

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

INSTITUTO DE PESQUISAS HIDRÁULICAS

USO DE UMA ABORDAGEM ESTOCÁSTICA PARA A AVALIAÇÃO
DO RISCO À SAÚDE HUMANA DEVIDO À INGESTÃO
DE ÁGUA SUBTERRÂNEA CONTAMINADA

JÚLIO GOMES

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Recursos Hídricos
e Saneamento Ambiental da Universidade Federal do Rio Grande do Sul
como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Engenharia

Porto Alegre
Dezembro/2008

APRESENTAÇÃO

Este trabalho foi desenvolvido no Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental do Instituto de Pesquisas Hidráulicas da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, sob a orientação do Prof. Nelson Oswaldo Luna Caicedo da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Desejo expressar meus agradecimentos e o mais sincero reconhecimento às seguintes instituições e pessoas:

- Ao Instituto de Pesquisas Hidráulicas (IPH) da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), por me aceitar no Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental e pela excelência e seriedade do Programa;
- Ao CNPq, pela concessão das bolsas de doutorado no País (GD) e de Doutorado Sanduíche no Exterior (SWE);
- À Universidade de Toronto, mais especificamente ao Departamento de Engenharia Civil, pela aceitação e boa acolhida durante o meu período de um ano de Doutorado Sanduíche;
- Ao Prof. Nelson Oswaldo Luna Caicedo, por me apresentar a este campo fascinante do conhecimento humano que resulta da inter-relação entre a contaminação do solo e da água subterrânea e o risco à saúde humana e por sua orientação, conversa amigável e paciência em compreender as dificuldades encontradas por mim ao longo desta jornada;
- Ao Prof. Bryan William Karney, pela orientação e amizade durante o meu Doutorado Sanduíche na Universidade de Toronto;
- Ao amigo Cristóvão S. Fernandes, por me apresentar ao Prof. Karney, permitindo assim que eu tenha vivido esta experiência única de ter estudado em uma Universidade de primeira linha no exterior;
- Aos Professores e Amigos, Cristóvão S. Fernandes, Maurício Dziejczak e Ruy F. Santana, pela carta de recomendação e, principalmente, por empenharem a sua palavra em atestar a minha capacidade para ingressar no Programa de Doutorado do IPH;
- A todos os Professores do IPH, pela convivência amistosa, pelo exemplo e pelos ensinamentos que transmitiram ao longo da minha permanência no Programa;

- Aos Funcionários do IPH, em particular à Sra. Nadir Bueno Solari, pelo atendimento sempre gentil e pelo suporte que garante o trabalho de todos;
- Aos Amigos e Colegas do Programa de Pós-Graduação do IPH pela convivência ao longo da minha permanência no Programa, principalmente durante os anos em que morei na cidade de Porto Alegre;
- Aos Professores dos Cursos de Engenharia Civil e de Mestrado em Gestão Ambiental da Universidade Positivo, pela amizade e força, principalmente nesta fase final do trabalho;
- À minha família, pela compreensão dos momentos de ausência e por, desde cedo, terem me incentivado a percorrer os caminhos do estudo;
- À família da minha esposa, que também é minha família, pela compreensão dos momentos de ausência e, principalmente, por terem me deixado casar com ela.

É importante destacar que essa lista de agradecimentos não faz justiça a todas as pessoas que me ajudaram ao longo desta jornada, que não se inicia no meu ingresso no programa de Doutorado, mas sim nas minhas primeiras experiências nos bancos escolares. Embora essas pessoas não tenham sido nominadas, eu gostaria de expressar os meus sinceros agradecimentos e que elas pudessem compartilhar comigo desta conquista, como uma forma de retribuição.

O percurso não foi fácil, como não é para todos aqueles que se aventuram em busca do título de Doutor, e nesse caminho tive uma companheira fiel de todas as horas e que a Ela dedico inteiramente esse trabalho, também como uma prova do meu Amor.

Essa conquista também é sua Bi !!!

Eu quero, do fundo do meu coração, que Você se veja em cada página, em cada linha e em cada letra desta Tese, pelo apoio, dedicação companheirismo e amor, principalmente, nos momentos mais difíceis que só nós dois sabemos e vivemos. Este momento marca o fim de uma jornada e o início de uma nova com a promessa e a esperança de que melhores dias virão, pois nós dois merecemos.

Com todo o meu Amor,
Bi

RESUMO

Este trabalho investiga o uso e a adequação de uma abordagem estocástica para o processo de avaliação de risco à saúde humana devido à ingestão de água subterrânea contaminada. A referida abordagem estocástica se caracteriza pela representação da variabilidade espacial e das incertezas associadas à condutividade hidráulica do meio poroso. A metodologia proposta é ilustrada através de um estudo de caso.

Em função da metodologia utilizada, a avaliação de risco fornece, como resultado, uma informação adicional ao tomador de decisão, uma vez que são estimados o risco e a sua chance de ocorrência. Deste modo, o conceito de risco passa a ter uma conotação mais abrangente, já que o mesmo é expresso por duas dimensões: a consequência e a sua probabilidade associada. A execução deste trabalho exigiu o estudo e o desenvolvimento dos seguintes tópicos:

- Geração de campos aleatórios bidimensionais de condutividade hidráulica, usando o método de Simulação Gaussiana Seqüencial (SGS).
- Implementação computacional de um modelo numérico de fluxo permanente unidimensional em meio poroso não saturado.
- Implementação computacional de um modelo numérico de transporte de contaminantes unidimensional em meio poroso não saturado sob regime de fluxo permanente.
- Implementação computacional de um modelo numérico de fluxo permanente tridimensional em meio poroso saturado.
- Implementação computacional de um modelo numérico de transporte de contaminantes tridimensional em meio poroso saturado sob regime de fluxo permanente.

O modelo numérico de fluxo permanente unidimensional em meio poroso não saturado foi baseado no conceito de continuidade e no uso da equação de Darcy para meios porosos, particularizados para o caso de regime permanente. O principal objetivo do desenvolvimento do referido modelo foi a obtenção de curvas de saturação e de carga hidráulica para utilização no modelo de transporte de contaminantes unidimensional em meio poroso não saturado.

O modelo numérico de transporte de contaminantes unidimensional em meio poroso não saturado foi baseado na equação clássica de advecção-difusão utilizada para descrever o transporte de contaminantes em meio poroso não saturado, particularizada para as hipóteses de regime permanente, substância não reativa, equilíbrio local e relação linear entre as concentrações na fase sólida e na fase aquosa.

O modelo numérico de fluxo permanente tridimensional em meio poroso saturado foi também baseado no conceito de continuidade e no uso da equação de Darcy para meios porosos, particularizados para o caso de regime permanente. Do ponto de vista de implementação computacional, o modelo foi desenvolvido tendo como inspiração a versão original do modelo MODFLOW. O principal objetivo do desenvolvimento do referido modelo foi a obtenção dos campos de velocidades para utilização no modelo de transporte de contaminantes tridimensional em meio poroso saturado.

O modelo numérico de transporte de contaminantes tridimensional em meio poroso saturado foi baseado na equação clássica de advecção-dispersão usada para descrever o transporte de contaminantes em meio poroso saturado, particularizada para as hipóteses de regime permanente, substância não reativa, equilíbrio local e relação linear entre as concentrações na fase sólida e na fase aquosa. O modelo computacional adota o método das características modificado (MMOC) para a solução da equação de transporte.

Os resultados obtidos pelos modelos computacionais desenvolvidos foram comparados a soluções analíticas e a soluções fornecidas por outros modelos disponíveis no mercado e o desempenho foi considerado satisfatório. O objetivo principal do desenvolvimento dos modelos foi o de se ter acesso e controle do código-fonte para criar versões que permitissem múltiplas execuções com diferentes campos de condutividade hidráulica.

O estudo de caso analisado neste trabalho se caracteriza pela existência de uma lagoa, utilizada no passado como destinação final de efluentes líquidos provenientes de uma indústria. O uso da lagoa como área de descarte dos efluentes implicou em sedimentação de finos e resíduos do processo produtivo no fundo da lagoa, gerando uma fonte de contaminação da água subterrânea. Do ponto de vista da avaliação de risco, quando considerada a água subterrânea como caminho de exposição, foram estabelecidos dois cenários: cenário 01 (estação chuvosa) e cenário 02 (estação seca).

No caso do cenário 01 (estação chuvosa), a contaminação da água subterrânea se dá através da contribuição da lagoa para o aquífero em razão da diferença de carga hidráulica entre os dois. No caso do cenário 02 (estação seca), continua existindo a contribuição da lagoa para aquífero, mas em uma área menor, em função da retração da lagoa na estação seca. A

área correspondente ao solo exposto com a retração da lagoa continua contribuindo como fonte de contaminação, mas agora devido à recarga do aquífero.

Os resultados da avaliação de risco mostraram uma probabilidade de excedência do limite para o risco de 1×10^{-6} (um caso adicional de câncer em uma população de um milhão de pessoas) de 4,9 %, para o cenário 01, e de 17,4 %, para o cenário 02, considerando-se o receptor mais afetado. Estes resultados constituem o ponto central do desenvolvimento da presente tese, já que conferem uma dimensão a mais ao risco estimado. Portanto, verificou-se que o cenário 02 representou uma condição mais crítica do que o cenário 01.

Foram comparadas duas abordagens estocásticas distintas em termos de representação da variabilidade espacial da condutividade hidráulica, considerando-se a estação chuvosa (Cenário 01). A primeira abordagem considera o meio heterogêneo e a segunda abordagem considera o meio homogêneo. Os resultados obtidos mostraram que a consideração de meio homogêneo resultou em uma subestimativa do risco em comparação à condição de meio heterogêneo.

Em comparação a outros estudos já realizados relativos à questão da integração do conceito de análise de incerteza na propagação do contaminante com a avaliação do risco à saúde humana, este estudo apresenta algumas importantes diferenças, destacando-se principalmente: a natureza do estudo de caso; a análise do fluxo e transporte no meio não saturado; a geração de simulações condicionadas dos campos aleatórios de condutividade hidráulica; e a comparação direta entre duas abordagens estocásticas distintas quanto à variabilidade espacial da condutividade hidráulica.

ABSTRACT

This work investigates the use and adequacy of a stochastic approach to the process of human health risk assessment due to ingestion of contaminated groundwater. Such approach is characterized by the representation of spatial variability and uncertainty related to the hydraulic conductivity of the porous medium. The proposed methodology is illustrated with the presentation of a real case study.

As a consequence of the proposed methodology, the risk assessment provides additional information to the decision-makers, once it estimates not only the risk but also its chance of occurrence. Thus, the concept of risk is represented by a broader meaning, as it is expressed by two dimensions: the consequence and its related probability. The present work required the study and development of the following:

- Simulation of two-dimensional random hydraulic conductivity fields, using the Sequential Gaussian Simulation Method (SMS).
- Computational implementation of a 1-dimensional steady-state unsaturated flow numerical model.
- Computational implementation of a 1-dimensional contaminant transport numerical model for the vadose zone, assuming steady-state flow.
- Computational implementation of a 3-dimensional steady-state saturated flow numerical model
- Computational implementation of a 3-dimensional contaminant transport numerical model for the saturated zone, assuming steady-state flow.

The 1-dimensional unsaturated flow model was based on the mass conservation and Darcy's equation for porous media, simplified by the steady-state flow hypothesis. The model was mainly developed to obtain saturation curves and hydraulic heads to be used as input to the contaminant transport model for the vadose zone.

The 1-dimensional contaminant transport model for the vadose zone was based on the classical advection-diffusion equation, used to describe the contaminant transport in unsaturated porous media, assuming the hypotheses of steady-state flow, non-reactive substance, local equilibrium, and linear relationship between the concentrations in solid and aqueous phases.

The 3-dimensional saturated flow model was also based on the mass conservation and Darcy's equation for porous media, simplified by the steady-state flow hypothesis. From the viewpoint of computational implementation, the model was developed taking as inspiration the MODFLOW original version. The model was mainly developed to obtain the velocity fields to be used as input to the contaminant transport model for the saturated zone.

The 3-dimensional contaminant transport model for the saturated zone was based on the classical advection-dispersion equation, used to describe contaminant transport in saturated porous media, assuming the hypotheses of steady-state flow, non-reactive substance, local equilibrium, and linear relationship between the concentrations in solid and aqueous phases. The computational model adopts the modified method of characteristics (MMOC) to solve the transport equation.

The results from the developed computational models were compared to analytical solutions and to solutions provided by other models that are free available in the market. The overall performance of the developed models was considered satisfactory. The main goal of developing the computational models was to get access and control of the source code to create versions that allow multiple runs with different hydraulic conductivity fields.

The case study is characterized by the existence of a pond, used in the past as a final destination to an industrial effluent. Such use resulted in sedimentation of fine particles and production process wastes at the bottom of the pond, originating a source of groundwater contamination. To perform the human health risk assessment, when considering only groundwater as a exposure pathway, two scenarios were established: scenario 01 (rainy season) and scenario 02 (dry season).

In the scenario 01 (rainy season) case, the groundwater contamination is due to the pond contribution to the aquifer, as a result of hydraulic head difference between them. On the other hand, in the scenario 02 (dry season) case, there is still the pond contribution to the aquifer, but in a smaller area, according to the shrinkage of the pond during the dry season. The resulting area of exposed contaminated soil continues contributing as a source of groundwater contamination, but now due to the natural aquifer recharge.

In relation to a 1×10^{-6} (one additional case of cancer in a population of one million people) risk limit, the risk assessment showed an exceedance of 4.9 % for the scenario 01, and 17.4 % for the scenario 02, considering the most affected receptor. These results represent the main goal of the present work, since they bring an additional dimension to the estimated risk. Furthermore, the results showed that the scenario 02 (dry season) is more critical than the scenario 01 (rainy season), considering again the most affected receptor.

Two different stochastic approaches in terms of representation of spatial variability of the hydraulic conductivity were compared, considering the rainy season (Scenario 01). The first approach assumes a heterogeneous porous medium, and the second one supposes a homogeneous porous medium. The results showed that the homogeneous porous medium approach led to a underestimation of the risks compared to the heterogeneous one.

Compared to previous studies that relates the uncertainty analysis of the contaminant migration to the human health risk assessment, this study presents some important differences, especially the following: the nature of the real case study; the analysis of flow and transport in the unsaturated zone; the generation of conditioned simulations of hydraulic conductivity random fields; and direct comparison between two different stochastic approaches to the representation of spatial variability of the hydraulic conductivity.

SUMÁRIO

APRESENTAÇÃO.....	i
RESUMO	iii
ABSTRACT	vi
SUMÁRIO.....	ix
LISTA DE TABELAS.....	xiii
LISTA DE FIGURAS	xv
LISTAS DE SÍMBOLOS.....	xxiv
1. INTRODUÇÃO	01
1.1 O PROBLEMA	02
1.1.1 Hipótese de Trabalho	04
1.2 JUSTIFICATIVA.....	05
1.3 OBJETIVO GERAL.....	05
1.4 METODOLOGIA	06
1.5 ESTRUTURA DA TESE.....	06
2 AVALIAÇÃO DO RISCO.....	09
2.1. CONCEITO DE AVALIAÇÃO DO RISCO	09
2.1.1 Avaliação do Risco à Segurança nas Indústrias de Processos Químicos	14
2.1.2 Avaliação do Risco à Saúde Humana	19
2.1.3 Análise Comparativa dos Processos de Avaliação do Risco à Segurança e de Avaliação do Risco à Saúde Humana	23
2.2 AVALIAÇÃO DO RISCO E A RELAÇÃO COM A CONTAMINAÇÃO DO SOLO E DA ÁGUA SUBTERRÂNEA.....	25
2.2.1 A Problemática da Contaminação do Solo e da Água Subterrânea	25
2.2.2 Enfoque: Avaliação da Migração do Contaminante	26
2.2.3 Enfoque: Avaliação do Risco à Saúde Humana	28
2.3 METODOLOGIA RBCA (<i>RISK-BASED CORRECTIVE ACTION</i>): AÇÃO CORRETIVA BASEADA NO RISCO	31
2.3.1 Descrição da Metodologia RBCA	31
2.3.2 Modelos Computacionais para a Avaliação do Risco	33
2.3.3 Modelos Computacionais para Problemas de Fluxo e Transporte em Meio Poroso Saturado e não Saturado.....	35
2.4 ANÁLISE DA INCERTEZA NA AVALIAÇÃO DO RISCO.....	35
2.4.1 Análise da Incerteza na Propagação do Contaminante.....	36

2.4.2	Análise da Incerteza na Avaliação do Risco à Saúde Humana	37
2.4.3	Aspectos Básicos do Uso do Método Monte Carlo na Avaliação do Risco.....	39
2.4.4	Integração do Conceito de Análise de Incerteza na Propagação do Contaminante à Avaliação do Risco à Saúde Humana.....	41
3.	FLUXO E TRANSPORTE EM MEIO POROSO NÃO SATURADO	52
3.1	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO FLUXO EM MEIO NÃO SATURADO.....	52
3.1.1	Condições Inicial e de Contorno para o Problema de Fluxo em Meio Não Saturado.....	57
3.1.2	Solução Numérica da Equação do Fluxo em Meio Não Saturado	58
3.2	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO TRANSPORTE EM MEIO NÃO SATURADO	61
3.2.1	Condições Inicial e de Contorno para o Problema de Transporte em Meio Não Saturado.....	65
3.2.2	Solução Numérica da Equação do Transporte em Meio Não Saturado.....	66
3.2.3	Discussão do Sistema de Equações e Método de Solução	68
3.3	AVALIAÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL DE FLUXO EM MEIO NÃO SATURADO	71
3.3.1	Análise da Sensibilidade em Relação à Discretização Espacial (Δz).....	72
3.3.2	Comparação em Relação ao Modelo VS2DTI	75
3.4	AVALIAÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL DE TRANSPORTE EM MEIO NÃO SATURADO	79
3.4.1	Discussão sobre Critérios de Estabilidade Numérica	79
3.4.2	Análise da Sensibilidade em Relação à Discretização Temporal (Δt).....	82
3.4.3	Análise da Sensibilidade em Relação à Discretização Espacial (Δz).....	86
3.4.4	Comparação entre a Solução Analítica e a Solução Numérica	90
3.5	CONCLUSÕES DO CAPÍTULO 3	94
4.	FLUXO E TRANSPORTE EM MEIO POROSO SATURADO	98
4.1	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO FLUXO EM MEIO SATURADO.....	98
4.1.1	Condições Inicial e de Contorno para o Problema de Fluxo em Meio Saturado	102
4.1.2	Solução Numérica do Problema de Fluxo em Meio Saturado.....	102
4.1.3	Cálculo das Condutâncias nas Direções x, y e z	107
4.1.3.1	Cálculo da condutância para as direções x e y (células parcialmente saturadas) ..	109
4.1.3.2	Cálculo da condutância para a direção z (células parcialmente saturadas).....	110

4.1.4	Representação dos Processos Externos ao Aquífero	111
4.1.4.1	Representação da recarga do aquífero	112
4.1.4.2	Representação da conexão hidráulica entre o aquífero e uma lagoa	113
4.1.5	Discussão do Sistema de Equações e Método de Solução	116
4.2	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO TRANSPORTE EM MEIO SATURADO	120
4.2.1	Condições Inicial e de Contorno para o Problema de Transporte em Meio Saturado	124
4.2.2	Solução Numérica do Problema de Transporte em Meio Saturado	125
4.2.2.1	Tratamento matemático do processo de advecção	130
4.2.2.2	Tratamento matemático do processo de dispersão	131
4.2.2.3	Tratamento matemático do termo de reações químicas	135
4.2.2.4	Algoritmo simplificado do método MMOC	135
4.2.3	Representação dos Processos Externos ao Aquífero	136
4.2.3.1	Representação da Contribuição da Recarga do Aquífero	137
4.2.3.2	Representação da Contribuição da Lagoa para o Aquífero	139
4.3	AVALIAÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL DE FLUXO EM MEIO SATURADO	140
4.3.1	Caso 01 – Problema Unidimensional	140
4.3.1.1	Comparação com solução analítica	141
4.3.1.2	Comparação com o modelo computacional ASMWIN	145
4.3.2	Caso 02 – Problema Bidimensional	149
4.3.3	Caso 03 – Problema Tridimensional	154
4.4	AVALIAÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL DE TRANSPORTE EM MEIO SATURADO	160
4.4.1	Caso 01 – Problema Unidimensional	160
4.4.1.1	Análise de sensibilidade à discretização espacial (Δx)	161
4.4.1.2	Análise da sensibilidade à discretização temporal (Δt)	167
4.4.2	Caso 02 – Problema Bidimensional	171
4.5	CONCLUSÕES DO CAPÍTULO 4	177
5.	GERAÇÃO DE CAMPOS ALEATÓRIOS DE CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA	183
5.1	VARIABILIDADE ESPACIAL DA CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA	183
5.2	CONCEITOS BÁSICOS SOBRE FUNÇÕES ALEATÓRIAS E GEOSTATÍSTICA	185

5.3	TÉCNICAS DE SIMULAÇÃO ESTOCÁSTICA UTILIZADAS PARA A GERAÇÃO DE CAMPOS ALEATÓRIOS DE CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA.....	195
5.3.1	Exemplos de Técnicas Multigaussianas para a Geração de Campos Aleatórios de Condutividade Hidráulica.....	199
5.3.2	Técnicas de Simulação Seqüencial para a Geração de Campos Aleatórios de Condutividade Hidráulica.....	202
5.3.3	Método de Simulação Gaussiana Seqüencial (SGS).....	204
5.3.4	Uso do Método de Monte Carlo na Simulação de Campos Aleatórios de Condutividade Hidráulica.....	207
6.	AVALIAÇÃO DO RISCO À SAÚDE HUMANA - ESTUDO DE CASO	212
6.1	DESCRIÇÃO DO PROBLEMA E DADOS BÁSICOS.....	213
6.2	GERAÇÃO DOS CAMPOS ALEATÓRIOS DE CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA	216
6.2.1	Análise Preliminar dos Dados	216
6.2.2	Geração dos Campos Aleatórios de Condutividade Hidráulica	223
6.2.3	Análise dos Resultados da Geração dos Campos Aleatórios de Condutividade Hidráulica	233
6.3	CENÁRIO 01 – AVALIAÇÃO DE RISCO PARA A ESTAÇÃO CHUVOSA ..	242
6.3.1	Análise do Problema de Fluxo na Estação Chuvosa	242
6.3.2	Análise do Problema de Transporte na Estação Chuvosa.....	246
6.3.3	Avaliação do Risco na Estação Chuvosa	251
6.4	CENÁRIO 02 – AVALIAÇÃO DE RISCO PARA A ESTAÇÃO SECA	256
6.4.1	Análise do Problema de Fluxo na Estação Seca	258
6.4.2	Análise do Problema de Transporte na Estação Seca.....	267
6.4.3	Avaliação do Risco na Estação Seca	272
6.4.4	Comparação entre os Resultados dos Cenários 01 e 02	276
6.5	ABORDAGEM ESTOCÁSTICA ALTERNATIVA.....	280
6.5.1	Análise do Problema de Fluxo na Abordagem Estocástica Alternativa.....	280
6.5.2	Análise do Problema de Transporte na Abordagem Estocástica Alternativa	282
6.5.3	Avaliação do Risco na Abordagem Estocástica Alternativa	284
6.5.4	Comparação entre os Resultados do Cenário 01 e da Abordagem Alternativa	288
7.	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	293

