersão hidrodinâmica (1,6 m), obtidos com base nas informações contidas nos relatórios de investigação existentes.

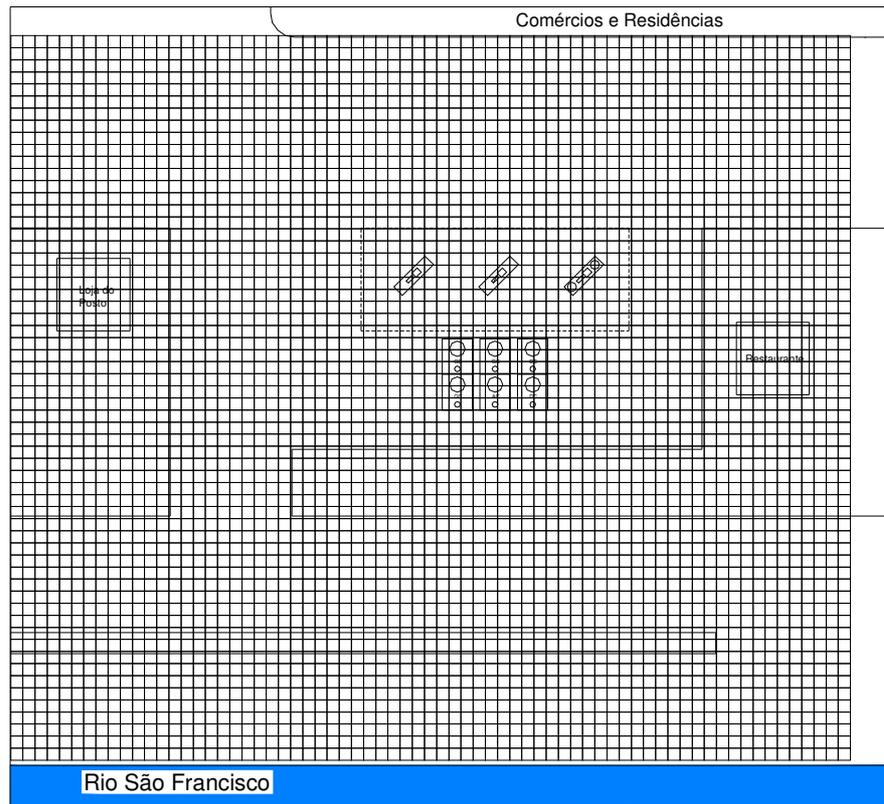


Figura 4.1: Discretização retangular da área modelada.

4.3 - Unidades

As unidades adotadas para a modelagem do fluxo das águas subterrâneas estão apresentadas na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Unidades adotadas para a modelagem do fluxo das águas subterrâneas

UNIDADES MÉTRICAS UTILIZADAS		
PARÂMETRO	SÍMBOLO	UNIDADE
Comprimento	m	metro
Tempo	dia	dia
Força	KN	Kilo-Newton
Pessão	kN/m^2	Kilo-Newton por metro quadrado
Peso Unitário da Água	kN/m^3	Kilo-Newton por metro cúbico
Condutividade Hidráulica	m/dia	metro por dia
Carga Hidráulica	m	metro
Fluxo Nodal	m^3/dia	metro cúbico por dia
Volume	m^3	metro cúbico

4.4 - Propriedades dos materiais

A camada do subsolo que contém o nível freático da água subterrânea, caracterizando a fronteira entre a zona saturada e vadosa, está presente na porção inicial de todas as sondagens executadas. Considerou-se, portanto, para todo o domínio modelado, a homogeneidade das propriedades dos materiais como também condições isotrópicas para a função de condutividade hidráulica.

As propriedades dos materiais pertinentes à construção do modelo foram retiradas dos relatórios de investigação ambientais descritos no capítulo 3. A Tabela 4.2 lista os valores destes parâmetros.

Tabela 4.2: Parâmetros utilizados na modelagem do fluxo das águas subterrâneas

PARÂMETROS UTILIZADOS NA MODELAGEM			
PARÂMETRO	VALOR	UNIDADE	FONTE
Condutividade Hidráulica	4,52 X 10 ⁻²	m/dia	HAZTEC, 2005 (convertido a partir do valor original de 5,02 x 10 ⁻⁵ metros por segundo)
Porosidade	21%	adimensional	HAZTEC, 2005.
Peso Unitário da Água	9,807	kN/m ³	KRAHN, 2004a

A análise, em relação à escala de tempo, foi do tipo estacionária, uma vez que o grau das variações sazonais do nível das águas do Rio São Francisco não altera significativamente o padrão de fluxo hidrogeológico local, principalmente devido às cotas topográficas elevadas do terreno em relação à lâmina do rio.

4.5 - Condições de contorno

As condições de contorno preliminarmente impostas no domínio modelado foram as cargas hidráulicas (H) nos nós dos respectivos poços de extração, monitoramento e injeção, cujos valores encontram-se calculados e descritos na Tabela 3.1.

Nos limites das laterais esquerda e direita, foram impostas condições de contorno de fluxo (Q) nulo, com a finalidade de delimitar o problema à área de interesse.

Ao longo de todo o limite superior, foi imposta uma condição de contorno do tipo carga hidráulica (H) constante, cujo valor foi interpolado linearmente a partir da carga hidráulica do poço PM-01, por ser o mais próximo desta fronteira. Esta ação foi importante para garantir um traçado uniforme das linhas equipotenciais obtidas no interior do domínio, além de estabelecer que a direção preferencial do fluxo das águas será da borda superior da área modelada para a inferior (em direção ao rio).

Ao longo de todo o limite inferior (lâmina do rio), foi imposta uma condição de contorno do tipo carga hidráulica (H) constante, cujo valor foi obtido através da aproximação da cota topográfica do nível das águas do rio em relação à cota do poço PM-06, por ser o mais próximo desta fronteira.

4.6 - Resultados

Os resultados da modelagem do fluxo da água subterrânea são apresentados nos itens a seguir:

4.6.1 - – Mapa potenciométrico

O mapa potenciométrico resultante, com indicação das linhas equipotenciais e linhas de fluxo, está apresentado na Figura 4.2.

Atenta-se para a semelhança entre o mapa ilustrado na Figura 4.2 (modelado) e o da Figura 3.5 (HAZTEC, 2005). Analisando o traçado das linhas de fluxo, nota-se que existe certa tendência das águas confluírem, em até certo ponto, à região destacada pela elipse, situada em frente à cobertura de bombas do posto. Os tanques subterrâneos de combustíveis, localizados à montante desta região, podem ter causado a origem do fato.

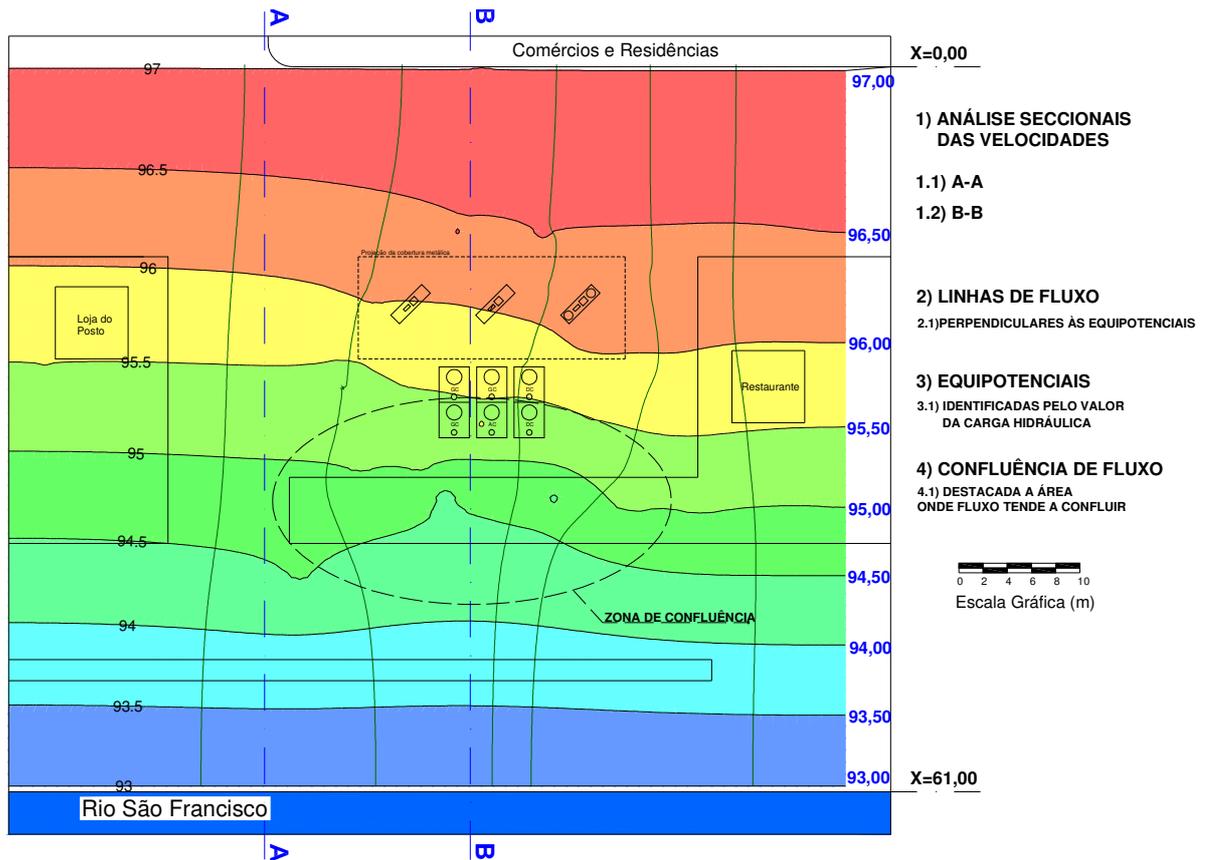


Figura 4.2: Mapa potenciométrico com as linhas equipotenciais resultantes

4.6.2 - – Gráfico da Velocidade Modular versus Distância

A Figura 4.3 ilustra o gráfico das velocidades modulares versus distância nas seções A-A e B-B respectivamente.

Na seção A-A, o gráfico exprime um comportamento com certa uniformidade em relação aos valores das velocidades, que variam de aproximadamente $2,50 \times 10^{-3}$ m/dia a $3,90 \times 10^{-3}$ m/dia. Já na seção B-B, nota-se um comportamento com mudanças mais bruscas nos valores das velocidades, variando de $1,55 \times 10^{-3}$ m/dia (na distância doze metros) a $6,30 \times 10^{-3}$ m/dia (na distância 32 metros), justamente na zona de confluência. Em ambos os casos, as velocidades tendem a estabilizar em um mesmo valor na medida em que se aproxima do rio.

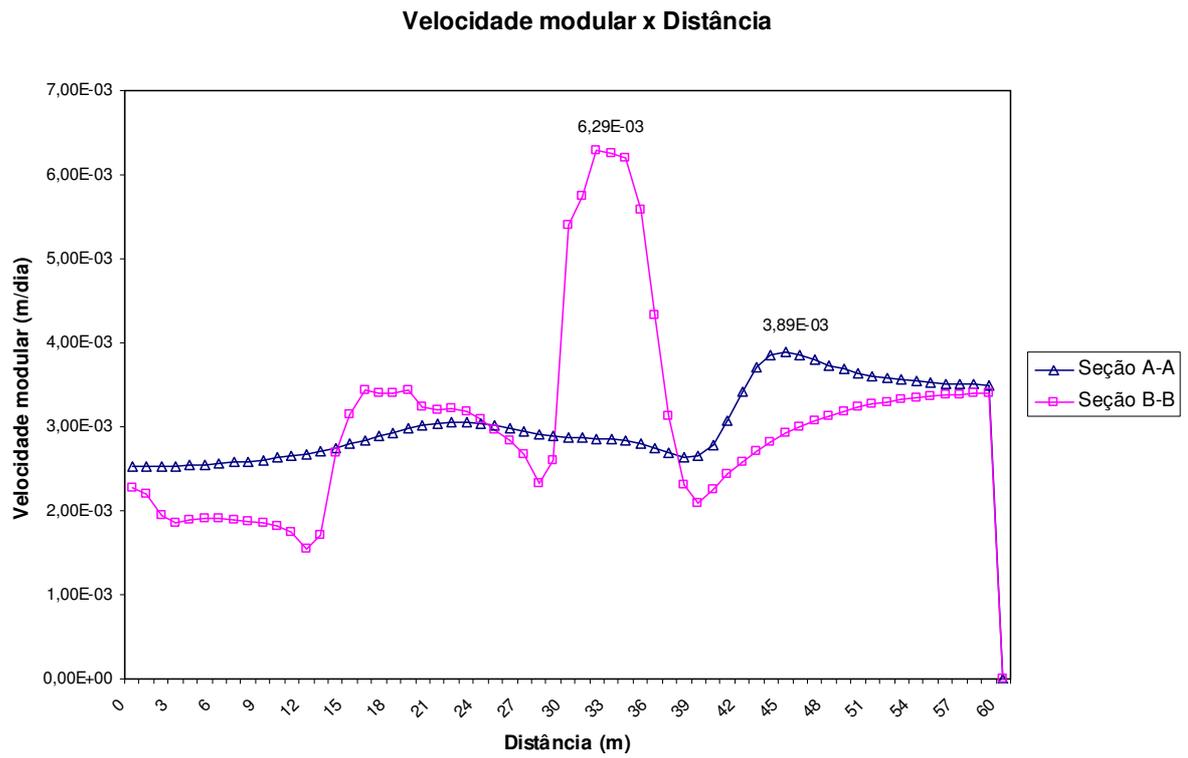


Figura 4.3: Gráfico da Velocidade Modular versus Distância para as Seções A-A e B-B.

5 - MODELAGEM DO TRANSPORTE DE CONTAMINANTES DISSOLVIDOS

5.1 - Aspectos gerais

Com os dados gerados pela resolução do problema de modelagem de fluxo hidrogeológico, iniciou-se o processo de modelagem e simulação do transporte de contaminantes dissolvidos.

Para a modelagem e simulação do transporte de contaminantes dissolvidos fez-se uso do programa CTRAN/W versão 2002, da Geo-Slope International Ltd, de propriedade da Universidade Católica de Pernambuco.

O composto alvo da simulação foi o benzeno (C_6H_6). Os parâmetros necessários à elaboração do modelo conceitual foram obtidos a partir da solução do problema de fluxo de águas subterrâneas, complementados pelos relatórios de investigações ambientais (ver capítulo 3) e também por dados disponíveis na literatura pertinente ao assunto.

5.2 - Unidades

As unidades adotadas para a modelagem do transporte de contaminantes dissolvidos estão apresentadas na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Unidades adotadas para a modelagem do transporte de contaminantes dissolvidos

UNIDADES MÉTRICAS UTILIZADAS		
PARÂMETRO	SÍMBOLO	UNIDADE
Comprimento	m	metro
Tempo	dia	dia
Força	KN	Kilo-Newton
Pessão	kN/m ²	Kilo-Newton por metro quadrado
Peso unitário da água	kN/m ³	Kilo-Newton por metro cúbico
Condutividade Hidráulica	m/dia	metro por dia
Carga Hidráulica	m	metro
Fluxo nodal	m ³ /dia	metro cúbico por dia
Volume	m ³	metro cúbico
Concentração	ppm	parte por milhão
Coefficiente de Difusão	m ² /dia	metro quadrado por dia
Dispersividades Longitudinal e Transversal	m	metro
Tempo de meia vida	dia	dia
Adsorção (S)	g/g	grama por grama
Densidade	g/m ³	grama por metro cúbico
Fluxo de Massa	g/dia	grama por dia

5.3 - Condições de contorno

5.3.1 - Aspectos gerais sobre o comportamento dos LNAPs no subsolo

Conforme descrito no capítulo 2, os hidrocarbonetos no subsolo estão presentes em cinco fases de estado físico (AZAMBUJA et al., 2.000): (a) Fase líquida ou livre; (b) Fase adsorvida ou residual; (c) Fase dissolvida; (d) Fase vapor; (e) Fase condensada.

Parker & Islam (2000) desenvolveram um modelo analítico inverso para estimar-se o tempo de liberação de um vazamento existente de LNAPLs, apresentando soluções para o cálculo das velocidades de migração da pluma de contaminantes nas zonas vadosa e saturada. Durante o desenvolvimento matemático do modelo, chegaram a conclusão que o tempo de migração vertical do contaminante na zona vadosa, necessário para alcançar aquíferos livres, variava na ordem de dias ou meses, sendo, portanto, pouco influente nas análises em longo prazo, podendo ser assim desconsiderado.

5.3.2 - Aspectos gerais sobre a dissolução dos LNAPLs na água subterrânea.

Kim & Corapcioglu (2001), com o objetivo de investigar os efeitos da dissolução e volatilização no processo de migração de um LNAPL, desenvolveram um modelo numérico bidimensional, considerando-se a fase residual de NAPL capturada pelas forças capilares, a dissolução na interface entre contaminante e água subterrânea e a volatilização na interface entre o contaminante e zona vadosa. Foi conduzida a simulação de dois cenários de contaminação com o benzeno. No primeiro cenário, foram assumidas condições máximas de fluxo de massa volatilizada a partir da zona vadosa para atmosfera, por difusão, através de uma superfície de solo permeável. No segundo cenário, as condições de volatilização foram negligenciadas (caso de superfície de solo impermeável). Os autores concluíram que as concentrações de benzeno na água subterrânea para o primeiro cenário (dissolução mais volatilização) são até 50% menores em relação aos valores calculados para o segundo cenário (sem volatilização).

O transporte de um LNAPL na zona capilar é diferente de quando em um aquífero. Nas zonas capilares, a água subterrânea apresenta-se basicamente estagnada e o processo de difusão molecular é o mecanismo dominante do transporte. No aquífero, advecção e dispersão hidrodinâmica são predominantes. Sob estas condições, a dissolução e o transporte de cada composto de uma piscina de LNAPL para a água subterrânea pode ser visto como uma reação heterogênea dividida em três etapas: (i) difusão molecular dos compostos presentes na piscina em direção à interface com a água subterrânea, (ii) dissolução destes compostos na interface, e (iii) transporte dos contaminantes dissolvidos por advecção, dispersão e difusão, sendo, nesta etapa, a difusão molecular geralmente desprezada quando comparada com a dispersão mecânica (HOLMAN & JAVANDEL, 1996).

Sob condições de equilíbrio termodinâmico, a concentração dos compostos dissolvidos na interface imediatamente adjacente à fronteira com a piscina de LNAPL pode ser relacionada com sua concentração inicial na fase não aquosa de acordo com a Equação 5.1 (HOLMAN & JAVANDEL, 1996).

$$C_s(t) = K_p C_N(t) \quad \text{Equação (5.1)}$$

Onde:

C_s = Concentração da fração molar do composto na fase dissolvida;

C_N = Concentração da fração molar do composto na fase não aquosa (piscina);

K_p = Coeficiente de partição dos compostos entre as fases.

O coeficiente de partição é obtido através de medições das concentrações dos compostos em ambas as fases utilizando-se experimentos de coluna ou batelada.

Johnson & Pankow (1992 *apud* HOLMAN & JAVANDEL, 1996), utilizaram um modelo matemático com condições estacionárias de fluxo advectivo e dispersivo para relacionar a dissolução de uma piscina de NAPL com a dispersão hidrodinâmica transversal e a velocidade de água no poro do aquífero, assumindo a hipótese de concentração constante na interface com a piscina de NAPL.

Hunt et al., (1988 *apud* CHRYSIKOPOULOS, 1995), apresentaram uma solução analítica para uma equação bidimensional de fluxo estacionário advectivo-dispersivo aplicável à dissolução de uma piscina de NAPL num meio poroso saturado e homogêneo, assumindo a hipótese da piscina ter forma retangular. Chrysikopoulos et al., (1994 *apud* CHRYSIKOPOULOS, 1995), admitindo que o soluto dissolvido decai e adsorve governado por uma função de isoterma linear sob condições de equilíbrio químico, estendeu este modelo adicionando o transporte transiente de contaminantes a partir de uma piscina de NAPL formada por um único componente. Nos dois casos, os modelos assumiram que a concentração inicial do contaminante na origem era igual à solubilidade máxima em meio aquoso.

Já em outro trabalho, Chrysikopoulos (1995), desenvolveu soluções analíticas para um modelo tridimensional de transporte de contaminantes a partir de uma piscina de NAPL formada por um único componente num meio poroso saturado e homogêneo, sob condições de fluxo estacionário e unidirecional. Para simplificações matemáticas, assumiu que o soluto dissolvido decai e adsorve governado por uma

função de isoterma linear sob condições de equilíbrio químico. Além disso, considerou que a concentração do soluto na fase dissolvida adjacente à origem (interface com a piscina de NAPL) é igual ao limite de sua solubilidade.

Borden & Kao (1992 *apud* GUSMÃO, 2002), indicam três fases distintas na dissolução de um NAPL nas águas subterrâneas, salientado a baixa taxa de dissolução a partir da fase dois (Figura 5.1), o que caracterizaria um tempo consideravelmente longo para a completa dissolução de uma fonte residual de contaminantes, no caso de nenhuma ação de intervenção na origem.

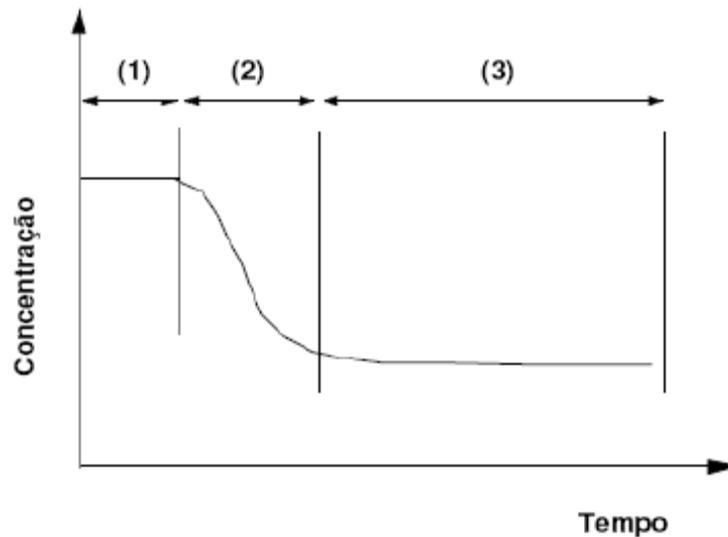


Figura 5.1: Dissolução da fase residual de um NAPL na água subterrânea (GUSMÃO, 2002).

Esta afirmação pôde ser confirmada pelo trabalho de Kim & Corapcioglu (2001), que, ao aplicarem um modelo numérico bidimensional (que considera a fase residual de NAPL capturada pelas forças capilares, a dissolução na interface entre contaminante e água subterrânea e a volatilização na interface entre contaminante e zona vadosa) em um caso de contaminação onde um volume de combustível vazado foi estimado entre 246 e 280 metros cúbicos, concluíram que, após 20 anos, 76,4%, 13,4% e 10,2% desse volume estavam presentes como fases livre, residual e dissolvida respectivamente, estando a maior fração ainda móvel, podendo atuar como fonte de contaminação ainda por longos períodos de tempo.

5.3.3 - Estudo da condição de contorno aplicada

A pesquisa aborda a modelagem e simulação dos cenários de contaminação originados por um composto já dissolvido na água subterrânea. Algumas hipóteses, portanto, foram assumidas: (a) ausência de perdas por adsorção, degradação e volatilização na zona vadosa; (b) a área inicial da superfície de interface entre a piscina de combustível originada pelo vazamento e o nível do aquífero freático livre possui um formato quadrado de lado igual a dois metros, conforme Capítulo 3; (c) a concentração inicial do composto nesta área é igual ao seu limite de solubilidade deste em meio aquoso; (d) a concentração do composto nesta área permanecerá constante até que toda a massa do contaminante vazado encontre-se dissolvida na água subterrânea. A Figura 5.2 ilustra a estimativa dos nós abrangidos pela área de interface entre a piscina de combustíveis e o nível do aquífero livre, considerando-se as hipóteses mencionadas.

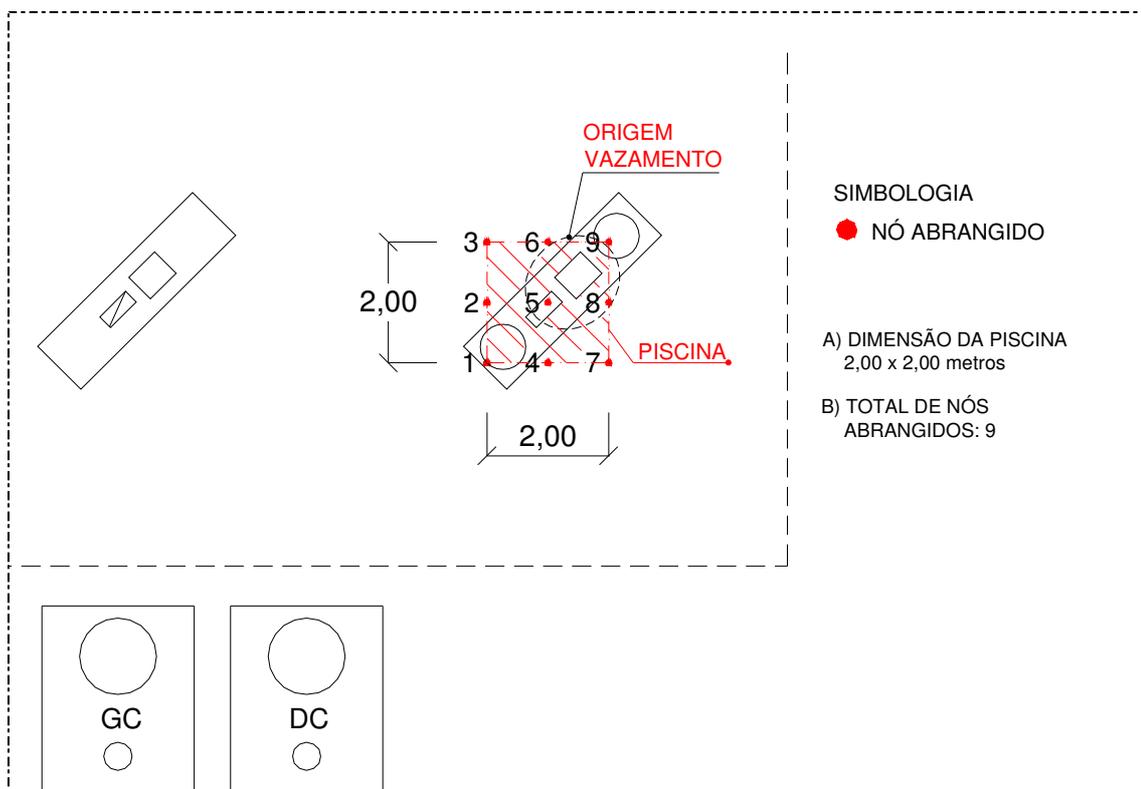


Figura 5.2: Estimativa dos nós abrangidos pela área de interface entre a piscina de combustíveis e o nível do aquífero livre.

O composto alvo da modelagem é o benzeno. Uma estimativa do cálculo da quantidade em massa deste contaminante oriunda do vazamento é apresentada na Tabela 5.2.

Tabela 5.2: Cálculo da quantidade em massa de benzeno oriunda do vazamento

CÁLCULO DA QUANTIDADE DE BENZENO EM MASSA ORIUNDA DO VAZAMENTO			
PARAMETRO	UNIDADE	QUANTIDADE	REFERÊNCIA
Volume de óleo diesel vazado	m ³	14,00	CETREL, 2005
Densidade do óleo diesel	kg/m ³	830	ANP, 2004
Massa de óleo diesel vazada	Kg	11.620	CALCULADA
% do benzeno no óleo diesel, em massa	adimensional	0,50%	USEPA, 2006a
Massa de benzeno vazada	Kg	58,1	CALCULADA

Conforme apresentado no Capítulo 2, a Equação 2.7 é utilizada pelo programa CTRAN/W para relacionar a concentração imposta e o fluxo de massa em um determinado nó.

Desta forma, quando se especifica concentração nodal (C), a solução proverá o fluxo (Qm) de contaminantes no nó capaz de equilibrar o valor da concentração inicial imposta. Alternativamente, quando é adotado um valor de fluxo (Qm), então a concentração (C) será a solução obtida (KRAHN, 2004b).

Para as simulações, foi utilizada uma escala de tempo com intervalos de “time steps” de 15 dias, levando-se em consideração o atendimento ao critério dos Números de Peclet e Courant para oscilações e dispersões numéricas. A Figura 5.3 ilustra a variação temporal da função fluxo de entrada de contaminante (Qm) nos respectivos nós, em resposta à condição imposta da concentração inicial ser igual à solubilidade do benzeno, ou seja, C=Solubilidade=1.780 ppm (USEPA, 2006b).