LISTA DE TABELAS

3.1	Valores dos parâmetros dos solos utilizados nos testes do modelo FLUX.....	71
3.2	Cenários utilizados para os testes do modelo FLUX	72
3.3	Módulo da máxima diferença entre os valores de tensão capilar calculados pelos modelos FLUX e VS2DTI (em cm).....	78
3.4	Módulo da máxima diferença entre os valores de saturação calculados pelos modelos FLUX e VS2DTI	78
3.5	Valores dos parâmetros dos solos utilizados nos testes do modelo TRANSP	82
3.6	Valores máximos teóricos de discretização temporal (Δt), em horas, para os diferentes cenários de testes do modelo TRANSP	83
4.1	Valores dos parâmetros usados nos testes de comparação entre o modelo TRANSPSAT e a solução analítica de problemas de transporte unidimensionais	162
4.2	Valores dos parâmetros utilizados nos problemas de transporte bidimensionais .	172
6.1	Propriedades físicas do solo natural à margem da lagoa.....	215
6.2	Parâmetros utilizados na simulação dos problemas de fluxo e transporte	215
6.3	Concentração média dos principais contaminantes.....	215
6.4	Valores de condutividade hidráulica, obtidos a partir de ensaios de permeabilidade	216
6.5	Resumo das estatísticas dos valores de condutividade hidráulica (em m/s)	218
6.6	Frequências de classe para os valores de condutividade hidráulica (em m/s).....	218
6.7	Ajuste da distribuição normal aos valores de condutividade hidráulica	219
6.8	Resumo das estatísticas dos logaritmos da condutividade hidráulica	221
6.9	Frequências de classe dos logaritmos da condutividade hidráulica	221
6.10	Ajuste da distribuição normal aos logaritmos da condutividade hidráulica.....	222
6.11	Escore padronizados (z) para os valores dos logaritmos da condutividade (y) ...	224
6.12	Variograma amostral obtido a partir dos escores padronizados (z) dos logaritmos da condutividade hidráulica (y).....	225
6.13	Parâmetros resultantes dos ajustes dos modelos teóricos de variograma.....	227
6.14	Parâmetros estatísticos dos escores-padrão (z) dos campos aleatórios gerados....	234
6.15	Parâmetros estatísticos dos valores de y dos campos aleatórios gerados	239
6.16	Dados básicos relativos aos contaminantes analisados no problema de transporte	247
6.17	Parâmetros utilizados para a estimativa da dose diária média (DDM)	253

6.18	Estimativas da probabilidade do RIC exceder os limites usuais para o risco incremental de câncer para o receptor 01 (cenário 01 – estação chuvosa).....	255
6.19	Resultados de ensaios para a determinação da curva de retenção do solo	263
6.20	Ajuste dos parâmetros que caracterizam a curva de retenção do solo na área de solo exposto.....	264
6.21	Estimativas da probabilidade do RIC exceder os limites usuais para o risco incremental de câncer para o receptor 01 (cenário 02 – estação seca).....	274
6.22	Grandezas relacionadas ao fluxo na região próxima ao receptor 01 (fronteira norte da lagoa).....	279
6.23	Estimativas da probabilidade do RIC exceder os limites usuais para o risco incremental de câncer para o receptor 01 (Abordagem alternativa – estação chuvosa).....	286

LISTA DE FIGURAS

2.1	Processo de Análise de Risco.....	11
2.2	Visão integrada do processo de Análise do Risco (adaptado de McCallum e Santos, 1996).....	13
2.3	O processo de avaliação do risco à segurança nas indústrias de processos químicos (adaptado de Arendt, 1990)	15
2.4	Avaliação probabilística do risco químico. Os diferentes modelos (adaptado de Paté-Cornell e Boykin,1987)	17
2.5	Paradigma americano de avaliação do risco/gerenciamento do risco à saúde humana (adaptado de Barnes, 1994)	20
2.6	Estrutura de simulação de avaliação do risco à saúde humana pela contaminação da água subterrânea (adaptado de Pelmuder, Yeh e Kastenber, 1996)	29
2.7	Modelo para a avaliação do risco à saúde humana devido à contaminação do solo e da água subterrânea (adaptado de Swartjes, 1999)	30
2.8	Fluxograma da metodologia RBCA (adaptado de ASTM, 1995).....	34
3.1	Esquema de discretização espacial para a solução do problema de fluxo de água em meio poroso não saturado.....	59
3.2	Esquema de discretização espacial para a solução do problema de fluxo de água em meio poroso não saturado. Detalhe da representação da célula n	61
3.3	Grau de saturação (Cenário 01 – recarga = 500 mm/ano).....	73
3.4	Tensão capilar (Cenário 02 – recarga = 0,0 cm/h)	73
3.5	Condutividade hidráulica relativa (Cenário 03 – recarga = 0,2 cm/h)	74
3.6	Grau de saturação (Cenário 04 – recarga = 500 mm/ano).....	74
3.7	Tensão capilar (Cenário 01 – recarga = 500 mm/ano)	76
3.8	Grau de saturação (Cenário 02 – recarga = 0,2 cm/h).....	76
3.9	Tensão capilar (Cenário 03 – recarga = 0,0 cm/h)	77
3.10	Grau de saturação (Cenário 04 – recarga = 500 mm/ano).....	77
3.11	Perfil de concentração (Cenário 01, recarga = 0,2 cm/h, $t = 15$ dias).....	84
3.12	Perfil de concentração (Cenário 02, recarga = 50 cm/ano, $t = 90$ dias)	84
3.13	Perfil de concentração (Cenário 03, recarga = 0,2 cm/h, $t = 15$ dias).....	85
3.14	Perfil de concentração (Cenário 04, recarga = 0 cm/h, $t = 720$ dias)	85
3.15	Perfil de concentração (Cenário 01, recarga = 0,2 cm/h, $t = 15$ dias).....	87
3.16	Perfil de concentração (Cenário 02, recarga = 50 cm/ano, $t = 90$ dias)	88

3.17	Perfil de concentração (Cenário 03, recarga = 50 cm/ano, t = 90 dias)	88
3.18	Perfil de concentração (Cenário 04, recarga = 0 cm/h, t = 720 dias)	89
3.19	Variação da concentração na metade da coluna ($\Delta t = 6$ h e $\alpha_L = 10$ cm)	93
3.20	Variação da concentração na metade da coluna ($\Delta t = 12$ h e $\alpha_L = 5$ cm)	93
3.21	Variação da concentração na metade da coluna ($\Delta t = 24$ h e $\alpha_L = 20$ cm)	94
4.1	Representação discretizada de um aquífero hipotético (adaptado de McDonald e Harbaugh, 1988)	103
4.2	Representação do esquema de discretização espacial centrado na célula (adaptado de McDonald e Harbaugh, 1988)	104
4.3	Representação das células (i,j,k) e das respectivas células adjacentes (McDonald e Harbaugh, 1988).....	105
4.4	Esquema para o cálculo do fluxo da célula $i,j-1,k$ para a célula i,j,k	107
4.5	Esquema para o cálculo da condutância na direção x	108
4.6	Esquema para definição da camada para aplicação da recarga (plano vertical) ...	113
4.7	Representação esquemática da interação entre o aquífero e uma lagoa.....	114
4.8	Esquema para o cálculo da condutância $CL_{i,j}$	115
4.9	Avaliação dos componentes da velocidade na interface das células (i,j,k) e $(i,j+1,k)$ na direção x para o cálculo dos coeficientes de dispersão D_{xx} , D_{xy} e D_{xz} (adaptado de Zheng, 1990).....	134
4.10	Comparação entre os resultados 1D do modelo FLUXSAT e a solução analítica (Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $q = 0,0$ cm/h).....	143
4.11	Comparação entre os resultados 1D do modelo FLUXSAT e a solução analítica (Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $q = 500$ mm/ano).....	143
4.12	Comparação entre os resultados 1D do modelo FLUXSAT e a solução analítica (Dados: $K_x = 2,70 \times 10^{-6}$ m/s; $q = 0,0$ cm/h).....	144
4.13	Comparação entre os resultados 1D do modelo FLUXSAT e a solução analítica (Dados: $K_x = 2,70 \times 10^{-6}$ m/s; $q = 500$ mm/ano).....	144
4.14	Representação esquemática da posição da lagoa em relação ao aquífero para uma discretização espacial Δx de 200 m (Caso unidimensional).....	147
4.15	Comparação entre os resultados 1D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN (Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $h(x = 2000$ m) = 9,0 m).....	147
4.16	Comparação entre os resultados 1D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN (Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $h(x = 2000$ m) = 5,0 m).....	148
4.17	Comparação entre os resultados 1D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN (Dados: $K_x = 2,70 \times 10^{-6}$ m/s; $h(x = 2000$ m) = 9,0 m).....	148

4.18	Comparação entre os resultados 1D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN (Dados: $K_x = 2,70 \times 10^{-6}$ m/s; $h(x = 2000 \text{ m}) = 5,0 \text{ m}$).....	149
4.19	Representação esquemática da posição da lagoa em relação ao aquífero para Δx igual a 200 m e Δy igual a 100 m (Caso bidimensional).....	151
4.20	Comparação entre os resultados 2D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN (Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $K_y/K_x = 1,0$; $q = 0,0$ cm/h; $\Delta x = 200 \text{ m}$; $\Delta y = 100 \text{ m}$).....	151
4.21	Comparação entre os resultados 2D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN (Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $K_y/K_x = 1,0$; $q = 500$ mm/ano; $\Delta x = 40 \text{ m}$; $\Delta y = 20 \text{ m}$).....	152
4.22	Comparação entre os resultados 2D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN (Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $K_y/K_x = 0,1$; $q = 0,00$ cm/h; $\Delta x = 40 \text{ m}$; $\Delta y = 20 \text{ m}$).....	152
4.23	Comparação entre os resultados 2D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN (Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $K_y/K_x = 0,1$; $q = 500$ mm/ano; $\Delta x = 200 \text{ m}$; $\Delta y = 100 \text{ m}$).....	153
4.24	Representação esquemática (em planta) do modelo numérico usado nos testes relacionados aos problemas de fluxo tridimensional em meio poroso saturado para o aquífero com geometria irregular.....	155
4.25	Representação esquemática (em planta) da distribuição espacial da condutividade hidráulica (K_x) para a configuração de <u>aquífero heterogêneo</u> usada nos testes relacionados aos problemas de fluxo tridimensional.....	156
4.26	Comparação dos resultados 3D dos modelos FLUXSAT e <i>Groundwater</i> <i>Vistas</i> (Condições: geometria regular, aquífero homogêneo).....	156
4.27	Comparação dos resultados 3D dos modelos FLUXSAT e <i>Groundwater</i> <i>Vistas</i> (Condições: geometria regular, aquífero homogêneo por camadas).....	157
4.28	Comparação dos resultados 3D dos modelos FLUXSAT e <i>Groundwater</i> <i>Vistas</i> (Condições: geometria regular, aquífero heterogêneo).....	157
4.29	Comparação dos resultados 3D dos modelos FLUXSAT e <i>Groundwater</i> <i>Vistas</i> (Condições: geometria irregular, aquífero homogêneo).....	158
4.30	Comparação dos resultados 3D dos modelos FLUXSAT e <i>Groundwater</i> <i>Vistas</i> (Condições: geometria irregular, aquífero homogêneo por camadas).....	158
4.31	Comparação dos resultados 3D dos modelos FLUXSAT e <i>Groundwater</i> <i>Vistas</i> (Condições: geometria irregular, aquífero heterogêneo).....	159

4.32	Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (<u>Condições:</u> $L = 500$ m; $v = 0,1$ m/dia; $\alpha_L = 1$ m; $D = 0,1$ m ² /dia; $\Delta t = 45,63$ dias; $R = 1$)	163
4.33	Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (<u>Condições:</u> $L = 500$ m; $v = 0,1$ m/dia; $\alpha_L = 10$ m; $D = 1,0$ m ² /dia; $\Delta t = 45,63$ dias; $R = 1$)	163
4.34	Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (<u>Condições:</u> $L = 500$ m; $v = 0,1$ m/dia; $\alpha_L = 50$ m; $D = 5,0$ m ² /dia; $\Delta t = 5,70$ dias; $R = 1$)	164
4.35	Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (<u>Condições:</u> $L = 500$ m; $v = 1,0$ m/dia; $\alpha_L = 1$ m; $D = 1,0$ m ² /dia; $\Delta t = 5,70$ dias; $R = 2$)	164
4.36	Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (<u>Condições:</u> $L = 500$ m; $v = 1,0$ m/dia; $\alpha_L = 10$ m; $D = 10,0$ m ² /dia; $\Delta t = 5,70$ dias; $R = 2$)	165
4.37	Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (<u>Condições:</u> $L = 500$ m; $v = 1,0$ m/dia; $\alpha_L = 50$ m; $D = 50,0$ m ² /dia; $\Delta t = 1,43$ dias; $R = 2$)	165
4.38	Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (<u>Condições:</u> $L = 500$ m; $\Delta x = 50$ m; $v = 0,1$ m/dia; $\alpha_L = 1$ m; $D = 0,1$ m ² /dia; $R = 1$)	168
4.39	Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (<u>Condições:</u> $L = 500$ m; $\Delta x = 50$ m; $v = 0,1$ m/dia; $\alpha_L = 10$ m; $D = 1,0$ m ² /dia; $R = 1$)	168

4.40	Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $\Delta x = 50$ m; $v = 0,1$ m/dia; $\alpha_L = 50$ m; $D = 5,0$ m ² /dia; $R = 1$).....	169
4.41	Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $\Delta x = 50$ m; $v = 1,0$ m/dia; $\alpha_L = 1$ m; $D = 1,0$ m ² /dia; $R = 2$).....	169
4.42	Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $\Delta x = 50$ m; $v = 1,0$ m/dia; $\alpha_L = 10$ m; $D = 10,0$ m ² /dia; $R = 2$).....	170
4.43	Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $\Delta x = 50$ m; $v = 1,0$ m/dia; $\alpha_L = 50$ m; $D = 50,0$ m ² /dia; $R = 2$).....	170
4.44	Localização da fonte de contaminação nos testes de transporte bidimensional....	173
4.45	Comparação dos resultados dos modelos TRANPSAT e <i>Groundwater Vistas</i> na solução de problemas bidimensionais de transporte (Condições: $K = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $\alpha_L = 5$ m; $f_{oc} = 0$ %).....	173
4.46	Comparação dos resultados dos modelos TRANPSAT e <i>Groundwater Vistas</i> na solução de problemas bidimensionais de transporte (Condições: $K = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $\alpha_L = 50$ m; $f_{oc} = 0$ %).....	174
4.47	Comparação dos resultados dos modelos TRANPSAT e <i>Groundwater Vistas</i> na solução de problemas bidimensionais de transporte (Condições: $K = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $\alpha_L = 50$ m; $f_{oc} = 1,006$ %).....	175
4.48	Comparação dos resultados dos modelos TRANPSAT e <i>Groundwater Vistas</i> na solução de problemas bidimensionais de transporte (Condições: $K = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $\alpha_L = 5$ m; $f_{oc} = 0$ %).....	176
5.1	Relação entre a Covariância ($C(\mathbf{h})$) e o Variograma ($\gamma(\mathbf{h})$) (adaptado de Marsily, 1986).....	189
5.2	Comparação entre modelos teóricos de variograma.....	191
5.3	O problema de estimativa pontual (adaptado de Marsily, 1986)	193
5.4	Comparação entre técnicas de geração de campos aleatórios (adaptado de Wen e Gómez-Hernández (1998)).....	197

6.1	Pontos de amostragem e valores da condutividade hidráulica (em log K) (eixo horizontal – direção Oeste-Leste; eixo vertical – direção Sul - Norte).....	217
6.2	Variação da condutividade hidráulica em relação à direção Oeste – Leste	217
6.3	Variação da condutividade hidráulica em relação à direção Sul – Norte.....	218
6.4	Histograma de frequências relativas dos valores de condutividade hidráulica	219
6.5	Comparação entre as frequências amostrais e as probabilidades teóricas para os valores de condutividade hidráulica.....	220
6.6	Afastamento do ajuste perfeito entre as frequências amostrais e as probabilidades teóricas para os valores de condutividade hidráulica	220
6.7	Histograma de frequências relativas dos logaritmos da condutividade hidráulica	221
6.8	Comparação entre as frequências amostrais e as probabilidades teóricas para os logaritmos da condutividade hidráulica	222
6.9	Afastamento do ajuste perfeito entre as frequências amostrais e as probabilidades teóricas para os logaritmos da condutividade hidráulica	223
6.10	Variogramas amostrais obtidos a partir dos escores padronizados (z) dos logaritmos da condutividade hidráulica (y)	226
6.11	Ajustes dos modelos teóricos ao variograma amostral (alternativa 01).....	227
6.12	Ajustes dos modelos teóricos ao variograma amostral (alternativa 02).....	227
6.13	Ajustes dos modelos teóricos ao variograma amostral (alternativa 03).....	228
6.14	Ajustes dos modelos teóricos ao variograma amostral (alternativa 04).....	228
6.15	Comparação dos modelos teóricos usados na geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica	229
6.16	Realizações 001, 023, 077, 135 e 189 da variável y (logaritmo da condutividade hidráulica) obtidas a partir do modelo gaussiano do variograma teórico.....	231
6.17	Realizações 001, 023, 077, 135 e 189 da variável y (logaritmo da condutividade hidráulica) obtidas a partir do modelo esférico do variograma teórico.....	232
6.18	Representação esquemática dos valores de média e variância dos campos aleatórios de z gerados pelos modelos gaussiano e esférico	235
6.19	Variação da média de z em função do número de campos aleatórios gerados.....	236
6.20	Variação da variância de z em função do número de campos aleatórios gerados.....	237

6.21	Comparação entre o modelo teórico do variograma e os variogramas relativos a alguns campos aleatórios gerados.....	238
6.22	Variação da média de y em função do número de campos aleatórios gerados	240
6.23	Variação da variância de y em função do número de campos aleatórios gerados.....	241
6.24	Modelo conceitual da área de estudo para a estação chuvosa – plano xy	243
6.25	Modelo conceitual da área de estudo para a estação chuvosa (corte vertical na área da lagoa)	243
6.26	Valores médios de níveis (em m) do lençol freático para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a estação chuvosa.....	244
6.27	Valores de níveis (em m) do lençol freático para a realização 146 de fluxo em meio poroso saturado para a estação chuvosa.....	245
6.28	Desvio-padrão dos níveis (em m) do lençol freático para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a estação chuvosa.....	245
6.29	Valores médios de velocidade de Darcy (em m/dia) para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a estação chuvosa.....	246
6.30	Evolução das concentrações médias de benzeno (em ppb) para os horizontes de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos no cenário 01 (estação chuvosa).....	249
6.31	Variação da concentração média de benzeno para o receptor 01 no cenário 01 (estação chuvosa).....	250
6.32	Distribuição de freqüências de concentração de benzeno para o receptor 01 (5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos) no cenário 01 (estação chuvosa).....	250
6.33	Distribuição de freqüências de concentração de benzeno para o receptor 01 para o horizonte de tempo de 30 anos no cenário 01 (estação chuvosa).....	252
6.34	Distribuições de freqüências dos valores de risco incremental de câncer para o receptor 01 no cenário 01 (estação chuvosa).....	254
6.35	Probabilidade de excedência dos valores de risco incremental de câncer para o receptor 01 no cenário 01 (estação chuvosa).....	254
6.36	Superfícies de risco médio para os horizontes de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos, obtidas para o cenário 01 (estação chuvosa)	257
6.37	Representação esquemática da lagoa para o cenário 02 – estação seca	259
6.38	Valores médios de níveis (em m) do lençol freático para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a estação seca	260
6.39	Valores de níveis (em m) do lençol freático para a realização 146 de fluxo em meio poroso saturado para a estação seca	261

6.40	Desvio-padrão dos níveis (em m) do lençol freático para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a estação seca	261
6.41	Valores médios de velocidade de Darcy (m/dia) para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a estação seca	262
6.42	Modelo conceitual da área de estudo – corte vertical na área da lagoa (cenário 02 – estação seca)	265
6.43	Representação esquemática das células junto à região da lagoa para o cenário 02 (estação seca), destacando a condição de fluxo no meio não saturado na área de solo contaminado exposto, obtida para a realização (simulação) 194	266
6.44	Variação da concentração de entrada do contaminante no aquífero para a região de solo exposto	269
6.45	Evolução das concentrações médias de benzeno (em ppb) para os horizontes de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos no cenário 02 (estação seca)	271
6.46	Variação da concentração média de benzeno para o receptor 01 no cenário 02 (estação seca)	272
6.47	Distribuição de freqüências de concentração de benzeno para o receptor 01 (5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos) no cenário 02 (estação seca)	272
6.48	Distribuição de freqüências de concentração de benzeno para o receptor 01 para o horizonte de tempo de 30 anos no cenário 02 (estação seca)	273
6.49	Distribuição de freqüências dos valores de risco incremental de câncer para o receptor 01 no cenário 02 (estação seca)	273
6.50	Probabilidade de excedência dos valores de risco incremental de câncer para o receptor 01 no cenário 02 (estação seca)	274
6.51	Superfícies de risco médio para os horizontes de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos, obtidas para o cenário 02 (estação seca)	275
6.52	Comparação da <u>curva inferior</u> de RIC para o receptor 01 nos cenários 01 e 02	276
6.53	Comparação da <u>curva superior</u> de RIC para o receptor 01 nos cenários 01 e 02	276
6.54	Comparação das distribuições de freqüências de concentração de benzeno (receptor 01) para 30 anos nos cenários 01 e 02	277
6.55	Comparação das distribuições de freqüências da contribuição da lagoa para o aquífero em termos de fluxo nos cenários 01 e 02	278

6.56	Valores médios de níveis (em m) do lençol freático para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a abordagem alternativa (estação chuvosa).....	281
6.57	Valores médios de velocidade de Darcy (em m/dia) para as simulações de fluxo em meio poroso saturado, segundo a abordagem alternativa (estação chuvosa).....	281
6.58	Evolução das concentrações médias de benzeno (em ppb) para os horizontes de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos na abordagem alternativa (estação chuvosa).....	283
6.59	Variação da concentração média de benzeno para o receptor 01 na abordagem alternativa (estação chuvosa).....	284
6.60	Distribuição de freqüências de concentração de benzeno para o receptor 01 (5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos) na abordagem alternativa (estação chuvosa).....	284
6.61	Distribuição de freqüências de concentração de benzeno para o receptor 01 para o horizonte de tempo de 30 anos na abordagem alternativa (estação chuvosa)....	285
6.62	Distribuições de freqüências dos valores de risco incremental de câncer para o receptor 01 na abordagem alternativa (estação chuvosa).....	285
6.63	Probabilidade de excedência dos valores de risco incremental de câncer para o receptor 01 na abordagem alternativa (estação chuvosa).....	286
6.64	Superfícies de risco médio para os horizontes de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos, obtidas na abordagem alternativa (estação chuvosa).....	287
6.65	Comparação das distribuições de freqüências de concentração de benzeno (receptor 01) para 30 anos no cenário 01 e na abordagem alternativa.....	288
6.66	Comparação da <u>curva inferior</u> de RIC para o receptor 01 no cenário 01 e na abordagem alternativa.....	289
6.67	Comparação da <u>curva superior</u> de RIC para o receptor 01 no cenário 01 e na abordagem alternativa.....	290

LISTA DE SÍMBOLOS

Δt	discretização temporal [T]
Δx	discretização espacial na direção x [L]
Δy	discretização espacial na direção y [L]
Δz	discretização espacial na direção z [L]
Ω	espaço amostral
$\sum_{k=1}^N R_k$	termo representando as reações químicas [ML^3T^{-1}]
α	parâmetro do modelo de van Genuchten [L^{-1}]
α_L	dispersividade longitudinal do meio poroso [L]
α_T	coeficiente de dispersividade transversal [L]
$\gamma(\cdot)$	função semivariograma
λ	taxa constante de reação para reações químicas de primeira ordem [T^{-1}]
λ_i	ponderador de uma combinação linear
ϕ	porosidade [L^3L^{-3}]
ϕ_e	porosidade efetiva [L^3L^{-3}]
ϕ_i	fonte/sumidouro externo [$ML^{-3} T^{-1}$]
ψ	altura de pressão (ou tensão) capilar [L]
ρ_b	densidade aparente do solo [ML^{-3}]
ρ_s	densidade dos grãos do solo [ML^{-3}]
θ	conteúdo volumétrico de água [L^3L^{-3}]
θ_m	conteúdo volumétrico para a saturação máxima [L^3/L^3]
θ_r	conteúdo volumétrico para a saturação residual [L^3/L^3]
AT	tempo sobre o qual se considera a média na avaliação de risco [T]
BW	peso corporal [M]
C	concentração do contaminante dissolvido na água subterrânea [ML^{-3}]
C_a	concentração na fase dissolvida na fonte de contaminação [ML^{-3}] (capítulo 6)
C_e	concentração de contaminante dissolvido em fonte/sumidouro externos [ML^{-3}]
C_m^{t+1}	concentração média para uma célula m no instante de tempo $t+1$ [ML^3]
C_m^t	concentração média para uma célula m no instante de tempo t^* [ML^3]
C_0	concentração inicial do contaminante na água subterrânea [ML^{-3}] (capítulo 3)
	concentração na fonte do contaminante na fase dissolvida [ML^{-3}] (capítulo 4)

C_s	concentração na fase sólida [ML^{-3}] (capítulo 3)
	concentração mássica na fase sólida [MM^{-1}] (capítulo 4)
	concentração mássica na fase sólida na fonte de contaminação [MM^{-1}] (capítulo 6)
CL	condutância entre a lagoa e o aquífero [L^2T^{-1}]
CoV(X,Y)	covariância entre as variáveis aleatórias X e Y
Cr	número de Courant [-]
Cx	condutância na direção x [L^2T^{-1}]
CW	concentração do contaminante na água [ML^3]
Cy	condutância na direção y [L^2T^{-1}]
Cz	condutância na direção z [L^2T^{-1}]
D	coeficiente de dispersão hidrodinâmica [L^2T^{-1}]
D*	D/R [L^2T^{-1}]
Dc	coeficiente de dispersão hidrodinâmico corrigido [L^2T^{-1}]
DDM	exposição (dose) diária média [$MM^{-1}T^{-1}$]
D _m	coeficiente de difusão molecular do contaminante na fase aquosa [L^2T^{-1}]
E[X]	valor esperado da variável aleatória X
ED	duração da exposição [T]
EF	freqüência de exposição [TT^{-1}]
I	taxa de recarga aplicada a uma célula [LT^{-1}]
IR	taxa de ingestão diária de água [L^3T^{-1}]
K(θ)	condutividade hidráulica no meio poroso não saturado [LT^{-1}]
K	condutividade hidráulica no meio saturado [LT^{-1}]
K _d	coeficiente de distribuição [L^3M^{-1}]
K _L	condutividade hidráulica vertical do material do leito [LT^{-1}]
K _{oc}	coeficiente de partição em relação ao carbono orgânico [L^3M^{-1}]
K _{ow}	coeficiente de partição entre octanol e água [-]
K _p	coeficiente de partição [L^3M^{-1}]
K _s	condutividade hidráulica para o meio poroso saturado [LT^{-1}]
K _{s_i}	condutividade hidráulica saturada da camada i [LT^{-1}]
K _x	condutividade hidráulica saturada na direção x [LT^{-1}]
K _y	condutividade hidráulica saturada na direção y [LT^{-1}]
K _z	condutividade hidráulica saturada na direção z [LT^{-1}]
L	comprimento da coluna de solo [L]
L	fator de drenança (<i>leakage factor</i>) [T^{-1}]
M	parâmetro do modelo de van Genuchten [-]

N	parâmetro do modelo de van Genuchten [-]
N_k	número de observações no intervalo k
P(.)	probabilidade
Pe	número de Peclet [-]
QL	fluxo entre a lagoa e o aquífero [L^3T^{-1}]
QR	recarga aplicada a uma célula [L^3T^{-1}]
R	fator de retardo [-]
RIC	risco incremental de câncer (casos adicionais de câncer por população exposta)
S	grau de saturação de água no solo [L^3L^{-3}]
S'	fonte/sumidouro externo [$L^3T^{-1}L^{-3}$]
S_s	armazenamento específico [L^{-1}]
S_m	grau de saturação máximo [L^3L^{-3}]
S_r	grau de saturação residual [L^3L^{-3}]
SF	fator de declividade ou <i>slope-factor</i> [$MM^{-1}T^{-1}$] ⁻¹
V	velocidade no nível do poro [LT^{-1}]
VAR[X]	variância da variável aleatória X
W'	fonte/sumidouro externo [$L^3T^{-1}L^{-3}$]
Z(.)	função aleatória
\hat{Z}_0	valor estimado do atributo Z na posição \mathbf{x}_0
a	amplitude (<i>range</i>) do variograma teórico [L]
c	patamar (<i>sill</i>) do variograma teórico [-]
$c(\psi)$	declividade da relação funcional entre ψ e θ para o meio poroso não saturado [L^{-1}]
e_L	espessura do leito da lagoa [L]
f_{oc}	fração de carbono orgânico presente na matriz do solo [MM^{-1}]
h	carga hidráulica [L]
\mathbf{h}	distância euclidiana entre os pontos \mathbf{x} e $\mathbf{x} + \mathbf{h}$ [L]
h_L	nível da superfície livre da lagoa [L]
i	índice da célula do modelo conceitual 3D do aquífero livre na direção y
j	índice da célula do modelo conceitual 3D do aquífero livre na direção x
k	índice da célula do modelo conceitual 3D do aquífero livre na direção z
$k_r(\psi)$	condutividade hidráulica relativa [-]
$m(\mathbf{x})$	valor esperado de x [dimensões de \mathbf{x}]
n_i	cosseno diretor na direção i
$ncam$	número de camadas do modelo conceitual 3D do aquífero livre
$ncol$	número de colunas do modelo conceitual 3D do aquífero livre

n_{lin}	número de linhas do modelo conceitual 3D do aquífero livre
q	fluxo volumétrico de água (velocidade de Darcy) [LT^{-1}]
q	recarga [LT^{-1}]
\tilde{q}	velocidade de Darcy [LT^{-1}]
q_e	fluxo volumétrico de fonte/sumidouro externos por unidade de volume do aquífero [T^{-1}]
t	tempo [T]
t^*	instante de tempo intermediário entre t e $t+1$ [T]
v	velocidade real do fluxo [LT^{-1}]
v^*	v/R [LT^{-1}]
v_i	velocidade média na escala do poro na direção do eixo x_i [LT^{-1}]
v_x	velocidade real do fluxo na direção x [LT^{-1}]
v_y	velocidade real do fluxo na direção y [LT^{-1}]
v_z	velocidade real do fluxo na direção z [LT^{-1}]
x	Eixo horizontal [L]
\mathbf{x}	vetor localização em um espaço n -dimensional
x_i	distância ao longo do eixo coordenado x_i [L]
y	Eixo horizontal, perpendicular ao eixo x [L]
y	logaritmo natural da condutividade hidráulica
z	Eixo vertical, paralelo à direção de ação da força gravitacional [L]
z	cota em relação a um plano de referência arbitrado [L]
z	variável normal padronizada
$z(x_i)$	observação do atributo z na posição x_i
D/Dt	operador derivada material em relação ao tempo [T^{-1}]
$\partial/\partial t$	operador diferencial em relação ao tempo [T^{-1}]
$\frac{\partial}{\partial x_i}$	operador diferencial em relação ao espaço na direção do eixo x_i [L^{-1}]
$\text{div}(\cdot)$	operador divergente no espaço [L^{-1}]
$\text{erfc}(\cdot)$	função erro complementar
$\text{exp}(\cdot)$	função exponencial
$\text{grad}(\cdot)$	operador gradiente no espaço [L^{-1}]
$\text{log}(\cdot)$	função logaritmo natural
$\ \cdot \ $	operador norma matemática

1. INTRODUÇÃO

A importância da água subterrânea está relacionada à sua maior disponibilidade em relação aos recursos hídricos superficiais. Segundo estimativas apresentadas em Maidment (1993), considerando-se o volume de água doce no planeta, 68,6% apresenta-se sob a forma de gelo acumulado nas regiões polares; 30,1 % encontra-se acumulado em aquíferos; e somente 1,3% constitui as fases superficial e atmosférica do ciclo hidrológico.

Destaca-se ainda que o volume disponível sob a forma de vazão nos rios representa somente 0,006% da água doce do planeta. Soma-se a este fato, a contaminação crescente dos recursos hídricos superficiais, o que diminui ainda mais o volume de água disponível para o consumo humano proveniente das águas de superfície.

Em relação à contaminação da água subterrânea, embora se possa argumentar que esta seja mais difícil de ocorrer em comparação à contaminação das águas de superfície, deve-se ter em mente que, uma vez contaminada, o processo de remediação da água subterrânea é bem mais complexo, caro e demorado.

A contaminação da água subterrânea pode ter origens diversas, sendo atualmente as mais comuns aquelas relacionadas com as atividades industriais, domésticas e agrícolas. Fetter (1999) apresenta uma classificação das fontes de contaminação, onde pode-se destacar as seguintes fontes relacionadas direta ou indiretamente às atividades industriais:

- fossas sépticas (águas residuais);
- poços de injeção (resíduos perigosos);
- aterros sanitários;
- vazamentos de tanques de armazenamento (produtos de petróleo, químicos agrícolas e outros químicos);
- vazamentos de oleodutos, gasodutos e coletores de esgotos;
- acidentes com caminhões e trens utilizados no transporte de substâncias químicas.

Uma das características importantes dos problemas relacionados à contaminação do solo e da água subterrânea é a sua natureza de longo termo. Como consequência, os processos de remediação em geral demandam muito tempo e consomem muitos recursos. Portanto, a decisão de se remediar ou não um determinado local contaminado deve ser criteriosa, procurando-se, deste modo, evitar o desperdício de recursos.

Neste contexto, destaca-se o uso da avaliação do risco à saúde humana como uma ferramenta auxiliar na tomada de decisão em relação à adoção de processos de remediação de locais contaminados.

O uso da avaliação de risco tem se tornado cada vez mais freqüente no estabelecimento de padrões de risco do que, por exemplo, a utilização de padrões de qualidade de água. Isto tem ocorrido porque o conceito de risco permite associar ao problema de contaminação da água subterrânea questões como a possibilidade ou não de contato com a contaminação e quais as conseqüências deste contato.

1.1 O PROBLEMA

O problema analisado nesta tese pode ser entendido, do ponto de vista genérico, sob a ótica da contaminação da água subterrânea e de como esta pode ser vinculada ao conceito de avaliação do risco à saúde humana. Do ponto de vista específico, o problema pode ser traduzido pelo estudo de caso, que fornece o roteiro sobre o qual foi estruturada a presente tese.

O problema avaliado sob o enfoque genérico se caracteriza pelo fato da água subterrânea ser um recurso natural de extrema importância. Dentre os diversos usos, pode-se destacar a irrigação, o abastecimento doméstico e o abastecimento industrial. Além disso, há que se considerar o seu papel no ciclo hidrológico e no meio ambiente.

Como mencionado anteriormente, uma das principais características do problema da contaminação da água subterrânea, em comparação à contaminação das águas de superfície, reside na dificuldade da detecção e no tempo e recursos necessários para a sua remediação.

A tomada de decisão sobre a necessidade de remediação exige, em grande parte dos casos, a modelagem do fluxo e transporte de contaminantes para os locais contaminados com os objetivos de auxiliar no processo decisório e de fornecer informações que ajudem na concepção do sistema de remediação. Como ocorre em diversas áreas dos recursos hídricos, duas abordagens distintas podem ser utilizadas: determinística ou estocástica.

A abordagem determinística, via de regra, envolve um processo de calibração dos modelos de fluxo e transporte, a partir de dados observados em campo, produzindo uma solução única para o problema. Já na abordagem estocástica, os dados observados em campo, são utilizados para definir um padrão estatístico para as variáveis dos modelos de fluxo e transporte.

A abordagem estocástica se baseia na obtenção de várias soluções equiprováveis para o problema, a partir do uso de alguma técnica de simulação estocástica. Portanto, uma diferença fundamental entre as duas abordagens é a de que a estocástica não fornece uma solução única, mas sim uma distribuição de soluções. Como consequência, esta abordagem tem sido preferida quando existe a necessidade de representação das incertezas em relação às variáveis que caracterizam o problema em análise.

No caso da contaminação da água subterrânea é fundamental reconhecer as incertezas associadas a diferentes fatores, relacionados tanto ao meio físico, quanto ao contaminante. Um aspecto bastante importante refere-se à variabilidade espacial e à incerteza associadas à condutividade hidráulica, parâmetro fundamental para a determinação da solução do problema de fluxo e, por consequência, do problema de transporte de contaminantes em meio poroso.

Como extensão do raciocínio apresentado, tem-se que as concentrações estimadas para os contaminantes são fatores importantes na avaliação do risco à saúde humana, portanto os resultados também são influenciados pelas considerações relativas ao meio físico neste tipo de avaliação. A necessidade de representação das incertezas relacionadas às diferentes etapas do processo de avaliação de risco é destacada e sugerida por diversos autores.

O problema analisado sob o enfoque específico se caracteriza pela existência de uma lagoa utilizada no passado como destinação final de efluentes líquidos provenientes de uma indústria, resultando na sedimentação de finos e resíduos do processo produtivo no fundo da lagoa e, conseqüentemente, gerando uma contaminação residual que atinge o aquífero através da conexão hidráulica entre o aquífero e a lagoa, bem como, através da recarga que atravessa regiões de solo contaminado e acaba atingindo o aquífero.

Na caracterização da área de estudo foram realizadas campanhas para a determinação da condutividade hidráulica do meio poroso. Novamente, destaca-se que os valores de condutividade podem ser interpretados segundo uma abordagem determinística ou segundo uma abordagem estocástica.

Na abordagem determinística, o conjunto de valores observados em campo pode ser utilizado para definir um valor único, característico para todo o aquífero. Já na abordagem estocástica, esse mesmo conjunto de valores pode ser utilizado para definir a estrutura espacial da condutividade hidráulica para área de estudo, permitindo representar a sua variabilidade espacial através da geração e possibilitando a geração de campos aleatórios de condutividade.

Esta última abordagem constitui a abordagem utilizada na presente tese, na qual a avaliação do risco à saúde humana devido à contaminação da água subterrânea para o estudo

de caso é desenvolvida, procurando-se levar em consideração a variabilidade espacial e as incertezas associadas à condutividade hidráulica.

Para os leitores mais familiarizados com metodologias de avaliação de risco, como, por exemplo, a metodologia RBCA (Ação Corretiva Baseada no Risco – *Risk-Based Corrective Action*), descrita em ASTM (1995, 1998 e 2000), a modelagem aqui apresentada poderia ser interpretada como relativa à uma avaliação do nível 3 (*Tier 3*), em razão da complexidade e do detalhamento dos modelos computacionais utilizados na representação do fluxo e do transporte dos contaminantes.

1.1.1 Hipótese de Trabalho

Segundo Gil (2002), em algumas pesquisas, as hipóteses são implícitas e em outras são formalmente expressas. Geralmente, naqueles estudos em que o objetivo é descrever determinado fenômeno ou as características de um grupo, as hipóteses não são enunciadas formalmente. Nesses casos, as hipóteses envolvem uma única variável e o mais freqüente é indicá-la no enunciado dos objetivos da pesquisa.

A pesquisa proposta pode ser enquadrada dentro deste contexto, já que a questão básica formulada trata do problema de estimar a possível concentração de um contaminante em um determinado local com o objetivo de subsidiar uma avaliação do risco à saúde humana. De qualquer forma, em respeito ao método científico e em função do problema formulado, podem ser colocadas diversas hipóteses relativas tanto aos valores de concentração, em termos de contaminação da água subterrânea, quanto aos possíveis valores de risco, em termos de avaliação do risco à saúde humana. Por exemplo:

Hipótese básica: O risco incremental de câncer devido à ingestão de água subterrânea contaminada por um determinado indivíduo é superior a um limite pré-estabelecido.

Destaca-se que a referida hipótese é colocada em termos bastante genéricos, mas que pode ser particularizada para condições mais específicas dentro de um estudo de caso de avaliação do risco à saúde humana. Na realidade, a metodologia aqui adotada não procura responder a hipótese básica do modo como formulada. A abordagem estocástica permite que a hipótese básica seja reformulada e seja escrita novamente da seguinte forma:

Hipótese básica (reformulada): A probabilidade do risco incremental de câncer devido à ingestão de água subterrânea contaminada por um determinado indivíduo ser superior a um limite pré-estabelecido é igual a um dado valor.

A hipótese básica escrita desta forma permite formular a questão fundamental que serve de orientação para o desenvolvimento da pesquisa, expressa como a seguir:

Questão fundamental: Qual a probabilidade do risco incremental de câncer devido à ingestão de água subterrânea contaminada por um determinado indivíduo ser superior a um limite pré-estabelecido?

1.2 JUSTIFICATIVA

Dentro deste contexto, insere-se o desenvolvimento desta pesquisa, na qual se pretende apresentar um estudo de caso de avaliação do risco à saúde humana devido à ingestão de água subterrânea contaminada, procurando-se conferir ao problema analisado uma abordagem estocástica que permita estimar uma distribuição de frequência para os valores de risco.

Esta abordagem estocástica é baseada na representação da variabilidade espacial da condutividade hidráulica, através da geração de campos aleatórios de condutividade, possibilitando o estabelecimento de várias soluções teoricamente equiprováveis para os problemas de fluxo e transporte nos meios porosos saturado e não saturado e, por extensão, a definição de distribuições de frequência de valores de risco.

Do ponto de vista de um processo de tomada de decisão, o desenvolvimento deste trabalho permite associar aos resultados da avaliação de risco, a informação da chance de que determinado limite pré-estabelecido para o risco seja superado ou não, constituindo informação auxiliar para o processo decisório.

1.3 OBJETIVO GERAL

O objetivo geral da presente tese é o de investigar o uso e a adequação de uma abordagem estocástica para o processo de avaliação de risco à saúde humana devido à ingestão de água subterrânea contaminada.

A referida abordagem estocástica se caracteriza pela representação da variabilidade espacial e das incertezas associadas à condutividade hidráulica do meio poroso. A metodologia proposta é ilustrada através de um estudo de caso.

Destaca-se, como uma consequência da realização do objetivo proposto, o fato da avaliação de risco proporcionar, como resultado, uma informação adicional ao tomador de decisão, uma vez que são estimados o risco e a sua chance de ocorrência. Deste modo, o conceito de risco passa a ter uma conotação mais abrangente, já que o mesmo passa a ser expresso por duas dimensões: a consequência e a sua probabilidade associada.

1.4 METODOLOGIA

Do ponto de vista de procedimentos metodológicos, a presente tese pode ser caracterizada pelas seguintes etapas.

Etapa 01 – Revisão bibliográfica;

Etapa 02 – Desenvolvimento de modelos computacionais de fluxo e transporte em meio poroso não saturado;

Etapa 03 – Desenvolvimento de modelos computacionais de fluxo e transporte em meio poroso saturado;

Etapa 04 – Definição do modelo conceitual relativo ao estudo de caso;

Etapa 05 – Análise da estrutura espacial da condutividade hidráulica para a área em estudo;

Etapa 06 – Geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica para a área em estudo;

Etapa 07 – Solução do problema de fluxo nos meios saturado e não saturado;

Etapa 08 – Solução do problema de transporte nos meios saturado e não saturado;

Etapa 09 – Avaliação do risco à saúde humana por ingestão de água subterrânea contaminada.

1.5 ESTRUTURA DA TESE

É importante ressaltar, para a orientação do leitor, que a estrutura da presente tese difere do padrão normalmente adotado para teses desenvolvidas em programas de pós-graduação nas universidades brasileiras. Esta decisão foi tomada em razão da amplitude dos assuntos aqui tratados. Optou-se por uma estrutura onde os capítulos são, na sua maioria, independentes entre si.

Este capítulo inicial, Capítulo 01, visa oferecer ao leitor uma visão ampla do trabalho desenvolvido, procurando embasá-lo do ponto de vista científico e metodológico.

O Capítulo 02 trata de uma breve revisão sobre conceitos relacionados à avaliação do risco à saúde humana de modo geral e, em particular, ao problema de contaminação da água subterrânea analisado sob a ótica de avaliação de risco.

O Capítulo 03 discute os problemas de fluxo e transporte em meio poroso não saturado, apresentando uma revisão de conceitos básicos que serviu de subsídio para a elaboração dos modelos computacionais FLUX e TRANSP. Os referidos modelos tratam respectivamente do fluxo permanente unidimensional em meio poroso não saturado e do transporte unidimensional em meio poroso não saturado sob fluxo permanente. Este capítulo apresenta também os testes efetuados para a verificação dos modelos FLUX e TRANSP.

O Capítulo 04 discute os problemas de fluxo e transporte em meio poroso saturado, apresentando uma revisão de conceitos básicos que serviu de subsídio para a elaboração dos modelos computacionais FLUXSAT e TRANSPSAT. Os referidos modelos tratam respectivamente do fluxo permanente tridimensional em meio poroso saturado e do transporte tridimensional em meio poroso saturado sob fluxo permanente. Neste capítulo são também apresentados os testes efetuados para a verificação dos modelos FLUXSAT e TRANSPSAT.

O Capítulo 05 apresenta uma breve revisão sobre conceitos básicos relacionados à variabilidade espacial da condutividade hidráulica e à sua influência sobre os problemas de fluxo e transporte de contaminantes em meio poroso, bem como, sobre técnicas usualmente utilizadas na geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica e que permitem associar o conceito de incerteza aos resultados de modelos de fluxo e transporte concebidos, em geral, dentro de uma abordagem determinística.

O Capítulo 06 trata do estudo de caso de avaliação do risco à saúde humana devido à ingestão de água subterrânea contaminada e que serve de roteiro sobre o qual foi estruturada a presente tese, como já mencionado. São apresentadas: a área de estudo; a análise da estrutura espacial da condutividade hidráulica; a geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica; a solução dos problemas de fluxo e transporte para a área em estudo; e a avaliação do risco à saúde humana.