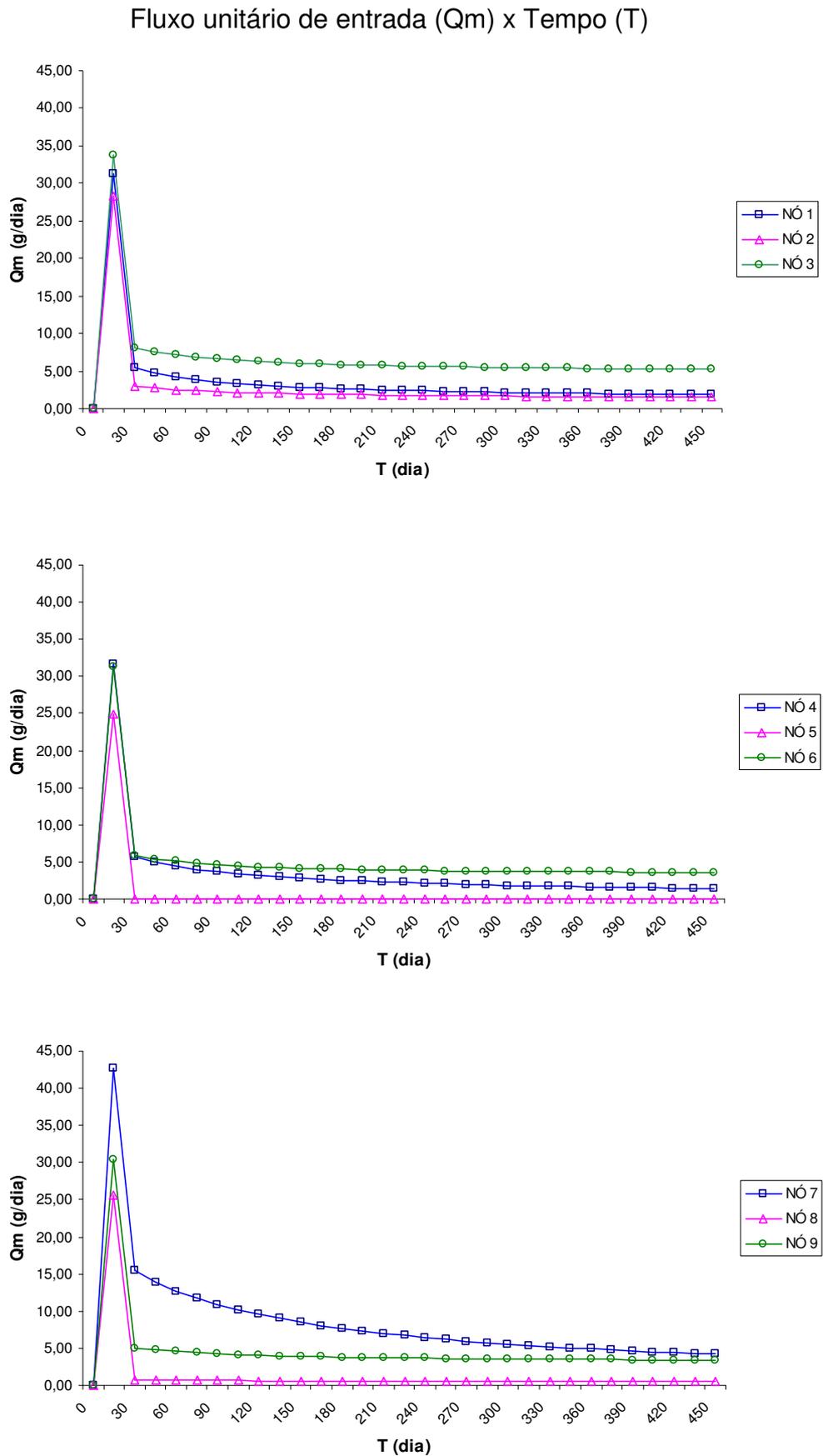


Figura 5.3: Fluxo de entrada de contaminante (Q_m) nos respectivos nós, em resposta à condição inicial imposta $C=1.780$ ppm.

Analisando os gráficos da Figura 5.3, nota-se, como comportamento geral da função Q_m versus T nos nós, um pico inicial no valor da vazão de entrada unitária e, em seguida, uma tendência a estabilizar-se num valor constante. Os valores da função são proporcionais às velocidades de fluxo das águas subterrâneas computadas em cada nó.

Este pico pode ser explicado pelos elevados gradientes de concentração gerados no primeiro intervalo de tempo (time step), na medida em que para o tempo inicial $T_0=0$, tem-se a concentração inicial $C_0=0$ e para o tempo de 15 dias (primeiro “time step”) $T_{15}=15$, a concentração aumenta bruscamente para $C_{15}=1.780$ ppm.

Em seguida, foi verificado, por meio da função temporal de fluxo acumulado de entrada de massa, em qual intervalo de tempo (time step) a soma dos valores de fluxo acumulado nos nove nós mais se aproximava do valor calculado para a massa total vazada de benzeno, a saber, 58,1 kg (Tabela 5.2).

A variação temporal da função fluxo acumulado de entrada (Q_{ac}) de massa nos nove nós afetados pelo vazamento, em resposta à condição imposta da concentração inicial ser igual à solubilidade do benzeno $C=1.780$ ppm, está ilustrada na Figura 5.4.

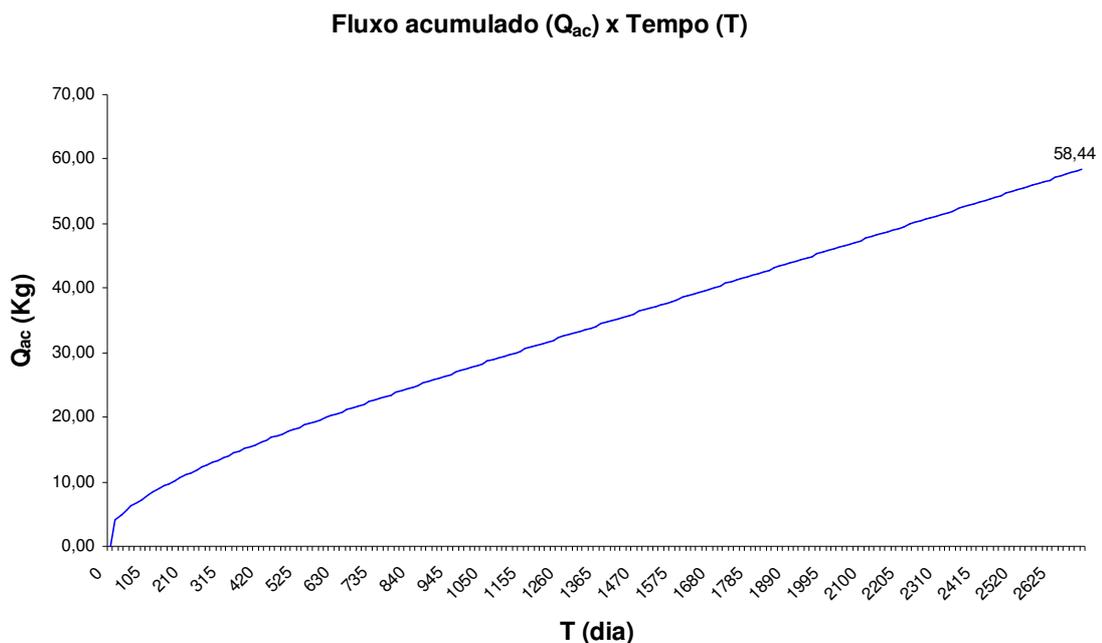


Figura 5.4: Fluxo acumulado de entrada de massa (Q_{ac}) nos nós atingido pelo vazamento em resposta à condição inicial imposta $C=1.780$ ppm.

Como esperado, o acúmulo de massa entrando no sistema pelos nove nós cresce com o tempo. Analisando o gráfico, observou-se que, no tempo $T=2700$ dias, o valor de fluxo acumulado de entrada de massa era $Q_{ac}=58,440$ Kg.

De posse desta informação, a nova condição de contorno estabelecida para cada nó foi obtida alterando-se a condição de concentração inicial constante, $C=1.780$ ppm, para uma função de entrada de fluxo unitário de massa (Q_m) pelo tempo (T). Para cada nó, foram então reproduzidos os respectivos pontos notáveis da função (Q_m) versus Tempo (T) ilustrada na Figura 5.3, até o tempo $T=2700$ dias.

Ao final, foi necessário realizar um processo de calibração e ajustes através de tentativas e erros, devido às pequenas diferenças geradas pela escolha escalonada dos pontos notáveis aplicados à função de entrada (Q_m) versus (T) e pela aproximação das casas decimais. Concluída esta etapa, o somatório dos valores de fluxo acumulado nos nove nós chegou a exatos $58,10$ Kg no tempo $T=2.715$ dias. Portanto, para cenários com tempos menores que este valor, seria possível adotar uma condição de contorno do tipo concentração inicial contínua.

A Figura 5.5 ilustra as novas funções de entrada de fluxo unitário de massa (Q_m) pelo tempo (T), como sendo as soluções impostas às condições iniciais de contorno nos seus respectivos nós.

A Figura 5.6 ilustra a variação temporal da função fluxo acumulado de entrada de massa (Q_{ac}) dos nove nós afetados pelo vazamento, em resposta à nova condição de contorno imposta (Q_m versus T , Figura 5.5).

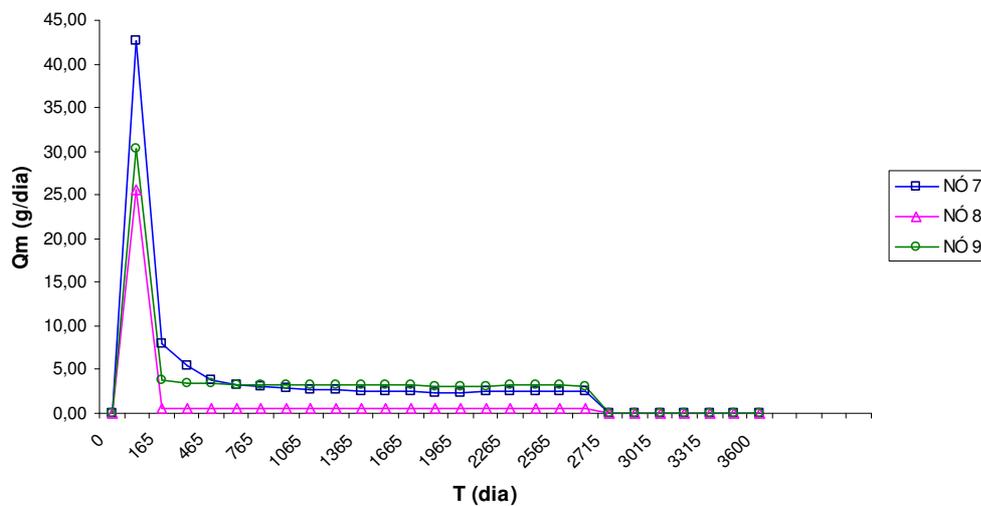
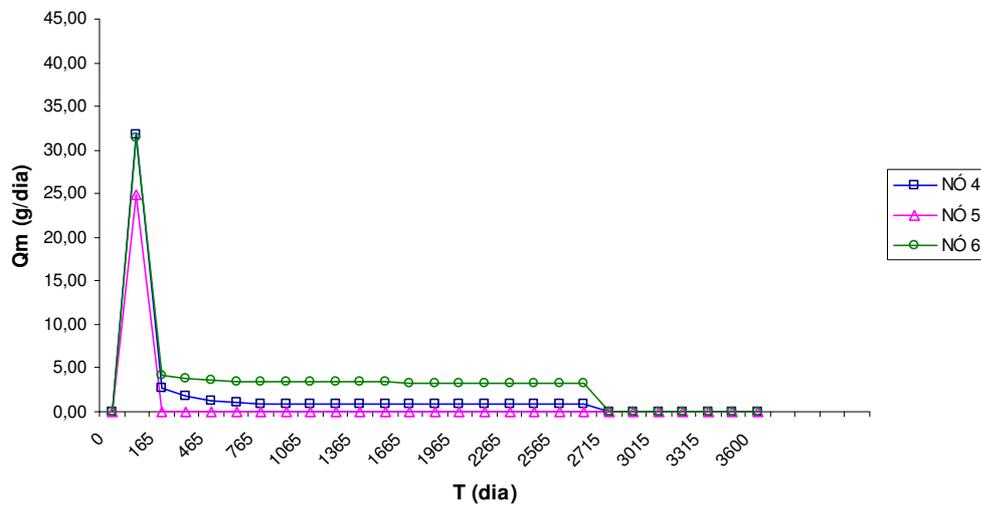
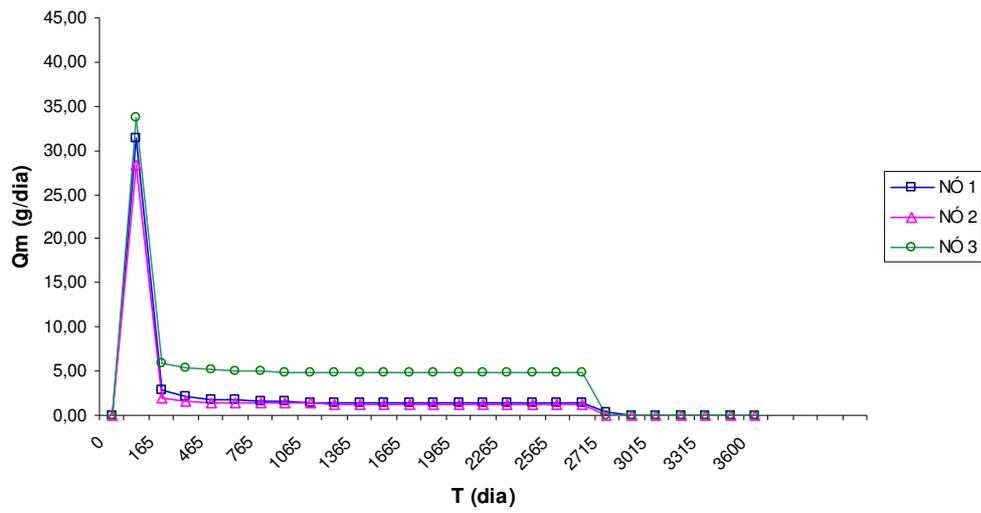
Fluxo unitário de entrada (Q_m) x Tempo (T)

Figura 5.5: Nova condição de contorno aplicada aos respectivos nós: função do fluxo unitário de entrada pelo tempo.

De acordo com o exposto na Figura 5.5, o comportamento da nova condição de contorno, uma função de fluxo de entrada Q versus T , mostra que no tempo $T=2715$ dias, o fluxo de entrada é zerado, indicando que não há mais contaminante sendo adicionado aos nós.

A variação temporal da função fluxo acumulado de entrada de massa (Q_{ac}) versus tempo dos nove nós afetados pelo vazamento, em resposta à nova condição de contorno imposta (Q_m versus T , Figura 5.5) é apresentada na Figura 5.6. Obedecendo ao comportamento da condição de contorno imposta, observa-se que, após o tempo $T=2715$ dias, o valor estabiliza-se em 58,10 kg, correspondendo à estimativa inicial para o cálculo da massa de benzeno vazada (Tabela 5.2).

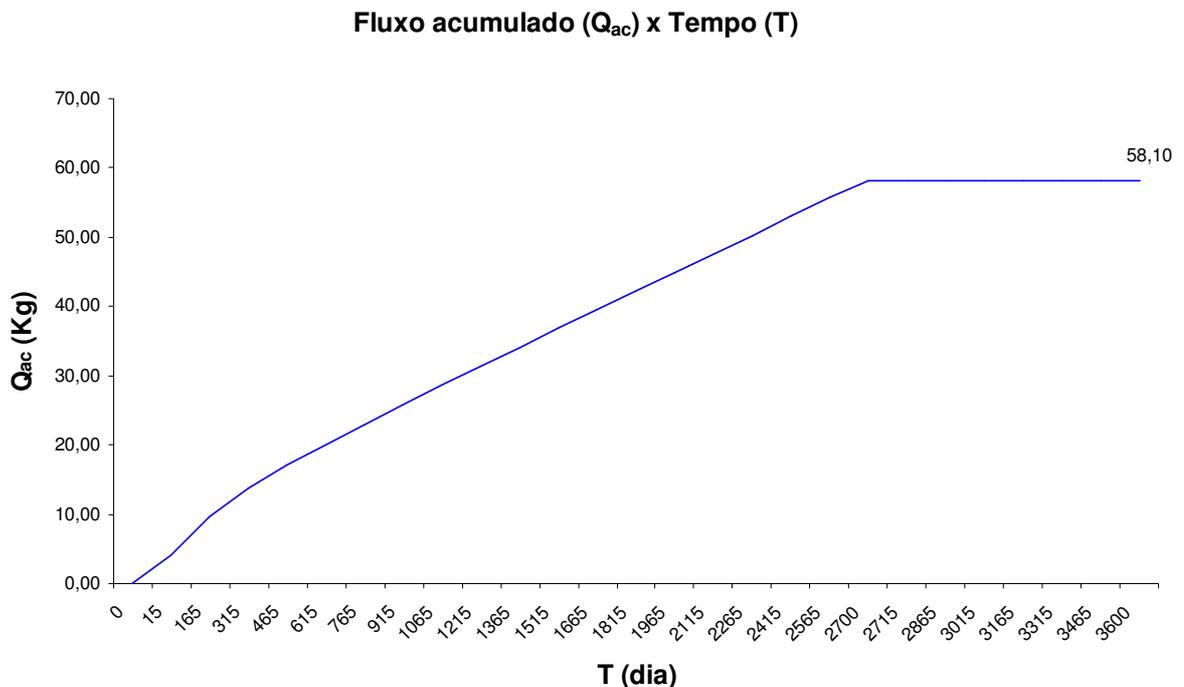


Figura 5.6: Fluxo acumulado de entrada de massa (Q_{ac}) nos nós atingido pelo vazamento em resposta à nova condição de contorno imposta (Q versus T).

A Figura 5.7 ilustra as funções concentração (C) pelo tempo (T) dos nove nós afetados pelo vazamento, em resposta à nova condição de contorno imposta (Q_m versus T , Figura 5.5).

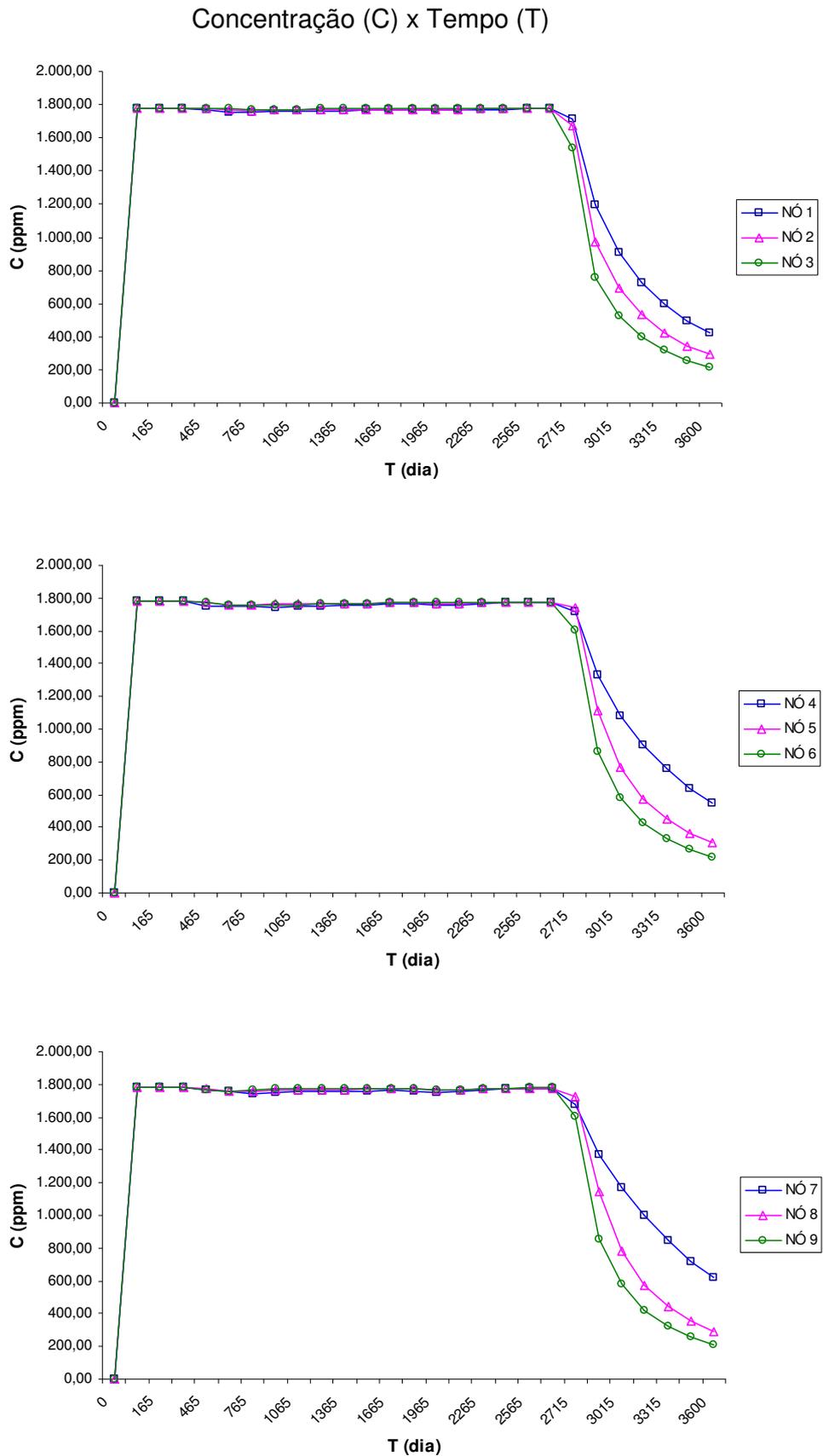


Figura 5.7: Concentração (C) versus tempo (T) nos nove nós afetados pelo vazamento, em resposta à nova condição de contorno imposta (Q_m versus T).

Nota-se que as concentrações nos respectivos nós tendem a permanecerem fixas, em um valor aproximado de $C=1.780$ ppm até o tempo $T=2715$. Posteriormente, quando o fluxo de entrada de contaminantes é zerado, os valores das concentrações começam a cair, demonstrando um comportamento coerente com a nova condição de contorno Q_m versus T imposta.

5.3.4 - Critérios de Peclet e Courant

Para o controle das dispersões e oscilações numéricas foi utilizado o critério dos Números de Peclet e Courant, cuja faixa de variação dos valores finais obtidos é mostrada na Tabela 5.3. Pode-se constatar, a partir dos resultados, que a solução geral do problema modelado encontra-se dentro de uma faixa estável no que diz respeito a este critério.

Tabela 5.3: Valores obtidos para os Números de Peclet e Courant

FAIXA DE VARIAÇÃO DOS NÚMEROS DE PECLLET E COURANT OBTIDOS		
PARAMETRO	VALOR MÍNIMO	VALOR MÁXIMO
Número de Peclet na direção X	0,50033200	2,09714000
Número de Peclet na direção Y	0,33485200	1,59035000
Número de Courant na direção X	0,00000000	0,96355000
Número de Courant na direção Y	0,00933028	0,96640600

Ao longo de toda a extensão dos limites superiores e inferiores e das laterais esquerda e direita da área modelada, foram impostas condições de contorno especiais para garantir o livre fluxo de massa (Q_m), e, conseqüentemente, o não acúmulo de contaminantes nas fronteiras do domínio.

6 - SIMULAÇÃO DE CENÁRIOS DE CONTAMINAÇÃO – ESTUDOS PARAMÉTRICOS

Com a finalidade de avaliar o grau de influência de alguns parâmetros inerentes ao processo de transporte de contaminantes dissolvidos, foram criados diversos grupos de simulações, listados na Tabela 6.1.

Tabela 6.1: Grupos de simulações criados para os estudos paramétricos dos cenários de contaminação.

GRUPOS DE SIMULAÇÕES - ESTUDOS PARAMÉTRICOS		
GRUPO	NOME DA SIMULAÇÃO	PARÂMETRO A SER AVALIADO
01	Efeito da dimensão da piscina de combustível	Dimensão da piscina de combustível
02	Efeito da dispersividade longitudinal e transversal	Valor da dispersividade longitudinal e transversal
03	Efeito da adsorção	Fração de carbono orgânico presente no solo
04	Efeito da degradação	Tempo de meia-vida do contaminante
05	Efeito da adsorção com degradação	Fração de carbono orgânico presente no solo mais o tempo de meia-vida do contaminante

Para cada grupo foram estabelecidos 3 Cenários distintos. Os dados de entrada iniciais utilizados para o Cenário 1, que é padrão para todas as simulações, encontram-se na Tabela 6.2. Em relação aos demais Cenários (2 e 3), a única diferença existente é justamente o valor do parâmetro a ser avaliado.

A densidade do solo seco (ρ_d) foi estimada em $1.80 \times 10^6 \text{ g/m}^3$, com base nos valores médios propostos para uma areia fina Walton (1988 *apud* USEPA, 1998).

Salienta-se que o tempo da simulação, 450 dias, corresponde razoavelmente ao período decorrido entre o início do vazamento e a data em que foram conduzidas as investigações de campo.

Os resultados finais foram expressos através de figuras de plantas baixas com valores de contorno, gráficos do tipo concentração versus distância, concentração

versus tempo, fluxo de massa acumulada versus tempo, entre outros.

Tabela 6.2: Valores dos parâmetros utilizados nas simulações.

VALORES DOS PARÂMETROS UTILIZADOS NAS SIMULAÇÕES		
PARÂMETROS	UNIDADE	VALOR
Dimensões da piscina	m	2,00 x 2,00
Tempo da simulação	dia	450
Condutividade Hidráulica	m/dia	$4,52 \times 10^{-2}$
Porosidade	adimensional	21%
Peso unitário da água	kN/m ³	9,807
Concentração inicial	ppm	1.780,00
Coefficiente de Difusão	m ² /dia	não utilizado
Dispersividade longitudinal	m	2,00
Dispersividade transversal	m	0,50
Tempo de meia vida	dia	não utilizado
Adsorção	g/g	não utilizado
Densidade do solo seco	g/m ³	$1,8 \times 10^6$

As dispersividades longitudinal e transversal foram estimadas levando-se em consideração o seguinte critério (USEPA, 1996):

$$\alpha_x = 0,1 \times C_p \quad \text{Equação (6.1)}$$

$$\alpha_y = 0,33 \times \alpha_x \quad \text{Equação (6.2)}$$

Onde,

α_x = Dispersividade na direção x (L);

α_y = Dispersividade na direção y (L);

C_p = Comprimento da pluma (L).

O comprimento estimado para a pluma foi de 20 metros (Capítulo 3).

A Figura 6.1 ilustra a planta baixa do empreendimento, contendo a indicação da seção longitudinal de interesse (A-A) para as simulações.

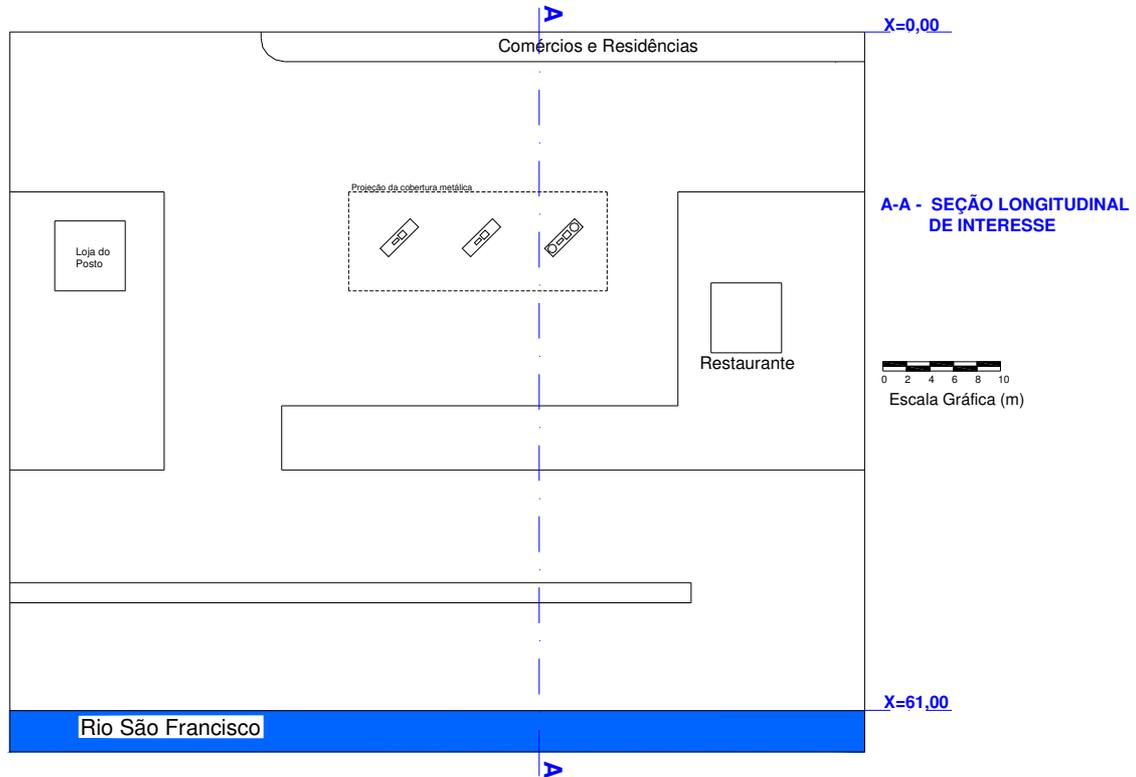


Figura 6.1: Planta baixa do empreendimento, contendo a indicação da seção longitudinal de interesse para as simulações (seção A-A).

6.1 - Efeito da dimensão da piscina de combustível

O objetivo desta simulação é analisar o grau de influência da dimensão da superfície de interface entre a piscina de combustível e o nível do aquífero freático livre, nos valores finais das concentrações e no fluxo de contaminantes. Foram considerados apenas os transportes advectivo e dispersivo (sem adsorção nem degradação)

Para tanto, foram criados os seguintes cenários: (a) Cenário 1 - Padrão, onde a piscina possui dimensões 2,00 x 2,00 metros; (b) Cenário 2, onde a piscina possui 1,00 x 1,00 metro; e (c) Cenário 3, onde a piscina possui 4,00 x 4,00 metros. A Figura 6.2 mostra a área inicial de nós considerada em cada cenário.

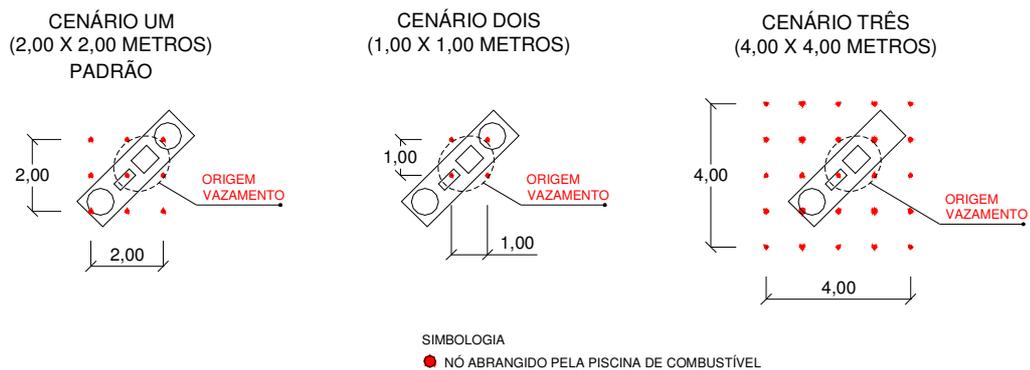


Figura 6.2: Área inicial de nós abrangidos pela piscina considerada em cada cenário.

6.1.1 - Resultados

Os resultados comparativos da pluma de contaminação do benzeno no tempo $T=450$ dias para os diferentes cenários estão ilustrados na Figura 6.3. Nas curvas de contorno, os valores apresentados referem-se às concentrações finais do composto e são mostrados em ppm.

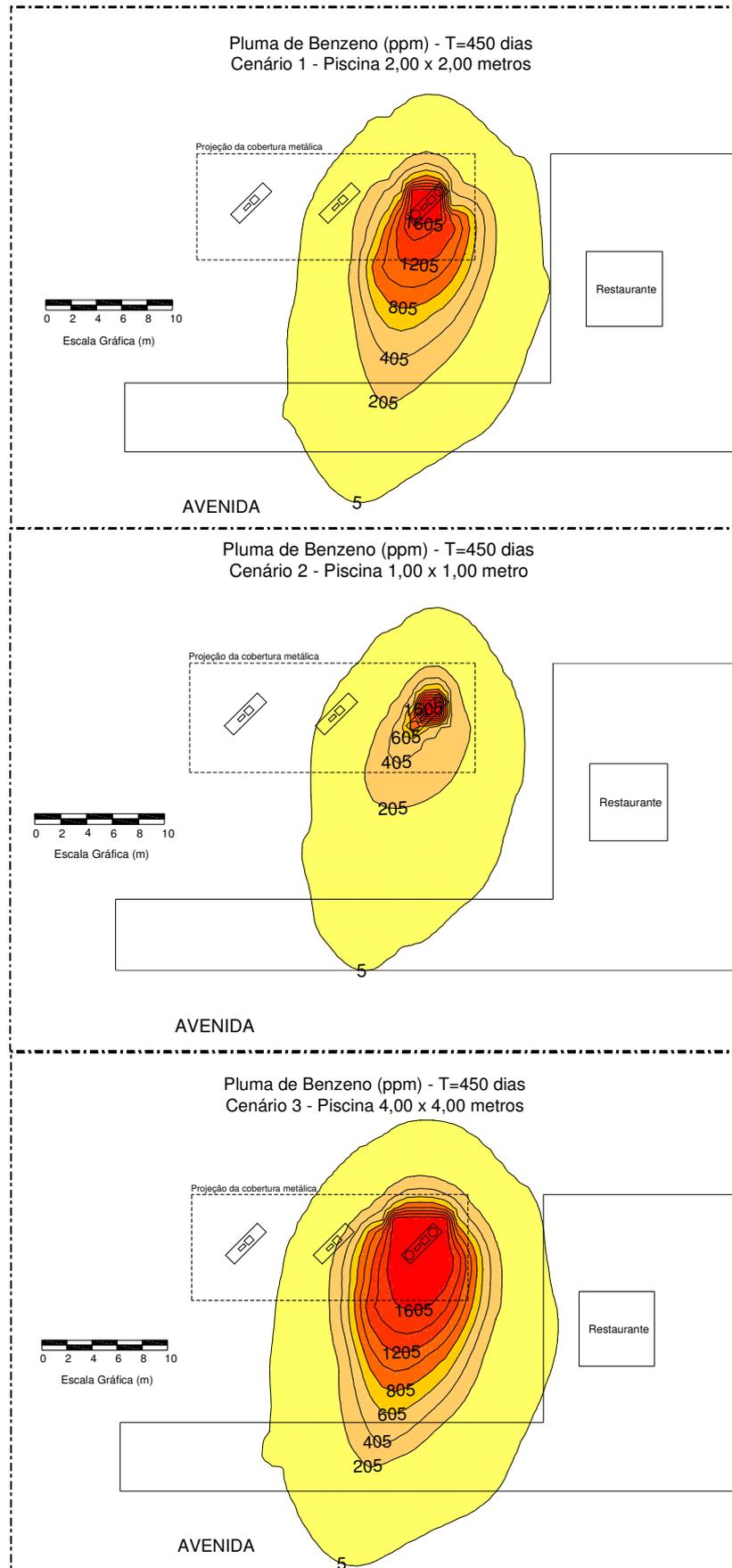


Figura 6.3: Pluma de contaminação do benzeno no tempo T=450 dias para as diferentes dimensões de piscina.

O comportamento geral da pluma modelada é coerente com a apresentada na Figura 3.5. Há uma tendência de convergência do contaminante para a zona de confluência advectiva, apresentada na Figura 4.2.

Analisando os contornos resultantes, fica evidente que, quanto maior a dimensão inicial da piscina de combustível, maior a área de abrangência da pluma resultante do composto dissolvido e maiores são as faixas de altas concentrações.

A Figura 6.4 demonstra as diferenças nos valores das concentrações causadas pelo efeito das dimensões da piscina. Como esperado, o Cenário 3 apresenta o maior pico ao longo da seção A-A.

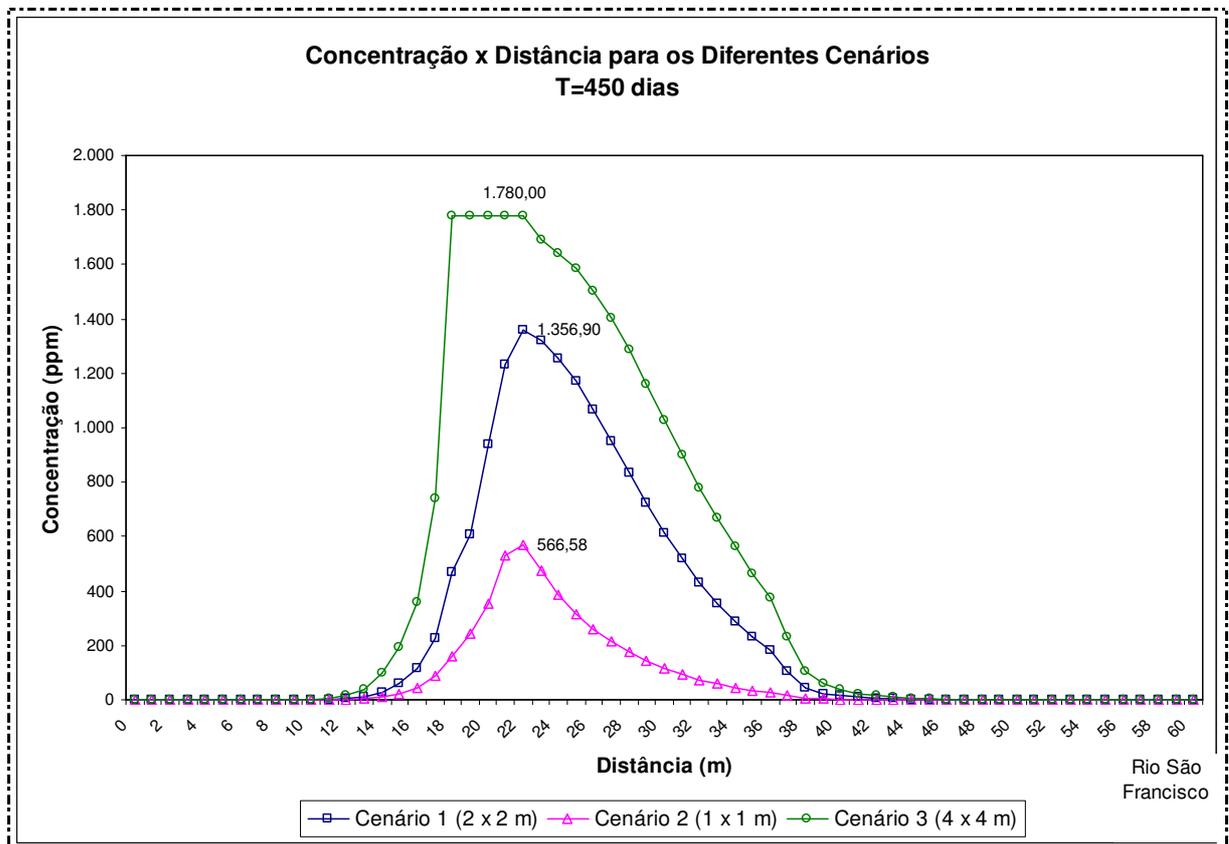


Figura 6.4: Resultados das concentrações versus distância na seção A-A da Figura 6.1, para os três cenários simulados.

O fluxo acumulado de entrada de contaminantes a partir dos nós, para os diferentes cenários, no tempo $T=450$ dias, em resposta à concentração inicial de 1.780 ppm está representado na Figura 6.5.

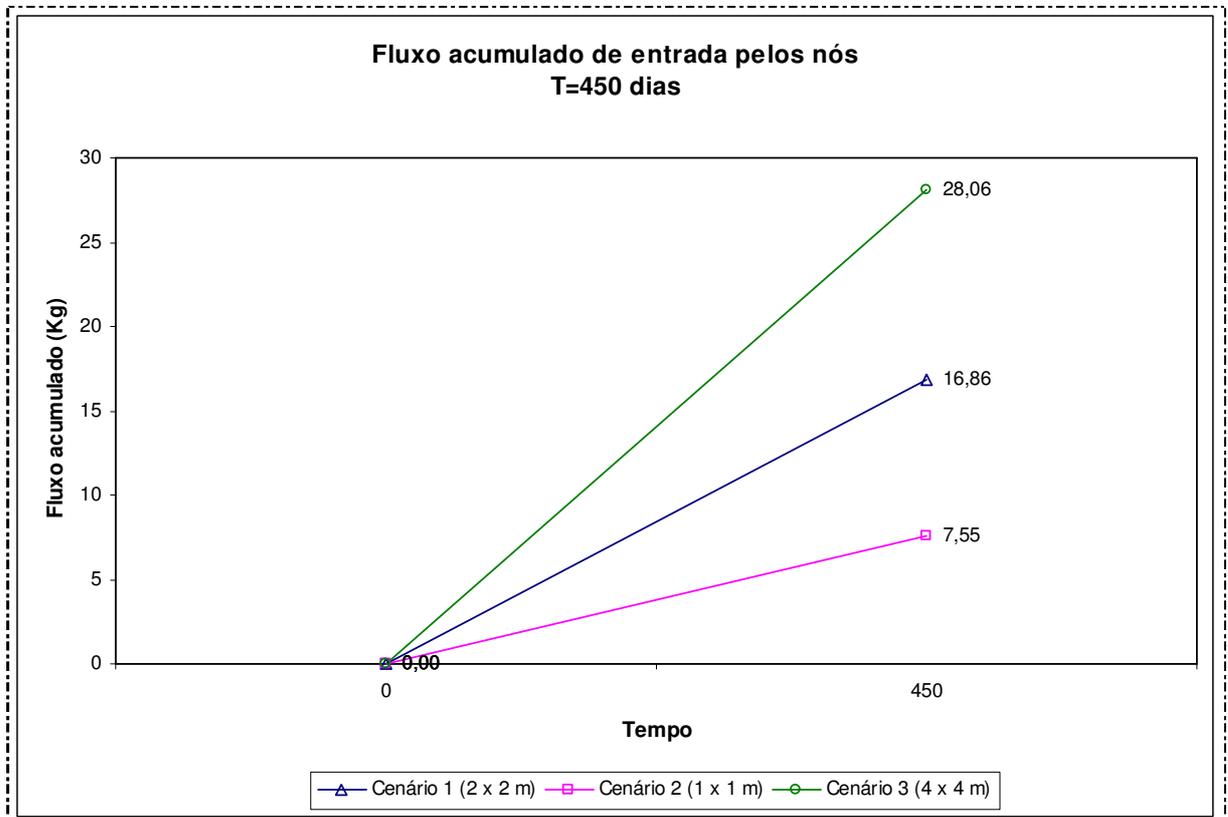


Figura 6.5: Fluxo acumulado de entrada de contaminantes a partir dos nós, para os diferentes cenários.

O valor obtido para piscina de 4,00 x 4,00 metros é cerca de 1,67 e 3,72 vezes maior do que os das piscinas de 2,00 x 2,00 e 1,00 x 1,00 metros respectivamente, indicando a clara relação entre a área inicial e a quantidade de massa dissolvida a partir de uma piscina de NAPL.

Conclui-se, portanto, que a dimensão inicial da área abrangida por um determinado vazamento deve ser bem delimitada pelo trabalho de campo, por influir significativamente no processo de transporte de contaminantes, conforme demonstram os resultados obtidos pelas simulações numéricas.

6.2 - Efeito da dispersividade longitudinal e transversal

Este grupo de simulação avaliará o grau de influência da dispersividade longitudinal e transversal na área abrangida pela pluma de contaminação e nos valores finais das concentrações do composto. Foram considerados apenas os transportes advectivo e dispersivo (sem adsorção nem degradação).

Para tanto, foram criados três cenários: (a) Cenário 1 - Padrão, onde as dispersividades longitudinal e transversal são iguais a 2,0 e 0,5 m, respectivamente; (b) Cenário 2, onde as dispersividades longitudinal e transversal são 3,0 e 0,75 m (50%), respectivamente; e (c) Cenário 3, onde as dispersividades longitudinal e transversal são 4,0 e 1,0 m (100%), respectivamente.

6.2.1 - Resultados

A Figura 6.6 ilustra os resultados comparativos da pluma de contaminação do benzeno no tempo $T=450$ dias para os diferentes cenários.

Percebe-se um moderado aumento na abrangência da pluma nas direções longitudinais (x) e transversais (y) na medida em que aumentamos os valores das dispersividades em ambas situações (Cenários 2 e 3).

O gráfico da concentração versus distância para os diferentes cenários, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A é apresentado na Figura 6.7. Apesar do aumento de 50% e 100% nos respectivos valores usados para as dispersividades longitudinais e transversais em cada simulação, o comportamento expresso é similar nos três cenários, sem grandes mudanças na magnitude dos valores obtidos para as concentrações. As baixas velocidades de fluxo advectivo podem ter contribuído para o fato em análise.

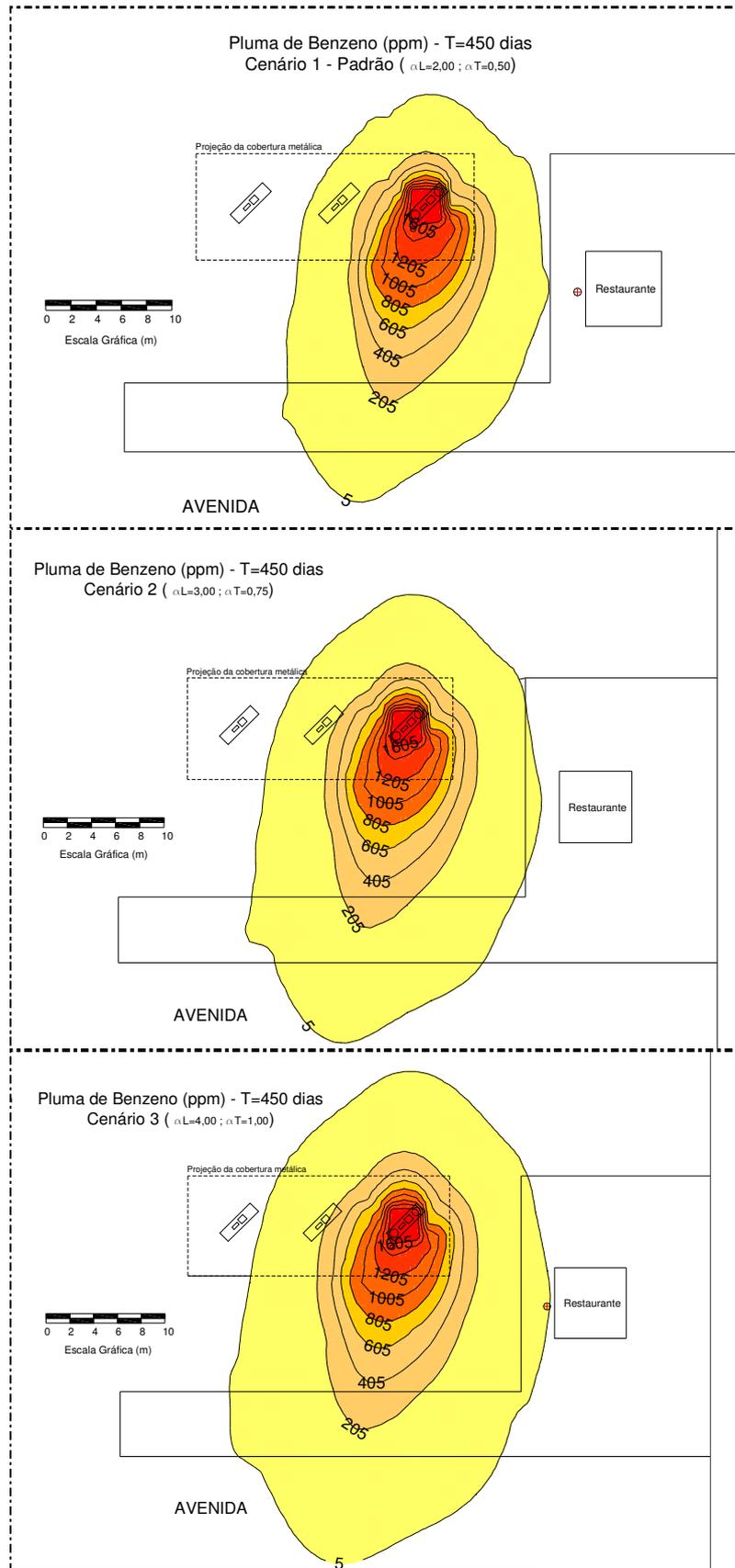


Figura 6.6: Pluma de contaminação do benzeno no tempo T=450 dias para os diferentes cenários de dispersividades

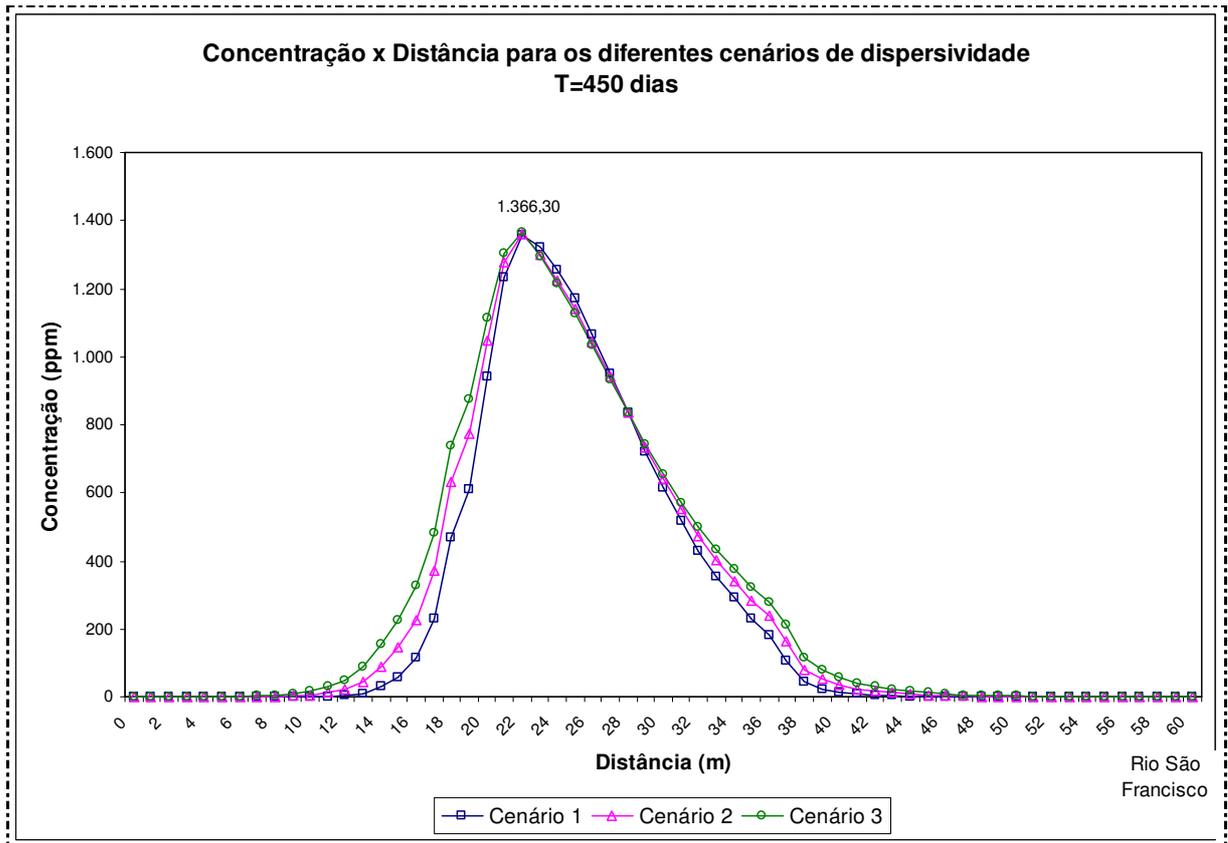


Figura 6.7: Gráficos de concentração versus distância para os diferentes cenários, no tempo T=450 dias, ao longo da seção A-A.

6.3 - Efeito da adsorção

Nesta simulação, o grau da influência da capacidade de adsorção dos solos nos resultados finais inerentes ao processo de transporte de massa de contaminantes é o objeto a ser estudado. Foram considerados apenas os componentes advectivos, dispersivos e as funções de adsorção (sem degradação).

Considerou-se, para a simulação, que a função S versus C obedece à função isoterma linear de Freundlich, a mais simples e geralmente mais utilizada por modeladores (DOMENICO et al., 1988; CORDAZZO, 2000). O coeficiente de distribuição foi estimado pela seguinte equação (USEPA, 2004):

$$K_d = K_{oc} \times f_{oc} \quad \text{Equação (6.3)}$$

Onde,

K_d = Coeficiente de distribuição (L^3/M);

K_{oc} = Coeficiente de partição com o carbono orgânico (L^3/M);

f_{oc} = Fração de carbono orgânico no solo (adimensional).

O valor de K_{oc} para o benzeno é 49 litros por quilograma (USEPA, 2004), ou, transformando para as unidades compatíveis com as do modelo conceitual, $0,000049 m^3/g$.

As frações de carbono orgânico (f_{oc}) foram estimadas em 0,001 e 0,01, consideradas, respectivamente, como típicos valores médio e alto para aquíferos em geral (USEPA, 2004).

Para tanto, foram criados três cenários: (a) Cenário 1 - Padrão, onde não há taxa de adsorção; (b) Cenário 2, onde o valor de f_{oc} é 0,001 (médio); e (c) Cenário 3, onde o valor de f_{oc} é 0,01 (alto). A função de Adsorção (S) versus Concentração (C) para os cenários 2 e 3 é apresentada na Figura 6.8.

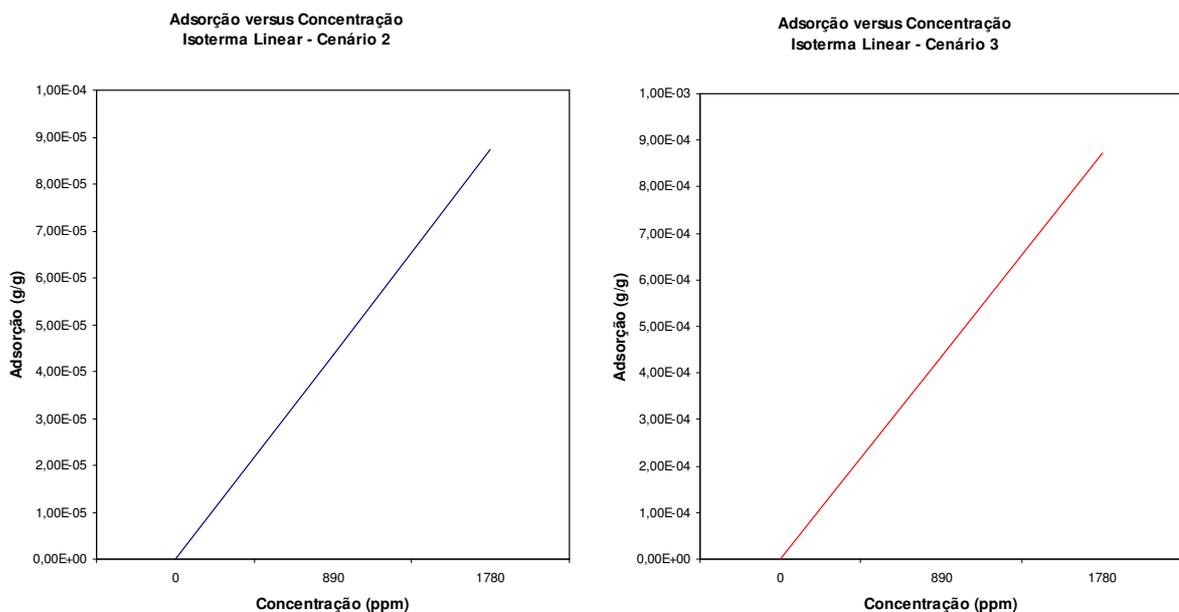


Figura 6.8: Gráficos de função de S versus C para os cenários 2 e 3.

6.3.1 - Resultados

Os resultados comparativos da pluma de contaminação do benzeno no tempo $T=450$ dias para os diferentes cenários de adsorção podem ser analisados na Figura 6.9. Percebe-se uma notória diminuição na área de abrangência da pluma à medida que se aumentam as frações de carbono orgânico presentes no solo. Os valores destas áreas para os Cenários 1, 2 e 3 foram de aproximadamente 507, 415 e 162 m² respectivamente. Em termos percentuais, diminuição de 18% e 68% para os Cenários 2 e 3 (com adsorção) em relação ao Cenário 1 (sem adsorção). Enfatiza-se, portanto, o forte grau de influência deste parâmetro no transporte.

A Figura 6.10 ilustra o gráfico de concentração versus distância para os diferentes cenários, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A. Observa-se que os valores de pico das concentrações ao longo da seção também diminuem em resposta ao efeito da adsorção. Em termos percentuais, 4% e 26% para os Cenários 2 e 3 respectivamente, em relação ao Cenário 1.

Esse fato é coerente com o comportamento da função adsorção versus distância, para os diferentes cenários, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A, plotado na Figura 6.11. Como esperado, tanto maior a adsorção quanto maior a fração de carbono orgânico presente em cada cenário. Constatação também válida para o gráfico que exprime a variação da quantidade de massa adsorvida aos grãos de solo versus distância (Figura 6.12).

Por fim, a Figura 6.13 ilustra o gráfico da quantidade de massa presente no fluido versus distância para os diferentes cenários, indicando que a massa de contaminantes presente no fluido é inversamente proporcional ao favorecimento da adsorção.