Destaca-se, novamente, o caráter estocástico conferido à avaliação de risco pela representação da variabilidade espacial e das incertezas associadas à condutividade hidráulica. O estudo de caso é desenvolvido através da análise e comparação de dois cenários distintos: cenário 01 (estação chuvosa) e cenário 02 (estação seca), procurando identificar o cenário mais crítico em termos de valores de risco.

Adicionalmente, apresenta-se uma abordagem estocástica alternativa para o cenário 01 (estação chuvosa), no qual a condutividade hidráulica também é tratada como uma variável aleatória, mas o meio poroso é considerado como homogêneo. Esta abordagem alternativa é apresentada com o objetivo de comparar os resultados obtidos para o cenário 01, quando se considera ou não a variabilidade espacial da condutividade hidráulica. A justificativa principal para esta comparação é de que alguns modelos computacionais existentes permitem a análise estocástica dos valores de condutividade hidráulica, porém sob a hipótese de que o meio poroso é homogêneo.

Finalmente, o Capítulo 07 apresenta conclusões e recomendações para estudos futuros. Procurou-se estabelecer a presente tese como um texto único, sem a inclusão de apêndices, permitindo ao leitor uma leitura sem muitas interrupções. Os códigos dos modelos computacionais desenvolvidos ao longo da tese não são incluídos para evitar a produção de um volume ainda maior do que o aqui apresentado.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ASTM. American Society for Testing and Materials. *Risk-based corrective action applied at petroleum release sites*. ASTM E 1739-95, 1995.
- ASTM. American Society for Testing and Materials. *Remediation of ground water by natural attenuation at petroleum release sites*. ASTM E 1943-98, 1998
- ASTM. American Society for Testing and Materials. *Standard guide for risk-based corrective action*. ASTM E 2081-00, 2000.
- FETTER, C. W. *Contaminant hydrogeology*. 3. ed. Upper Saddle River : Prentice Hall, 1999. 500 p.
- GIL, A. C. *Como elaborar projetos de pesquisa*. 4. ed. São Paulo : Atlas, 2002. 175 p.
- MAIDMENT, D. R. (edit.) *Handbook of hydrology*. New York : McGraw-Hill, 1993. páginação irregular.

2. AVALIAÇÃO DO RISCO

Este capítulo tem por objetivo apresentar uma breve revisão bibliográfica sobre conceitos relacionados à avaliação do risco à saúde humana decorrente da contaminação do solo e da água subterrânea por produtos derivados do petróleo.

Apresentam-se inicialmente definições relativas à avaliação do risco, procurando caracterizá-la como uma das etapas dentro do processo de análise do risco. São abordados basicamente dois tipos de avaliação do risco: avaliação do risco à segurança e avaliação do risco à saúde humana. A apresentação é feita no intuito de procurar identificar semelhanças e destacar diferenças entre os referidos tipos de avaliação do risco.

Finalmente, são abordados tópicos mais especificamente relacionados à contaminação do solo e da água subterrânea por produtos de petróleo e à utilização do conceito de avaliação do risco nos problemas relacionados a este tipo de contaminação.

2.1 CONCEITO DE AVALIAÇÃO DO RISCO

A idéia básica deste item é fornecer definições que permitam a diferenciação entre os conceitos de análise do risco e avaliação do risco. O próprio termo “risco” apresenta diferentes conotações, dependendo da circunstância em que é empregado. A palavra risco, como encontrada em Webster (1967), apresenta como definições:

- alguém ou algo que cria ou oferece chance de perigo ou resultados adversos;
- possibilidade de perda, dano, desvantagem ou destruição;
- produto da quantidade que pode ser perdida pela respectiva probabilidade de perda.

Observa-se, portanto, que o conceito de risco pode ser utilizado em pelo menos três conotações distintas: a qualidade de uma substância/ação; probabilidade de ocorrência de uma perda ou resultado adverso; e produto entre as conseqüências de um resultado adverso e a probabilidade associada a este resultado adverso. Em termos dos processos de análise e avaliação do risco, esta última conotação representa melhor o conceito da palavra risco, como pode ser constatado a partir das definições apresentadas a seguir.

Hansson (1989) destaca que a palavra risco tem dois sentidos principais estreitamente relacionados. Em primeiro lugar, pode-se referir à probabilidade estimada de que um evento

indesejável ocorra. Em um sentido mais amplo, a palavra risco pode ser usada em referência a uma situação onde é possível, mas não certo, que um evento indesejável ocorra. Neste conceito mais genérico, o conceito de risco inclui a probabilidade e a característica do evento indesejável. O risco é, no mínimo, um conceito bidimensional envolvendo a possibilidade de um resultado adverso e a incerteza sobre a ocorrência, instante ou magnitude deste resultado adverso (Covello e Merkhofer, 1993).

A noção de risco geralmente compreende dois (ou três) elementos. Após a identificação de cenários de falhas ou danos (o que pode acontecer de errado?), as questões são: quais são as possíveis conseqüências? E quais são as suas probabilidades de ocorrência? O risco pode ser então quantificado por uma distribuição de probabilidades dos possíveis resultados, ou pelos momentos de uma distribuição de probabilidade (Paté-Cornell, 1996). Esta última definição, além de focar o conceito de risco, também pode ser entendida como uma sugestão de procedimento para a realização de uma avaliação do risco.

Em uma abordagem mais ampla e filosófica, Crawford-Brown (1999) discute o conceito de risco segundo três diferentes escolas de pensamento: escola objetiva (*Objective school*), escola subjetiva (*Subjective school*) e escola psicológica (*Psychologicistic school*).

O risco é definido, segundo a escola objetiva, como a combinação da freqüência com a qual um efeito adverso ocorre e a severidade de tal efeito. O risco aumenta com o aumento da freqüência e/ou severidade. A noção de freqüência e severidade pode variar de pessoa para pessoa e, desta forma, o risco inclui uma medida desta variabilidade.

Segundo a escola subjetiva, o risco é uma condição mental caracterizada pela incerteza sobre o futuro, por uma sensação de que este futuro pode reservar resultados indesejáveis e de que esses resultados podem não ser completamente controlados, etc... À medida que esta condição mental torna-se mais severa, o risco é aumentado.

Finalmente, segundo a escola psicológica, o risco é definido como o conjunto de todos os resultados adversos que uma pessoa racionalmente pode acreditar serem possíveis de ocorrer quando ela é confrontada com a evidência sobre a freqüência, severidade e variabilidade dos efeitos.

É importante destacar, considerando-se as definições apresentadas, que o conceito de risco engloba diferentes dimensões. É fundamental para a diferenciação entre análise do risco e avaliação do risco compreender que o conceito de risco contém uma dimensão técnica, mas envolve também outras dimensões, como, por exemplo, as dimensões psicológica e social.

São apresentadas a seguir algumas definições, procurando-se estabelecer uma diferenciação entre os conceitos “análise do risco” e “avaliação do risco”. Existe na literatura técnica pertinente ao assunto, uma relativa falta de uniformidade em relação à utilização

destes termos. Por exemplo, o mesmo processo, descrito em NRC (1983) como avaliação do risco, é tratado em Molak (1997) como análise do risco.

A relação entre a análise do risco e a avaliação do risco será tratada aqui conforme apresentada em Louvar e Louvar (1998) e segundo representada na Figura 2.1. Portanto, entende-se que o conceito de análise do risco é mais amplo do que o conceito de avaliação do risco, porque engloba não somente o mesmo, mas também o gerenciamento do risco e a comunicação do risco. Destaca-se que a Figura 2.1 deve ser entendida como um instrumento didático para a visualização dos três grandes componentes do processo de análise do risco. Contudo, a mesma não representa as especificidades relativas a cada componente, bem como as relações de interface entre eles.



Figura 2.1 Processo de Análise do risco

A análise do risco inclui a análise do conceito de risco e dos modos pelos quais o risco é determinado, enquanto que a avaliação do risco envolve mais o aspecto técnico e cujo esforço maior é direcionado à colocação de valores numéricos nos conceitos revelados pela análise do risco (Crawford-Brown, 1999). Novamente, percebe-se que a análise do risco representa um conceito mais abrangente do que a avaliação do risco.

Portanto, em termos de processo, pode-se inferir que a avaliação do risco tem como enfoque principal, a dimensão técnica, embora não se limite a ela, enquanto a análise do risco procura englobar todas as dimensões relativas ao conceito de risco. De acordo com Crawford-Brown (1999), a análise do risco constitui uma atividade filosófica e científica, enquanto a avaliação do risco é uma atividade puramente técnica.

É importante conceituar o gerenciamento do risco e a comunicação do risco para uma melhor compreensão do processo de análise do risco, conforme esquematizado na Figura 2.1. NRC (1983) define o gerenciamento do risco como o processo de avaliação de alternativas de ações reguladoras e de seleção entre estas diferentes alternativas. Destaca ainda que a avaliação do risco constitui uma das bases para o gerenciamento do risco.

A relação entre avaliação do risco e o gerenciamento do risco é novamente explicitada em NRC (1994), onde o gerenciamento do risco é definido como um processo pelo qual os resultados da avaliação do risco são integrados com outras informações de ordem política,

social, econômica e de engenharia para tomada de decisões sobre ações necessárias e métodos para a redução do risco.

Enquanto a avaliação do risco procura responder as questões relativas ao que pode acontecer de errado, quais as possíveis conseqüências e quais são as probabilidades de ocorrência; o gerenciamento do risco, segundo Haimes (1991), procura responder as seguintes questões: O que pode ser feito?; Quais são as opções disponíveis e quais são seus respectivos balanços em termos de custos, benefícios e riscos?; e Quais são os impactos das atuais decisões quanto ao gerenciamento do risco sobre futuras alternativas?

O gerenciamento do risco usa todas as informações obtidas durante a avaliação do risco, juntamente com outras informações de ordem técnica, econômica, ambiental, social e política para (Louvar e Louvar, 1998): avaliar alternativas; determinar a melhor ação para reduzir ou eliminar o risco; projetar um plano para implementar a ação; executar o plano; e monitorar o processo de execução para certificar-se de que os resultados desejados serão alcançados e mantidos como planejado.

NRC (1983) recomenda que a avaliação do risco seja considerada separadamente em relação ao gerenciamento do risco sob o argumento de que o gerenciamento envolve, além dos dados relativos ao risco, questões relativas a aspectos sociais, econômicos, políticos e técnicos no desenvolvimento de opções alternativas para enfrentar perigos presentes ou futuros. No entanto, reconhece que, na prática, a avaliação e o gerenciamento do risco interagem, embora analiticamente separados.

McCallum e Santos (1996) destacam que, embora o processo de análise do risco seja geralmente visto como composto por três componentes distintos: avaliação do risco, gerenciamento do risco e comunicação do risco; é útil considerar estes três componentes como uma tríade, na qual cada um possui suas características próprias, mas é inseparável dos demais. A Figura 2.2 representa uma visão mais integrada do processo de análise do risco, procurando destacar a inter-relação entre os seus componentes.

Sob o ponto de vista histórico, Covello e Mumpower (1985) apresentam uma interessante perspectiva histórica da avaliação e gerenciamento do risco, com ênfase ao período anterior ao século XX.

A comunicação do risco pode ser definida como a troca de informações entre as partes interessadas sobre a natureza, magnitude, significância ou controle de um risco. Partes interessadas incluem agências governamentais, corporações ou grupos industriais, sindicatos, a mídia, cientistas, organizações profissionais, grupos com interesses específicos, comunidades e indivíduos (Covello, 1996).

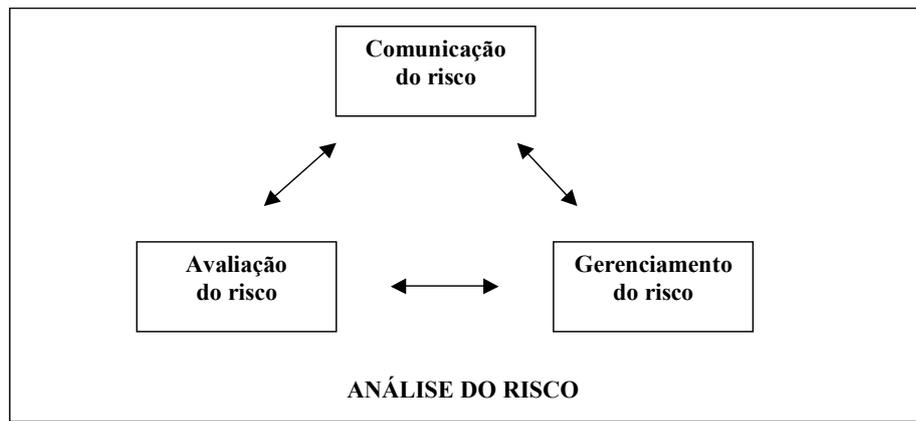


Figura 2.2 Visão integrada do processo de Análise do Risco
(adaptado de McCallum e Santos, 1996)

Os objetivos mais comuns da comunicação do risco, segundo Cox (2002) são: informar os indivíduos sobre os riscos para que eles possam tomar decisões melhor embasadas ou procurar por mais informações; influenciar pessoas a mudar comportamentos, atitudes e crenças em relação às atividades/ações perigosas e à aceitação das decisões e recomendações relativas ao gerenciamento do risco; envolver as partes afetadas no processo decisório; e facilitar a participação na resolução do conflito, na construção do consenso e na tomada de decisões coletivas em relação ao gerenciamento do risco.

O interesse na comunicação dos riscos ambientais tem se expandido rapidamente nos últimos anos. Segundo Covello (1996), este crescimento se deve a quatro razões básicas:

- aumento do número de leis que conferem ao público o direito de ser informado sobre os riscos ambientais;
- aumento do temor e da preocupação do público sobre a exposição a agentes de risco ambiental e a correspondente demanda por informações sobre o risco;
- aumento do número de informes da mídia relacionados a questões ambientais;
- crescimento dos movimentos ambientais e a correspondente perda de confiança do público nos Governos e indústrias como fontes de informações sobre riscos ambientais.

Este interesse relativamente recente sobre a comunicação do risco explica porque, nos modelos iniciais, o processo de análise do risco era representado como sendo composto basicamente pelos componentes avaliação e gerenciamento. Fischhoff (1995) apresenta uma importante revisão da história da comunicação do risco, caracterizando sua evolução através de uma seqüência de paradigmas dominantes. A comunicação do risco em seus principais aspectos é discutida em Covello (1996) e McCallum e Santos (1996).

É importante destacar que o conceito de avaliação do risco pode ser aplicado a diversos campos do conhecimento humano. Especificamente em relação à saúde humana e ao meio ambiente, Kolluru (1996) cita como principais usos: a avaliação do risco à segurança, a avaliação do risco à saúde humana e a avaliação do risco ao meio ambiente.

Na seqüência são abordados alguns aspectos relativos à avaliação do risco à segurança e a avaliação do risco à saúde humana com o objetivo de comparar os dois processos, buscando evidenciar similaridades e diferenças de enfoque.

2.1.1 Avaliação do Risco à Segurança nas Indústrias de Processos Químicos

Uma perspectiva histórica da avaliação do risco à segurança nas indústrias de processos químicos pode ser traçada a partir do apresentado em Khan e Abbasi (1998). Arendt (1990) e Montague (1990) apresentam, de forma esquemática, o processo de avaliação do risco à segurança nas indústrias de processos químicos, como apresentado na Figura 2.3. Portanto, o processo de avaliação do risco à segurança pode ser caracterizado pelas seguintes etapas: identificação dos perigos; estimativa da frequência dos acidentes; análise das conseqüências; e avaliação (quantificação) do risco.

As diferentes metodologias utilizadas para a avaliação do risco à segurança em indústrias de processos químicas recebem distintas denominações (Paté-Cornell e Boykin, 1987; Arendt, 1990; Papazoglou *et al.*, 1992; Paté-Cornell, 1996; Khan e Abbasi, 1998; Kirchsteiger, 1999a; Tixier *et al.*, 2002). No entanto, de modo geral, estas metodologias compreendem todas as etapas do processo de avaliação do risco, como estabelecidas na Figura 2.3. As diferenças encontradas referem-se às técnicas utilizadas em cada etapa do processo de avaliação do risco. Como referências, Khan e Abbasi (1998), Kirchsteiger (1999a) e Tixier *et al.* (2002) apresentam uma revisão de metodologias e técnicas de avaliação do risco aplicadas a plantas industriais.

A etapa de identificação dos perigos tem por objetivo, segundo van Sciver (1990), responder à seguinte questão: O que pode acontecer de errado? Khan e Abbasi (2001) destacam, como objetivo, a identificação das substâncias químicas e das unidades de operação que representam perigo em potencial. É a etapa mais importante do processo de avaliação do risco, já que perigos não identificados não serão quantificados, conduzindo a uma subestimativa do risco. É importante empregar os recursos necessários para esta etapa a fim de assegurar um completo entendimento dos perigos (van Sciver, 1990).

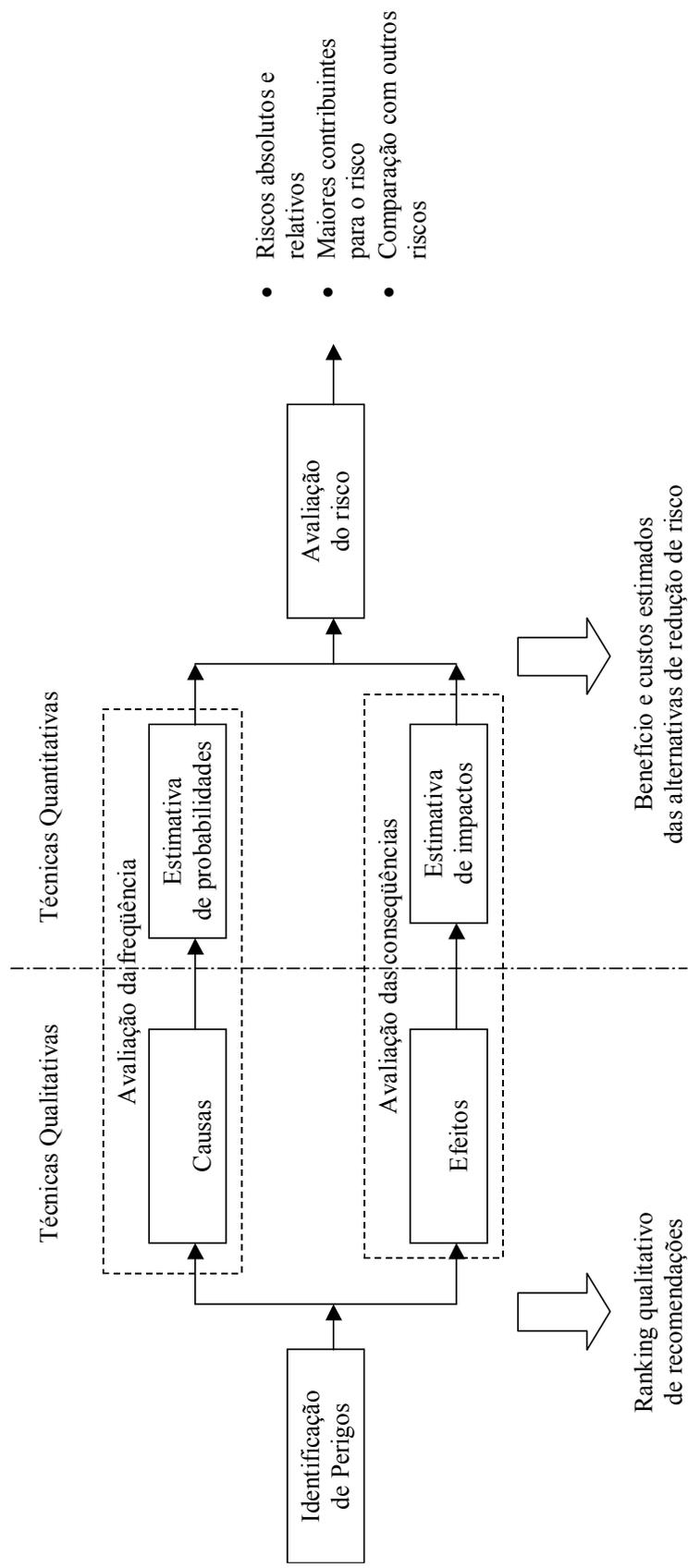


Figura 2.3 O processo de avaliação do risco à segurança nas indústrias de processos químicos (adaptado de Arendt, 1990)

O objetivo da avaliação da frequência dos acidentes é calcular a probabilidade de cada cenário de acidente. Duas fontes comuns de informação são os dados históricos e a análise de árvore de falhas (*Fault tree analysis* – FTA). Os dados históricos têm por base a experiência em acidentes do sistema, enquanto a análise da árvore de falhas é baseada na experiência em falhas dos componentes do sistema (van Sciver, 1990). Kirchsteiger (1999b) e Khan e Abbasi (1999) citam algumas bases de dados específicas sobre acidentes em indústrias nucleares e químicas.

O objetivo da análise das conseqüências é quantificar os impactos negativos de um evento. As conseqüências são normalmente mensuradas em termos de número de fatalidades, embora também possam ser medidas pelo número de pessoas atingidas ou pelos danos à propriedade (van Sciver, 1990). Khan e Abbasi (1998) citam que a análise das conseqüências envolve a avaliação das prováveis conseqüências, caso um cenário de acidente efetivamente ocorra, e destacam que as mesmas podem ser quantificadas em termos de raio do dano (raio da área na qual ocorreria o dano), do dano à propriedade e dos efeitos tóxicos (toxicidade aguda/crônica, mortalidade).

Os três tipos de efeitos que normalmente são considerados na análise das conseqüências, segundo van Sciver (1990), são os provocados por incêndios, explosões e exposição a substâncias tóxicas. Papazaglou *et al.* (1992) também tecem comentários sobre a análise das conseqüências, destacando novamente como efeitos, os incêndios e explosões, e quanto ao vazamento de substâncias químicas, comentam apenas o uso de modelos de dispersão atmosférica. A consulta a textos clássicos na área de prevenção de acidentes e segurança nas indústrias de processos químicos, tais como Lees (1996) e AIChE (2000), confirma a ênfase na análise das conseqüências relacionadas à ocorrência de incêndios, explosões e vazamentos de substâncias químicas passíveis de dispersão atmosférica.

A partir do exposto, considerando-se a ocorrência de acidentes, verifica-se que, na avaliação do risco à segurança, a atenção maior é dada às conseqüências imediatas ou de curto prazo e, em relação ao vazamento de produtos tóxicos, a principal preocupação refere-se à dispersão atmosférica de poluentes. Os efeitos de longo prazo, que são mais característicos dos casos de contaminação do solo e da água subterrânea, são tratados mais superficialmente.

Paté-Cornell e Boykin (1987) apresentam uma preocupação em relação a outros meios de exposição, além do ar, quando sugerem uma estrutura para a avaliação do risco, representada pela Figura 2.4, e destacam que, para cada tipo de vazamento, o modelo de dispersão incorpora as possíveis situações meteorológicas distintas, as características do meio e as reações químicas para avaliar a concentração em diferentes pontos no ar, água e solo.