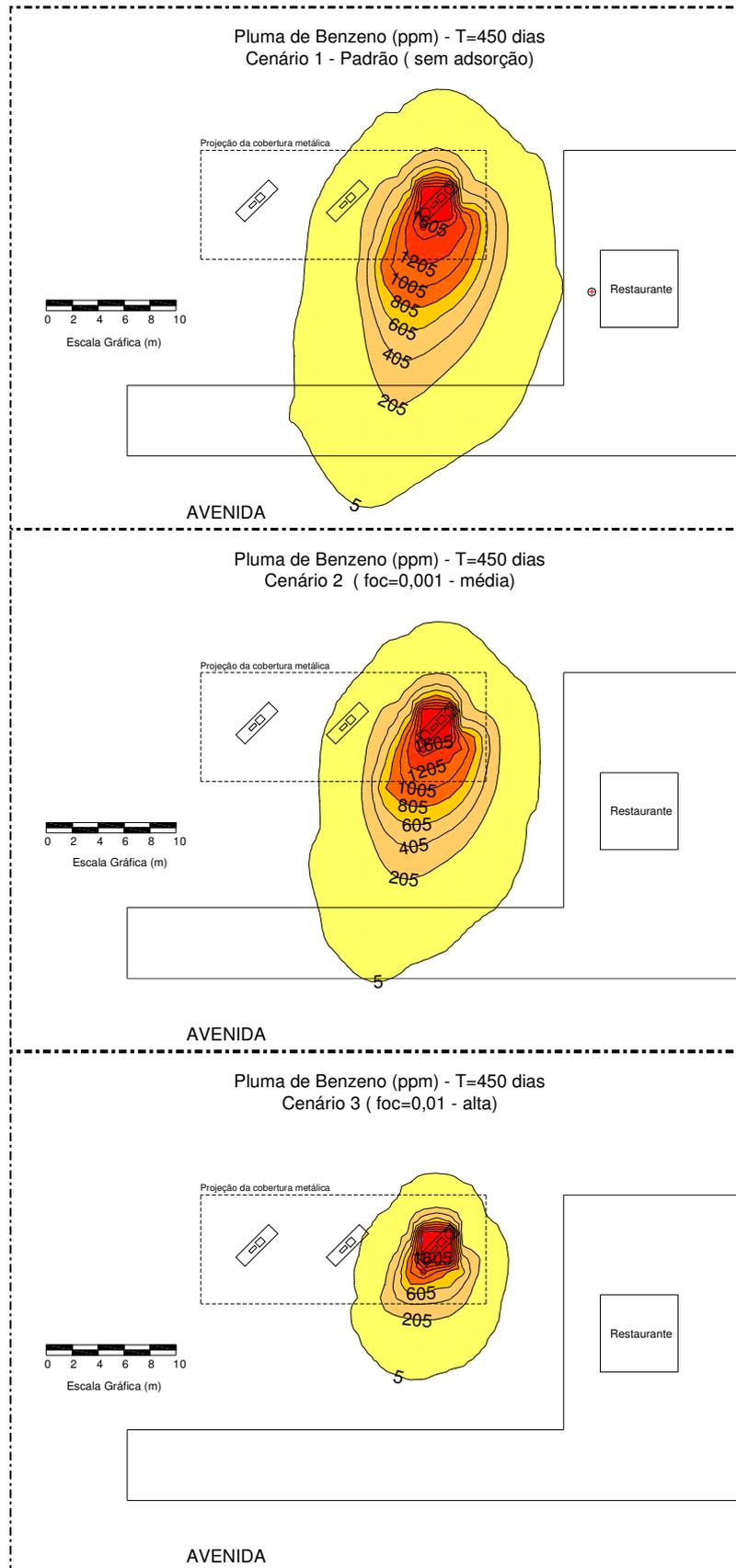


Figura 6.9: Pluma de contaminação do benzeno no tempo T=450 dias para os diferentes cenários de adsorção.

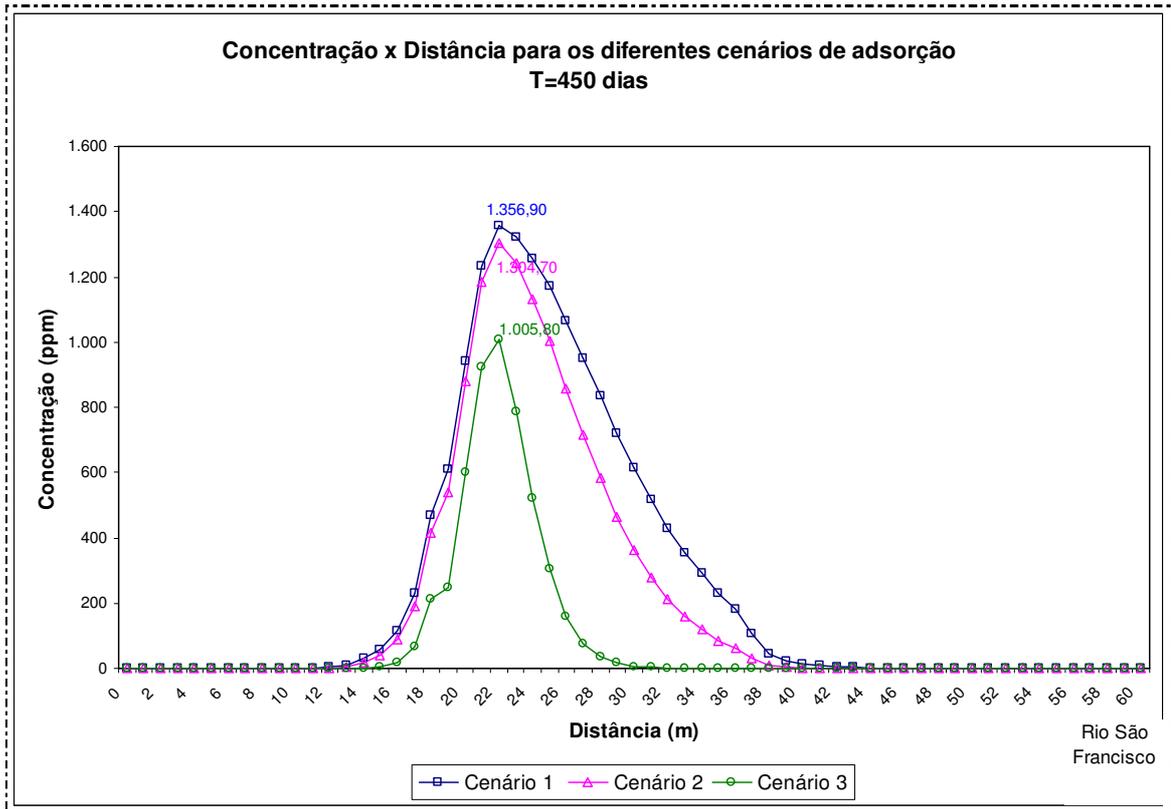


Figura 6.10: Gráfico de concentração versus distância para os diferentes cenários de adsorção, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.

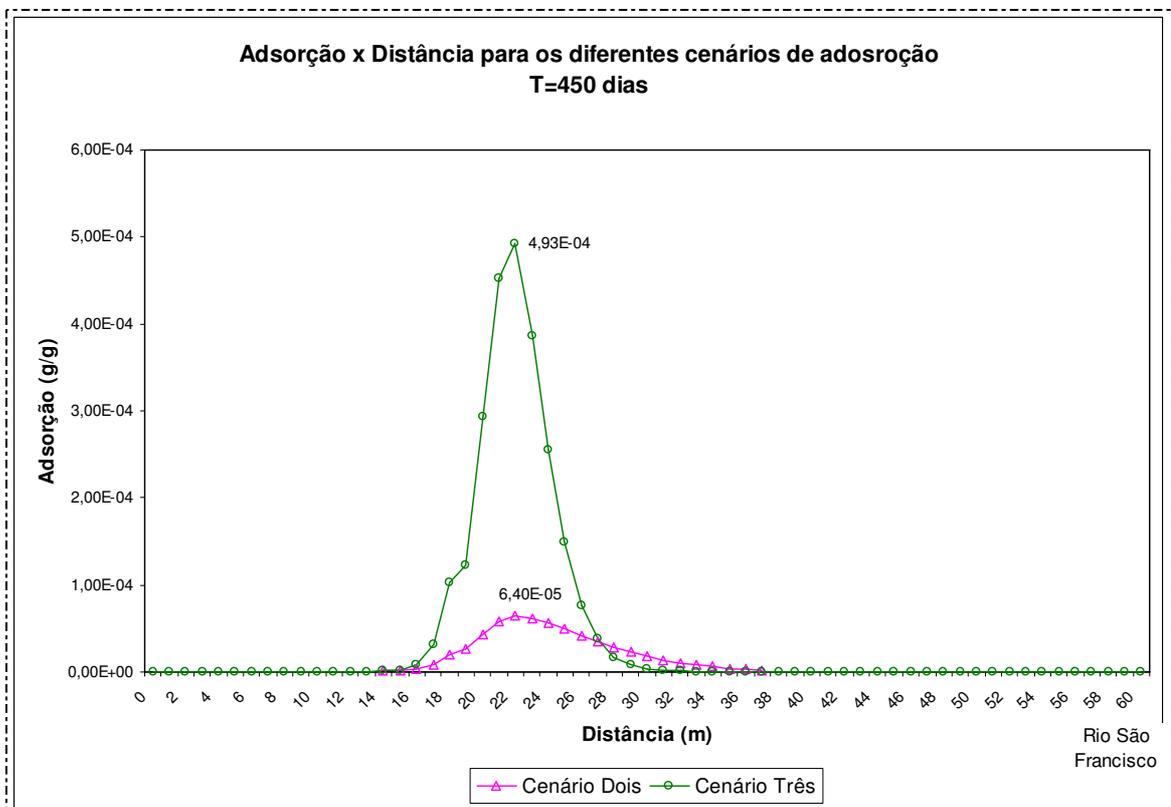


Figura 6.11: Gráfico da função adsorção versus distância para os diferentes cenários de adsorção, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.

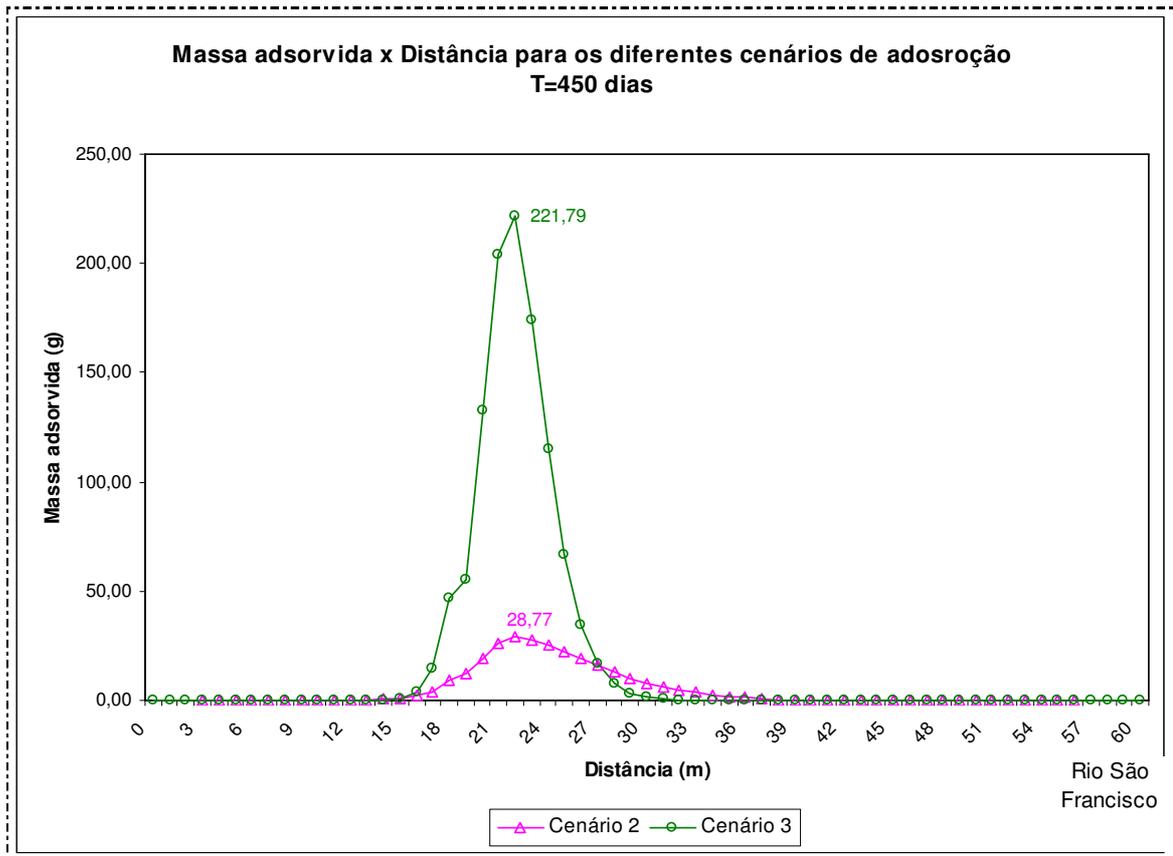


Figura 6.12: Gráfico da massa adsorvida versus distância para os diferentes cenários de adsorção, no tempo T=450 dias, ao longo da seção A-A.

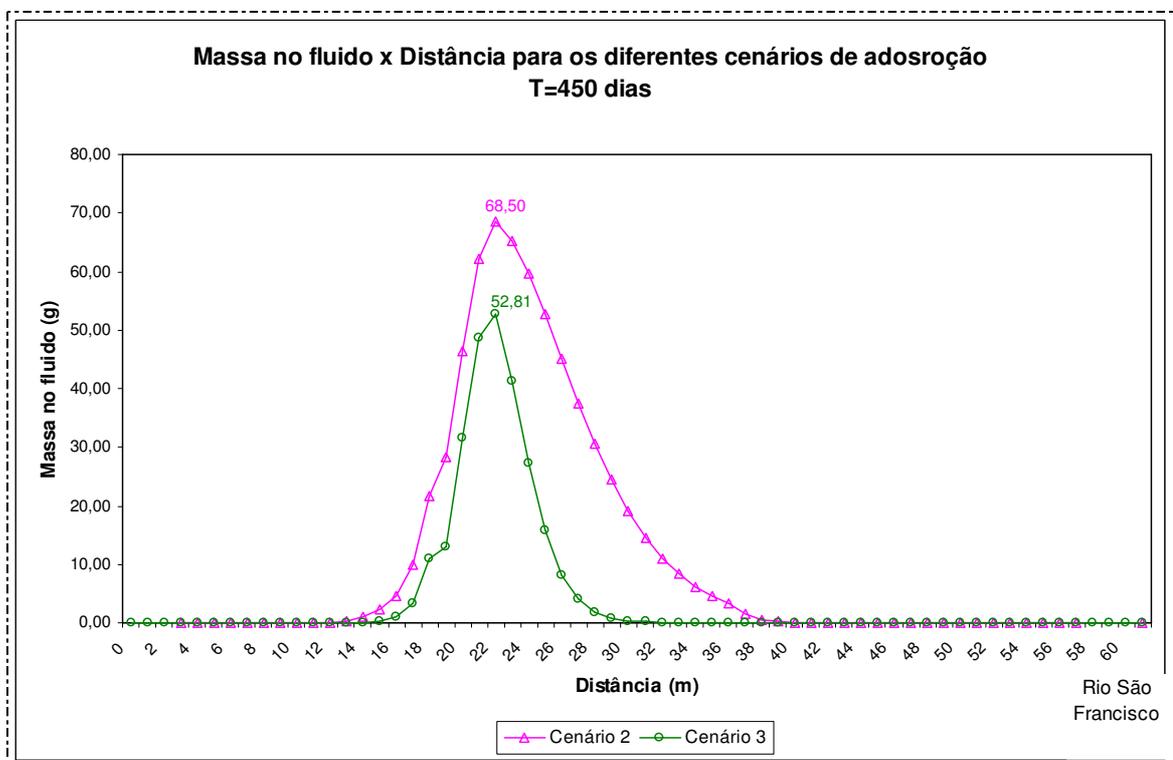


Figura 6.13: Gráfico da massa no fluido versus distância para os diferentes cenários de adsorção, no tempo T=450 dias, ao longo da seção A-A.

6.4 - Efeito da degradação

O objetivo desta simulação é analisar o grau de influência da degradação nos resultados finais inerentes ao processo de transporte de massa de contaminantes. Foram considerados apenas os componentes advectivos, dispersivos e a taxa de degradação por meio do tempo de meia-vida do composto para cada cenário (sem função adsorção).

O tempo de meia-vida do benzeno pode variar bastante, dependendo das características específicas de cada sítio. Adotou-se, para efeito desta simulação, valores entre 10 e 730 dias, típicos de referência para este composto (ASTM,1995).

Para tanto, foram criados três cenários: (a) Cenário 1 - Padrão, onde não há taxa de degradação; (b) Cenário 2, onde o valor do tempo de meia-vida T é de 500 dias (moderado); e (c) Cenário 3, onde o valor do tempo de meia-vida T é de 170 dias (baixo). Estes valores sugeridos para os Cenários estão baseados em um estudo de aquíferos contaminados por produtos de petróleo (BARLAZ et al.,1995 *apud* SRS, 2006).

6.4.1 - Resultados

A Figura 6.14 ilustra os resultados comparativos da pluma de contaminação do benzeno no tempo $T=450$ dias para os diferentes cenários. Percebe-se, quando comparados aos resultados das simulações para o efeito da adsorção, uma discreta diminuição na área de abrangência da pluma à medida que diminuimos o tempo de meia-vida do composto. Em termos percentuais, diminuição de 8% e 25% para os Cenários 2 e 3 (com degradação) em relação ao Cenário 1 (sem degradação).

Já no gráfico de concentração versus distância, apresentado na Figura 6.15, observa-se que os valores de pico das concentrações ao longo da seção também diminuem em resposta ao efeito da taxa de degradação, num grau de magnitude compatível com os resultados obtidos para o efeito da adsorção. Em termos percentuais, 9% e 21% para os Cenários 2 e 3 respectivamente, em relação ao Cenário 1.

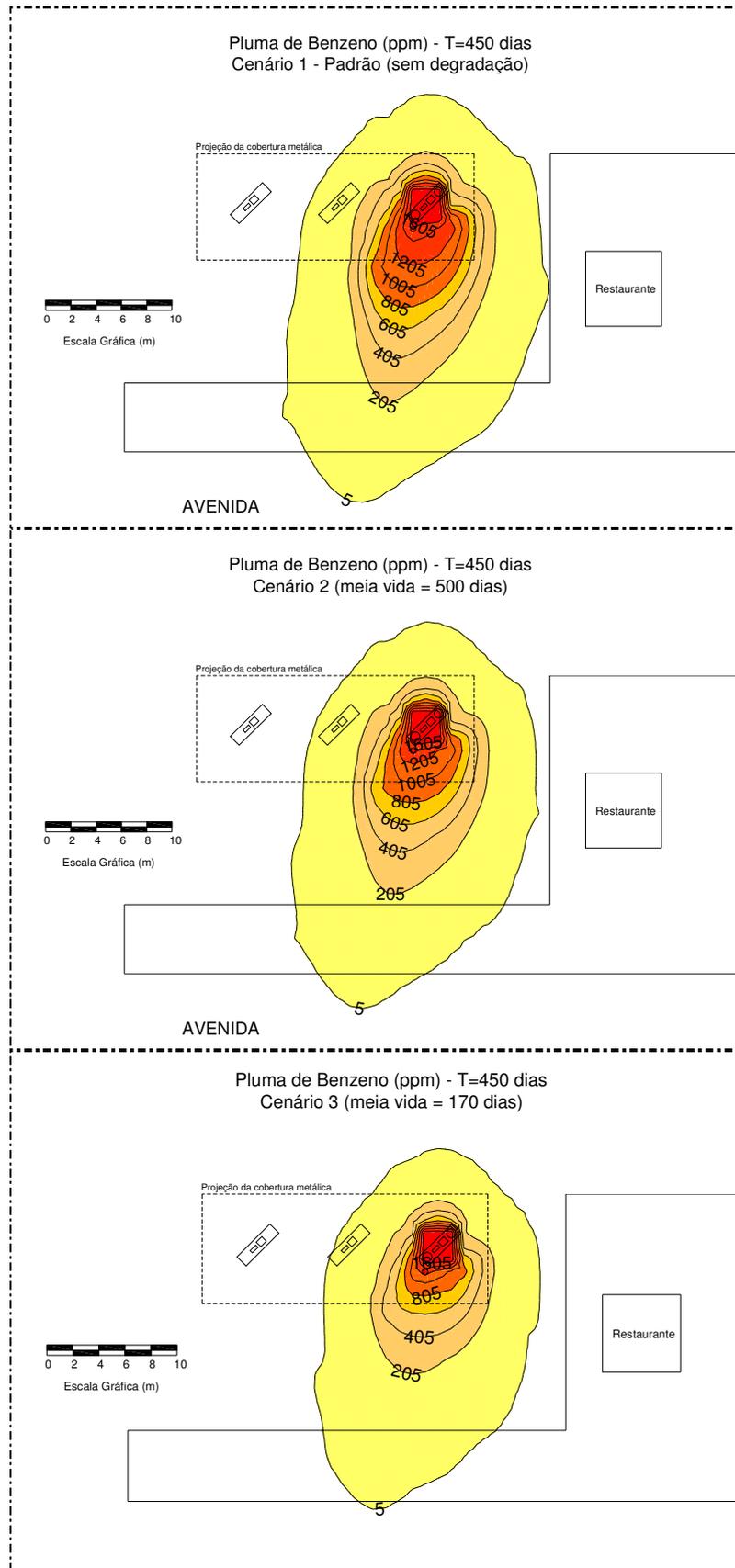


Figura 6.14: Pluma de contaminação do benzeno no tempo T=450 dias para os diferentes cenários de degradação.

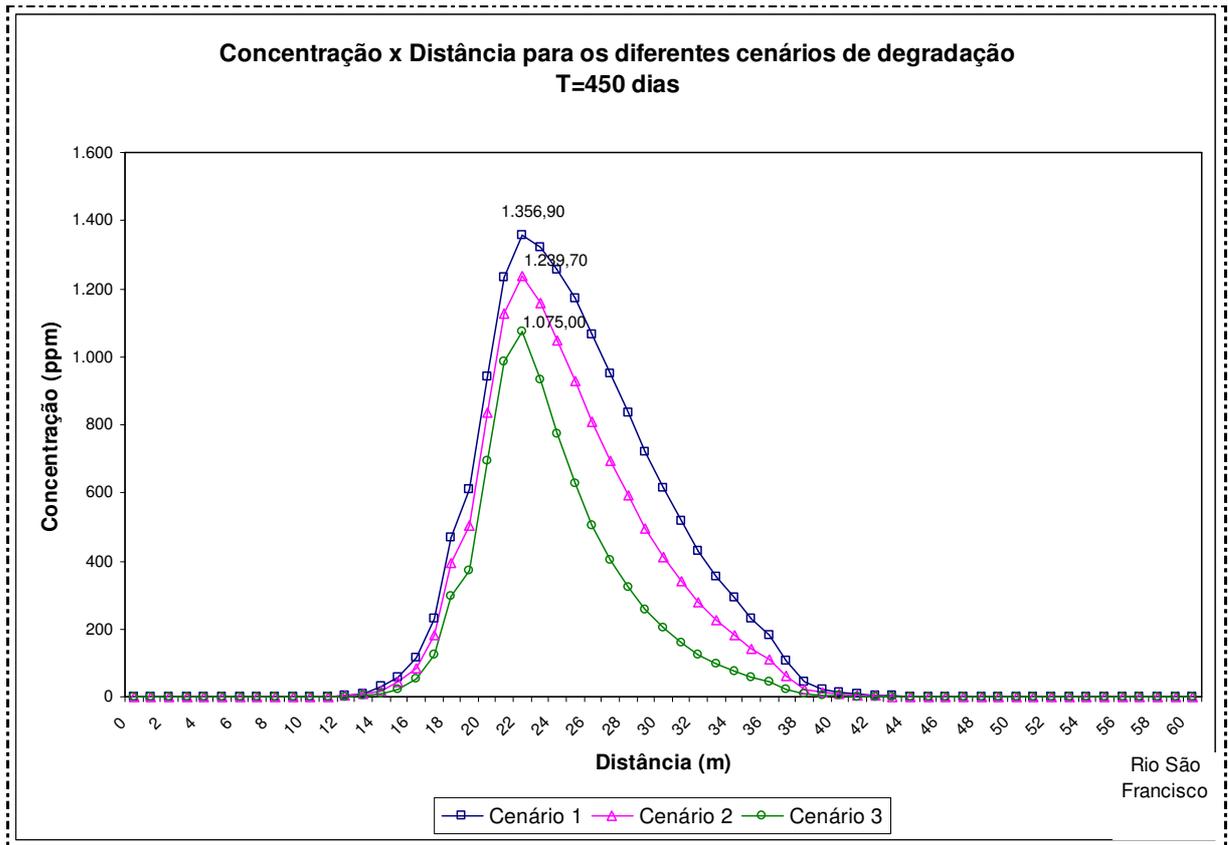


Figura 6.15: Gráfico de concentração versus distância para os diferentes cenários de degradação, no tempo T=450 dias, ao longo da seção A-A.

6.5 - Efeito da adsorção com degradação

Esta simulação tem como objetivo analisar o grau de influência da capacidade de adsorção dos solos com degradação nos resultados finais inerentes ao processo de transporte de massa de contaminantes. Os componentes advectivos, dispersivos, a função adsorção e a taxa de degradação por meio do tempo de meia-vida do composto para cada cenário foram considerados.

Para tanto, foram criados três cenários, a partir da combinação dos parâmetros já utilizados nas simulações anteriores de adsorção e degradação: (a) Cenário 1 - Padrão, onde não há adsorção nem taxa de degradação; (b) Cenário 2, onde o valor f_{oc} é 0,001 (médio) e o tempo de meia-vida T é de 170 dias (baixo); e (c) Cenário 3, onde o valor f_{oc} é 0,01 (alto) e o tempo de meia-vida T é de 500 dias (moderado).

6.5.1 - Resultados

Os resultados comparativos da pluma de contaminação do benzeno no tempo $T=450$ dias para os diferentes cenários de adsorção com degradação podem ser analisados na Figura 6.16. Comparando-se os resultados com os das Figuras 6.9 e 6.14, conclui-se que, a partir dos parâmetros utilizados nas simulações, a adsorção contribui com a maior parcela na redução da área das plumas.

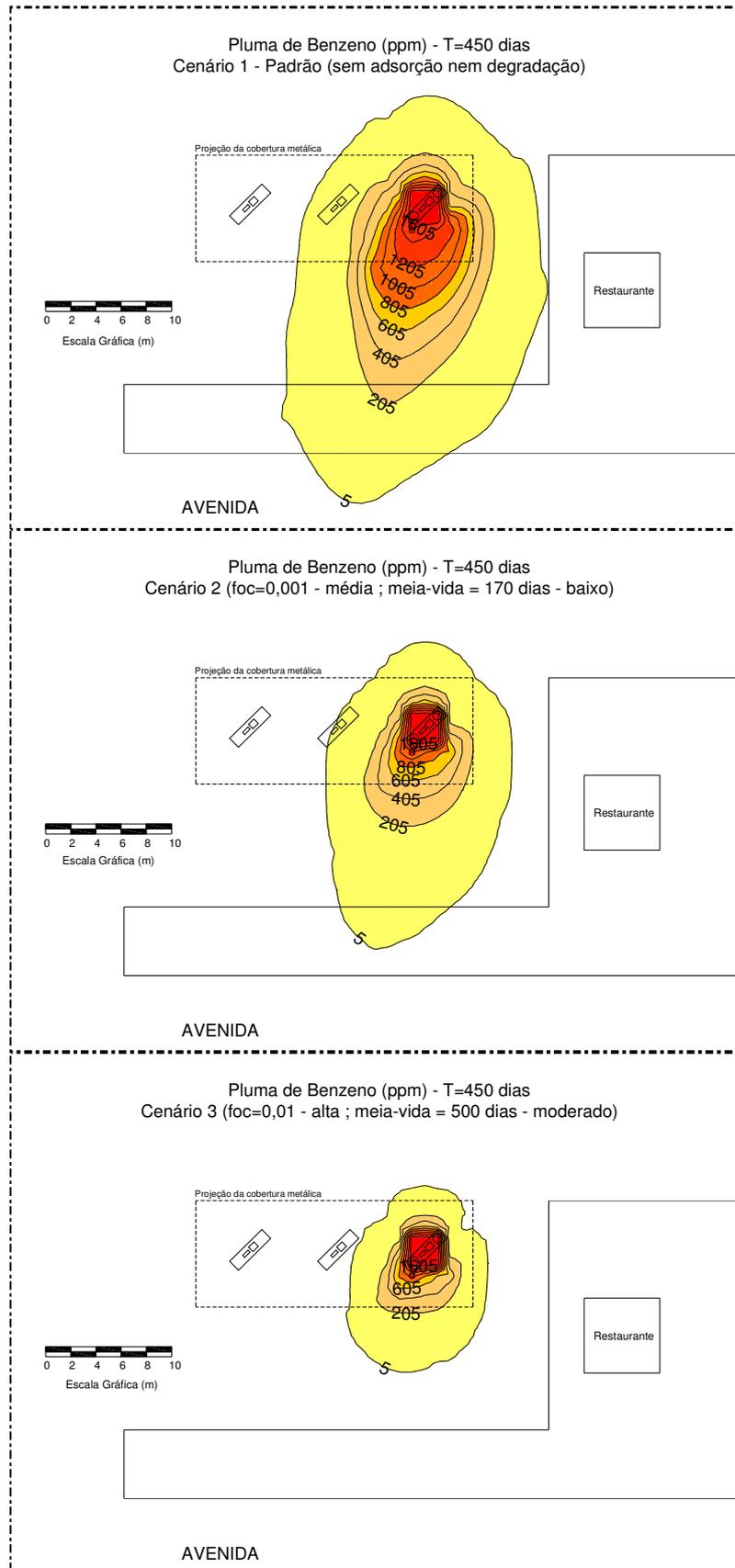


Figura 6.16: Pluma de benzeno no tempo T=450 dias para os diferentes cenários de adsorção com degradação.

A Figura 6.17 ilustra o gráfico de concentração versus distância para os diferentes cenários, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A. Observa-se que os valores de pico das concentrações ao longo da seção diminuem em resposta ao efeito da adsorção e da degradação, com o favorecimento de ambos.

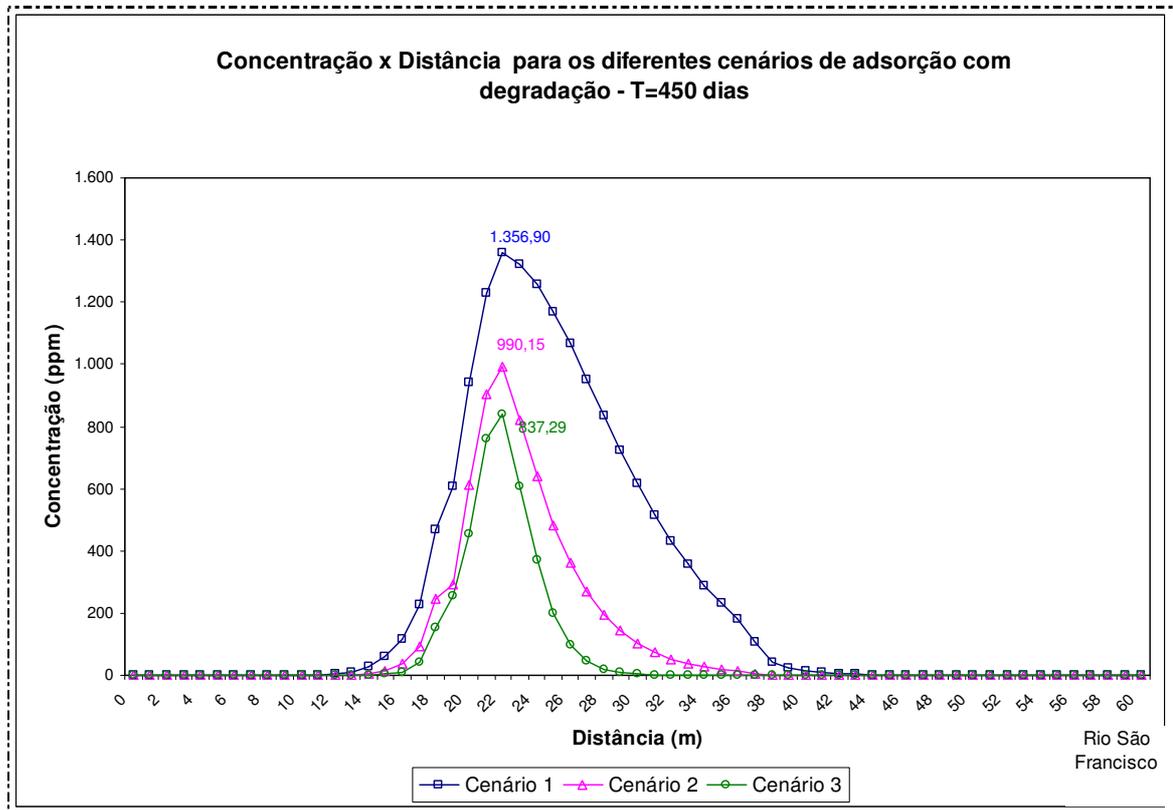


Figura 6.17: Gráfico de concentração versus distância para os diferentes cenários de adsorção com degradação, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.

Reforçando esta afirmação, apresenta-se o comportamento da função adsorção versus distância, plotado na Figura 6.18. Como esperado, tanto maior a adsorção quanto maior a fração de carbono orgânico presente em cada cenário, em escala diretamente proporcional. Comparando-se com os resultados da Figura 6.11, nota-se que os valores de pico da função adsorção são maiores quando o processo de transporte não está associado ao efeito da taxa de degradação. Este fato é explicado pela degradação ocorrida na massa adsorvida ao solo.

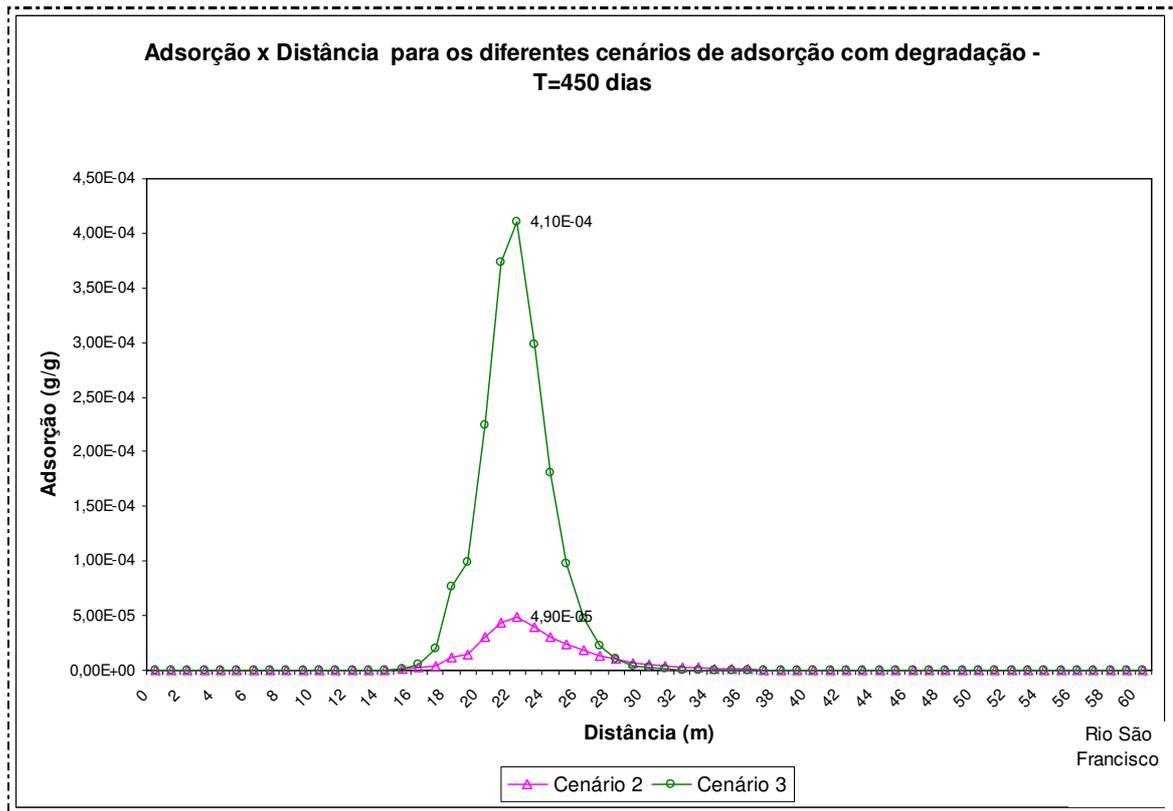


Figura 6.18: Gráfico da adsorção versus distância para os diferentes cenários de adsorção com degradação, no tempo T=450 dias, ao longo da seção A-A.

Os resultados mostrados na Figura 6.19, que contém o gráfico da quantidade de massa adsorvida aos grãos de solo versus distância, concordam com a sistemática exposta. Comparando-se os resultados com os da Figura 6.12, conclui-se que a massa adsorvida ao solo é maior quando o processo de transporte não está associado ao efeito da taxa de degradação, não havendo, portanto, perda de massa no meio.

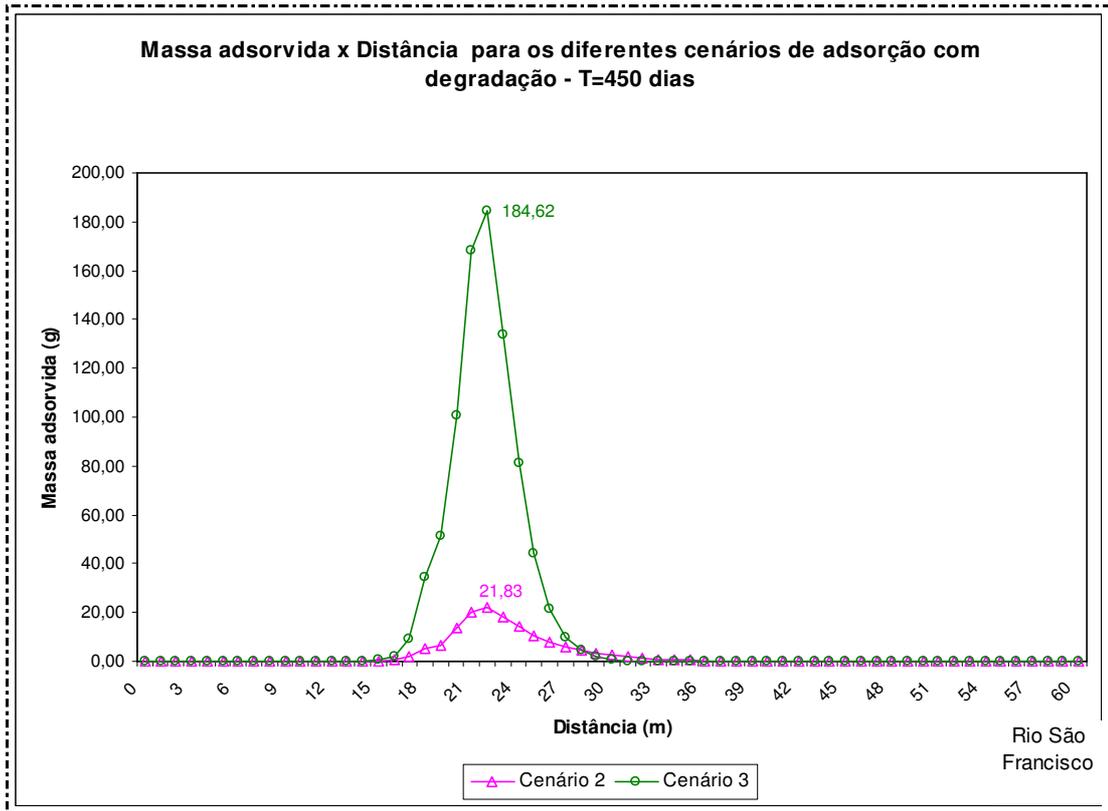


Figura 6.19: Gráfico da massa adsorvida versus distância para os diferentes cenários de adsorção com degradação, no tempo $T=450$ dias, ao longo da seção A-A.

Na Figura 6.20, é ilustrado o gráfico da quantidade de massa presente no fluido (água) versus distância. Quanto menor a massa adsorvida, maior a quantidade presente no fluido. Comparando-se os resultados com os da Figura 6.13, conclui-se que a massa presente no fluido é maior quando o processo de transporte não está associado ao efeito da taxa de degradação. Este fato é explicado pela degradação ocorrida na massa presente no fluido.

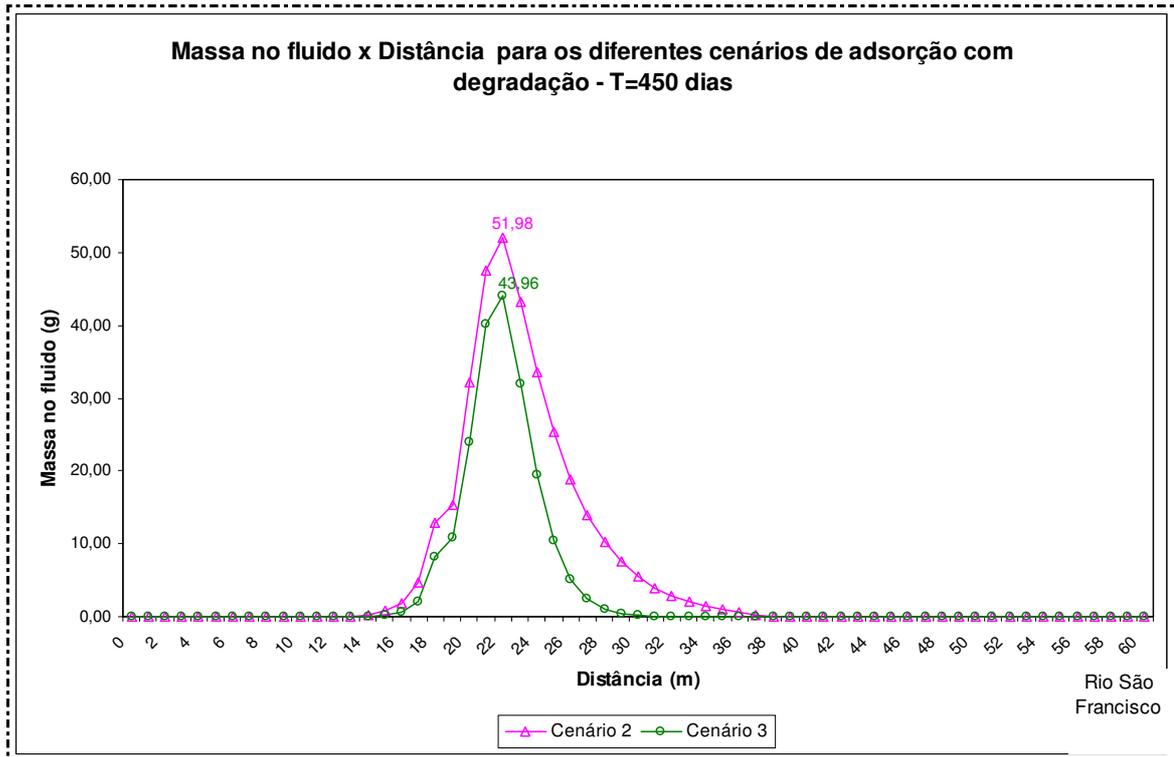
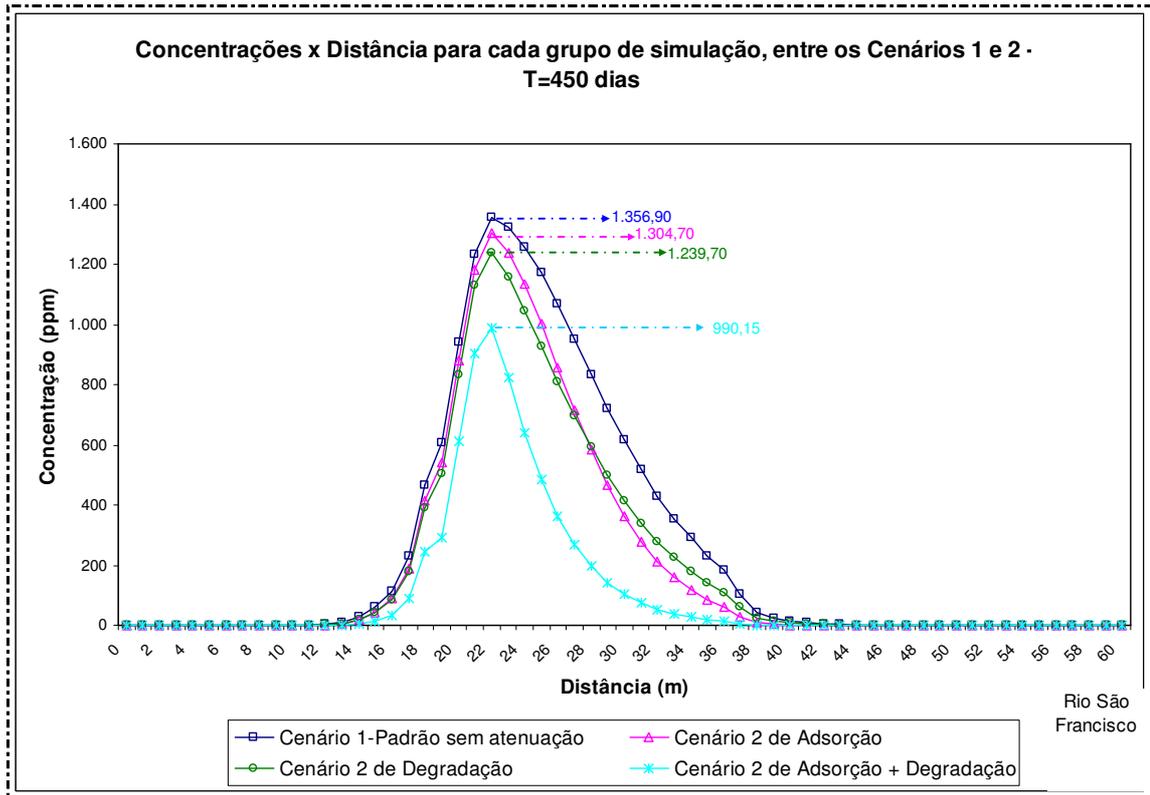


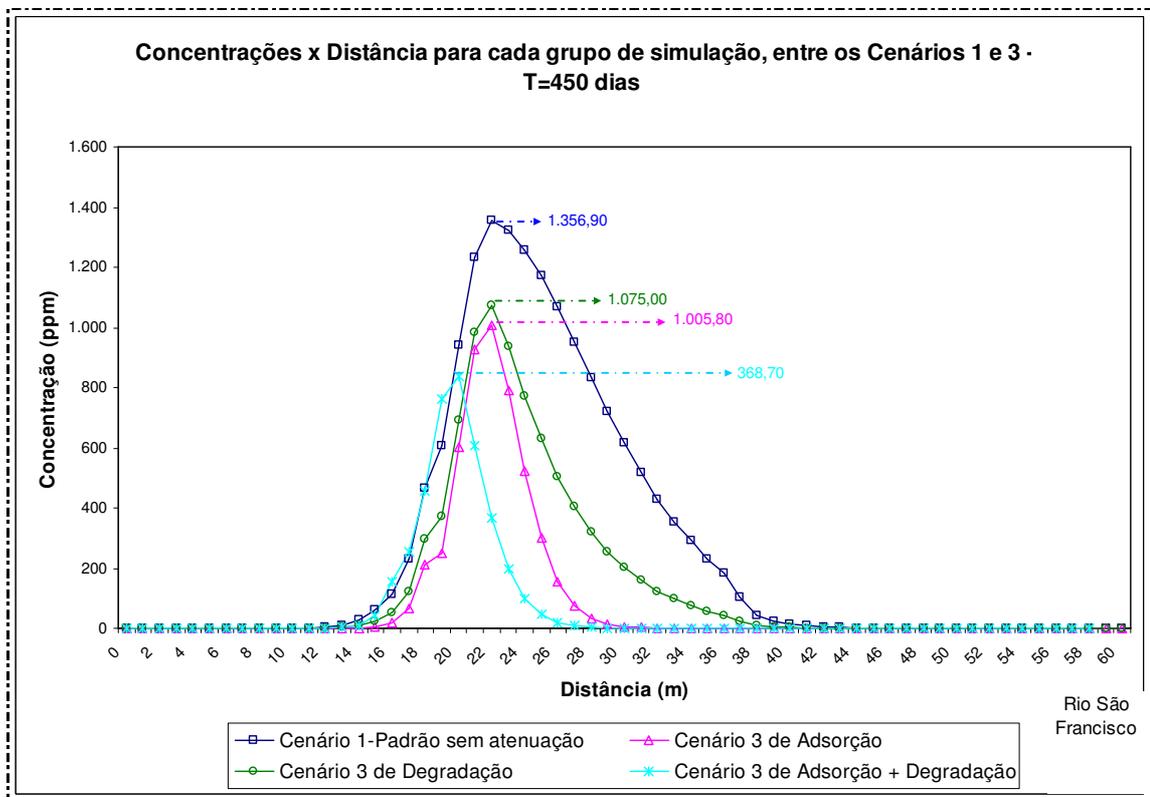
Figura 6.20: Gráfico da massa no fluido versus distância para os diferentes cenários de adsorção com degradação, no tempo T=450 dias, ao longo da seção A-A.

6.6 - Gráficos comparativos

Por fim, as Figuras 6.21 (a) e (b) apresentam gráficos comparativos das concentrações versus distâncias para cada grupo de simulação, entre os Cenários 1 e 2 e entre os Cenários 1 e 3, respectivamente.



(a)



(b)

Figura 6.21: Gráficos comparativos das concentrações versus distâncias para cada grupo de simulação, entre os Cenários (a) 1 e 2 e (b) 1 e 3.

7 - SIMULAÇÃO DE CENÁRIOS DE REMEDIAÇÃO

Com a finalidade de avaliar os impactos e/ou resultados da eficiência na aplicação de algumas técnicas de remediação ao caso, foram conduzidos três grupos de simulações: (a) Bombeamento e tratamento; (b) Vala de contenção hidráulica; e (c) Atenuação natural monitorada.

7.1 - Bombeamento e tratamento (“*Pump and Treat*”)

7.1.1 - Aspectos gerais da técnica

Até um passado muito recente, a maioria dos casos de remediação optava pela aplicação da técnica conhecida como *pump and treat*. O funcionamento do sistema consiste em (1) bombear a água subterrânea para a superfície; (2) promover o tratamento para retirada de contaminantes; (3) Retornar a água tratada para o aquífero ou para outro destino apropriado (corpos d’água ou rede de esgoto) (SUTHERSAN, 1997).

Entretanto, o bombeamento de contaminantes do subsolo não garante sua completa remoção, que é limitada pelo comportamento dos contaminantes (características dos compostos), pela geologia e hidrogeologia do sítio, pelo sistema de extração, presença de fase residual, dentre outros (SUTHERSAN, 1997).

O método pode ser eficaz na prevenção e contenção da migração de plumas de contaminação, e na remoção inicial de massa de contaminantes presentes em fases livre e dissolvida (GUSMÃO, 2002; SUTHERSAN, 1997). Entretanto, são restritos e limitados quando utilizados para remediações de longo prazo, especialmente no caso de aquíferos contaminados com NAPLs, segundo Starr e Cherry (1994 *apud* GUSMÃO, 2002), onde a taxa de dissolução da fase residual e migração da fase dissolvida podem ser bastante lentas, devido a fatores como heterogeneidade do solo e o efeito da adsorção (DOMENICO et al., 1998).

7.1.2 - Taxa de bombeamento nos poços de extração

O bombeamento através dos poços de extração promove um rebaixamento no nível do aquífero e, conseqüentemente, uma mudança no padrão de fluxo estacionário, que deverá tender a migrar em direção aos poços operantes. Fatores como a consistência no fluxo de bombeamento e o rendimento dos poços na operação do sistema são essenciais para o bom desempenho. Portanto, para obter-se uma taxa de bombeamento adequada, os pontos de extração devem ser em quantidades suficientes, estar bem locados, propriamente instalados e bombeados sob máximas condições de continuidade (SUTHERSAN, 1997).

Além do mais, existe um outro critério para estabelecimento das taxas de bombeamento: o das zonas de captura. A zona de captura corresponde à área abrangida pelo efeito do bombeamento naquele poço, ou seja, a sua zona de contribuição (DOMENICO et al., 1998).

O formato da zona de captura resulta dos efeitos combinados do rebaixamento do lençol freático causados pelo bombeamento no poço. Geralmente uma zona de captura é estimada para um período específico de tempo, como um ou cinco anos. Teoricamente, a água contida na área de captura será recuperada pelo poço naquele período. A largura e abrangência das zonas de captura são proporcionais à taxa de bombeamento (DOMENICO et al., 1998).

Soluções analíticas para a estimativa da zona de captura foram apresentadas por Javandel e Tsang (1986 *apud* DOMENICO et al., 1998), com a finalidade de definir a quantidade e locação dos poços de extração e das taxas de bombeamento. O esquema ótimo dimensionado para uma zona de captura é obtido quando esta área é um pouco maior do que a da pluma de contaminação existente.

Modelos numéricos também podem ser utilizados para a estimativa das zonas de capturas. Larson et al. (1987 *apud* DOMENICO et al., 1998), conduziram soluções através do uso de um modelo tridimensional de fluxo de água subterrânea, que, após resolver o problema de fluxo hidrogeológico, exporta os resultados para um segundo programa capaz de delimitar as linhas do caminho percorrido por partículas

(devido à advecção), com o uso da ferramenta *particle tracking*. Simulando-se então um sistema de bombeamento, essas linhas podem ser usadas para estimar a zona de captura de um ou vários poços em operação. Este procedimento também foi utilizado para a determinação das zonas de captura relacionadas com o presente trabalho.

O sistema de bombeamento que foi instalado para a remediação do presente caso opera através da extração multifásica de água e contaminante, com um armazenamento temporário do material extraído em um compartimento de 1.500 litros de volume. Em seguida, é direcionado ao sistema de separação e tratamento para depois retornar ao subsolo (HAZTEC, 2005).

A Figura 7.1 ilustra a pluma de contaminação do benzeno para uma simulação com tempo total de 525 dias, sem efeitos de adsorção nem degradação. O tempo escolhido corresponde ao período médio entre o início do vazamento e o início da operação do sistema de bombeamento (capítulo 3).

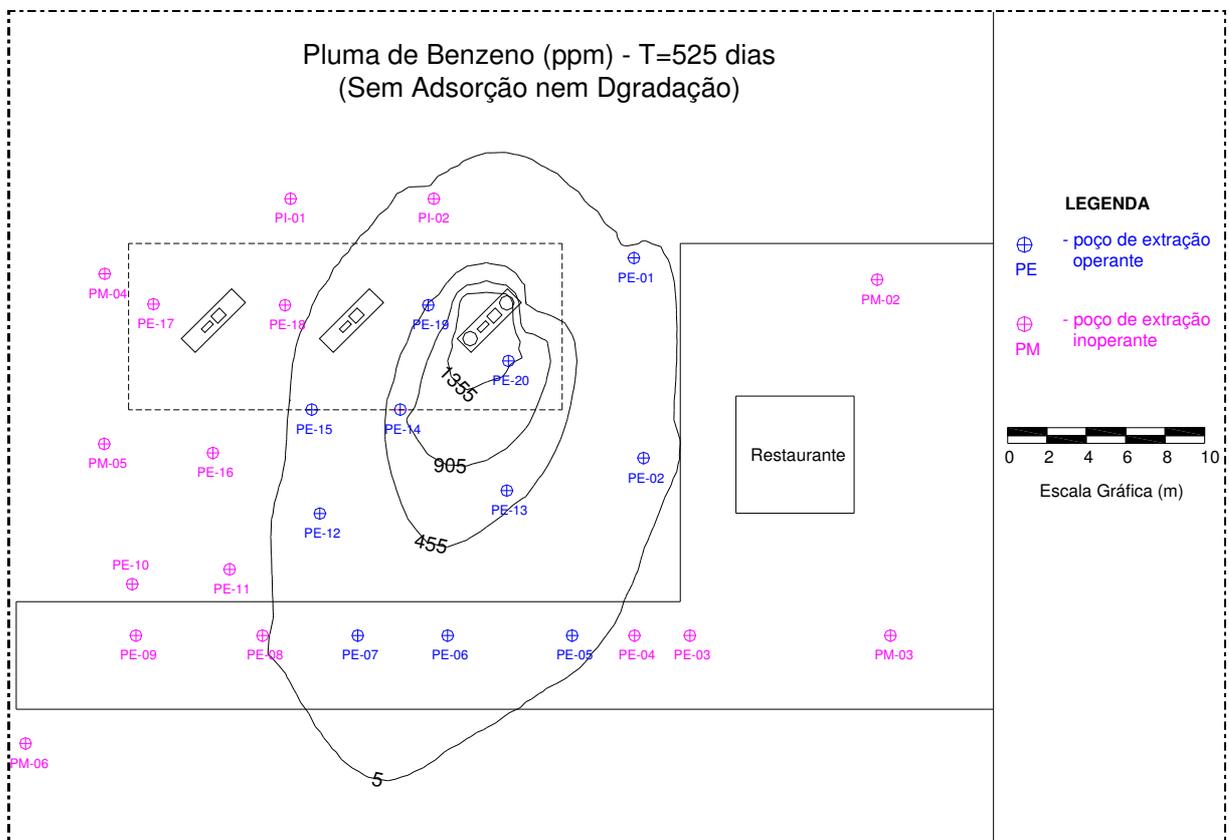


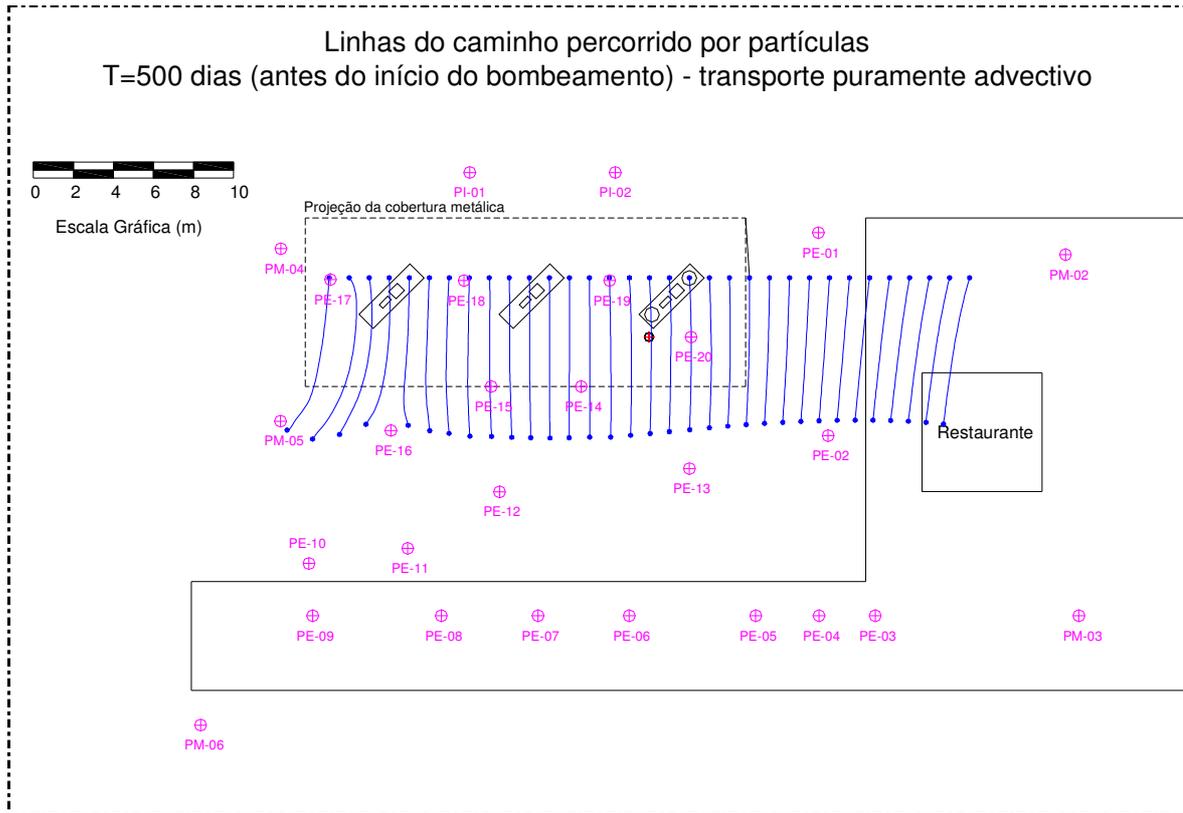
Figura 7.1: Pluma de contaminação do benzeno para uma simulação com tempo total de 525 dias, sem efeitos de adsorção nem degradação.