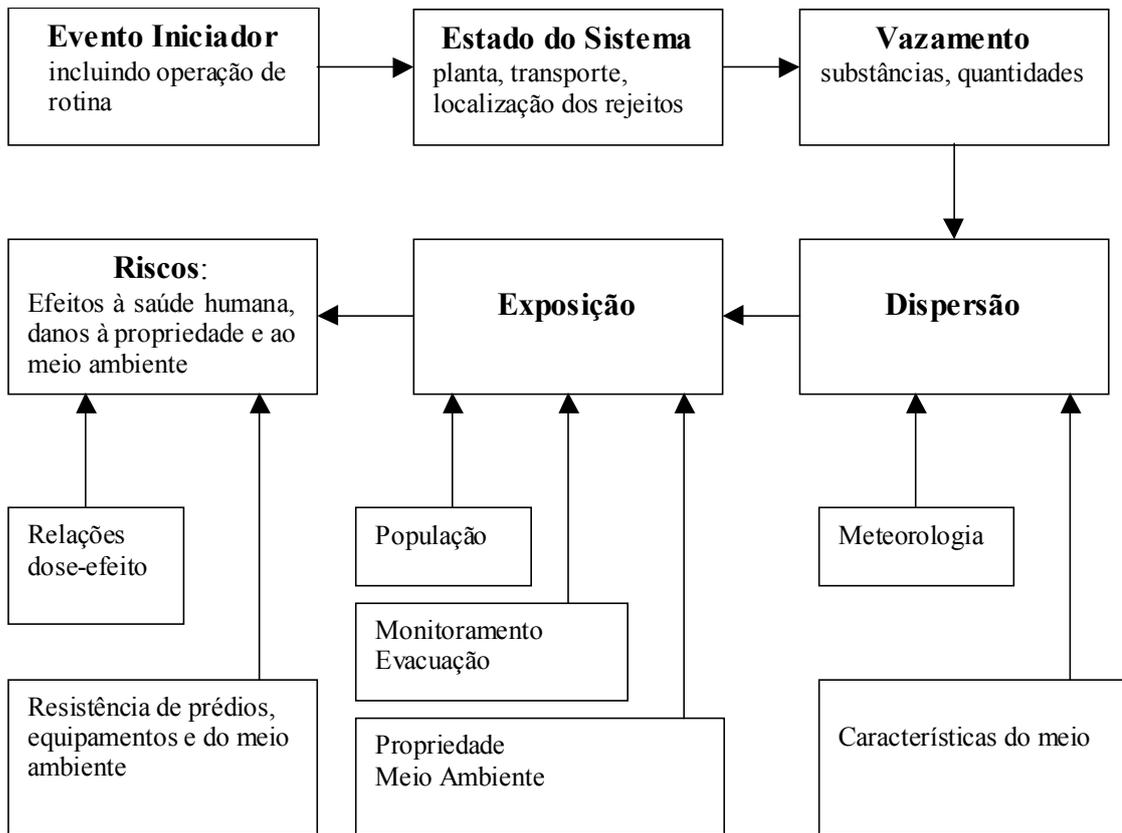


Figura 2.4 Avaliação probabilística do risco químico. Os diferentes modelos (adaptado de Paté-Cornell e Boykin, 1987)

O último passo de uma avaliação do risco à segurança é o cálculo do risco propriamente dito. O risco pode ser estimado de modo qualitativo ou quantitativo. Montague (1990) cita algumas técnicas de apresentação dos resultados de uma avaliação do risco. De modo qualitativo, o risco pode ser estabelecido segundo uma escala subjetiva de valores. Andreassen e Rasmussen (1990) e Kirchsteiger (1999a) apresentam exemplos da avaliação qualitativa do risco. Em relação às técnicas quantitativas, Van Sciver (1990) e Papazoglou *et al.* (1992) mostram algumas formas de apresentação dos resultados da avaliação do risco.

Kirchsteiger (1999a) apresenta um panorama do uso da avaliação do risco nas indústrias de processos químicos e destaca que, cada vez mais, as indústrias potencialmente de alto risco, tais como indústrias químicas e petroquímicas, são solicitadas a desenvolver sistemas formais para a avaliação e gerenciamento dos riscos relacionados a graves acidentes e que, de modo crescente, a resposta a como estas companhias avaliam o risco no contexto deste ambiente regulatório tem sido o uso de técnicas probabilísticas de avaliação do risco.

Paté-Cornell e Boykin (1987) discutem algumas dificuldades práticas no uso de técnicas probabilísticas para a avaliação do risco aplicada a indústrias, e destacam: a qualidade das bases de dados sobre falhas de componentes e falhas humanas; a propagação e a representação de modo preciso das incertezas; e a escolha dos modelos adequados durante o

processo de análise. Outro aspecto destacado refere-se à impossibilidade de se assegurar que nenhum possível cenário/evento tenha sido esquecido, em particular, aqueles que envolvem propriedades físicas ou químicas desconhecidas da substância de interesse.

Linnerooth-Bayer e Wahlström (1991) também discutem as dificuldades relacionadas à disponibilidade e à qualidade dos dados necessários para a avaliação. Kirchsteiger (1999a) destaca, como limitação da avaliação probabilística do risco, o fato de ser uma análise mais complexa e que demanda maior tempo, em virtude de que mais informações e opiniões têm de ser coletadas, processadas e consideradas para a tomada de decisões. Devido a esta estrutura mais complexa, as hipóteses, métodos e resultados são mais difíceis de serem entendidos e exigem alguma formação matemática.

Bley, Kaplan e Johnson (1992) discutem os pontos positivos e as limitações dos métodos de avaliação probabilística da segurança, destacando como problemas que causam desconforto aos tomadores de decisão: o uso da opinião de especialistas; a avaliação da confiabilidade humana; e o impacto de fatores organizacionais.

Em relação às potencialidades, Bier (1996) descreve algumas características da avaliação probabilística do risco, considerando-se sistemas de engenharia complexos. Destas características, pode-se inferir como aspectos positivos:

- representação das reações dos sistemas a perturbações durante a operação;
- visão integrada das reações dos sistemas;
- identificação dos tipos e níveis dos danos que podem resultar das diferentes reações do sistema;
- avaliação quantitativa e qualitativa do risco;
- avaliação quantitativa da incerteza quanto aos resultados;
- identificação dos maiores contribuintes para o risco e das potenciais ações para o gerenciamento do risco.

Bley, Kaplan e Johnson (1992) destacam que o valor básico da avaliação probabilística da segurança está em constituir:

- uma linguagem para a quantificação das incertezas;
- uma visão estruturada da planta industrial;
- uma visão racional e integrada das reações da planta industrial quanto às consequências das reações, suas chances de ocorrência e fatores contribuintes;
- uma ferramenta flexível para o gerenciamento da planta industrial.

2.1.2 Avaliação do Risco à Saúde Humana

O primeiro modelo formal dos processos de avaliação e gerenciamento do risco, considerando-se a perspectiva do risco à saúde humana e ao meio ambiente, parece ter sido, segundo Krewski e Birkwood (1987), o modelo proposto em 1980 pelo Comitê Científico sobre Problemas do Meio Ambiente (*Scientific Committee on Problems of the Environment – SCOPE*), no qual o processo de avaliação do risco consistia de três etapas: identificação do risco, estimativa do risco e avaliação do risco.

Um marco na fundamentação científica e na utilização da avaliação do risco à saúde humana é o relatório apresentado por NRC (1983), que estabelece o chamado paradigma americano da avaliação do risco. A Figura 2.5 apresenta, de modo sucinto, o referido paradigma, conforme apresentado em NRC (1983). Do ponto de vista histórico, NRC (1994) apresenta uma breve perspectiva das origens e evolução da avaliação do risco, a partir da década de 40, inclusive ressaltando a importância do trabalho apresentado em NRC (1983) para a fundamentação e utilização da avaliação do risco.

Uma comparação entre alguns dos primeiros modelos formais de avaliação do risco à saúde humana, propostos durante a década de 80, é apresentada por Krewski e Birkwood (1987). Kolluru (1996) apresenta a cronologia de alguns dos principais documentos relativos à avaliação do risco, compreendendo o período entre as décadas de 40 e 90, e Doull (2003) discute o impacto dos eventos mais importantes na evolução da avaliação do risco.

A avaliação do risco à saúde humana é definida em NRC (1983) como a caracterização qualitativa ou quantitativa dos potenciais efeitos de substâncias específicas sobre a saúde de indivíduos ou populações. O paradigma americano da avaliação do risco à saúde humana, apresentado na Figura 2.5, é composto de quatro etapas (NRC, 1983): identificação dos perigos; avaliação da relação dose-resposta; avaliação da exposição; e caracterização do risco. A descrição das etapas que compõem a avaliação do risco à saúde humana pode ser encontrada em NRC (1983), Krewski e Birkwood (1987), NRC (1994), Louvar e Louvar (1998) e Cox (2002).

A etapa de identificação dos perigos é definida como o processo de determinar se a exposição a um agente pode causar um aumento na incidência de condições adversas de saúde (câncer, defeitos congênitos, etc...). Envolve a caracterização da natureza e força da evidência de causalidade (NRC, 1983). Segundo Krewski e Birkwood (1987), consiste na determinação da relação de causa-efeito entre uma substância química em particular e um declínio na qualidade da saúde, através do uso de estudos epidemiológicos de populações humanas, dados de bioensaios em animais, testes de mutagenicidade e exame de estruturas moleculares.

Envolve ainda a identificação de contaminantes que são suspeitos de afetar a saúde; a quantificação das concentrações nas quais os mesmos estão presentes no meio ambiente; uma descrição das formas específicas de toxicidade (neurotoxicidade, carcinogenicidade, etc...); e uma avaliação das condições sob as quais estas formas de toxicidade podem se manifestar em indivíduos expostos (NRC, 1994).



Figura 2.5 Paradigma americano de avaliação do risco/gerenciamento do risco à saúde humana (adaptado de Barnes, 1994)

A etapa de avaliação da relação dose-resposta consiste nos processos de caracterização da relação entre uma dose administrada ou recebida de um agente e a incidência de um efeito adverso à saúde em populações expostas e de estimativa da incidência do efeito como uma função da exposição humana ao agente. São levados em consideração, fatores como idade, intensidade da exposição, padrão da exposição e, provavelmente, outras variáveis que possam afetar a resposta ao agente, tais como: sexo, estilo de vida, entre outros (NRC, 1983). A referida etapa envolve o exame da relação entre a magnitude da exposição e a probabilidade de ocorrência de efeitos adversos à saúde, usando métodos de extrapolação de doses altas para doses baixas e de animais para seres humanos como ferramentas básicas de pesquisa (Krewski e Birkwood, 1987). A etapa de avaliação da relação dose-resposta, segundo Louvar e Louvar (1998), envolve: a identificação dos tipos de efeitos adversos à saúde associados à exposição ao agente químico; a relação entre a magnitude da exposição e os efeitos adversos à saúde; e algumas considerações em relação às incertezas dos resultados.

A etapa de avaliação da exposição consiste no processo de medir ou estimar a intensidade, frequência e duração da exposição humana a um agente atualmente presente no meio ambiente ou de estimar exposições hipotéticas que possam vir a ocorrer a partir do

lançamento de novas substâncias químicas no meio ambiente. Em sua forma mais completa, descreve: a magnitude, duração, esquema e rota de exposição; o tamanho, natureza e classes das populações humanas expostas; e as incertezas de todas as estimativas (NRC, 1983).

A etapa de caracterização do risco consiste no processo de estimar a incidência dos efeitos sobre a saúde humana, considerando as várias condições de exposição humana, conforme descritas na avaliação da exposição. A referida etapa é desenvolvida a partir da combinação dos resultados das etapas de avaliação da relação dose-resposta e da avaliação da exposição (NRC, 1983). Segundo Krewski e Birkwood (1987), a caracterização do risco engloba as etapas de identificação dos perigos, avaliação da relação dose-resposta e avaliação da exposição, e envolve a descrição da natureza e magnitude do risco ao ser humano, incluindo a incerteza relacionada ao risco. Esta é a etapa na qual os resultados da avaliação do risco são apresentados e deve também incluir uma completa discussão das incertezas associadas às estimativas do risco (NRC, 1994).

Em relação ao seu uso, o modelo de avaliação do risco, proposto em NRC (1983), tem sido utilizado para: determinar os níveis de remediação para sítios contaminados; estimar a exposição do consumidor a um ingrediente/produto; tomar decisões em relação ao uso do solo; e estabelecer padrões de qualidade de água (Patterson *et al.*, 2002). O uso do termo paradigma “americano” evidencia a abrangência da utilização do modelo nos Estados Unidos. Além disso, de acordo com Lofstedt (2003), a influência do modelo americano sobre a estrutura das agências reguladoras na União Européia vem crescendo significativamente e pesquisas têm mostrado que a distinção conceitual entre a avaliação e o gerenciamento do risco tem aumentado a confiança do público nos agentes reguladores na Europa.

O próprio texto que define o modelo americano de avaliação do risco em NRC (1983) apresenta uma interessante discussão a respeito das limitações e dos problemas de ordem metodológica na avaliação do risco. Alguns dos problemas destacados em NRC (1983) ainda permanecem hoje, inclusive por questões éticas, como por exemplo, a extrapolação de resultados obtidos em experimentos com animais em laboratório para a caracterização dos efeitos em seres humanos.

As limitações inerentes ao processo de avaliação do risco, segundo NRC (1983), são: a incerteza quanto aos resultados; a disponibilidade limitada de recursos analíticos; e a complexidade. Existe freqüentemente incerteza nas estimativas de: tipos, probabilidades e magnitude dos efeitos sobre a saúde relacionados a determinado agente químico; efeitos econômicos de uma ação regulatória proposta; e extensão da exposição humana atual e futura (NRC, 1983). A disponibilidade limitada de recursos analíticos está relacionada ao grande número de substâncias químicas conhecidas e de uso comercial, enquanto a complexidade

deve-se à grande variedade de fatores que devem ser analisados e que estão relacionados aos efeitos adversos da substância química e as formas pelas quais se dá a exposição.

Barnes (1994) apresenta uma interessante discussão sobre os pontos fortes e fracos do modelo de avaliação do risco/gerenciamento do risco, proposto em NRC (1983). Como pontos fortes, pode-se destacar que o referido modelo (Barnes, 1994):

- constitui uma estrutura unificada e robusta;
- fornece uma linguagem comum que pode ser usada tanto por especialistas na área de avaliação e gerenciamento do risco quanto por pessoas leigas;
- separa os agentes responsáveis pela tomada de decisão (gerenciamento do risco) das atividades relacionadas à quantificação do risco (avaliação do risco), como uma forma de aumentar a credibilidade do processo perante ao público;
- tem aplicação abrangente, como a experiência tem mostrado;
- estabelece uma distinção clara entre fato (dado científico) e crença (inferência e conhecimento geral).

Como pontos fracos, Barnes (1994) destaca:

- a separação total entre a avaliação do risco e o gerenciamento do risco não é possível ou mesmo desejável em muitos casos;
- o paradigma, da forma como é usado, favorece o reducionismo. Em outras palavras, é mais facilmente aplicado ao caso de uma única substância química;
- a abordagem sugerida não considera a adversidade dos efeitos, ou seja, não permite a comparação entre diferentes efeitos adversos;
- o paradigma, da forma como usado, apresenta uma ambigüidade sobre se, na identificação dos perigos, deveriam ser relacionados os efeitos observados em “exposições em condições de teste” ou em “exposições em condições mais prováveis de serem encontradas no meio ambiente”;
- o paradigma ecológico é supostamente diferente do paradigma proposto em NRC (1983), este mais relacionado ao risco à saúde humana.

2.1.3 Análise Comparativa dos Processos de Avaliação do Risco à Segurança e de Avaliação do Risco à Saúde Humana

Este item apresenta, de modo sucinto, uma análise comparativa entre a avaliação do risco à segurança, tal como adotada nas indústrias de processos químicos, e a avaliação do risco à saúde humana. Além do apresentado nos itens anteriores, o Quadro 2.1, adaptado de Kolluru (1996), constitui base para a comparação entre os dois processos de avaliação do risco.

A etapa de identificação dos perigos é comum aos dois processos. Contudo, pode-se perceber que a referida etapa na avaliação do risco à segurança tem um caráter preventivo que não constitui uma característica marcante na avaliação do risco à saúde humana, principalmente em relação à ocorrência de acidentes. Existe sim, um caráter preventivo relacionado à avaliação do risco a saúde humana, porém mais voltado ao impacto da introdução de novos produtos/drogas, substâncias químicas e tecnologias.

Dentro da avaliação do risco à segurança, a análise das conseqüências (efeitos adversos) e a determinação das respectivas probabilidades associadas são realizadas respectivamente nas etapas de análise das conseqüências e de estimativa da freqüência dos acidentes. Novamente aqui se destaca o uso da avaliação do risco à segurança como uma ferramenta de prevenção.

Em relação às etapas da avaliação do risco à segurança, comentadas no parágrafo anterior, tem-se como etapas análogas na avaliação do risco à saúde humana: a avaliação da relação dose-resposta e a avaliação da exposição. Verifica-se aqui que o caráter probabilístico da avaliação do risco não aparece explicitamente na definição das etapas da avaliação do risco à saúde humana, ao contrário do que ocorre na avaliação do risco à segurança. Outro aspecto interessante, que pode ser inferido a partir da definição das etapas dos dois processos, é que o maior enfoque da avaliação do risco à segurança parecem ser as causas, enquanto na avaliação do risco à saúde humana são as conseqüências.

As etapas de avaliação (quantificação) do risco na avaliação do risco à segurança e de caracterização do risco na avaliação do risco à saúde humana são similares. No entanto, sofrem influência dos diferentes enfoques adotados nas etapas anteriores.

De modo geral, a avaliação do risco à segurança é mais voltada para as conseqüências imediatas (mortes, ferimentos, perdas econômicas, efeitos tóxicos agudos, entre outros), já a avaliação do risco à saúde humana sugere uma preocupação maior com efeitos cumulativos relacionados à longa exposição (doenças crônicas, efeitos tóxicos crônicos, entre outros).

Quadro 2.1 Comparação entre os processos de avaliação do risco à segurança nas indústrias de processos químicos e avaliação do risco à saúde humana.

	Avaliação do risco à segurança	Avaliação do risco à saúde humana
Etapas	<p>1. <u>Identificação dos perigos:</u></p> <p>Materiais, equipamentos e procedimentos, por exemplo: inventários com dimensões e localização de materiais inflamáveis, reativos ou altamente tóxicos. Eventos iniciadores, por exemplo: mau funcionamento de equipamento; falha humana; e falha de contenção.</p>	<p>1. <u>Identificação dos perigos:</u></p> <p>Quantidade e concentrações de agentes químicos, físicos e biológicos no meio ambiente em um local/área de estudo.</p>
	<p>2. <u>Estimativa da frequência dos acidentes:</u></p> <p>Probabilidade de eventos iniciadores e/ou de propagação de acidentes a partir de causas internas e externas.</p>	<p>2. <u>Avaliação da relação dose-resposta:</u></p> <p>Relação entre a dose de exposição e os efeitos adversos à saúde.</p>
	<p>3. <u>Análise das conseqüências:</u></p> <p>Natureza, magnitude e probabilidade de efeitos adversos, por exemplo: incêndios, explosões e lançamento inesperado de materiais tóxicos. Meteorologia. Receptores.</p>	<p>3. <u>Avaliação da exposição:</u></p> <p>Propagação do contaminante e rotas de exposição. Potenciais receptores, incluindo subgrupos mais sensíveis, taxas de exposição e tempo de exposição.</p>
	<p>4. <u>Avaliação (quantificação) do risco:</u></p> <p>Integração das probabilidades e conseqüências para expressão quantitativa dos riscos à segurança. Revisão da adequação do sistema.</p>	<p>4. <u>Caracterização do risco:</u></p> <p>Integração dos dados de toxicidade e exposição para expressão qualitativa e quantitativa dos riscos à saúde humana. Análise da incerteza.</p>
Pontos de interesse típicos	Fatalidades, ferimentos (segurança pública e do trabalhador) e perdas econômicas.	Risco cancerígeno individual e da população. Risco não cancerígeno.
Aplicações usuais	Segurança de processos químicos e petroquímicos. Transporte de materiais perigosos. Segurança do trabalhador. Programas de gerenciamento do risco.	Área de disposição de resíduos perigosos. Permissão de emissões no meio ambiente. Alimentos, drogas e cosméticos. Expansão/Fechamento de uma instalação.

Obs: adaptado de Kolluru (1996)

2.2 AVALIAÇÃO DO RISCO E A RELAÇÃO COM A CONTAMINAÇÃO DO SOLO E DA ÁGUA SUBTERRÂNEA

2.2.1 A Problemática da Contaminação do Solo e da Água Subterrânea

Um dos fatores que tornam a contaminação da água subterrânea um problema grave é a sua natureza de longo termo. Resíduos despejados há muito tempo podem causar contaminação da água subterrânea, podendo demorar décadas para ser descoberta. Embora muitos sítios contaminados possuam uma área pequena, a extensão da contaminação pode ser relativamente grande em razão do longo período no qual o contaminante migrou a partir da fonte de contaminação (Fetter, 1999). Embora a presente afirmação esteja relacionada somente à água subterrânea, a mesma pode ser estendida aos problemas envolvendo a contaminação do solo.

É importante destacar que nenhuma preocupação formal foi adotada no sentido de diferenciar os problemas de contaminação do solo e de contaminação da água subterrânea, embora possa se argumentar que ambos constituem problemas distintos, em razão dos diferentes processos físicos, químicos e biológicos. Tal atitude foi tomada no sentido de evidenciar a estreita relação entre os dois problemas.

Sob a ótica da avaliação do risco à saúde humana e ao meio ambiente, dois bons argumentos, além das diferenças entre os processos naturais, poderiam também ser usados como justificativas para tratar as contaminações do solo e da água subterrânea como problemas distintos, apesar de sua íntima relação. Primeiro, em uma situação de contaminação do solo, a água subterrânea representa apenas um dos possíveis caminhos através do qual o contaminante pode atingir o receptor (ser humano ou meio ambiente). Segundo, embora seja mais raro, podem existir casos de contaminação direta da água subterrânea sem a anterior contaminação do solo. Por exemplo, a partir da classificação apresentada em Fetter (1999), pode-se extrair como exemplos de fontes diretas de contaminação: poços de injeção, poços de produção e interações entre a água superficial e o aquífero.

Um panorama do problema da contaminação do solo e da água subterrânea nos Estados Unidos pode ser traçado a partir do apresentado em Fetter (1999) e Charbeneau (2000). Estimativas feitas pelo Conselho Nacional de Pesquisa (*Research National Council – NRC*) dos Estados Unidos na década de 1990 apontavam gastos variando entre 480 bilhões e 1 trilhão de dólares na remediação de um número estimado de 300.000 a 400.000 sítios contaminados em um período de 30 anos (Charbeneau, 2000). Como um exemplo de que o

problema não se refere exclusivamente aos Estados Unidos, atividades antrópicas passadas ou atuais introduziram contaminantes no solo e na água subterrânea, resultando em cerca de 750.000 sítios suspeitos de contaminação na Europa (Ferguson *et al.*, 1998).