Com base na abrangência da pluma do composto dissolvido, escolheu-se, para a simulação dos cenários de bombeamento, os seguintes poços instalados: PE-01 / PE-02 / PE-05 / PE-06 / PE-07 / PE-12 / PE-13 / PE-14 / PE-15 / PE-19 / PE – 20, totalizando 11 poços de extração operantes.

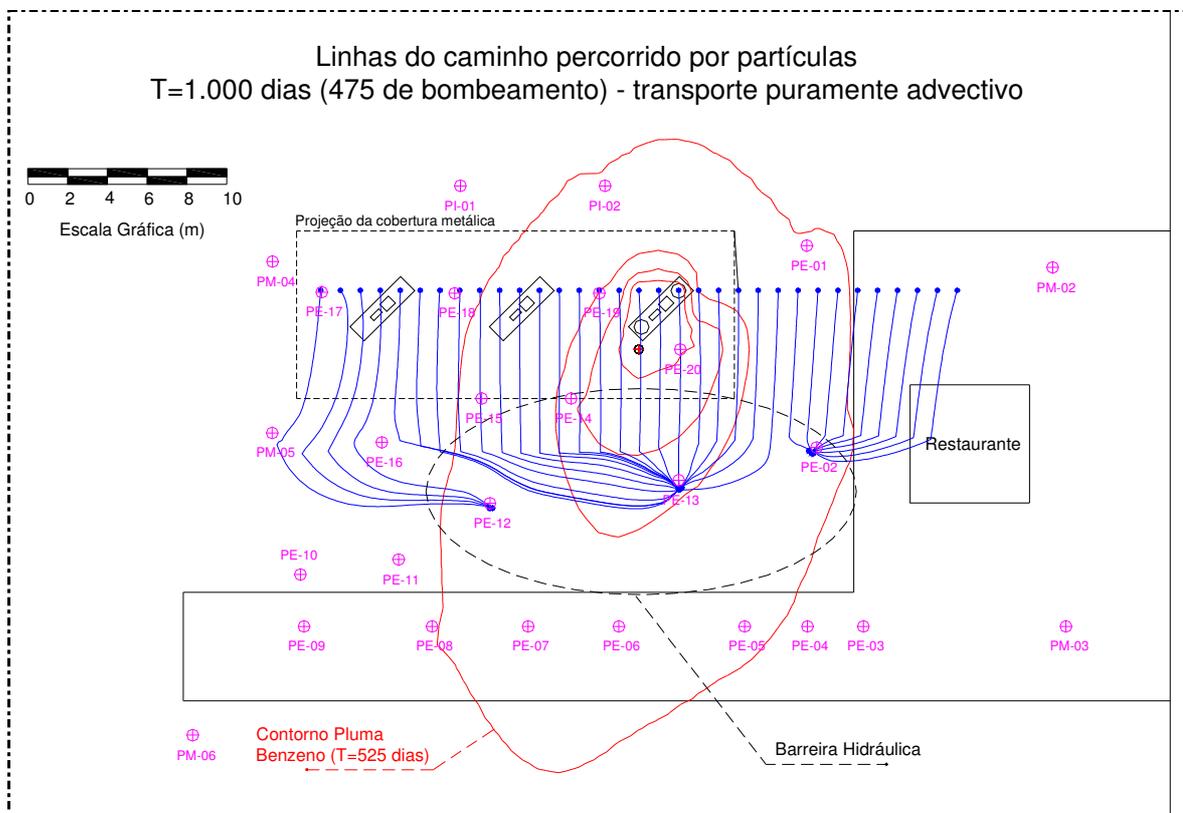
Para a definição de uma taxa de bombeamento, considerou-se a necessidade de um período razoável de tempo de retenção do efluente na caixa de separação para uma eficiente remoção dos contaminantes (SUTHERSAN, 1997). Para um dia de retenção no sistema de tratamento, ter-se-ia a capacidade total de armazenamento diária como sendo igual ao volume disponível no tanque de armazenamento provisório, a saber, 1.500 litros. Logo, a taxa de bombeamento por poço seria de aproximadamente 135 litros por dia. Para a simulação, foi adotada a taxa de 120 litros por dia por poço de extração, promovendo, teoricamente, mais de um dia de permanência dos efluentes na caixa separadora.

Para delimitação da zona de abrangência gerada pelos poços selecionados, operando a uma taxa de bombeamento contínuo de 120 litros por dia, desenvolveu-se um modelo transiente para simulação de fluxo hidrogeológico, com condições estacionárias até o tempo $T=525$ dias (início do bombeamento) e, a partir daí, a entrada em operação contínua e simultânea dos 11 poços de extração selecionados com base na Figura 7.1.

As Figuras 7.2 (a) e (b) mostram as linhas do caminho percorrido por partículas devido ao componente de fluxo advectivo, para os tempos $T=500$ dias (antes do início da operação de bombeamento) e $T=1.000$ dias (após o início da operação de bombeamento).



(a)



(b)

Figura 7.2: Linhas do caminho percorrido por partículas devido ao componente de fluxo advectivo, para os tempos (a) T=500 dias e (b) T=1.000 dias.

Analisando-se a Figura 7.2 (a), percebe-se que o comportamento das partículas obedece a uma condição ainda estacionária, sem nenhuma influência dos poços inoperantes, justamente no período que antecede ao início da remediação. Já na Figura 7.2 (b), nota-se que a taxa de bombeamento aplicada aos poços é capaz de reter o avanço da pluma em toda a sua extensão de largura. Os poços PE-02 / PE-12 e PE-13 funcionariam como barreiras hidráulicas ao transporte advectivo, impedindo o avanço de contaminantes. Os demais serviriam apenas para extração da massa remanescente do período que antecede o início da remediação.

7.1.3 - Condições iniciais de contorno para o transporte de contaminantes sob efeito do bombeamento

Analogamente ao estudo de condição de contorno aplicado aos cenários de contaminação (capítulo 6), buscou-se os fluxos (Q) de contaminantes capazes de equilibrar o valor da concentração inicial imposta (C) aos nós da Figura 5.2.

O efeito do bombeamento causa um aumento nas velocidades do fluxo das águas subterrâneas, contribuindo para um acréscimo no fluxo de massa acumulado de contaminantes (Q_{ac}) que entra no sistema a partir da piscina de interface entre contaminantes e aquífero (origem do vazamento, Figura 3.1). A Figura 7.3 retrata o comportamento desta função em resposta à condição de concentração inicial $C=1.780$ ppm constante.

Como esperado, o acúmulo de massa entrando no sistema cresce com o tempo. A descontinuidade observada no comportamento do fluxo de massa acumulado é explicada pelo início da operação de bombeamento. Nota-se que a taxa de acumulação aumenta a partir do tempo $T=525$ dias, momento em que o sistema de poços de extração entra em funcionamento.

Observando-se este gráfico, constatou-se inicialmente que, no tempo aproximado $T=680$ dias, o valor de fluxo acumulado de entrada de massa em resposta à condição de concentração (C) constante era $Q_{ac}= 58,1$ kg.

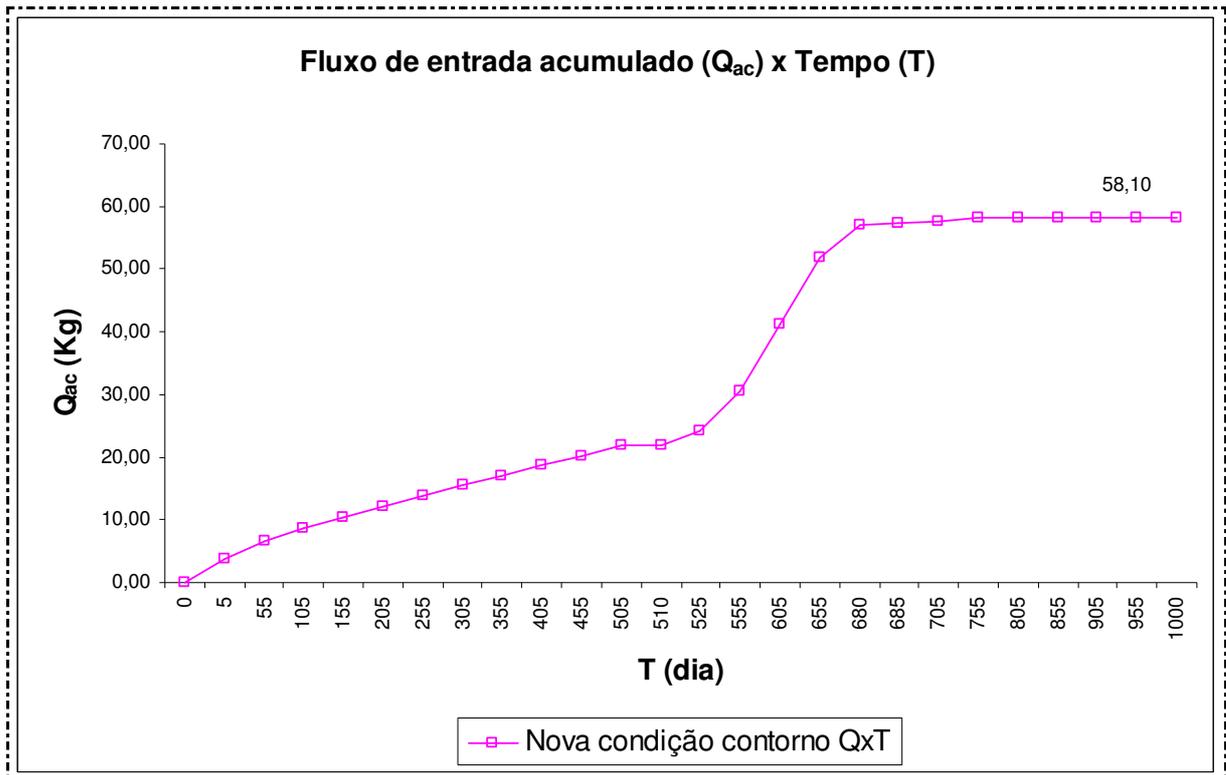


Figura 7.3: Fluxo acumulado de entrada de massa (Q_{ac}) a partir da piscina de interface entre contaminantes e aquífero (origem do vazamento, Figura 3.1).

Posto isto, a nova condição de contorno estabelecida foi obtida de maneira análoga ao estudo do item 5.3.3, alterando-se a condição de concentração inicial constante, $C=1.780$ ppm, para uma função de entrada de fluxo unitário de massa (Q_m) pelo tempo (T), para cada nó, onde o fluxo de massa ocorre até o tempo $T=680$, momento em que a massa total de benzeno vazada, 58,10 kg, estaria completamente dissolvida na água subterrânea.

7.1.4 - Simulação dos cenários de remediação por bombeamento simultâneo

O objetivo desta simulação é analisar a influência da operação de bombeamento simultâneo nos poços de extração nos resultados finais inerentes ao processo de transporte de massa de contaminantes.

Com o aumento das velocidades de fluxo das águas subterrâneas provocado pelo bombeamento nos poços, foi necessário diminuir o intervalo da escala de tempo “time steps” utilizado nas simulações de 15 para 5 dias, visando a minimização das

oscilações e dispersões numéricas ditadas pelos Critérios de Peclet e Courant, cujos valores finais obtidos são mostrados na Tabela 7.1. Pode-se concluir, para fins práticos, que a solução geral do problema modelado encontra-se dentro de uma faixa estável quanto a este critério.

Tabela 7.1: Valores obtidos para os Números de Peclet e Courant.

FAIXA DE VARIAÇÃO DOS NÚMEROS DE PECKET E COURANT OBTIDOS		
PARAMETRO	VALOR MÍNIMO	VALOR MÁXIMO
Número de Peclet na direção X	0,0000	2,2300
Número de Peclet na direção Y	0,2600	2,1400
Número de Courant na direção X	0,0000	1,2300
Número de Courant na direção Y	0,0000	1,2700

De maneira análoga às simulações do Capítulo 6, os parâmetros utilizados nas simulações de remediação são os mesmos para todos os Cenários padrões e estão descritos na Tabela 6.2. Para os demais Cenários (2 e 3), a única diferença reside nos parâmetros variantes.

Foram criados três cenários de bombeamento: (a) Cenário 1 – sem atenuação, onde não há adsorção nem taxa de degradação; (b) Cenário 2 – atenuação moderada, onde o valor f_{oc} é 0,001 (médio) e o tempo de meia-vida T é de 500 dias (moderado); e (c) Cenário 3 – atenuação alta, onde o valor f_{oc} é 0,01 (alto) e o tempo de meia-vida T é de 170 dias (baixo).

A Figura 7.4 ilustra a planta baixa do empreendimento, contendo a indicação da seção longitudinal dos pontos de interesse para esta simulação, aos quais alguns resultados se referem.

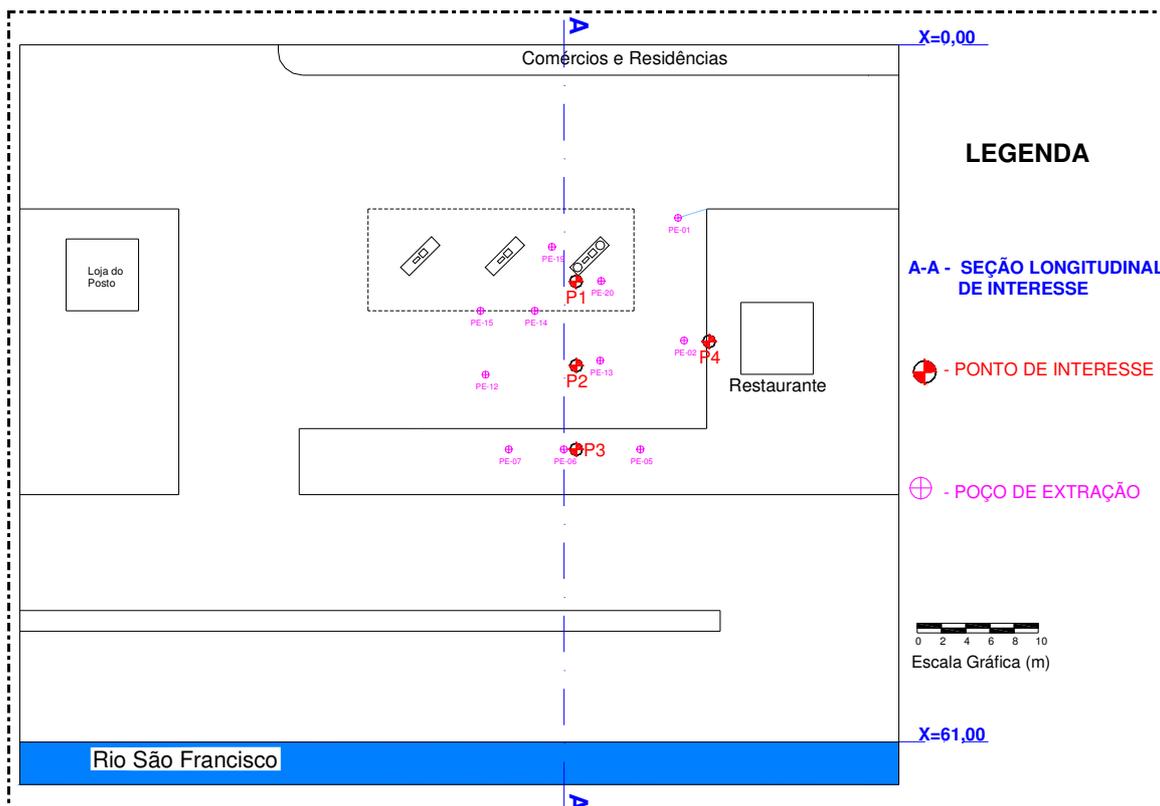


Figura 7.4: Planta baixa do empreendimento, contendo a indicação da seção longitudinal e dos pontos fixos de interesse.

7.1.5 - Resultados

A Figura 7.5 ilustra os resultados comparativos da pluma de contaminação do benzeno no tempo $T=1005$ dias (480 dias após início do bombeamento) para os diferentes cenários. Nota-se, que no cenário 1, o centro de massa da pluma deslocasse com maior liberdade, possibilitando um melhor rendimento na captação por bombeamento. Já nos cenários 2 e 3, onde existem fatores atenuantes (adsorção e degradação), percebe-se uma moderada diminuição na área final de abrangência da pluma bem como uma maior retenção de migração do seu centro de massa, o que contribuiria para a diminuição do rendimento da operação de extração de contaminante.

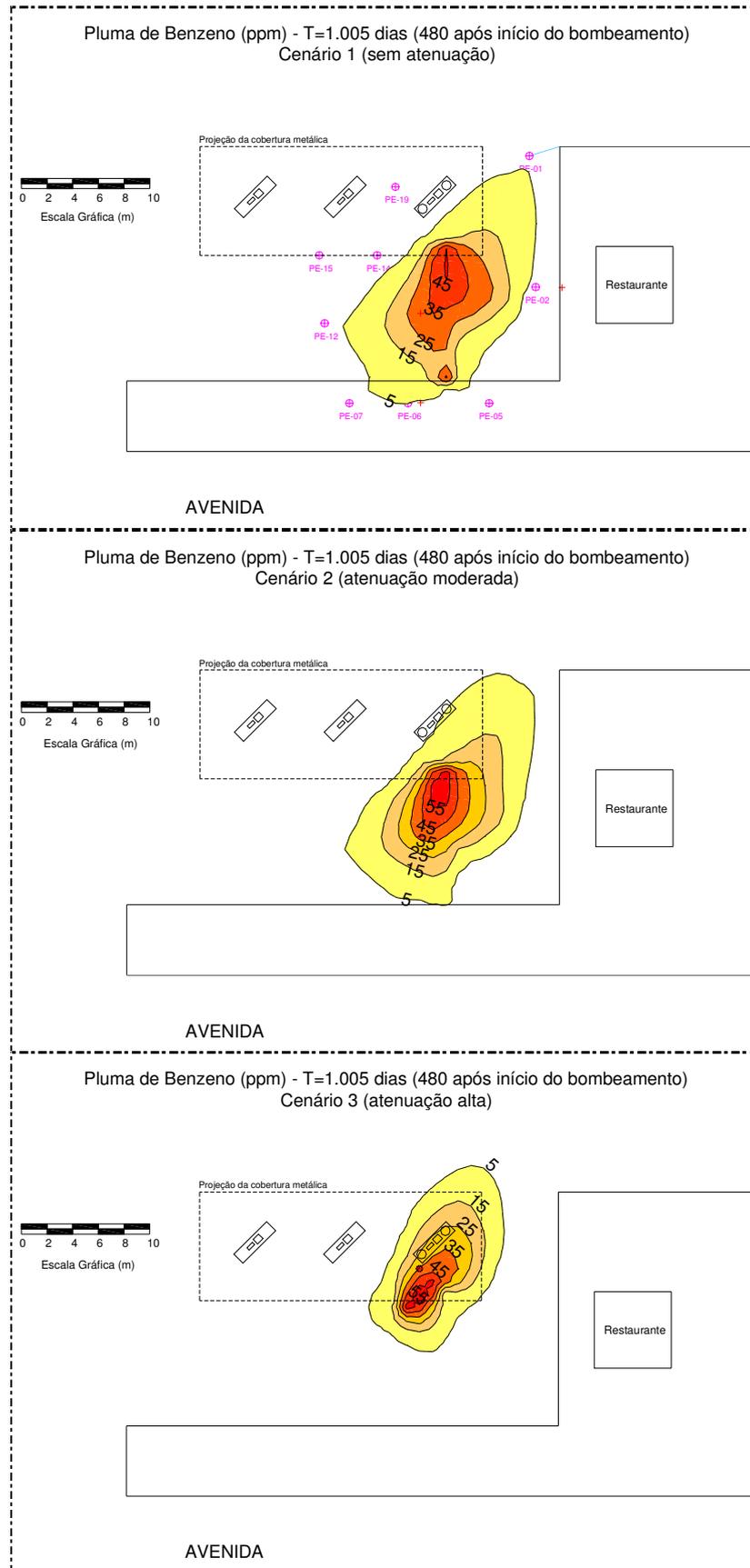


Figura 7.5: Pluma de contaminação do benzeno no tempo T=1.005 dias para os diferentes cenários de bombeamento

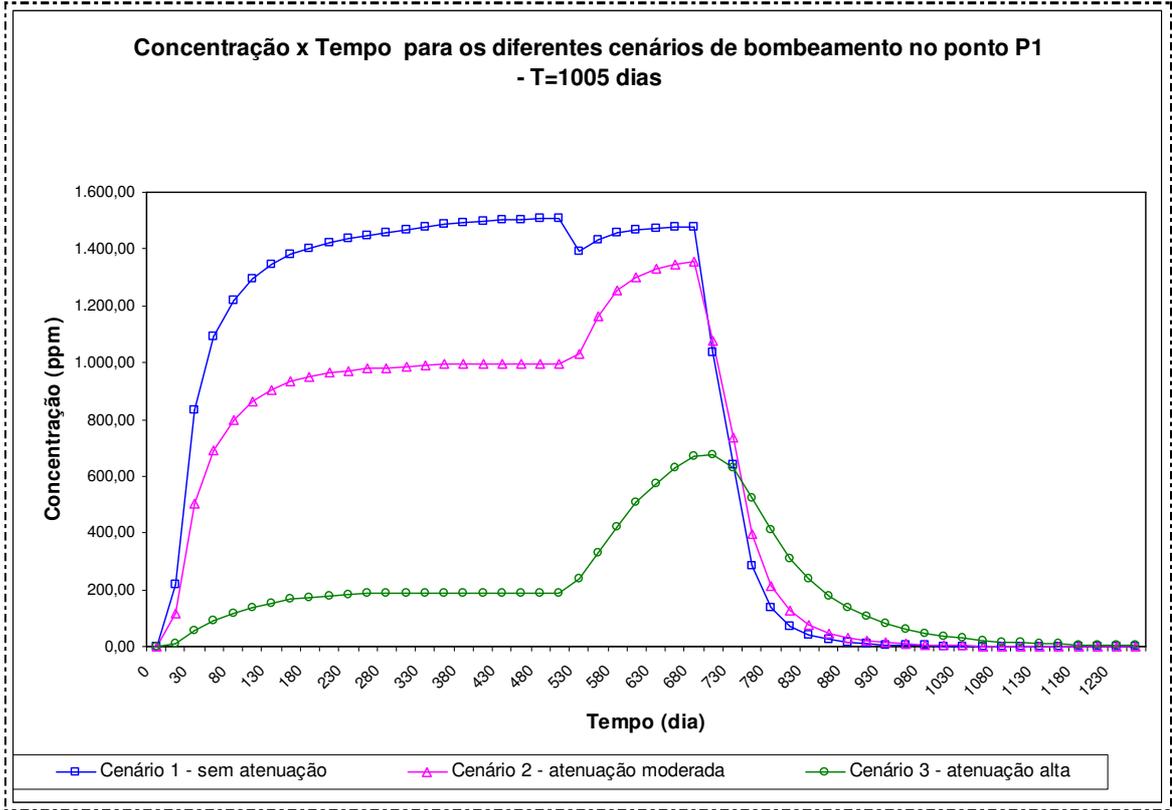
A distribuição final de massa remanescente no sistema modelado é apresentada na Tabela 7.2, para os diferentes cenários simulados. Pelos resultados, constata-se que existe uma melhoria na eficiência da remoção à medida que se diminui o fator atenuante da adsorção. Por outro lado, ao passo que se diminui o tempo de meia-vida do composto, contribui-se para a redução da massa de fase dissolvida em água.

Tabela 7.2: Distribuição final de massa remanescente no sistema modelado para os diferentes cenários simulados.

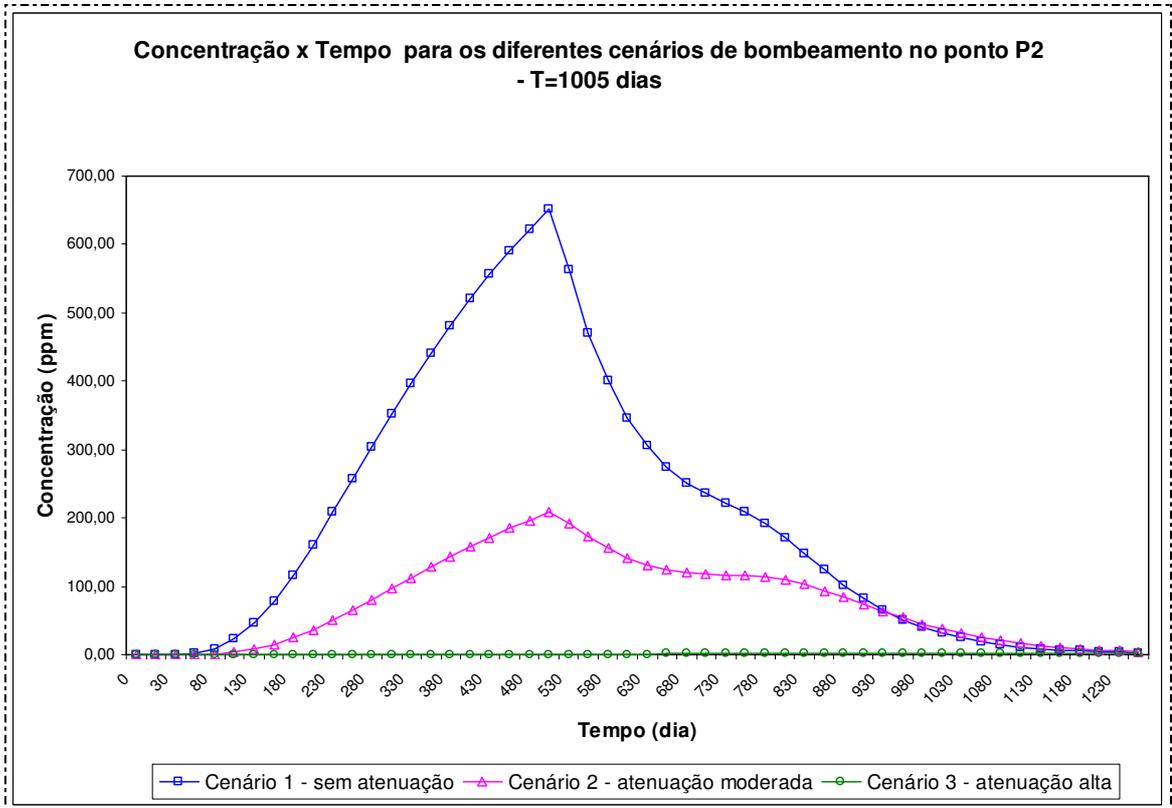
DISTRIBUIÇÃO DE MASSA REMANESCENTE NOS CENÁRIOS PARA O TEMPO T=1.005 DIAS MASSA INICIAL = 58,10 Kg DE BENZENO			
DISTRIBUIÇÃO DE MASSA (Kg)	CENÁRIO 1 (SEM ATENUAÇÃO)	CENÁRIO 2 (ATENUAÇÃO MODERADA)	CENÁRIO 3 (ATENUAÇÃO ALTA)
Adsorvida	0,00	0,30	1,82
Dissolvida	0,74	0,71	0,43
Total Eliminada/Removida	57,36	57,09	55,85
% ELIMINADA / REMOVIDA	98,7260%	98,2532%	96,1255%

As Figuras 7.6 (a), (b), (c) e (d) ilustram a variação das concentrações de contaminantes dissolvidos (C) versus tempo (T) nos respectivos pontos de interesse (P1 a P4).

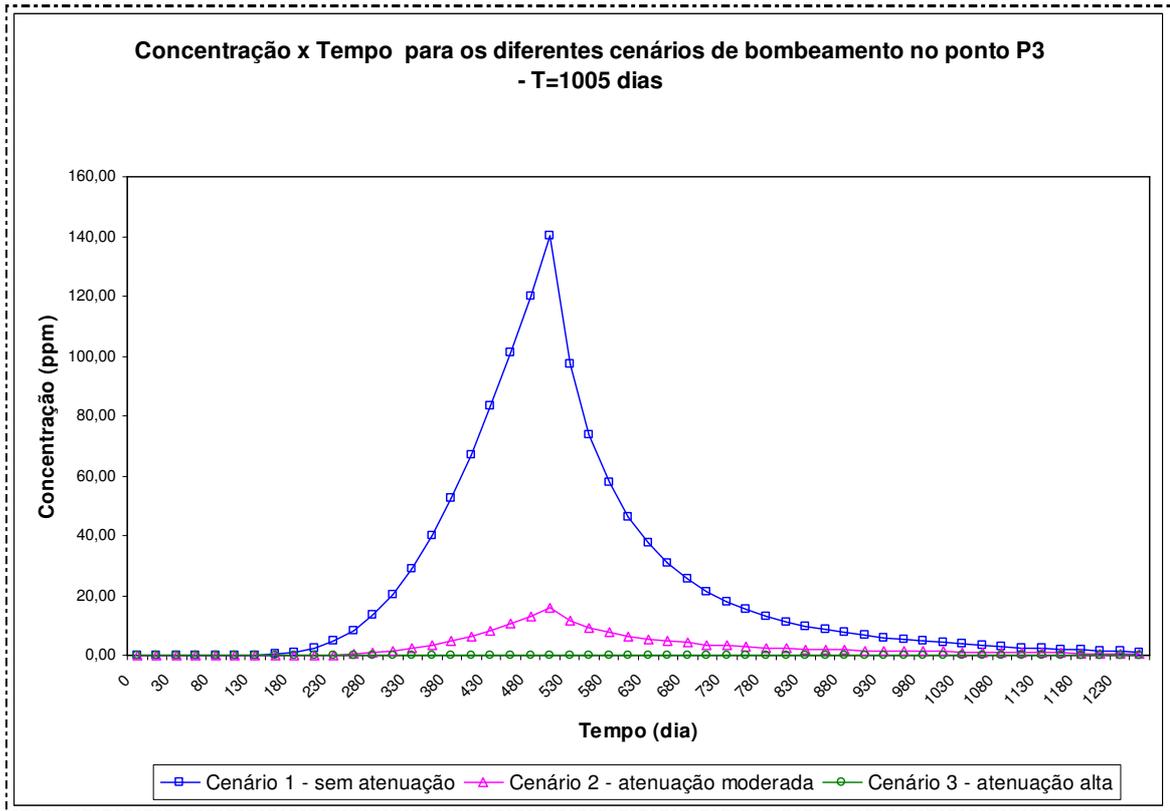
Analisando a Figura 7.6 (a), (b), (c) e (d), à medida que se aumenta o fator atenuante, nota-se a clara diminuição das concentrações ao longo do tempo nos respectivos pontos de interesse. Os maiores picos de concentração mostraram-se presentes no cenário 1 (sem atenuação), justamente devido ao fato do centro de massa da pluma deslocar-se com liberdade, possibilitando assim a maior liberação de massa a partir da origem. Já para os cenários 2 e 3, onde existem fatores atenuantes (adsorção e degradação), percebe-se uma clara diminuição nos valores de pico de concentração, justamente devido à maior retenção de massa no processo migração da pluma.



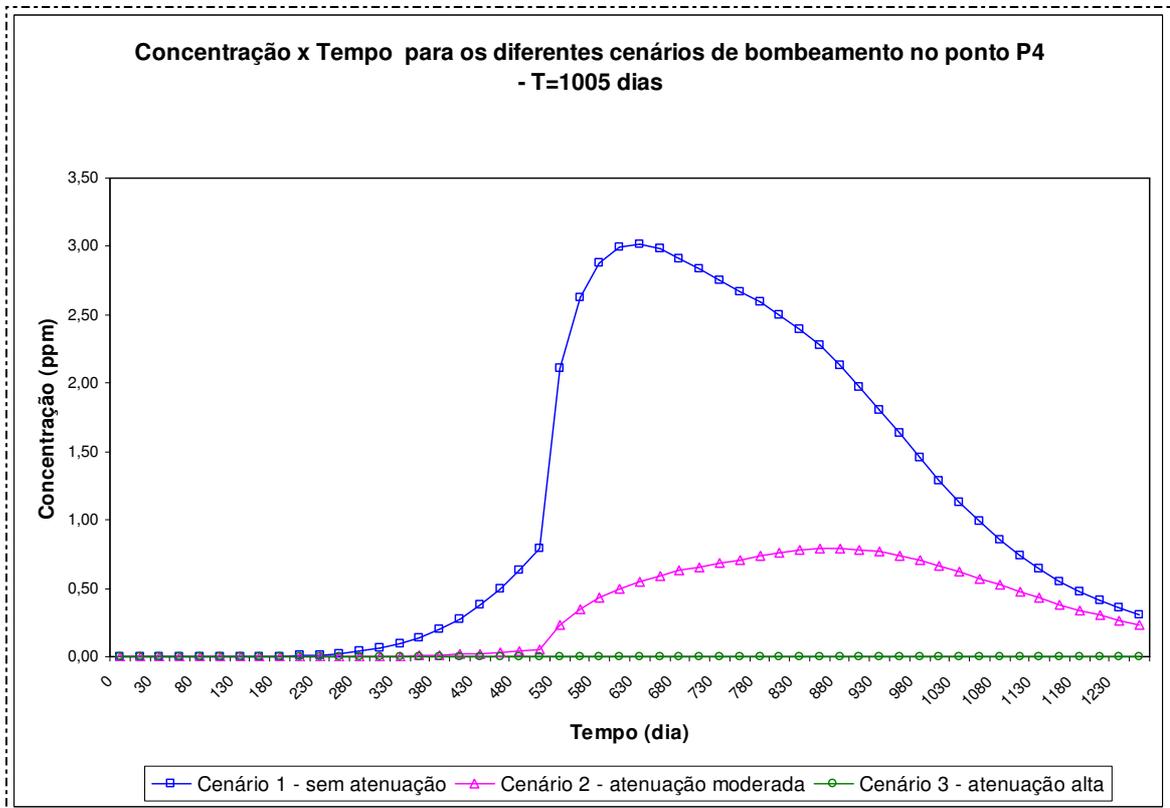
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 7.6 (a), (b), (c) e (d): Variação das concentrações (C) versus tempo (T) nos respectivos pontos de interesse (P1 a P4).

É importante salientar que, para todos os cenários, as concentrações finais de benzeno obtidas ao longo do tempo no ponto P4 (em frente ao restaurante), estão situadas abaixo do limite de intervenção para água subterrânea estabelecido pela Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental do estado de São Paulo, que é de 5 ppm (CETESB, 2001c).

7.1.6 - Considerações finais

O escopo de trabalho sugerido trata do estudo da influência de alguns parâmetros no processo de migração de um contaminante dissolvido. Para tanto, assumiu-se uma hipótese básica de dissolução na fonte de contaminação: taxa de dissolução como sendo os fluxos de massa capazes de manter a concentração inicial do composto dissolvido igual ao limite da solubilidade deste.

Esta consideração permitiu que toda a massa vazada do composto fosse dissolvida no modelo em período muito menor do que se levaria na realidade. Para uma completa dissolução, parâmetros como tempo, fluxo de massa e concentrações podem variar bastante, dependendo de fatores como a saturação residual de fase livre na zona vadosa, forma da piscina na origem, adsorção, volatilização, degradação, o coeficiente de partição entre contaminante e água subterrânea, dentre outros (HOLMAN & JAVANDEL, 1996).

Ainda assim, sob circunstâncias de dissolução favoráveis ao bombeamento, foi possível concluir que, após cerca de 1005 dias de simulação (480 após o início da operação do sistema de bombeamento), resquícios do composto ainda estariam presentes no sítio em todos os cenários, com concentrações superiores ao limite de intervenção estabelecido pela CETESB (5 ppm), podendo atuar como fontes contínuas de contaminação.

A determinação, para o caso em questão, de uma função que retrate a real dissolução do composto na origem, necessitaria de maiores investigações e dados específicos sobre os parâmetros físico-químicos inerentes ao processo. Salienta-se, novamente, que este objeto não foi o alvo principal do trabalho apresentado.

Considerações sobre a eficiência de sistemas de bombeamento também foram apresentadas por Forsyth & Sudicky (1998), que, ao simularem numericamente a aplicação da remediação de aquíferos através do bombeamento simultâneo, concluíram que o sistema, quando bem operado, poderia remover uma substancial quantidade de massa de LNAPL, bem como conter o avanço da pluma de contaminação. Por outro lado, seria muito difícil remover a massa de LNAPL que está na fase residual, acima no aquífero. Além do mais, a massa de contaminantes com baixa saturação residual tenderiam a dissolver lentamente e funcionar como fonte contínua, devido ao decréscimo no processo de transferência de massa ditado pela cinética da dissolução. Finalizaram suas colocações afirmando que se o bombeamento fosse cessado, então uma nova pluma se desenvolveria, porém com menores concentrações.

7.2 - Vala de contenção hidráulica

7.2.1 - Aplicação da técnica

Em fevereiro de 2005 foi construída, a título de ação emergencial, uma vala de contenção hidráulica às margens do Rio São Francisco, no alinhamento frontal ao posto. Trata-se da escavação de uma trincheira com profundidade suficiente para alcançar o nível freático, preenchida com material de granulometria graúda (tipo pedra britada) e possibilitando desta maneira a captação e bombeamento, por meio dos poços de extração, de uma eventual presença de produto. A Figura 7.7 ilustra a planta baixa do empreendimento, contendo a indicação da vala de contenção hidráulica com os poços de extração nas extremidades.

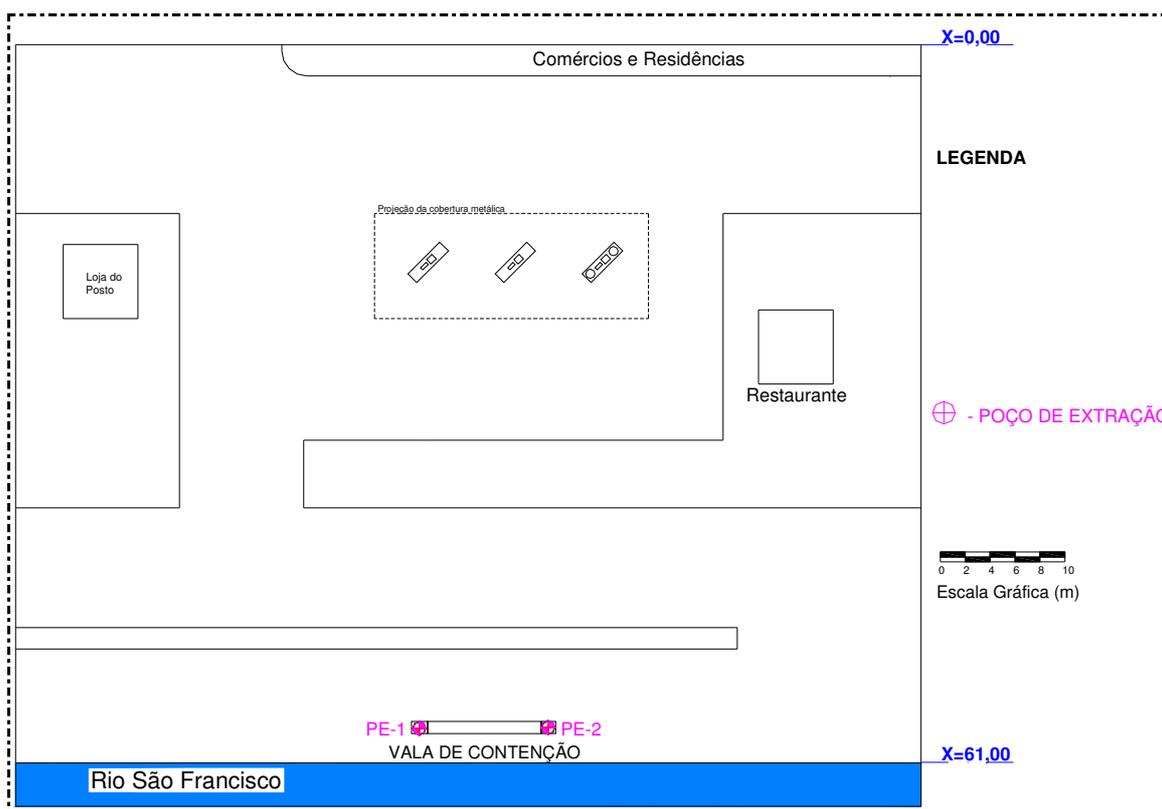


Figura 7.7: Planta baixa do empreendimento, contendo a indicação vala de contenção hidráulica com os poços de extração nas extremidades.

7.2.2 - Taxa de bombeamento nos poços de extração

O procedimento para delimitação das zonas de capturas geradas pelos poços de extração foi o mesmo utilizado no caso da simulação do bombeamento simultâneo (item 7.1.2), através das linhas do caminho percorrido por partículas (devido à advecção), com o uso da ferramenta *particle tracking*.

Também através desta ferramenta, o tempo de viagem necessário para as partículas transitarem da origem do vazamento até as imediações da vala de contenção foi estimado em aproximadamente 1700 dias, para um fluxo advectivo e estacionário.

Desenvolveu-se então um modelo transiente para simulação de fluxo hidrogeológico, com condições estacionárias até o tempo $T=1700$ dias e, a partir daí, a entrada em operação contínua e simultânea dos 2 poços de extração com uma taxa de bombeamento de 400 litros por dia cada. No interior da vala, os valores da

condutividade hidráulica e da porosidade do material foram adotados como sendo 20 m/dia e 36% respectivamente, típicos para solos compostos por pedregulhos (DOMENICO et al., 1998).

A Figura 7.8 mostra as linhas do caminho percorrido por partículas devido ao componente de fluxo advectivo, para o tempo $T=2300$ dias (600 após início da operação de bombeamento).

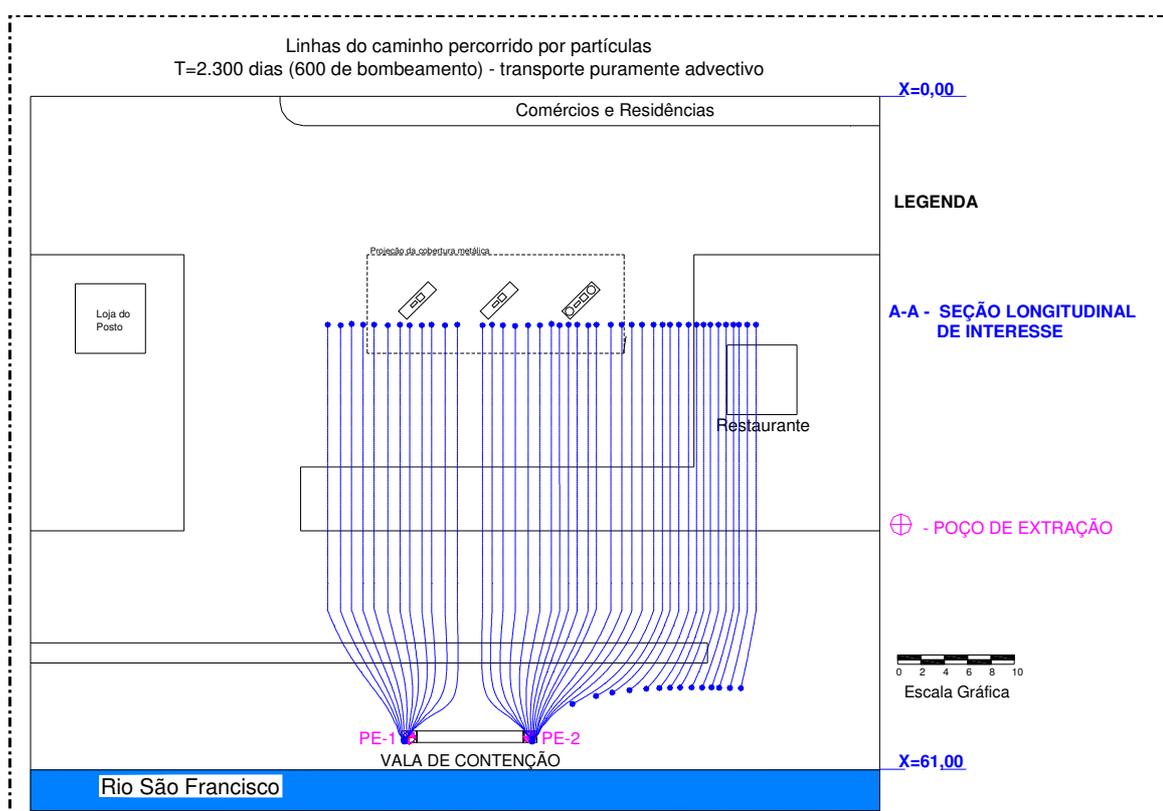


Figura 7.8: Linhas do caminho percorrido por partículas devido ao componente de fluxo advectivo, para o tempo $T=2.300$ dias

Analisando a Figura 7.8, nota-se que a taxa de bombeamento aplicada aos poços é capaz de gerar uma zona de captura que abrange todas as partículas em direção à vala. Outra parcela, porém, partindo de pontos afastados da origem do vazamento, consegue alcançar o rio. Sendo assim, os poços PE-01 / PE-02 funcionariam como barreiras hidráulicas ao transporte advectivo, impedindo o avanço dos contaminantes que se encaminhem à suas zonas de captura.

7.2.3 - Simulação dos cenários de eficiência de contenção da vala

O objetivo principal desta simulação é avaliar a eficiência da contenção do avanço da pluma em direção ao rio, para diferentes cenários de contaminação.

Foram utilizadas, para o transporte de contaminantes, condições iniciais de contorno $C=1.780$ ppm contínuas (ver estudo da condição de contorno apresentado no item 5.3.3).

Com o aumento das velocidades de fluxo das águas subterrâneas provocado pelo bombeamento nos poços, optou-se por diminuir o intervalo da escala de tempo “*time steps*” utilizado nas simulações de 15 para 5 dias, visando assim garantir a minimização das oscilações e dispersões numéricas ditadas pelos critérios de Peclet e Courant, cujos valores finais obtidos são mostrados na Tabela 7.3. Pode-se concluir, pelos resultados, que a solução geral do problema modelado encontra-se dentro de uma faixa estável quanto a este critério.

Tabela 7.3: Valores obtidos para os números de Peclet e Courant

NÚMEROS DE PECLLET E COURANT OBTIDOS		
PARAMETRO	VALOR MÍNIMO	VALOR MÁXIMO
Número de Peclet na direção X	0,47575400	2,18725000
Número de Peclet na direção Y	0,26242700	1,96994000
Número de Courant na direção X	0,00000000	0,32300000
Número de Courant na direção Y	0,00000000	0,32400000

Foram criados três cenários para análise temporal da eficiência de contenção da vala: (a) Cenário 1 – sem atenuação, com tempo de simulação total $T=1.700$ dias (início do bombeamento); (b) Cenário 2 - sem atenuação, com tempo de simulação total $T=2.000$ dias (300 dias de bombeamento); e (c) Cenário 3 – sem atenuação, total $T=2.300$ dias (600 dias de bombeamento).

7.2.4 - Resultados

A Figura 7.9 ilustra os resultados comparativos da pluma de contaminação do benzeno para os respectivos cenários. Nota-se, que no Cenário 1, a pluma de contaminação já teria atingido o rio, mesmo antes do bombeamento começar. Ao fato, atribui-se que a estimativa de tempo de chegada das partículas de contaminantes à vala levou apenas em consideração o mecanismo de transporte puramente advectivo. Os efeitos das dispersões longitudinais e transversais contribuíram para antecipar o tempo de percurso inicialmente adotado.

Percebe-se, através dos resultados das plumas de contaminação para os cenários 2 e 3, que, mesmo após o início da operação de bombeamento simultâneo dos dois poços de extração da vala, o avanço da migração da pluma não seria contido. Constata-se que há certa expansão das áreas e faixas de concentrações ao longo do tempo. No cenário 2 ($T=2000$ dias), há concentrações chegando ao rio na ordem de 5 ppm. Já no cenário 3, o avanço continuado da pluma gerou concentrações finais na ordem de 205 ppm chegando ao corpo d'água.

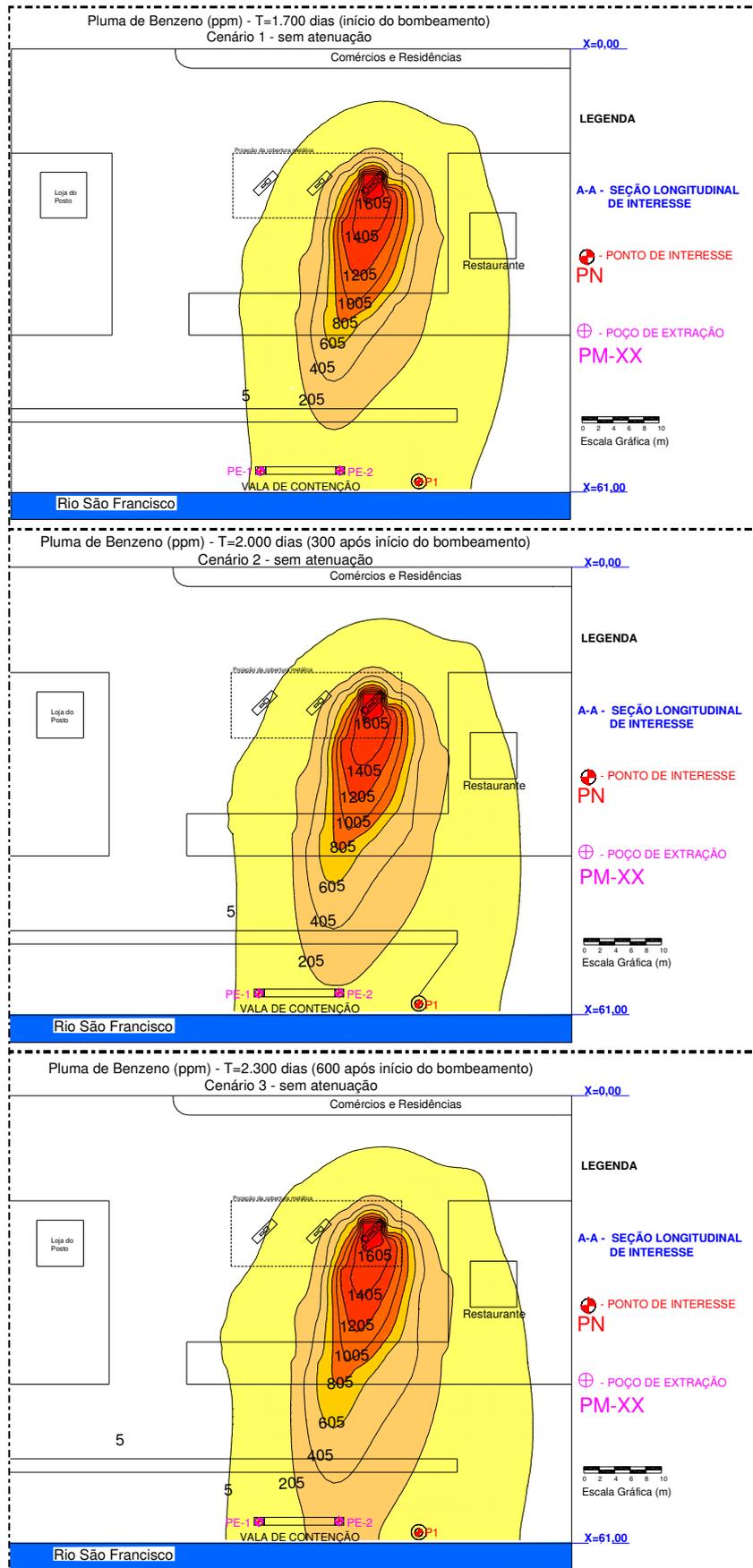


Figura 7.9: Pluma de contaminação do benzeno para os diferentes cenários de eficiência de contenção da vala.

7.2.5 - Considerações finais

As simulações de contenção hidráulica promovida pela vala demonstraram que o sistema poderia não atender às necessidades de projeto. Alguns fatores, porém, merecem ser discutidos:

a) A trincheira poderia estar localizada num local mais próximo à origem do vazamento, aumentando a eficácia do bombeamento, uma vez que as dimensões da pluma a ser capturada seriam bem menores. Por outro lado, o lençol freático desta região está numa profundidade média de 6,00 metros (CETREL, 2005), inviabilizando a engenharia de construção, além de existir uma intensa presença de veículos e transeuntes. Em função disto, escolheu-se o local às margens do rio, onde o freático livre está a cerca de 2,00 metros e não há movimentação de terceiros.

b) O bombeamento foi simulado iniciando no tempo $T=1700$ dias, quando a pluma já tinha alcançado o rio. Se tivesse começado antes, a pluma ainda assim não seria contida, uma vez que foi constatada a evolução da mesma para os cenários 2 e 3, ambos com bombeamento em operação. Some-se ainda ao fato, o alto custo de manutenção do sistema operando por longos períodos de tempo, sem obtenção de um tratamento efetivo, apenas preventivo.

c) Nos cenários simulados, não foram levados em conta fatores atenuantes, como adsorção e degradação, que poderiam contribuir para a retenção e perda de massa de contaminantes, ajudando a conter o avanço da pluma. Na zona vadosa, o efeito da volatilização poderia reduzir significativamente a massa do composto.

d) Ainda assim, os resultados das simulações mostram que o sistema de vala de contenção implantado pode ser considerado, no mínimo, questionável em relação ao seu desempenho, eficiência e adoção.

7.3 - Simulação de cenários de remediação por atenuação natural monitorada

7.3.1 - Aspectos gerais da técnica

O termo “Atenuação Natural Monitorada – ANM” refere-se à utilização de processo de atenuação natural (sem intervenção humana) como técnica para serem obtidos objetivos específicos de remediação para um determinado sítio em período de tempo razoável quando comparado aos oferecidos por outras técnicas. O monitoramento do desempenho do sistema em longo prazo é fundamental para a aplicação da técnica (USEPA, 2004).

O fenômeno da atenuação natural inclui uma variedade de processos físicos, químicos e biológicos que, sob circunstâncias favoráveis, reduzem a massa, toxicidade, mobilidade, volume e concentração dos contaminantes no solo ou na água subterrânea (USEPA, 2004).

Os processos que resultam apenas na redução das concentrações dos contaminantes são designados de “não destrutivos”. Estão inclusos neste grupo a dispersão hidrodinâmica, adsorção e volatilização. Outros processos, como biodegradação e degradação abiótica (ex: hidrólise), também resultam numa redução de massa de contaminante e são designados como “destrutivos” (WEIDEMEIER et al., 1999 *apud* USEPA, 2004).

Para os hidrocarbonetos derivados de petróleo, a biodegradação é o mecanismo de atenuação mais importante. A biodegradação aeróbia consome o oxigênio disponível, resultando em condições anaeróbias no centro da pluma e zonas de oxigênio reduzido nas margens de contorno. A zona anaeróbia é tipicamente mais extensa do que a aeróbia, devido a fatores como o rápido consumo e baixa taxa de reposição do oxigênio dissolvido disponível e a abundância de aceptores anaeróbios de elétrons, quando comparados ao oxigênio. Por essa razão, a biodegradação anaeróbia é tipicamente o processo dominante. Para ambos os mecanismos aeróbios e anaeróbios, a taxa de degradação dos contaminantes é limitada pela taxa de suprimento dos elétrons aceptores e não pela taxa de utilização pelos microrganismos. Desde que exista um suprimento suficiente de elétrons aceptores, a

taxa de metabolismo não fará nenhuma diferença prática no período final requerido para se atingir os objetivos alvos de remediação (WEIDEMEIER et al.,1999 *apud* USEPA, 2004).

O oxigênio é o elétron acceptor para o metabolismo aeróbio enquanto que nitrato, ferro, sulfato e dióxido de carbono servem como elétrons aceptores para o metabolismo anaeróbio (USEPA, 1998).

Khan & Husain (2001) avaliaram as condições para implantação da atenuação natural monitorada em um sítio através de uma metodologia de ação corretiva baseada no risco em que cada contaminante pode causar aos pontos receptores, proposta pela American Society for Testing and Materials – ASTM (ASTM, 1995). Nas simulações da migração do benzeno na zona vadosa, concluíram que as perdas, em massa, apenas por volatilização, poderiam chegar a 87%.

Bockelmann et al. (2003) desenvolveram um trabalho no qual o objetivo principal era quantificar, de maneira confiável, os fluxos de massa de contaminantes ao longo de seções transversais pré-estabelecidas no terreno, com a finalidade de determinar as taxas de atenuação natural que estariam ocorrendo, baseando-se nos resultados dos fluxos de massa nas respectivas seções. Como os tempos médios para a completa dissolução de BTEX e PAH variam entre décadas e séculos, assumiu-se que os contaminantes na origem funcionariam como fonte contínua, com concentração inicial constante.

Lee^a & Lee^b (2003) procuraram avaliar a viabilidade do uso da atenuação natural monitorada através da quantificação das taxas de degradação intrínseca num sítio contaminado por hidrocarbonetos derivados de petróleo. A metodologia envolveu basicamente: (a) uma profunda caracterização hidrogeológica do local; (b) análises laboratoriais periódicas de águas subterrâneas; (c) estimativa das taxas de degradação através do estudo da variação temporal nos valores de concentrações obtidos; e (d) confirmação de indícios de ocorrência de biodegradação intrínseca, através da comparação entre as quantidades de aceptores de elétrons aeróbios e anaeróbios existentes, dentro e fora da área contaminada (*background*).

O fato de comprovar, através de estudos específicos do local, que o processo de atenuação natural pode estar ocorrendo, não significa que não seja necessário o uso de outras ações complementares. De fato, a técnica de ANM será tipicamente implantada em conjunto com outras medidas e intervenções diretas. Por exemplo, em se adotando medidas iniciais de controle e diminuição da massa de contaminantes na origem do vazamento, a atenuação natural pode ser suficiente para se alcançar os objetivos finais de remediação nos pontos de interesse em prazo razoável, sem a necessidade de aplicação de outras medidas complementares (USEPA, 2004).

7.3.2 - Simulação dos cenários de remediação por Atenuação Natural Monitorada

O objetivo principal desta simulação é avaliar a influência dos mecanismos atenuantes de adsorção e degradação nos resultados finais inerentes ao processo de transporte de contaminantes, assumindo-se que condições iniciais do local são favoráveis à adoção da técnica de remediação por atenuação natural monitorada.

Algumas hipóteses foram assumidas: (a) o bombeamento simulado no item 7.1 corresponde à medida inicial adotada para o controle e diminuição da massa do contaminante na origem; (b) a concentração inicial do composto é aproximadamente igual ao maior valor ainda remanescente no sítio depois de cessada a operação de bombeamento, ou seja, $C = 70$ ppm (Cenário 3); e (c) essa concentração é constante e contínua, caracterizando o longo período de dissolução da massa remanescente.

Como as velocidades de fluxo das águas subterrâneas modeladas obedecem a um estado estacionário, a escala de tempo “time steps” utilizada nas simulações pôde ser de 15 dias, sem comprometer os critérios de oscilações e dispersões numéricas ditados pelos Números de Peclet e Courant, cujos valores finais obtidos são mostrados na Tabela 7.4.