Charbeneau (2000) descreve o processo regulatório concernente aos casos de contaminação do solo e da água subterrânea nos Estados Unidos. Um panorama da política e da prática adotadas em outros países pode ser traçada a partir de Ferguson (1999) e Guimarães (2003).

Em uma tentativa de apresentar a relação entre a avaliação do risco e o problema de contaminação do solo e da água subterrânea sob uma perspectiva de desenvolvimento histórico e de abrangência de enfoque, pode-se sugerir que existem três modos distintos de abordagem do problema, aqui denominados de: avaliação da migração do contaminante; avaliação do risco à saúde humana; e avaliação do risco ao meio ambiente.

A primeira abordagem, avaliação da migração do contaminante, característica dos primeiros modelos de análise do problema de contaminação do solo e da água subterrânea, não envolve explicitamente o conceito de avaliação do risco e seria caracterizada pela comparação entre valores de concentração observados e/ou estimados para um determinado contaminante e valores limites estabelecidos em legislação. A segunda abordagem consistiria na utilização do processo de avaliação do risco a saúde humana, conforme descrito anteriormente, envolvendo, além da determinação das concentrações no meio ambiente, a avaliação da exposição do ser humano ao contaminante. Finalmente, a terceira e última forma de abordagem seria novamente utilizar o conceito de avaliação do risco, tendo-se agora, como foco principal, o meio ambiente.

A seguir são apresentados alguns conceitos relativos às duas primeiras formas de abordagem do problema de contaminação do solo e da água subterrânea: avaliação da migração do contaminante e avaliação do risco à saúde humana. A avaliação do risco ao meio ambiente não será abordada, visto que não constitui objeto da presente tese. Contudo, é importante citar o exposto em USEPA (1998), como fonte de informações e referência.

2.2.2 Enfoque: Avaliação da Migração do Contaminante

A análise das conseqüências da contaminação do solo e da água subterrânea, através da migração do contaminante, é útil nos casos onde existe a necessidade de se verificar a concentração estimada do contaminante em pontos de controle em relação a uma dada concentração limite para fins de legislação. Este tipo de análise representa, de modo geral, o

ponto de vista do agente privado e é utilizada em modelos de decisão baseados em uma análise de custo-benefício.

A avaliação da migração dos contaminantes é um problema melhor estudado em comparação à avaliação do risco à saúde humana e ao meio ambiente, uma vez que o problema do transporte de contaminantes tem sido estudado há muitos anos (Swartjes, 1999). Especificamente em relação à água subterrânea, Massmann e Freeze (1987a), Massmann e Freeze (1987b), Freeze *et al.* (1990) e Massmann *et al.* (1991) representam trabalhos clássicos na avaliação do risco de contaminação, considerando somente o problema de propagação do contaminante.

Os referidos autores adotam modelos de decisão baseados em uma análise de custo-benefício, onde o risco é definido como o custo associado à probabilidade de falha, e onde a falha é definida como a ocorrência de um evento de contaminação que viola padrões de desempenho estabelecidos pela legislação, considerando-se pontos de controle previamente estabelecidos. Portanto, dentro deste contexto, o termo risco não tem a mesma conotação que a utilizada na avaliação do risco à saúde humana, uma vez que está relacionado a critérios de falhas de sistemas ou a critérios econômicos.

A previsão do impacto de um projeto no solo e/ou na água subterrânea, segundo Canter (1996), pode ser efetuada, empregando-se, em um sentido crescente de sofisticação: técnicas qualitativas, técnicas quantitativas simples e técnicas quantitativas específicas. O referido autor apresenta nove metodologias empíricas de avaliação dos impactos sobre a água subterrânea e que podem ser entendidas como técnicas quantitativas simples. Estas metodologias apresentam, em comum, o fato de fornecerem índices relativos aos possíveis impactos. Portanto, não associam um valor de concentração do contaminante e a respectiva probabilidade de ocorrência aos resultados obtidos.

Um exemplo deste tipo de metodologia é a técnica de mapeamento de vulnerabilidade de aquíferos conhecida por DRASTIC. Merchant (1994) apresenta uma análise crítica do modelo DRASTIC e que serve como referência para os conceitos fundamentais desta técnica. Basicamente, são consideradas características físicas da área de estudo e índices relativos a cada uma destas características para compor um índice que “traduz” o potencial de poluição (vulnerabilidade) do aquífero. Este modo de abordagem pode ser útil em avaliações expeditas e em escala regional, mas seu uso é difícil de ser justificado na etapa de análise das conseqüências, dentro de um processo de avaliação probabilística do risco.

Rosen e LeGrand (1997) apresentam uma proposta de metodologia para a avaliação do risco da contaminação da água subterrânea, usando a técnica DRASTIC, onde destacam que a metodologia proposta é útil nos estágios iniciais de avaliação do risco. Salientam ainda que os

métodos usados para a análise probabilística devem ser simples nestes estágios iniciais, o que significa, em muitos casos, que os mesmos poderão não ser muito precisos na descrição das propriedades físicas de interesse e, portanto, limitarão a acurácia da avaliação do risco. Neste caso, as técnicas quantitativas específicas são mais indicadas, já que se caracterizam pelo uso de modelos matemáticos de fluxo e transporte de contaminantes. O uso destes modelos permite o cálculo da concentração do contaminante em pontos de controle definidos *a priori* e a comparação com concentrações-limite estabelecidas pela legislação ambiental.

2.2.3 Enfoque: Avaliação do Risco à Saúde Humana

A análise das conseqüências da contaminação do solo e da água subterrânea, quando desenvolvida sob a ótica pura e simples da propagação do contaminante, se caracteriza pela comparação entre concentrações estimadas e concentrações limites definidas pela legislação, considerando-se pontos de controle previamente estabelecidos, conforme discutido no item anterior. Esta forma de abordagem tem sido sistematicamente substituída por metodologias que levam em consideração os riscos à saúde humana e ao meio ambiente. Khadam e Kaluarachchi (2003) citam que, nos últimos anos, tem-se testemunhado a substituição de padrões de qualidade de água por padrões baseados no risco como critérios para a remediação da água subterrânea, por exemplo.

Esta tendência resulta, por conseqüência, na crescente utilização de técnicas de avaliação do risco à saúde humana e ao meio ambiente em detrimento ao uso de metodologias que consideram somente a propagação do contaminante. Destaca-se também que o uso de técnicas que avaliam o risco à saúde humana e ao meio ambiente é mais apropriado para a análise sob o ponto de vista público por incorporarem, de modo explícito ou implícito, valores que são dificilmente considerados sob o ponto de vista privado, tais como saúde pública e conservação ambiental.

Especificamente em relação à contaminação da água subterrânea, Freeze e McWhorter (1997) apresentam uma evolução em relação a trabalhos anteriores que enfocavam somente a propagação do contaminante (Massmann e Freeze, 1987a; Massmann e Freeze, 1987b; Freeze *et al.*, 1990 e Massmann *et al.*, 1991) ao estabelecerem como restrição um limite baseado no risco cancerígeno relacionado ao contaminante e não na sua concentração limite. Os autores analisam a redução do risco cancerígeno devido a diferentes tecnologias de remediação, considerando-se derivados de petróleo mais densos que a água, os chamados DNAPL, para a tomada de decisão entre as diversas tecnologias de remediação.

Pelmuder, Yeh e Kastenber (1996) propõem uma estrutura de modelos de simulação para incluir a exposição humana a contaminantes em um problema de gestão de aquíferos em escala regional. A estrutura considera o fluxo horizontal, o transporte de uma pluma de contaminantes no aquífero e os múltiplos caminhos de exposição humana, apresentados na Figura 2.6. Os compartimentos ambientais analisados são: ar, solo junto à superfície, zona das raízes das plantas, vegetação, zona vadosa, zona saturada, águas superficiais e sedimentos.

Em uma abordagem mais ampla, por considerar explicitamente a relação entre as contaminações do solo e da água subterrânea, Swartjes (1999) sugere uma estrutura de modelo para a avaliação do risco à saúde humana, apresentada pela Figura 2.7, que considera como possíveis caminhos de exposição humana ao contaminante: ingestão do solo; consumo de plantas cultivadas; ingestão de água; inalação de ar; inalação de partículas sólidas; inalação de ar durante o banho; e absorção dérmica, via contato com o solo e durante o banho.

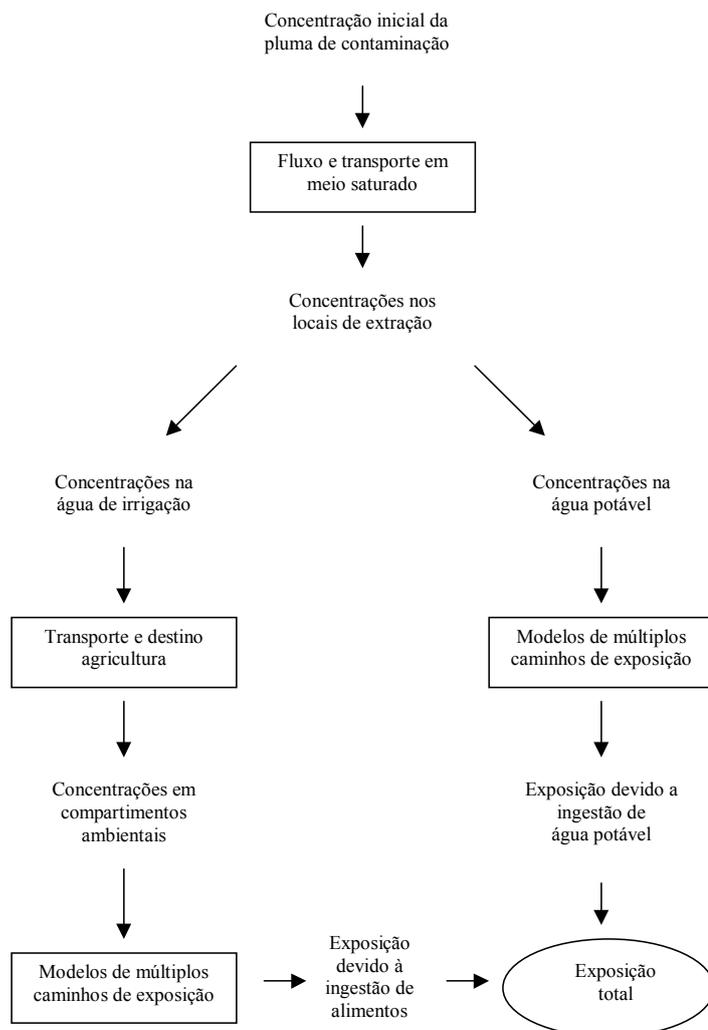


Figura 2.6 Estrutura de simulação de avaliação do risco à saúde humana pela contaminação da água subterrânea (adaptado de Pelmuder, Yeh e Kastenber, 1996)

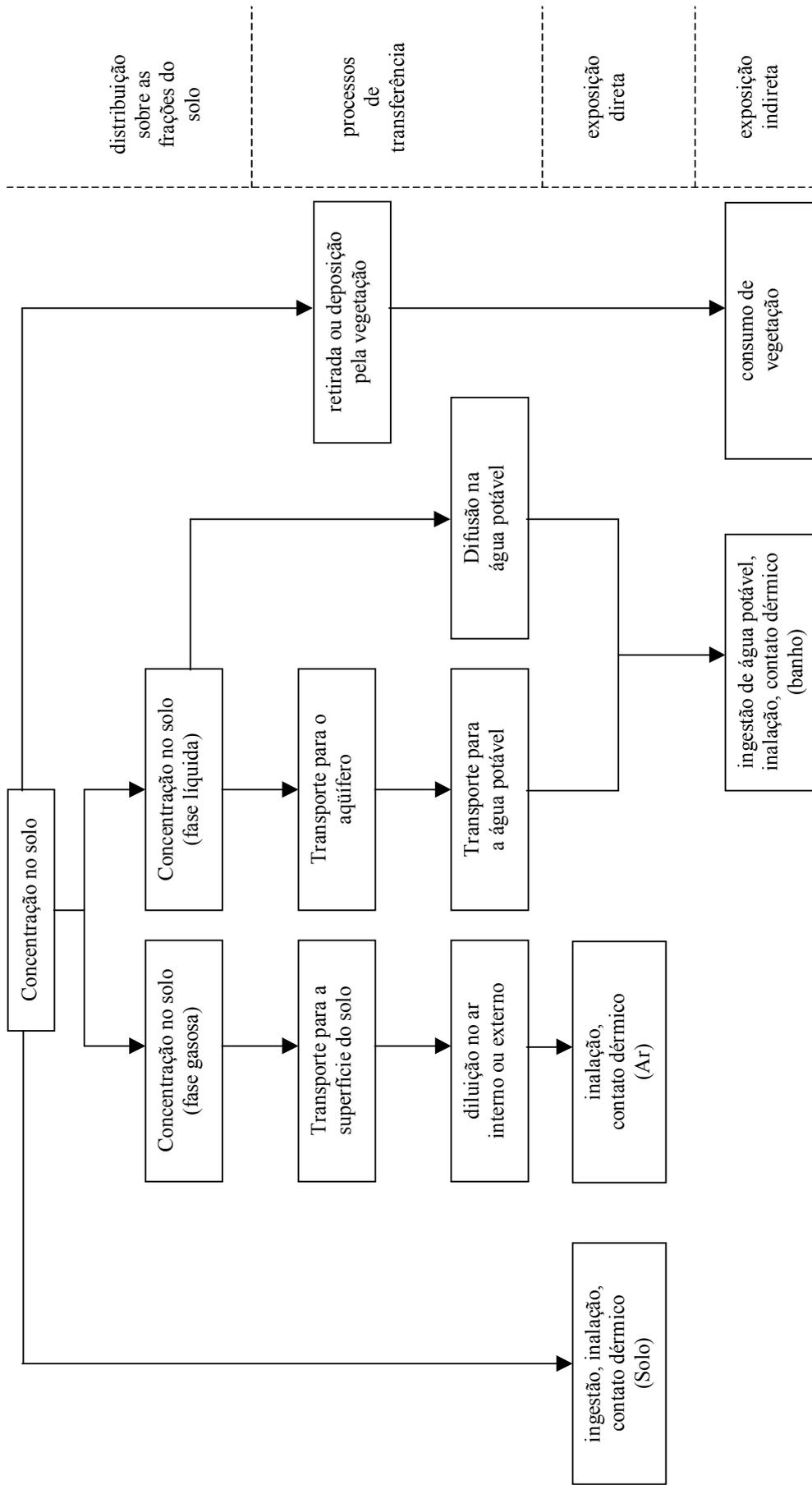


Figura 2.7 Modelo para a avaliação do risco à saúde humana devido à contaminação do solo e da água subterrânea (adaptado de Swartjes, 1999)

2.3 METODOLOGIA RBCA (*RISK-BASED CORRECTIVE ACTION*): AÇÃO CORRETIVA BASEADA NO RISCO

Guimarães (2003) apresenta um panorama do uso do conceito de avaliação do risco à saúde humana no estabelecimento de padrões de remediação baseados no risco no Brasil e em outros países, a saber: Estados Unidos, Holanda, Inglaterra, Alemanha e Canadá. O referido autor destaca a metodologia RBCA (ação corretiva baseada no risco / *Risk-Based Corrective Action*) como uma das mais usadas e conhecidas no Brasil. Um exemplo de uma das primeiras aplicações da metodologia RBCA no Brasil é o trabalho desenvolvido por Finotti (1997). Na seqüência, são apresentados alguns conceitos básicos relacionados à metodologia RBCA.

2.3.1 Descrição da Metodologia RBCA

A metodologia RBCA é um processo para determinar a extensão e urgência de ações corretivas necessárias em um sítio contaminado pelo lançamento de produtos químicos baseado na avaliação relativa do risco à saúde humana e ao meio ambiente (Connor *et al.*, 2001). A referida metodologia foi primeiramente apresentada em ASTM (1995) e encontra-se detalhadamente descrita em ASTM (1995) e ASTM (2000), sendo concebida inicialmente para sítios contaminados por produtos derivados do petróleo. Posteriormente, em ASTM (1998), a metodologia foi estendida para avaliação do risco em sítios contaminados por produtos químicos em geral.

Segundo ASTM (1995), a metodologia RBCA representa um processo consistente de tomada de decisão na avaliação e resposta a um derrame de petróleo, baseado na proteção da saúde humana e do meio ambiente. É importante observar que o risco ambiental, como discutido em ASTM (1995), é avaliado apenas de uma forma qualitativa em relação aos impactos atuais e futuros sobre o meio ambiente. Portanto, a metodologia RBCA não constitui, a princípio, uma ferramenta para a avaliação quantitativa do risco ambiental.

A metodologia RBCA reconhece que os sítios contaminados por produtos de petróleo apresentam enorme variação em termos de complexidade, das características químicas e físicas e do risco que eles podem representar à saúde humana e ao meio ambiente. A referida metodologia usa uma abordagem estruturada, onde as atividades relativas à ação corretiva são definidas em função das condições específicas do sítio e dos riscos (ASTM, 1995).

A estrutura da metodologia RBCA é composta por três abordagens distintas, em

função da quantidade de dados específicos (relativos ao local de estudo) e do grau de complexidade utilizado para a representação dos processos de fluxo e transporte dos contaminantes. As referidas abordagens serão mencionadas nesta tese como: *Nível 1*, *Nível 2* e *Nível 3*; em uma tentativa de “traduzir” a denominação original em inglês: *Tier 1*, *Tier 2* e *Tier 3*.

A passagem de um nível inferior para um nível superior, por exemplo, do *Nível 1* para o *Nível 2*, corresponde a um maior número de dados obtidos especificamente para o local em estudo e a um maior grau de complexidade na representação dos processos de fluxo e transporte de contaminantes. A Figura 2.8 apresenta um fluxograma que caracteriza as etapas que definem a metodologia RBCA.

A avaliação *Nível 1* consiste basicamente na comparação entre concentrações das substâncias químicas de interesse e níveis preliminares de remediação baseados no risco (*Risk-Based Screening Levels* - RBSLs). Os valores de RBSL são usados para determinar se as condições do sítio satisfazem os critérios para um rápido fechamento em termos regulatórios ou se requerem uma avaliação mais específica. Os valores de RBSL são tipicamente derivados para cenários-padrão de exposição, usando o conceito de máxima exposição racional (*Reasonable Maximum Exposure* - RME) e parâmetros toxicológicos de uso corrente, como recomendado pela Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (*U. S. Environmental Protection Agency* – USEPA) (ASTM, 1995).

A avaliação *Nível 2* fornece ao usuário a opção de determinar níveis de remediação específicos para o sítio (*Site-Specific Target Levels* - SSTLs) e de definir pontos de verificação. É importante destacar que tanto os RBSLs (*Nível 1*) quanto os SSTLs (*Nível 2*) visam níveis similares de proteção à saúde humana e ao meio ambiente. Contudo, na avaliação *Nível 2*, as hipóteses e os pontos de exposição genéricos são substituídos por dados e informações específicos do sítio contaminado. Coleta adicional de dados específicos do sítio pode ser necessária. Por exemplo, os SSTLs (*Nível 2*) podem ser definidos usando as mesmas equações utilizadas para estabelecer os RBSLs (*Nível 1*), exceto pelo uso de parâmetros obtidos especificamente para o sítio em análise. Os dados adicionais podem permitir análises alternativas do transporte e destino dos contaminantes. Por outro lado, a avaliação *Nível 2* pode envolver apenas a aplicação dos mesmos RBSLs, estabelecidos na avaliação *Nível 1*, só que aplicados a pontos de exposição mais prováveis (ASTM, 1995).

A avaliação *Nível 3* fornece ao usuário a opção de determinar os SSTLs (*Nível 3*) para caminhos de exposição diretos e indiretos, usando parâmetros específicos do sítio e pontos de exposição e verificação, quando os SSTLs (*Nível 2*) são julgados inadequados para serem utilizados como níveis de remediação. A avaliação *Nível 3*, em geral, pode representar um

substancial incremento de esforço em relação às avaliações *Nível 1* e *Nível 2*, já que a mesma é muito mais complexa e pode incluir coleta adicional de dados, avaliações probabilísticas e modelos sofisticados de transporte e destino de contaminantes (ASTM, 1995).

Segundo ASTM (1998), a modelagem do transporte e destino dos contaminantes na avaliação *Nível 3* pode envolver o uso de modelos numéricos para representar a variação temporal da migração do contaminante em condições de variabilidade espacial das propriedades do meio, através do qual a migração está ocorrendo. Em outras palavras, é válido assumir que, em geral, as avaliações *Nível 1* e *Nível 2* consideram condições permanentes (*steady-state*) e meio homogêneo, enquanto a avaliação *Nível 3* pode abranger condições transitórias e meio heterogêneo.

Ainda segundo ASTM (1998), a avaliação *Nível 3* não envolve sempre o uso de modelos numéricos. Para satisfazer os objetivos da modelagem, uma análise de nível mais alto pode exigir apenas o uso de modelos analíticos mais sofisticados ou o uso de modelos comuns nas análises de nível mais baixo, porém com a utilização de dados adicionais específicos para o sítio em análise para a caracterização dos parâmetros de entrada do modelo.

2.3.2 Modelos Computacionais para a Avaliação do Risco

Petts *et al.* (1997) mencionam como exemplos de modelo computacionais disponíveis comercialmente para a avaliação do risco: AERIS (*Aid for Redevelopment of Industrial Sites*); API-DSS (*American Petroleum Institute Risk Assessment - Decision Support System*); RBCA (*Risk-Based Corrective Action Toolkit for Chemical Releases*); Risk*Assistant e RISC-HUMAN. Laniak *et al.* (1997) e Mills *et al.* (1997) citam e descrevem sucintamente os modelos MEPAS (*Multimedia Environmental Pollutant Assessment System*), RESRAD e MMSOILS como modelos usados para a avaliação do risco à saúde humana.

Guimarães (2003) também apresenta uma compilação e uma breve descrição de alguns modelos computacionais disponíveis no mercado, todos baseados na metodologia RBCA, a saber: API-DSS; RISC; MEPAS; RBCA; RISK*Assistant e SMARTRISK. Ainda segundo o referido autor, em razão de suas características, os modelos RBCA e RISC são os mais usados para avaliações de risco de sítios impactados por hidrocarbonetos de petróleo.

Uma característica comum dos modelos computacionais de avaliação de risco citados é que os mesmos permitem avaliações de *Nível 1* e *Nível 2*. Avaliações de *Nível 3* envolvem, em geral, o desenvolvimento de modelos específicos para o problema e para o local em estudo.