Pode-se concluir, pelos resultados, que a solução geral do problema modelado encontra-se dentro de uma faixa estável quanto a este critério.

Tabela 7.4: Valores obtidos para os Números de Peclet e Courant.

NÚMEROS DE PECKET E COURANT OBTIDOS		
PARAMETRO	VALOR MÍNIMO	VALOR MÁXIMO
Número de Peclet na direção X	0,47570000	2,08120000
Número de Peclet na direção Y	0,26270000	1,96994000
Número de Courant na direção X	0,00000000	0,96890000
Número de Courant na direção Y	0,00138400	0,97334500

Dois cenários foram criados: (a) Cenário 1 – sem atenuação; e (b) Cenário 2 - atenuação moderada, onde o valor f_{oc} é 0,001 (médio) e o tempo de meia-vida T é de 500 dias (moderado). O tempo total da simulação foi de 7.305 dias (aproximadamente 20 anos).

A Figura 7.10 ilustra a planta baixa do empreendimento, contendo a indicação dos pontos de interesse para esta simulação.

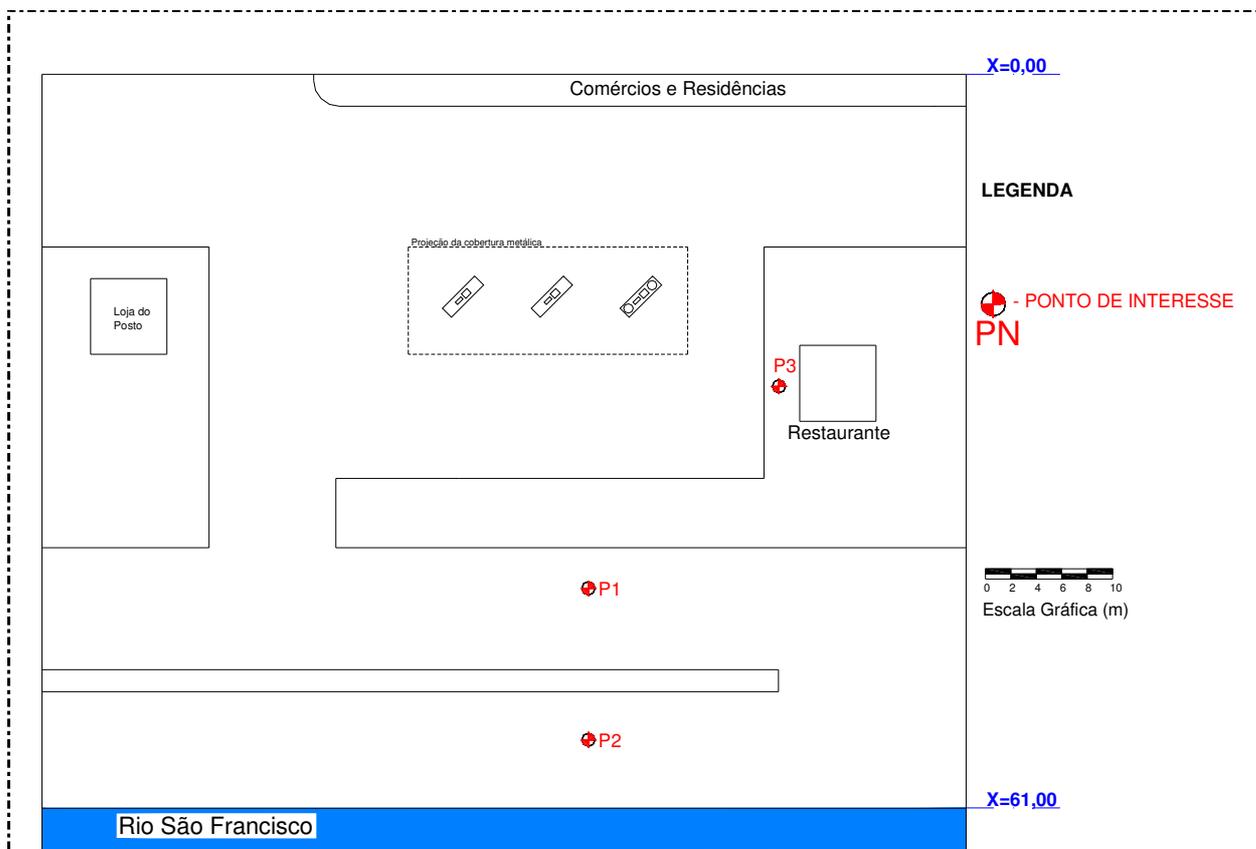


Figura 7.10: Planta baixa do empreendimento, contendo a indicação dos pontos fixos de interesse para esta simulação.

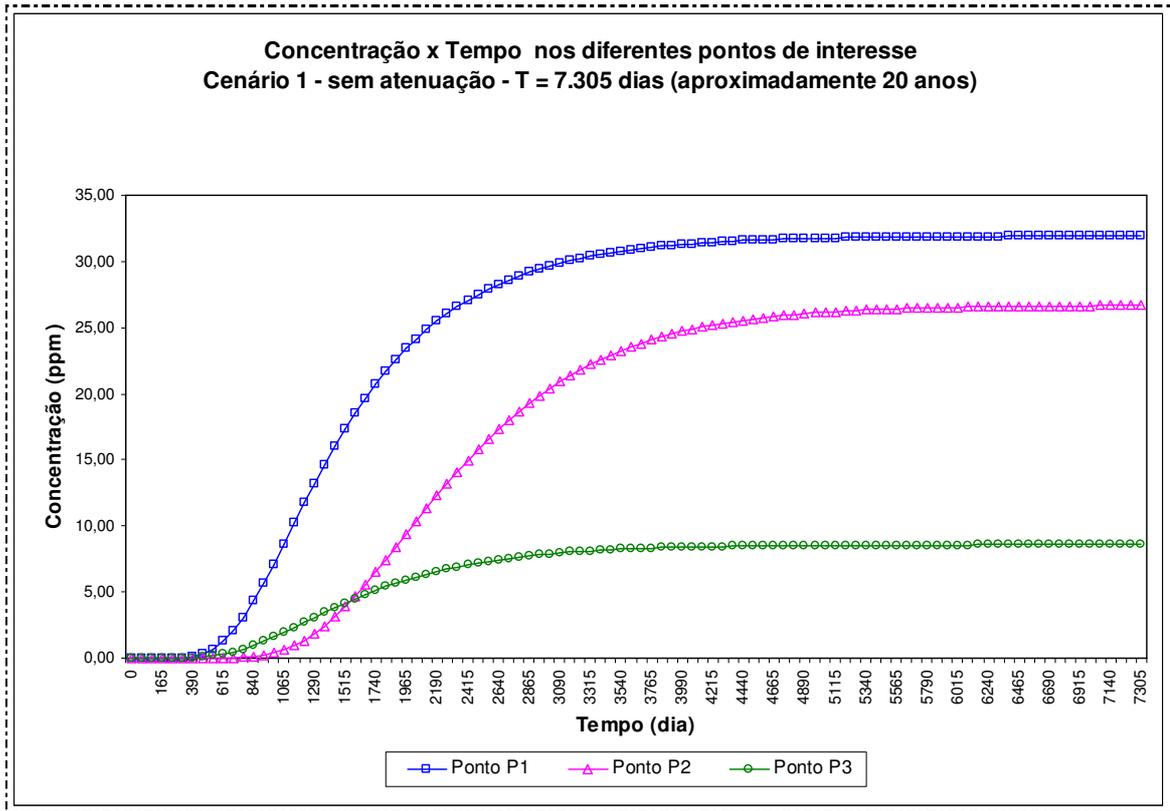
7.3.3 - Resultados

As Figuras 7.11 (a) e (b) ilustram a variação das concentrações (C) versus tempo (T) para os respectivos cenários nos pontos de interesse (P1 a P3).

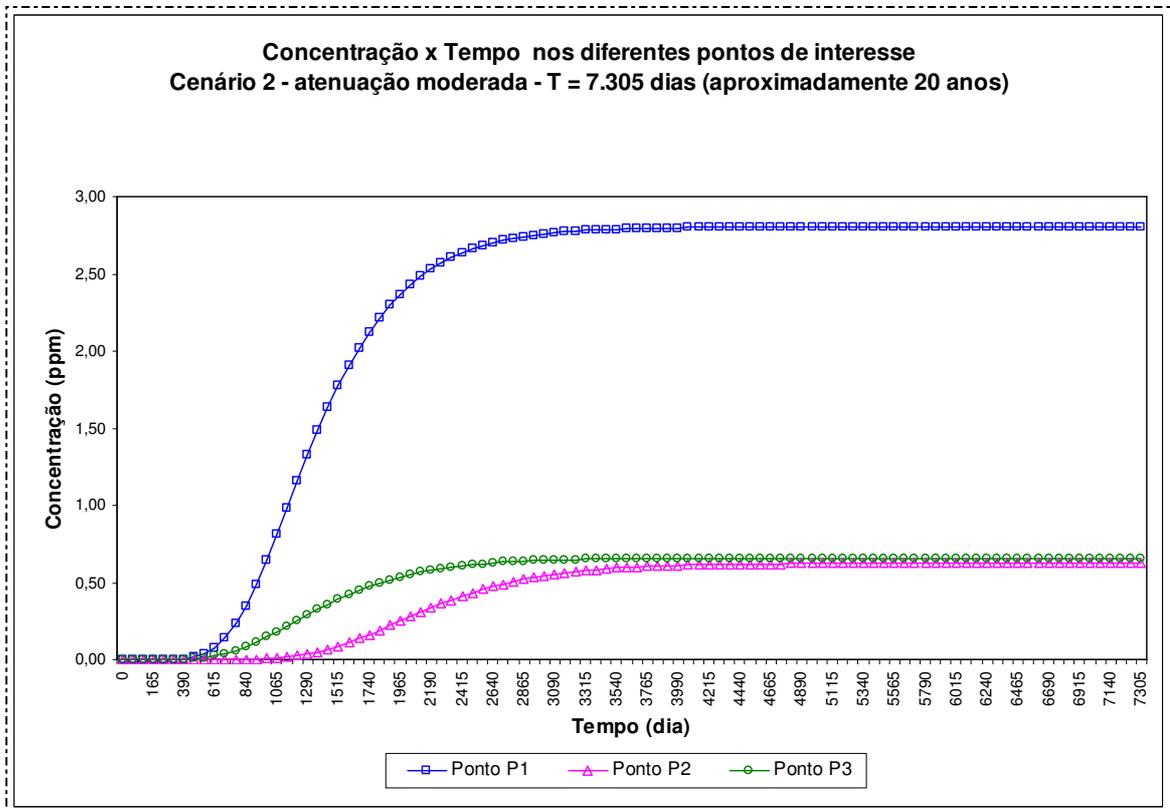
Analisando a Figura 7.11 (a), do cenário sem atenuação, nota-se que as concentrações nos pontos de interesse P1, P2 e P3 atingem valores estacionários de aproximadamente 32, 27, e 9 ppm a partir dos tempos médios decorridos de 4.000, 5.000 e 3.600 dias, respectivamente. Em todo caso, os valores finais das concentrações estariam acima do limite de intervenção para água subterrânea estabelecido pela Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental do estado de São Paulo, que é de 5 ppm (CETESB, 2001c). Em ambos os pontos P2 e P3, este limite seria atingido em aproximadamente 1.700 dias.

Já no caso da Figura 7.11 (b), do cenário com atenuação, percebe-se que as concentrações nos pontos de interesse P1, P2 e P3 atingem valores estacionários de aproximadamente 2,8, 0,6 e 0,7 ppm a partir dos tempos médios decorridos de 3.000, 3.700 e 2.500 dias, respectivamente. Portanto, em nenhum dos pontos os valores finais das concentrações estariam acima do limite de intervenção para água subterrânea estabelecido pela CETESB.

A Figura 7.12 ilustra os resultados da pluma de contaminação do benzeno para os respectivos cenários de atenuação, no tempo final da simulação, $T=7.305$ dias (aproximadamente 20 anos), sob condições estacionárias. Uma análise dos formatos apresentados pelas respectivas plumas mostra clara concordância com os resultados expressos nas Figuras 7.11 (a) e (b).



(a)



(b)

Figura 7.11 (a) e (b): Concentrações (C) versus tempo (T) para os respectivos cenários nos pontos de interesse (P1 a P3).

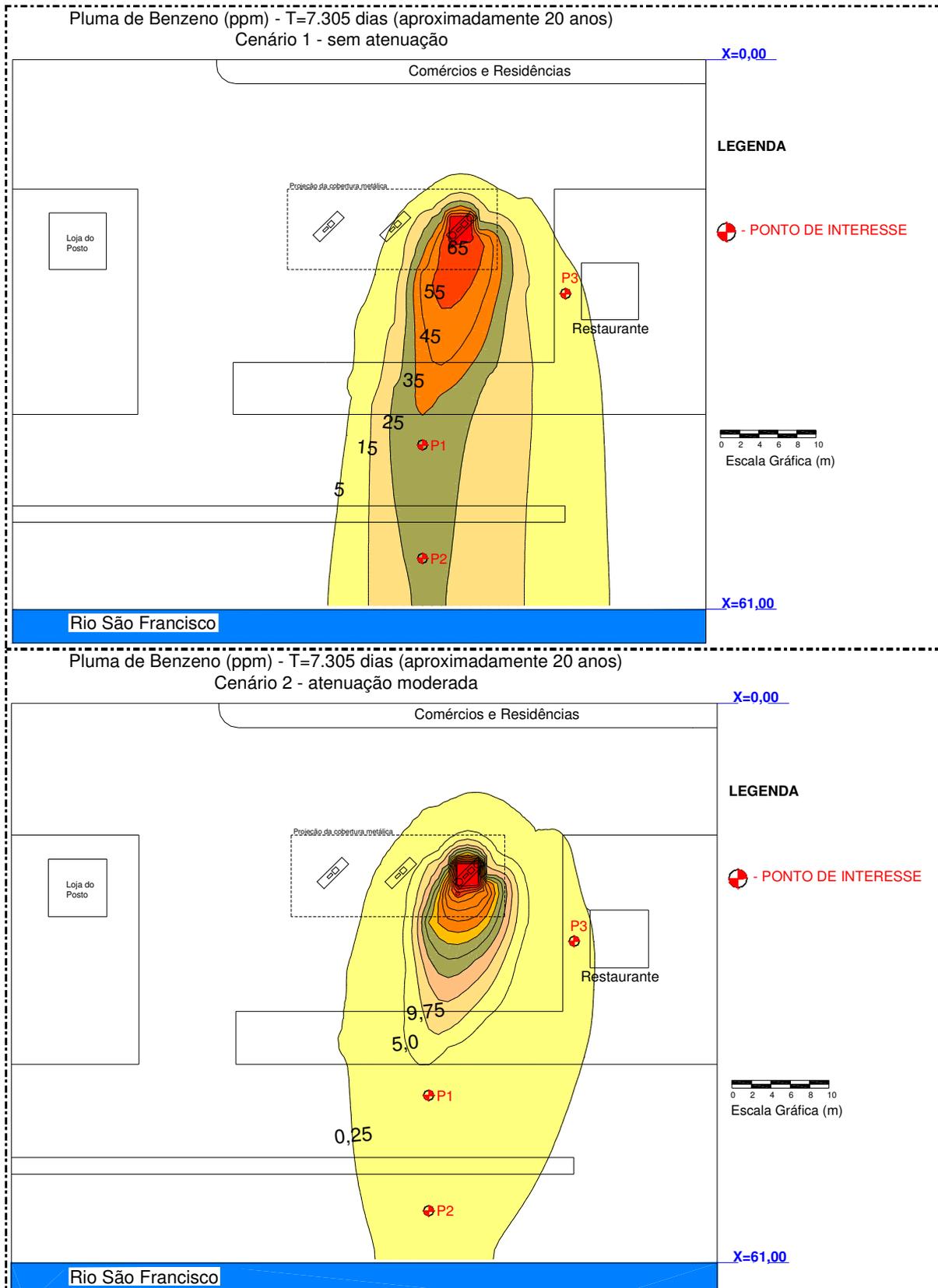


Figura 7.12: Pluma de contaminação do benzeno para os respectivos cenários de atenuação, no tempo final da simulação, T=7.305 dias (aproximadamente 20 anos), sob condições estacionárias.

7.3.4 - Considerações finais

O uso da atenuação natural monitorada como uma estratégia alternativa de remediação para o sítio contaminado em questão necessitaria de uma avaliação e quantificação do potencial para o sucesso da técnica. Se os resultados dos estudos, investigações de campo e análises laboratoriais não garantirem que a atenuação natural poderia ser suficiente, então soluções de engenharia de remediação complementares deveriam ser adotadas (MCALLISTER & CHIANG, 1994 *apud* LEE^a & LEE^b, 2003).

As simulações mostraram que, se o sítio possuir características moderadamente favoráveis ao processo de atenuação natural, então a técnica poderia ser adotada, desde que acompanhada por um plano de monitoramento extensivo e, obviamente, medidas iniciais fossem adotadas para o controle e diminuição da massa do contaminante na origem.

8 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Os principais resultados encontrados foram:

O padrão de fluxo de águas subterrâneas modelado sugeriu um direcionamento voltado para o Rio São Francisco, com comportamento variável em relação aos valores vetoriais das velocidades. Foram obtidos números entre $1,55 \times 10^{-3}$ e $6,30 \times 10^{-3}$ m/dia, estando as maiores velocidades concentradas na zona de confluência.

O estudo paramétrico do grau de influência das dimensões da superfície de interface entre a piscina de combustível originada do vazamento e o nível do aquífero freático livre indicou que tanto maiores as dimensões, maiores serão as áreas de abrangência das plumas resultantes do composto dissolvido, e também maiores serão as faixas de concentrações obtidas, devido ao favorecimento da taxa de dissolução e, conseqüentemente, o aumento de massa de contaminantes “entrando” no aquífero. Portanto, a importância da sua coerente delimitação nos trabalhos de investigação de campo.

Na avaliação da grau de influência das dispersividades longitudinal e transversal, os resultados demonstraram que, apesar do aumento de 50% e 100% nos valores utilizados para as simulações dos respectivos cenários, a abrangência da pluma e os números finais para as concentrações não alteraram significativamente.

A capacidade de adsorção dos solos influenciou notoriamente na diminuição da área de abrangência da pluma e das concentrações finais à medida que se favorecem os cenários de adsorção, aumentando os valores das frações de carbono orgânico presentes no solo, enfatizando assim a forte contribuição deste parâmetro nos resultados.

Já no caso do estudo do grau de influência da degradação, constatou-se uma discreta diminuição, quando comparada com os resultados do efeito da adsorção, na área de abrangência da pluma e nas concentrações finais, à medida que se favorecem as taxas de degradação, diminuindo o tempo de meia-vida do composto.

Considerando-se a soma dos efeitos da adsorção com degradação, as simulações mostraram que tanto a massa adsorvida ao solo quanto a dissolvida no fluido é maior quando o processo de transporte não está associado ao efeito da taxa de degradação. Este fato é explicado pela degradação ocorrido nas duas fases.

A simulação dos cenários de remediação por bombeamento simultâneo levou à conclusão que as alterações nos padrões de fluxo das águas subterrâneas podem acelerar o processo de dissolução da piscina de NAPL. Concluiu-se também que, tanto maior a mobilidade dos contaminantes, melhor o rendimento da captação por bombeamento. Por outro lado, fatores atenuantes (adsorção e degradação) causam uma diminuição na área final de abrangência da pluma, através da retenção de migração do seu centro de massa, podendo, este fato, contribuir para a formação de fase residual remanescente ao processo de bombeamento. A completa dissolução da piscina de NAPL levaria um período muito maior do que o estipulado neste estudo. Ainda assim, foi possível constatar que após cerca de 1005 dias de simulação (480 após o início da operação do sistema de bombeamento), resquícios do composto ainda estariam presentes no sítio em todos os cenários, com concentrações superiores ao limite de intervenção estabelecido pela CETESB (5 ppm) e podendo, inclusive, vir a atuar como fonte de contaminação contínua.

Para o caso da avaliação dos cenários de eficiência de contenção da vala, concluiu-se que, mesmo após o início da operação de bombeamento simultâneo dos dois poços de extração, o avanço da migração da pluma poderia não ser contido. Questões como a localização física da trincheira, as taxas de bombeamento e a ausência de fatores atenuantes na simulação poderiam influir significativamente nos resultados finais obtidos. Ainda assim, diante dos fatos, o sistema de vala de contenção implantado pode ser considerado, no mínimo, questionável em relação ao seu desempenho, eficiência e adoção.

A avaliação do uso da atenuação natural monitorada mostrou que, mesmo com ações de remediação direta na origem do vazamento, o cenário com ausência de fatores atenuantes de transporte de contaminantes resultaria em concentrações estacionárias finais nos pontos de interesses maiores do que as máximas permitidas pela CETESB. Já no cenário com atenuação moderada, percebe-se que as

concentrações nos pontos de interesse P1, P2 e P3 (Figura 7.10) atingem valores estacionários de aproximadamente 2,8, 0,6 e 0,7 ppm, respectivamente. Portanto, em nenhum dos pontos os valores finais das concentrações estariam acima do limite de intervenção para água subterrânea estabelecido pela CETESB. Logo, se o sítio possuir características moderadamente favoráveis ao processo de atenuação natural, então a técnica poderia ser adotada.

Por fim, a certeza de que a modelagem e simulação numérica do transporte de massa em meio poroso é uma poderosa ferramenta do ponto de vista de suporte às tomadas de decisões, principalmente relacionadas a impactos ambientais decorrentes da contaminação de solos e águas subterrâneas, contribuindo para que ações de cunho ecológico sejam tomadas baseadas numa fundamentação física e matemática do fenômeno a ser estudado.

Sugere-se, para futuras pesquisas envolvendo o tema aqui trabalhado, estudos que abordem: (i) Monitoramento contínuo dos poços do caso em questão ao longo de um intervalo de 365 dias com análises da variação do padrão de fluxo hidrogeológico e do transporte de massa; (ii) Coleta de água e sedimentos do sítio para estudo e quantificação dos processos de atenuação natural dos contaminantes por adsorção e degradação e (iii) Estudos que retratem o comportamento da dissolução nas águas subterrâneas dos contaminantes a partir das fases livre e residual resultantes de um vazamento de combustíveis.

9 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANP - AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS. Resolução ANP nº21, de 25 de Outubro de 2004. Estabelece a especificação do óleo diesel utilizado como padrão nos ensaios de consumo de combustível e emissões veiculares ANP.

ASTM - AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. **E1739-95**: Standard Guide for Risk-Based Corrective Action Applied at Petroleum Release Sites. Estados Unidos da América, 1995. 53 p.

AZAMBUJA, Eduardo; CANCELIER, Dione B.; NANNI, Arthur S. **Contaminação dos solos por LNAPL: discussão sobre diagnóstico e remediação**. In: II Simpósio de Prática de Engenharia Geotécnica da Região Sul, 2000.

BOCKELMANN, Alexander; ZAMFIRESCU, Daniela; PTAK, Thomas; GRATHWOH, Peter; TEUTSCH, Georg. Quantification of mass fluxes and natural attenuation rates at an industrial site with a limited monitoring network: a case study. **Journal of Contaminant Hydrology**, v 60, p 97– 121, 2003.

CETESB - COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL. **Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas**. 2. ed. São Paulo, 2001(b). 389 p.

CETESB - COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL. **Relatório de estabelecimento de Valores Orientadores para Solos e Águas Subterrâneas no Estado de São Paulo**. São Paulo, 2001(c). 232 p.

CETESB - COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL. **Relação de Áreas Contaminadas**. São Paulo, 2005. Disponível em: <http://www.cetesb.sp.gov.br/Solo/areas_contaminadas/relacao_areas.asp>. Acesso em: 08 mar. 2005

CETESB - COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL. **Procedimento para a Identificação de Passivos Ambientais em Estabelecimentos com Sistema de Armazenamento Subterrâneo de Combustíveis (SASC)**. São Paulo. 2006.

CETREL - EMPRESA DE PROTEÇÃO AMBIENTAL S/A. **Avaliação Ambiental de Fase II do Posto Importadora Tavares**. Salvador, 2005. 34 p.

CHRYSIKOPOULOS, Constantinos V. Three-dimensional analytical models of contaminant transport from nonaqueous phase liquid pool dissolution in saturated subsurface formations. **Water Resources Research**, v 31, No. 4, p. 1137-1145, 1995.

COLE, G. Mattney. **Assessment and Remediation of Petroleum Contaminated Sites**. CRC Press, Inc. Estados Unidos da América, 1994. 359p.

CORDAZZO, Jonas. **Modelagem e simulação numérica do derramamento de gasolina acrescida de álcool em águas subterrâneas**. 2000. 120 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2000.

DOMENICO, Patrick A.; SCHWARTZ, Franklin W. **Physical and Chemical Hydrogeology**. John Wiley & Sons, Inc. New York, 1998. 494 p.

FETTER, C. W. **Contaminant Hydrogeology**. Macmillan Publishing Company. Estados Unidos da América, 1993. 458 p.

FILHO, Carlos Alberto de Carvalho; COTA, Stela Dalva Santos. Análise de sensibilidade para o parâmetro condutância na condição de contorno de tipo 3 do modelo Modflow. **Águas Subterrâneas**, v 17, 2003.

FORSYTH, P.A; SUDICKY, E. A. Discrete wellbore simulations of pump-and-treat strategies for remediation of LNAPL-contaminated aquifers. **Journal of Contaminant Hydrology**, v 31, p. 57-81, 1998.

GUIGUER, Nilson. **Poluição das Águas Subterrâneas e dos Solos Causada por Vazamentos em Postos de Abastecimento**. Waterloo Hydrogeologic, Inc. Canadá, (1996). 355 p.

GUSMÃO, Alexandre Duarte. **Águas Subterrâneas: Aspectos de Contaminação e Remediação**. Série Ciência e Tecnologia. Editora Universidade de Pernambuco. Recife, 2002. 193p.

HAZTEC - TECNOLOGIA E PLANEJAMENTO AMBIENTAL S/A. **Instalação do Sistema de Saneamento do Solo e Lençol Freático**. São Cristóvão, 2005. 40 p.

HOLMAN, H.Y.N.; JAVANDEL, I. Evaluation of transient dissolution of slightly water-soluble compounds from a light nonaqueous phase liquid poll. **Water Resources Research**, v 32, No. 4, p. 915-923, 1996.

KHAN, Faisal I.; HUSAIN, Tahir. Risk-based monitored natural attenuation - a case study. **Journal of Hazardous Materials**, v 85, p 243–272, 2001.

KHAN, Faisal I.; HUSAIN, Tahir. Evaluation of a petroleum hydrocarbon contaminated site for natural attenuation using “RBMNA” methodology. **Environmental Modeling & Software**, v 18, p 179-194, 2003.

KIM, Jeongkon; CORAPCIOGLU, M. Yavuz. Modeling dissolution and volatilization of LNAPL sources migrating on the groundwater table. **Journal of Contaminant Hydrology**, v. 65, p. 137-158, 2003.

KRAHN, John. **Seepage Modeling with SEEP/W. An Engineering Methodology**. 1. ed. Geo-Slope International Ltd. Calgary, Alberta, Canada, 2004a. 393p.

KRAHN, John. **Transport Modeling with CTRAN/W. An Engineering Methodology**. 1. ed. Geo-Slope International Ltd. Calgary, Alberta, Canada, 2004b. 171p.

LEE^a, Jin-Yong; LEE^b, Kang-Kun. Viability of natural attenuation in a petroleum-contaminated shallow sandy aquifer. **Environmental Pollution**, v 126, p 201–212, 2003.

LEITE. C.B.B. **Aspectos Hidrogeológicos na Disposição de Resíduos Sólidos**. In: Curso sobre Disposição de Resíduos. São Paulo, 1996. 13 p.

PARKER, J.C.; ISLAM, M. Inverse modeling to estimate LNAPL plume release timing. **Journal of Contaminant Hydrology**, v. 45, p. 303-327, 2000.

SRS - SYRACUSE RESEARCH CORPORATION. **Environmental Fate Data Base. Biodeg**. Disponível em: < <http://www.syrres.com/esc/efdb.htm>>. Acesso em: 30 jan. 2006.

SUTHERSAN, Suthan S. **Remediation Engineering: Design Concepts**. CRC Press, Inc. Estados Unidos da América, 1997. 362p.

TUCCI, Carlos Eduardo M. **Modelos Hidrológicos**. s.l. Editora da Universidade Federal do Rio Grande do Sul. 1995.

USEPA - UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. **Bioscreen Natural Attenuation Decision Support System: User's Manual**. Version 1.3. EPA/600/R-96/087. Washington D.C., ago. 1996.

USEPA - UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. **Bioplume III Natural Attenuation Decision Support System: User's Manual**. Version 1.0. EPA/600/R-98/010. Ohio, ago. 1998.

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

USEPA - UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. Office of Solid Waste and Emergency Response. **MEMORANDUM**. Washington, D.C. Dez. 2005. Disponível em: <http://www.epa.gov/swerust1/cat/ca_05_34.pdf>. Acesso em: 12 jan. 2006.

USEPA - UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. **EPA On Line Tools for Site Assessment Calculation**. Disponível em: <http://www.epa.gov/athens/learn2model/part-two/onsite/afuel_onsite.htm>. Acesso em: 12 jan. 2006a.

USEPA - UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. **EPA On Line Tools for Site Assessment Calculation**. Disponível em: <http://www.epa.gov/athens/learn2model/part-two/onsite/ach_onsite.htm>. Acesso em 12 jan. 2006b.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)