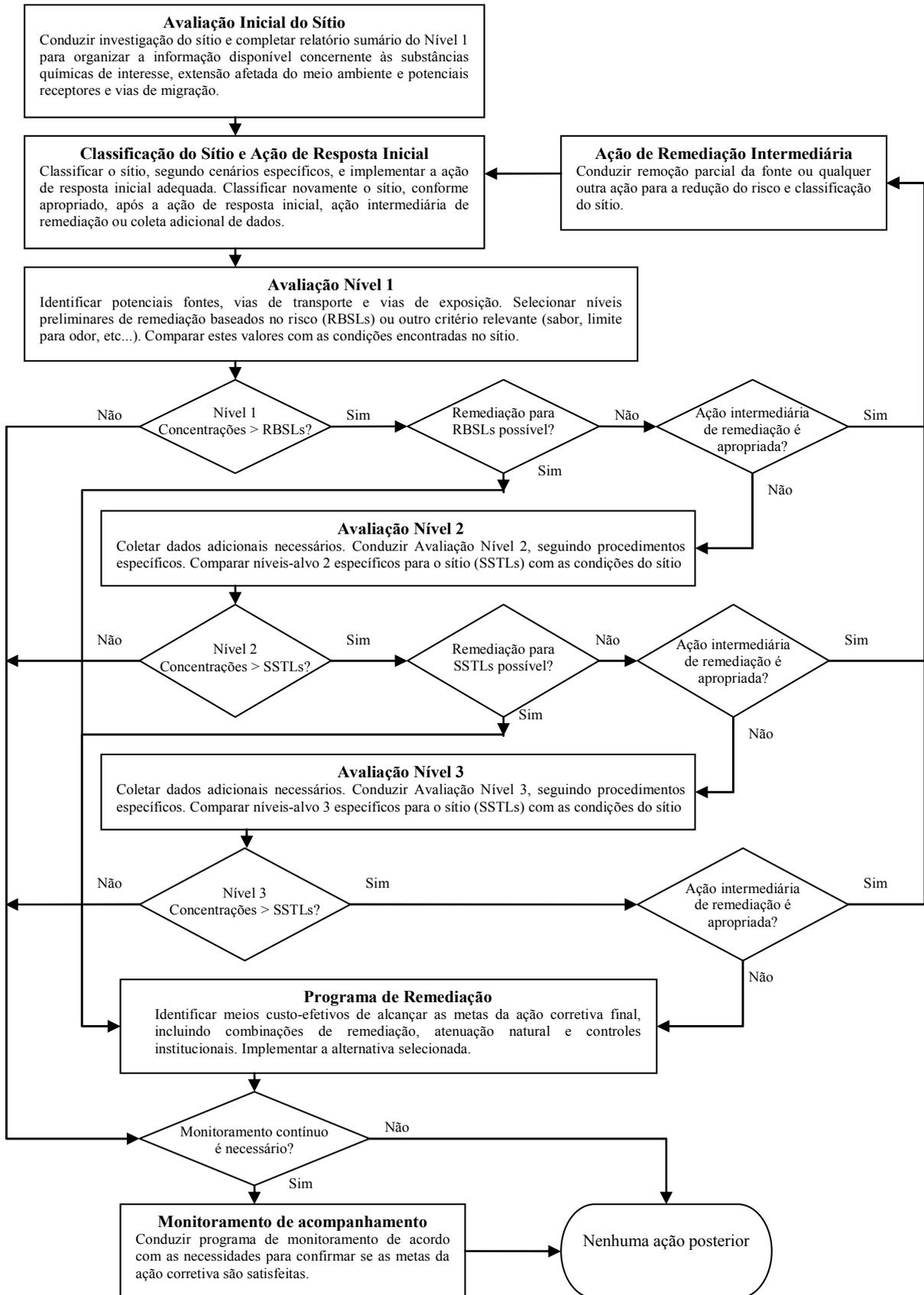


Figura 2.8 Fluxograma da metodologia RBCA (adaptado de ASTM, 1995)

2.3.3 Modelos Computacionais para Problemas de Fluxo e Transporte em Meio Poroso Saturado e não Saturado

Bachmat *et al.* (1985) apresentam um texto de revisão interessante sobre o uso de modelos numéricos para a gestão da água subterrânea, contendo uma análise detalhada dos pontos fortes e fracos dos modelos existentes. Os referidos autores destacam a existência de 550 modelos de fluxo de água subterrânea, sendo que 399 deles podem ser considerados como numéricos ou semi-analíticos. Os modelos restantes são baseados em técnicas analíticas de solução ou representam processos hidrogeoquímicos. Estes dados referem-se ao final do ano de 1983.

Um pouco mais recente é o trabalho de van der Heijde, El-Kadi e Williams (1988) que apresentam um panorama dos diferentes tipos de modelos computacionais desenvolvidos para a modelagem do fluxo e transporte em meio poroso saturado e não saturado e seu uso no gerenciamento dos recursos hídricos. Em van der Heijde e Elnawawy (1993), além da apresentação de uma relação mais atualizada em relação ao trabalho anterior, é apresentada também a metodologia usada pelo Centro Internacional de Modelagem de Águas Subterrâneas (*International Ground Water Modeling Center - IGWMC*) para classificar, avaliar e gerenciar informações descritivas relativas aos modelos computacionais existentes com o objetivo de auxiliar na escolha do modelo computacional mais adequado.

De modo geral, os trabalhos citados trazem modelos computacionais aplicados não somente ao fluxo em meio poroso saturado. Podem ser encontradas também relações de modelos computacionais aplicados ao fluxo em meio poroso não saturado, bem como, modelos computacionais que tratam conjuntamente do transporte em meio poroso saturado e não saturado. Especificamente em relação a modelos de fluxo e transporte em meio poroso não saturado, pode-se citar o trabalho de van der Heijde e Williams (1994) que traz uma compilação de 92 modelos computacionais.

2.4 ANÁLISE DA INCERTEZA NA AVALIAÇÃO DO RISCO

A incerteza, de modo simples, está relacionada à falta de conhecimento a respeito dos mecanismos que governam os fenômenos de interesse e à adequação dos modelos utilizados para a representação dos sistemas analisados. Portanto, a incerteza é uma característica intrínseca da avaliação do risco. As incertezas não são erros e uma análise que exponha as incertezas não perde seu valor (Roberts and Hayns, 1989).

2.4.1 Análise da Incerteza na Propagação do Contaminante

Beck (1987) apresenta um trabalho fundamental sobre a análise da incerteza quanto à modelagem matemática da qualidade da água, analisando quatro áreas em detalhe: a incerteza sobre a estrutura dos modelos; a incerteza em relação aos valores estimados dos parâmetros do modelo; a propagação dos erros de previsão; e o projeto de experimentos com o objetivo de reduzir as incertezas críticas associadas ao modelo.

Especificamente em relação ao problema de fluxo e transporte em meio saturado, Freeze *et al.* (1990) dividem as incertezas em dois grandes grupos: incertezas geológicas e incertezas nos parâmetros. As incertezas geológicas são associadas às condições de contorno do problema de fluxo e transporte do contaminante, destacando-se (Freeze *et al.*, 1990):

- localização das fronteiras impermeáveis (fluxo zero);
- localização das fronteiras com carga constante;
- localização de fronteiras entre unidades geológicas distintas;
- delimitação da fonte de contaminação;
- delimitação da pluma de contaminação.

As incertezas nos parâmetros hidrogeológicos estão relacionadas às incertezas quanto aos valores de condutividade hidráulica (K) e porosidade (ϕ), bem como, à variabilidade espacial destes parâmetros. São também relacionados como fontes de incerteza, alguns parâmetros relacionados ao contaminante: coeficiente de difusão, dispersividade, fator de retardo e taxa de decaimento (meia vida).

A propagação da incerteza, considerando-se os parâmetros hidrogeológicos (condutividade/transmissividade e porosidade), é função da abordagem utilizada na simulação do problema de fluxo e transporte do contaminante.

Em uma abordagem determinística, a análise da incerteza é realizada através de uma análise de sensibilidade, ou seja, procura-se avaliar as variações produzidas nas variáveis de saída (resultados) em função de variações nos dados e/ou parâmetros de entrada do modelo determinístico utilizado nas simulações.

Em uma abordagem estocástica, a incerteza dos dados e/ou parâmetros de entrada do modelo é especificada na forma de uma função densidade de probabilidade ou pela média e variância de uma dada distribuição de probabilidade. Existem três abordagens básicas para a propagação das incertezas através do modelo de simulação hidrogeológica e para a análise da incerteza nos resultados (Freeze *et al.*, 1990):

- Análise de primeira ordem (*First-order analysis*);
- Análise das perturbações (*Perturbation analysis*);
- Análise Monte Carlo (*Monte Carlo analysis*).

A análise de primeira ordem utiliza somente os dois primeiros momentos (média e variância) da função de distribuição de probabilidade dos parâmetros de entrada e, em consequência, fornece somente a média e a variância da distribuição dos resultados obtidos. A técnica é simples e direta, mas é limitada a sistemas lineares ou quase lineares. Como fonte de referência, Dettinger e Wilson (1981) apresentam desenvolvimento matemático relativo à análise de primeira ordem aplicada a modelos numéricos de fluxo em meio saturado.

No método da análise das perturbações, os parâmetros de entrada e as variáveis de saída (resultados) são definidos em termos de uma média e mais uma perturbação em relação à média. O principal obstáculo ao uso desta técnica é a dificuldade no tratamento matemático. Dagan (1982a), Dagan (1982b) e Gelhar (1986) são alguns dos trabalhos clássicos nesta área.

A técnica de simulação Monte Carlo constitui a abordagem mais genérica para a propagação da incerteza e a mais utilizada. A técnica consiste na geração de um grande número de realizações igualmente prováveis de cada parâmetro de entrada e na simulação, através de modelo matemático, a partir de cada uma das realizações geradas. Copty e Findikakis (2000) relacionam alguns estudos envolvendo o uso do método de Monte Carlo na avaliação de esquemas de remediação da água subterrânea. Alguns aspectos específicos em relação à simulação Monte Carlo são apresentados no item 2.4.3, uma vez que foi a técnica usada na presente tese.

Em geral, no caso dos parâmetros hidrogeológicos, considera-se somente a incerteza quantos aos valores e à variabilidade espacial da condutividade hidráulica nos estudos de propagação de contaminante em meio saturado. A distribuição de probabilidades freqüentemente adotada para a condutividade hidráulica é a distribuição lognormal e a análise da variabilidade espacial é feita utilizando-se ferramentas de geostatística.

2.4.2 Análise da Incerteza na Avaliação do Risco à Saúde Humana

As incertezas associadas à avaliação do risco à saúde humana, em razão da sua própria estrutura são devidas, principalmente a:

- concentração estimada do contaminante nos diferentes meios;
- taxa de contato e de absorção do contaminante pelo indivíduo;
- frequência e duração da exposição do indivíduo ao contaminante;
- confiabilidade da relação dose-resposta (efeito);
- características da população afetada;
- estrutura do modelo utilizado na avaliação do risco.

Thompson, Burmaster e Crouch (1992) apresentam metodologia para a análise da incerteza em avaliações do risco à saúde humana. Os referidos autores utilizam o método de Monte Carlo para a análise da incerteza e sugerem distribuições de frequência para as variáveis consideradas como aleatórias no processo de análise de incerteza.

Smith (1994) apresenta uma comparação entre estimativas determinísticas e probabilísticas do risco à saúde humana, considerando a exposição a solventes voláteis através da ingestão de água potável e da inalação durante o banho. No referido estudo, dezenove (!!)

variáveis de entrada são consideradas aleatórias e o método Monte Carlo é usado para a propagação das incertezas. São sugeridas distribuições de frequência para as diferentes variáveis de entrada, com os valores característicos das distribuições sendo definidos a partir de dados do local do estudo, trabalhos de outros autores e julgamento próprio.

Finley e Paustenbach (1994) discutem algumas vantagens e desvantagens da estimativa pontual em relação à abordagem probabilística, através da comparação dos resultados de três estudos de caso. O referido estudo recomenda um conjunto de distribuições de probabilidade para diversas variáveis de entrada do modelo de avaliação do risco, destacando que as mesmas são suficientemente bem conhecidas para serem usadas com confiança na maioria das avaliações de exposição a contaminantes.

Finley *et al.* (1994) também sugerem várias distribuições de probabilidade para a representação de variáveis de entrada comumente usadas em estudos de avaliação do risco à saúde humana e sugerem que as mesmas podem ser consideradas como padrão para vários estudos de casos dentro dos Estados Unidos. Estas distribuições são mais relacionadas a fatores fisiológicos e de comportamento da população. Destaca-se que estas sugestões devem ser consideradas com cautela para estudos desenvolvidos em outros países. Novamente, a técnica utilizada para a propagação das incertezas é o método Monte Carlo.

Uma análise dos estudos citados neste item mostra que, em um grande número de modelos de avaliação do risco à saúde humana, uma característica comum é o fato do risco ser calculado como o produto de diferentes fatores. Rai e Krewski (1998) propõem um procedimento genérico para a análise da incerteza no caso de modelos multiplicativos do

risco, nos quais o risco pode ser calculado como produto entre dois ou mais fatores de risco. Como todos os demais estudos anteriores, o método Monte Carlo é utilizado na propagação das incertezas.

Na seqüência, procura-se apresentar alguns aspectos básicos do método Monte Carlo, em razão da grande utilização do mesmo em estudos de avaliação do risco.

2.4.3 Aspectos Básicos do Uso do Método Monte Carlo na Avaliação do Risco

O método Monte Carlo usa experimentos numéricos de amostragem para resolver problemas de estimativa. No contexto da avaliação do risco, distribuições de probabilidade são usadas para representar a incerteza em algumas ou em todas as variáveis de entrada de uma determinada expressão matemática de interesse. Valores específicos para estas variáveis são aleatoriamente selecionados, de acordo com distribuições pré-definidas, e a expressão matemática é então avaliada. Este processo é repetido várias vezes e a distribuição dos resultados, obtida a partir das várias realizações, representa a variação dos possíveis resultados, bem como, a probabilidade de cada possível resultado em particular (Warren-Hicks e Moore, 1998).

A avaliação da incerteza dos parâmetros, usando a abordagem do método Monte Carlo, envolve os seguintes passos (Smith e Ye, 1998):

- seleção de uma distribuição de probabilidades para descrever os possíveis valores de cada variável e/ou parâmetro de entrada;
- especificação das propriedades de cada parâmetro, tais como, correlações e restrições (limites);
- geração de realizações dos parâmetros, a partir das respectivas distribuições, considerando-se suas propriedades;
- produção dos resultados, usando as realizações geradas como valores possíveis para os parâmetros do modelo.

A partir do exposto, podem ser listadas algumas das dificuldades relacionadas à utilização do método Monte Carlo e que constituem críticas ao seu uso:

- precisão dos resultados, já que constitui um método aproximado;
- tempo e esforço computacional exigido para a obtenção de um nível aceitável de precisão;
- escolha da distribuição para as variáveis e/ou parâmetros de entrada do modelo;
- possível correlação entre alguns parâmetros de entrada do modelo;
- representatividade da solução.

Vose (2000) aborda, de forma prática, a maior parte dos problemas relacionados ao uso do método Monte Carlo no âmbito da avaliação do risco. As questões de precisão dos resultados e do esforço computacional exigido pelo método estão intimamente ligadas. Com o desenvolvimento dos computadores, através de processadores matemáticos mais eficientes e velocidades de processamento cada vez maiores, a questão relativa ao esforço computacional tem se tornado menos importante e a possibilidade de geração de um grande número de realizações contribui para uma melhor precisão dos resultados.

Outro modo de abordar o problema de precisão e do esforço computacional é a diminuição do número de realizações, geradas a partir das distribuições de probabilidade usadas para descrever os parâmetros de entrada do modelo, pelo uso de técnicas eficientes de amostragem. McKay, Beckman e Conover (1979) comparam três técnicas de amostragem: amostragem puramente randômica; amostragem estratificada; e a técnica LHS (*Latin Hypercube Sampling*). A técnica LHS é destacada como uma alternativa eficiente em relação à amostragem puramente randômica, tendo como característica exigir um menor número de realizações para atingir um nível aceitável de precisão na reprodução das características das distribuições de probabilidade usadas. Uma descrição mais simples da técnica LHS, do ponto de vista de implementação computacional, pode ser encontrada em Ding, Zhou e Liu (1998).

Seiler e Alvarez (1996) abordam a questão da seleção das distribuições de probabilidade. Os autores apresentam uma revisão dos métodos usualmente utilizados para a definição das distribuições e discutem alguns critérios que podem ser usados no processo de seleção das distribuições. USEPA (1999) aborda, especificamente em relação a estudos na área ambiental, algumas questões relativas à escolha das distribuições de probabilidade das variáveis de entrada em uma avaliação probabilística do risco.

Binkowitz e Wartenberg (2001) apresentam uma comparação de resultados de diversos estudos de avaliação quantitativa do risco, obtidos a partir do uso de diferentes distribuições de probabilidade para parâmetros como: peso do indivíduo; consumo de alimento; taxa de ingestão do solo; taxas de respiração; e ingestão de fluídos, mostrando a influência da escolha da distribuição nos resultados.

A questão da correlação entre as variáveis e/ou parâmetros de entrada dos modelos é discutida em Bukowski, Korn e Wartenberg (1995), onde se analisa também a influência da forma da distribuição de probabilidade usada. Hass (1999) e Vose (2000) apresentam métodos para a geração de realizações das variáveis de entrada, considerando-se correlações entre elas.

Em razão da grande utilização do método Monte Carlo em estudos de avaliação do risco, principalmente na área ambiental, Burmaster e Anderson (1994) e USEPA (1997) sugerem alguns princípios a serem observados no uso do método.

2.4.4 Integração do Conceito de Análise de Incerteza na Propagação do Contaminante à Avaliação do Risco à Saúde Humana

Os itens 2.4.1 e 2.4.2 tratam da análise da incerteza na propagação do contaminante e na avaliação do risco à saúde humana como praticamente dissociadas entre si. O presente item procura apresentar como a questão da variabilidade espacial e da incerteza na propagação do contaminante em meio poroso tem sido incorporada às avaliações de risco à saúde humana, principalmente através da representação da variabilidade espacial e da incerteza relacionadas à condutividade hidráulica do meio poroso.

Andricevic e Cvetkovic (1996), Maxwell *et al.* (1998) e Maxwell *et al.* (1999) são exemplos dos primeiros trabalhos que procuram integrar a caracterização hidrogeológica à avaliação do risco à saúde humana. Alguns aspectos específicos destes trabalhos e que são de interesse da presente tese são destacados a seguir.

Andricevic e Cvetkovic (1996) tratam do problema de transporte de contaminantes radioativos em meio poroso saturado. A solução do problema de transporte é analítica e a variabilidade espacial e a incerteza em relação à condutividade hidráulica não são diretamente representadas. No referido trabalho, a questão da variabilidade espacial e da incerteza é associada diretamente ao campo de velocidades.

Maxwell *et al.* (1998) apresentam uma metodologia genérica que relaciona o problema de transporte em meio poroso saturado com a exposição humana ao contaminante e que inclui a variabilidade espacial e a incerteza associadas diretamente à condutividade hidráulica. Os autores representam a variabilidade espacial da condutividade através de campos aleatórios estacionários e bidimensionais, obtidos considerando-se o logaritmo da condutividade hidráulica. Os problemas de fluxo e de transporte são resolvidos numericamente e os campos aleatórios gerados são não condicionados, ou seja, não necessariamente representam os valores observados em campo. Adicionalmente, a metodologia proposta é aplicada a um caso

hipotético e não a uma situação real.

Maxwell *et al.* (1999) apresentam uma metodologia que incorpora informações de características locais, na forma de medições de condutividade hidráulica, à avaliação do risco à saúde humana de indivíduos que utilizam água subterrânea contaminada para consumo doméstico. Um aspecto importante do referido trabalho é a utilização explícita de conceitos de geostatística e a geração de campos aleatórios condicionados. Novamente, a metodologia proposta é ilustrada por um estudo de caso hipotético.

Khadam e Kaluarachchi (2003) apresentam uma abordagem integrada para o gerenciamento da água subterrânea contaminada usando avaliação do risco à saúde humana e análise econômica em uma estrutura de análise de decisão multicriterial. A avaliação dos riscos não se restringe à ingestão da água subterrânea contaminada, levando também em consideração a inalação de gases e o contato dérmico. Especificamente em relação à condutividade hidráulica, a sua variabilidade espacial é representada por campos aleatórios estacionários e bidimensionais, obtidos a partir do logaritmo natural dos valores de condutividade. A solução dos problemas de fluxo e de transporte é numérica e os campos aleatórios gerados são não condicionados. A metodologia sugerida é aplicada também a um estudo de caso hipotético.

Bién *et al.* (2004) apresentam uma abordagem baseada em sistemas de informações geográficas (SIG) para a previsão de longo-termo do risco à saúde humana em sítios contaminados. O referido trabalho é mencionado aqui como exemplo de abordagem distinta das anteriores, onde a principal preocupação é a espacialização das informações de risco. A metodologia proposta, segundo os autores, permite a troca de informações entre modelos de fluxo e transporte de contaminantes e um sistema de informações geográficas (SIG) para definição de mapas de risco. Portanto, a questão da variabilidade espacial da condutividade hidráulica não é diretamente abordada, mas poderia eventualmente ser inserida na análise do problema de fluxo e transporte. Contudo, o estudo não aborda a questão da incerteza, uma vez que trabalha com cenários e não com o conceito de avaliação probabilística do risco.

Neste ponto é interessante destacar a existência de outra tendência em relação à questão da representação da variabilidade espacial e da incerteza relacionadas à avaliação do risco à saúde humana devido à contaminação do solo e da água subterrânea e que se caracteriza pelo uso de sistemas geográficos de informações (SIGs). Tristan *et al.* (2000), Korre *et al.* (2002), Juang *et al.* (2004), Gay e Korre (2006) e Carlon *et al.* (2008) são exemplos de trabalhos com este enfoque. Uma característica comum a estes trabalhos é a de que o problema do transporte dos contaminantes não é analisado. A variabilidade espacial e a incerteza são avaliadas diretamente a partir de valores de concentração de contaminantes

observados em campo. Como consequência, os mapas obtidos representam um instantâneo do momento atual de contaminação, não permitindo uma previsão de longo-termo dos riscos.

Benekos *et al.* (2007), Barros e Rubin (2008) e Maxwell *et al.* (2008) são exemplos de trabalhos mais recentes que tratam da avaliação probabilística do risco à saúde humana, considerando, além de outros fatores, a variabilidade espacial do meio físico.

Benekos *et al.* (2007) apresentam a integração de um modelo complexo de degradação química, transformação e movimento em um aquífero, sujeito a uma possível remediação, com a avaliação do risco à saúde humana para diferentes populações dentro de uma comunidade. Especificamente em relação ao meio físico, a variabilidade espacial da transmissividade é representada como um campo aleatório estacionário bidimensional, obtido a partir do logaritmo dos valores de transmissividade.

Barros e Rubin (2008) apresentam uma metodologia probabilística para avaliação dos riscos à saúde humana devido à contaminação da água subterrânea. O foco do trabalho é relacionar a avaliação do risco à saúde humana à questão da aquisição de dados físicos do meio poroso e da melhoria do entendimento das respostas fisiológicas do homem à contaminação. O aquífero é caracterizado pela média e variância do logaritmo natural da condutividade hidráulica, pela covariância espacial e pela escala (amplitude) de correlação. A solução do problema de fluxo e transporte de contaminantes no meio poroso saturado é obtida analiticamente.

O trabalho de Maxwell *et al.* (2008), embora se detenha à avaliação probabilística das concentrações dos contaminantes e não trate propriamente da avaliação probabilística do risco, merece referência pela complexidade do meio poroso da área de estudo. No referido trabalho, a variabilidade espacial da condutividade hidráulica está mais relacionada a variações entre unidades hidrogeológicas distintas e não propriamente a variações dentro de cada unidade hidrogeológica.

Uma análise dos estudos citados neste item mostra que a maioria dos trabalhos citados trata o fluxo de água subterrânea sob a hipótese de regime permanente e, quando se adota uma abordagem probabilística, o método Monte Carlo é utilizado para a geração de realizações equiprováveis das variáveis consideradas como aleatórias. Outro aspecto importante é o de que a análise do problema de fluxo e transporte de contaminantes é restrita à condição de meio poroso saturado, ou seja, não se aborda a questão do fluxo e transporte no meio não saturado, bem como, a inter-relação entre estes dois meios.

Em termos de representação da variabilidade espacial da condutividade hidráulica, os campos aleatórios são gerados, em sua maioria, sob a forma de campos estacionários, bidimensionais e isotrópicos e as simulações são não condicionadas, ou seja, não

necessariamente reproduzem os valores observados em campo. De modo geral, a análise da estrutura espacial da condutividade hidráulica é realizada a partir dos valores do logaritmo (decimal ou natural) da condutividade hidráulica.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AIChE. *Guidelines for chemical process quantitative risk analysis*. 2. ed. New York : American Institute of Chemical Engineers : Center for Chemical Process Safety, 2000. 750 p.
- ANDREASEN, P.; RASMUSSEN, B. Comparison of methods of hazard identification at plant level. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 3, p. 339-344, 1990.
- ANDRICEVIC, R.; CVETKOVIC, V. Evaluation of risk from contaminants migrating by groundwater. *Water Resources Research*, v. 32, n. 3, pp. 611-621, 1996.
- ARENDT, J. S. Using quantitative risk assessment in the chemical process industry. *Reliability Engineering and System Safety*, v. 29, p. 133-149, 1990.
- ASCE. American Society of Civil Engineering. Review of Geostatistics in geohydrology : I. basic concepts. *Journal of Hydraulic Engineering*, v. 116, n. 5, p. 612-632, 1990a.
- ASCE. American Society of Civil Engineering. Review of Geostatistics in geohydrology : II. applications. *Journal of Hydraulic Engineering*, v. 116, n. 5, p. 633-658, 1990b.
- ASTM. American Society for Testing and Materials. *Risk-based corrective action applied at petroleum release sites*. ASTM E 1739-95, 1995.
- ASTM. American Society for Testing and Materials. *Remediation of ground water by natural attenuation at petroleum release sites*. ASTM E 1943-98, 1998
- ASTM. American Society for Testing and Materials. *Standard guide for risk-based corrective action*. ASTM E 2081-00, 2000.
- BACHMAT, Y. et al. *Groundwater management : the use of numerical models*. 2. ed. Washington: American Geophysical Union, 1985. 180 p. (Water Resources Monograph Series; 5).
- BARNES, D. G. Time are tough: brother, can you paradigm? *Risk Analysis*, v. 14, n. 3, p. 219-223, 1994.
- BARROS, F. P. J. de; RUBIN, Y. A risk-driven approach for subsurface site characterization. *Water Resources Research*, v. 44, W01414, 14p., 2008. (doi: 10.1029/2007wr006081).
- BECK, M. B. Water quality modeling : a review of the analysis of uncertainty. *Water Resources Research*, v. 23, n. 8, p. 1393-1442, 1987.

- BENEKOS, I. D.; SHOEMAKER, C. A.; STENDIGER, J. Probabilistic risk and uncertainty analysis for bioremediation of four chlorinated ethenes in groundwater. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, v. 21, p. 375-390, 2007. (doi: 10.1007/s00477-006-0071-4).
- BIÉN, J. D.; MEER, J. ter; RULKENS, W. H.; RIJNAARTS, H. H. M. A GIS-based approach for the long-term prediction for human health risk at contaminated sites. *Environmental Modeling and Assessment*, v. 9, pp. 221-226, 2004.
- BIER, V. M. An overview of probabilistic risk analysis for complex engineered systems. In: MOLAK, V., edit. *Fundamental of risk analysis and risk management*. Lewis Publishers, 1996. p.67-85.
- BINKOWITZ, B. S.; WARTENBERG, D. Disparity in quantitative risk assessment : a review of input distributions. *Risk Analysis*, v. 21, n. 1, p. 75-90, 2001.
- BLEY, D.; KAPLAN, S.; JOHNSON, D. The strengths and limitations of PSA : where we stand. *Reliability Engineering and System Safety*, v. 38, p. 3-26, 1992.
- BUKOWSKI, J.; KORN, L.; WARTENBERG, D. Correlated inputs in quantitative risk assessment : the effects of distributional shape. *Risk Analysis*, v. 15, n. 2, p. 215-219, 1995.
- BURMASTER, D. E.; ANDERSON, P. D. Principles of good practice for the use of monte carlo techniques in human health and ecological risk assessments. *Risk Analysis*, v. 14, n. 4, p. 477-481, 1994.
- CANTER, L. W. *Environmental impact assessment*. 2. ed. McGraw-Hill, 1996. 660 p. (McGraw-Hill series in water resources and environmental engineering).
- CARLON, C.; PIZZOL, L.; CRITTO, A.; MARCOMINI, A. A spatial risk assessment methodology to support the remediation of contaminated land. *Environmental International*, v. 34, pp. 397-411, 2008.
- CHARBENEAU, R. J. *Groundwater hydraulics and pollutant transport*. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2000. 593 p.
- COPTY, N. K.; FINDIKAKIS, A. N. Quantitative estimates of uncertainty in evaluation of ground water remediation schemes. *Ground Water*, v. 38, n. 1, p. 29-37, 2000.
- COVELLO, V. T. Communicating risk in crisis and noncrisis situations : tools and techniques for effective environmental communication. In: KOLLURU, R. V. *et al.*, edits. *Risk assessment and management handbook for environmental, health and safety professionals*. New York : Mc-Graw Hill, 1996. p.15.3-15.44.
- COVELLO, V. T.; MERKHOFFER, M. W. *Risk assessment methods : approaches for assessing health and environmental risks*. New York : Plenum Press, 1993. 318 p.

- COVELLO, V. T.; MUMPOWER, J. Risk analysis and risk management: an historical perspective. *Risk Analysis*, v. 5, n. 2, p. 103-120, 1985.
- COX, L.A., Jr. *Risk analysis : Foundations, models and methods*. Norwell : Kluwer Academic Publishers, 2002. 556 p
- CRAWFORD-BROWN, D. J. *Risk-based environmental decisions: methods and culture*. Norwell : Kluwer Academy Publishers, 1999. 224 p.
- DAGAN, G. Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities : 1. conditional simulation and the direct problem. *Water Resources Research*, v. 18, n. 4, p. 813-833, 1982a.
- DAGAN, G. Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities : 1. the solute transport. *Water Resources Research*, v. 18, n. 4, p. 835-848, 1982b.
- DELHOMME, J. P. Spatial variability and uncertainty in groundwater flow parameters : a geostatistical approach. *Water Resources Research*, v. 15, n. 2, p. 269-280, 1979.
- DETTINGER, M. D.; WILSON, J. L. First order analysis of uncertainty in numerical models of groundwater flow : part 1 : mathematical development. *Water Resources Research*, v. 17, n. 1, p. 149-161, 1981.
- DING, K.; ZHOU, Z.; LIU, C. Latin hypercube sampling used in the calculation of fracture probability. *Reliability, Engineering and System Safety*, v. 59, p. 239-242, 1998.
- DOULL, J. The “red book” and other risk assessment milestones. *Human and Ecological Risk Assessment*, v. 9, n. 5, p. 1229-1238, 2003.
- FERGUSON, C. et al. (edit.) *Risk assessment for contaminated sites in Europe*. Nottingham : LQM Press, 1998. Volume 1 : Scientific Basis. 165 p.
- FETTER, C. W. *Contaminant hydrogeology*. 3. ed. Upper Saddle River : Prentice Hall, 1999. 500 p.
- FINLEY, B.; PAUSTENBACH, D. The benefits of probabilistic exposure assessment : three case studies involving contaminated air, water and soil. *Risk Analysis*, v. 14, n. 1, p. 53-73, 1994.
- FINLEY, B. et al. Recommended distributions for exposure factors frequently used in health risk assessments. *Risk Analysis*, v. 14, n. 4, p. 533-553, 1994.
- FINOTTI, A. R. *Estudo da aplicabilidade do modelo da ação corretiva baseada no risco (RBCA) em contaminações subterrâneas com gasolina e etanol*. Florianópolis : UFSC, 1997. Dissertação submetida ao Programa de mestrado em Engenharia Ambiental da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC).

- FISCHHOFF, B. Risk perception and communication unplugged : twenty years of process. *Risk Analysis*, v. 15, n. 2, p. 137-145, 1995.
- FREEZE, R.A. et al. Hydrogeological decision analysis : 1. framework. *Ground Water*, v. 28, n. 5, p. 738-766, 1990.
- FREEZE, R. A.; McWHORTER, D. B. A framework for assessing risk reduction due to DNAPL mass removal from low-permeability soils. *Ground Water*, v. 35, n. 1, p. 111-123, 1997.
- GAY, J. R.; KORRE, A. A spatially-evaluated methodology for assessing risk to a population from contaminated land. *Environmental Pollution*, v. 142, pp. 227-234, 2006.
- GELHAR, L. W. Stochastic subsurface hydrology from theory to applications. *Water Resources Research*, v. 22, n. 9, p. 135S-145S, 1986.
- GUIMARÃES, C. H. D. *Avaliação de risco ambiental de sítios contaminados por hidrocarbonetos de petróleo*. Rio de Janeiro : COPPE/UFRJ, 2003. 315 p. Dissertação de mestrado submetida ao corpo docente da Coordenação dos Programas de Pós-graduação de Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- HAAS, C. N. On modeling correlated random variables in risk assessment. *Risk Analysis*, v. 19, n. 6, p. 1205-1214, 1999.
- HAIMES, Y. Y. Total risk management. *Risk Analysis*, v. 11, n. 2, p. 169-171, 1991.
- HANSSON, S. O. Dimensions of risk. *Risk Analysis*, v. 9, n. 1, p. 107-112, 1989.
- JUANG, K. W.; CHEN, Y. S.; LEE, D. Y. Using sequential indicator simulation to assess the uncertainty of delineating heavy-metal contaminated soils. *Environmental Pollution*, v. 127, pp. 229-238, 2004.
- KHADAM, I.; KALUARACHCHI, J. J. Applicability of risk-based management and the need for risk-based economic decision analysis at hazardous waste contaminated sites. *Environmental International*, v. 1045, p. 1-17, 2003.
- KHADAM, I. M.; KALUARACHCHI, J. J. Multi-criteria decision analysis with probabilistic risk assessment for the management of contaminated ground water. *Environmental Impact Assessment Review*, v. 23, pp. 683-721, 2003.
- KHAN, F. I.; ABBASI, S. A. Techniques and methodologies for risk analysis in chemical process industries. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 11, p. 261-277, 1998.
- KHAN, F. I.; ABBASI, S. A. Major accidents in process industries and an analysis of causes and consequences. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 12, p. 361-378, 1999.

- KHAN, F. I.; ABBASI, S. A. Risk analysis of a typical chemical industry using ORA procedure. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 14, p. 43-59, 2001.
- KIRCHSTEIGER, C. On the use of probabilistic and deterministic methods in risk analysis. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 12, p. 399-419, 1999a.
- KIRCHSTEIGER, C. Trends in accidents, disasters and risk sources in Europe. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 12, p. 7-17, 1999b.
- KITANIDIS, P. K. *Introduction to geostatistics : applications to hydrogeology*. Cambridge : University Press, 1997. 249 p.
- KOLLURU, R. V. Risk assessment and management : a unified approach. In: KOLLURU, R. V. *et al.*, edits. *Risk assessment and management handbook for environmental, health and safety professionals*. New York : Mc-Graw Hill, 1996. p.1.3-1.41.
- KORRE, A.; DURUCAN, S.; KOUTROUMANI, A. Quantitative-spatial assessment of the risks associated with high Pb loads in soil around Lavrio, Greece. *Applied Geochemistry*, v. 17, pp. 1029-1045, 2002.
- KREWSKI, D.; BIRKWOOD, P. L. Risk assessment and risk management : a survey of recent models. In: LAVE, L. B., edit. *Risk assessment and management*. New York : Plenum Press, 1987. p.399-406.
- LANIAK, G. F. *et al.* An overview of a multimedia benchmarking analysis for three risk assessment models: RESRAD, MMSOILS, and MEPAS. *Risk Analysis*, v. 17, n. 2, p. 203-214, 1997.
- LEES, F. P. *Loss prevention in the process industries : hazard identification, assessment and control*. 2. ed. Oxford : Butterworth-Heinemann, 1996. (3 volumes).
- LINNEROOTH-BAYER, J.; WAHLSTRÖM, B. Applications of probabilistic risk assessments : the selection of appropriate tools. *Risk Analysis*, v. 11, n. 2, p. 239-248, 1991.
- LOFSTEDT, R. E. A European perspective on the NRC “red book”: risk assessment in the federal. *Human and Ecological Risk Assessment*, v. 9, n.5, p. 1327-1335, 2003.
- LOUVAR, J. F.; LOUVAR, B. D. *Health and environmental risk analysis : fundamentals with applications*. Upper Saddle River : Prentice Hall, 1998. 678 p. (Hall PTR Environmental Management & Engineering Series, v. 2).
- MASSMANN, J.; FREEZE, R. A. Groundwater contamination from waste management sites : the interaction between risk-based engineering design and regulatory policy : 1. methodology. *Water Resources Research*, v. 23, n. 2, p. 351-367, 1987a.

- MASSMANN, J.; FREEZE, R. A. Groundwater contamination from waste management sites : the interaction between risk-based engineering design and regulatory policy : 2. results. *Water Resources Research*, v. 23, n. 2, p. 368-380, 1987b.
- MASSMANN, J. et al. Hydrogeological decision analysis : 2. applications to ground-water contamination. *Ground Water*, v. 29, n. 4, p. 536-548, 1991.
- MAXWELL, R. M.; PELMUDER, S. D., TOMPSON, A. F. B.; KASTENBERG, W. E. On the development of a new methodology for groundwater-driven health risk assessment. *Water Resources Research*, v. 34, n. 4, pp. 833-847, 1998.
- MAXWELL, R. M.; KASTENBERG, W. E.; RUBIN, Y. A methodology to integrate site characterization information into groundwater-driven health risk assessment. *Water Resources Research*, v. 35, n. 9, pp. 2841-2855, 1999.
- MAXWELL, R. M.; CARLE, S. F.; TOMPSON, A. F. B. Contamination, risk, and heterogeneity: on the effectiveness of aquifer remediation. *Environmental Geology*, v. 54, p. 1771-1786, 2008. (doi: 10.1007/s00254-007-0955-8).
- McCALLUM, D. B.; SANTOS, S. L. Participation and persuasion : a communication perspective on risk management. In: KOLLURU, R. V. *et al.*, edits. *Risk assessment and management handbook for environmental, health and safety professionals*. New York : Mc-Graw Hill, 1996. p.16.1-16.32.
- McKAY, M. D.; BECKMAN, R. J.; CONOVER, W. J. A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics*, v. 21, n. 2, p. 239-245, 1979.
- MERCHANT, J. W. GIS-based groundwater pollution hazard assessment : a critical review of the DRASTIC model. *Photogrammetric Engineering & Remote Sensing*, v. 60, n. 9, p. 1117-1127, 1994.
- MILLS, W. B. et al. Multimedia benchmarking analysis for three risk assessment models: RESRAD, MMSOILS, and MEPAS. *Risk Analysis*, v. 17, n. 2, p. 187-201, 1997.
- MOLAK, V. Introduction and overview. In: MOLAK, V., edit. *Fundamental of risk analysis and risk management*. Boca Raton : Lewis Publishers, 1997. p.1-10.
- MONTAGUE, D. F. Process risk evaluation : what method to use ?. *Reliability Engineering and System Safety*, v. 29, p. 27-53, 1990.
- NRC. National Research Council. Commission on Life Sciences. Committee on the Institutional Means for Assessment of Risks to Public Health. *Risk assessment in the Federal Government : managing the process*. Washington : National Academy Press, 1983. 191p.

- NRC. National Research Council. Commission on Life Sciences. Board on Environmental Studies and Toxicology. Committee on Risk Assessment of Hazardous Air Pollutants. *Science and judgement in risk assessment*. Washington : National Academy Press, 1994. 651 p.
- PAPAZOGLU, I. A. et al. Probabilistic safety analysis in chemical installations. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 5, n. 3, p. 181-191, 1992.
- PATÉ-CORNELL, M. E. Uncertainties in risk analysis : six levels of treatment. *Reliability Engineering and System Safety*, v. 54, p. 95-111, 1996.
- PATÉ-CORNELL, M. E.; BOYKIN, R. Probabilistic risk analysis and safety regulation in the chemical industry. *Journal of Hazardous Materials*, v. 15, p. 97-122, 1987.
- PATTERSON, J. et al. Human health risk assessment: selected internet and world wide web resources. *Toxicology*, v. 173, p. 123-143, 2002
- PELMUDER, S. D.; YEH, W. W-G.; KASTENBERG, W. E. Regional scale framework for modeling water resources and health risk problems. *Water Resources Research*, v. 32, n. 6, p. 1851-1861, 1996.
- PETTS, J. et al. *Risk-based contaminated land investigation and assessment*. Chichester ; New York : Wiley, 1997. 334 p.
- RAI, S. N; KREWSKI, D. Uncertainty and variability analysis in multiplicative risk models. *Risk Analysis*, v. 18, n. 1, p. 37-45, 1998.
- ROBERTS , L. E. J.; HAYNS, M. R. Limitations and usefulness of risk assessment. *Risk Analysis*, v. 9, n. 4, p. 483-494, 1989.
- ROSEN, L. LeGRAND, H. E. An outline of a guidance framework for assessing hydrogeological risks at early stages. *Ground Water*, v. 35, n. 2, p.195-204. 1997.
- SEILER, F. A.; ALVAREZ, J. L. On the selection of distributions for stochastic variables. *Risk Analysis*, v. 16, n. 1, p. 5-18, 1996.
- SMITH, E. P.; YE, K. A statistical perspective of uncertainty. In: WARREN-HICKS, W. J.; MOORE, D. R. J., edit. *Uncertainty analysis in ecological risk assessment*. Proceedings from the Pellston Workshop on Uncertainty Analysis in Ecological Risk Assessment. 23-28 August 1995. Pellston, Michigan. Pensacola : Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC), 1998. p. 149-168.
- SMITH, R. L. Use of monte carlo simulation for human exposure assessment at a superfund site. *Risk Analysis*, v. 14, n. 4, p. 433-439, 1994.
- SWARTJES, F. A. Risk-based assessment of soil and groundwater quality in the Netherlands : standards and remediation urgency. *Risk Analysis*, v. 19, n. 6, p. 1235-1249, 1999.

- THOMPSON, K. M.; BURMASTER, D. E.; CROUCH, E. A. C. Monte carlo techniques for quantitative uncertainty analysis in public health risk assessments. *Risk Analysis*, v. 12, n. 1, p. 53-63, 1992.
- TIXIER, J. *et al.* Review of 62 risk analysis methodologies of industrial plants. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 15, p. 291-303, 2002.
- TRISTÁN, E. *et al.* Spatially resolved hazard and exposure assessments: an example of lead in soil at Lavrion, Greece. *Environmental Research Section A*, v. 82, pp. 33-45, 2000.
- USEPA. U. S. Environmental Protection Agency. *Guidelines principles for monte carlo analysis*. EPA/630/R-97/001. Washington : US Environmental Protection Agency, 1997. 35 p.
- USEPA. Environmental Protection Agency. *Guidelines for ecological risk assessment*. EPA/630/R-95/002F. Washington : US Environmental Protection Agency, 1998. 124 p + anexos.
- USEPA. Environmental Protection Agency. *Report of the workshop on selecting input distributions for probabilistic assessment*. EPA/630/R-98/004. Washington : US Environmental Protection Agency, 1999. paginação irregular.
- van der HEIDJE, P. K. M.; EL-KADI, A. I.; WILLIAMS, S. A. *Groundwater modeling: an overview and status report*. Report EPA 600/2-89/028. Ada : United States Environmental Protection Agency : R. S. Kerr Environmental Research Laboratory, 1988. 242 p.
- van der HEIDJE, P. K. M.; EL-KADI, A. I.; WILLIAMS, J. R. *Identification and compilation pf unsaturated/vadose zone models*. Report EPA 600/R-94/028. Ada : United States Environmental Protection Agency : R. S. Kerr Environmental Research Laboratory, 1994. 27 p. + anexos.
- van der HEIDJE, P. K. M.; ELNAWAWY, O. A. *Compilation of ground-water models*. Report EPA 600/R-93/118. Ada : United States Environmental Protection Agency : R. S. Kerr Environmental Research Laboratory, 1993. paginação irregular.
- van SCIVER, G. Quantitative risk analysis in the chemical process industry. *Reliability Engineering and System Safety*, v. 29, n. 01, p. 55-68, 1990.
- VOSE, D. *Risk analysis : a quantitative guide*. 2. ed. John Wiley & Sons, 2000. 418 p.
- WARREN-HICKS, W. J.; MOORE, D. R. J., edit. *Uncertainty analysis in ecological risk assessment*. Proceedings from the Pellston Workshop on Uncertainty Analysis in Ecological Risk Assessment. 23-28 August 1995. Pellston, Michigan. Pensacola : Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC), 1998. 319 p.
- WEBSTER, N. *Webster's third new international dictionary of the English language, unabridged*. Springfield : G. & C. Merriam Co., 1967. 2662 p.

3. FLUXO E TRANSPORTE EM MEIO POROSO NÃO SATURADO

O presente capítulo busca apresentar conceitos básicos relativos ao fluxo e ao transporte em meio poroso não saturado, visando fornecer subsídios para o desenvolvimento de modelos computacionais que resolvam os problemas de fluxo permanente unidimensional e de transporte unidimensional sob regime de fluxo permanente, ambos em meio poroso não saturado. Destaca-se que os referidos problemas são equacionados e resolvidos de modo desacoplado sob a hipótese de que as concentrações dos contaminantes são pequenas e não alteram significativamente a densidade da água e as características hidráulicas do meio.

Inicialmente, são discutidos aspectos teóricos relativos à formulação matemática do problema de fluxo permanente unidimensional em meio não saturado. Apresenta-se também o esquema numérico adotado para a solução do problema e algumas considerações em relação ao modelo computacional desenvolvido, modelo FLUX.

Na seqüência, procura-se discutir a formulação matemática do problema de transporte unidimensional em meio não saturado, destacando-se as simplificações advindas da adoção da hipótese de regime de fluxo permanente. Apresenta-se também o esquema numérico adotado para a solução do problema e algumas considerações em relação ao modelo computacional desenvolvido, modelo TRANSP. Finalmente, são apresentados os testes realizados com os modelos FLUX e TRANSP, procurando avaliar o desempenho de ambos.

3.1 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO FLUXO EM MEIO NÃO SATURADO

A equação que descreve o fluxo de água em meio poroso não saturado é obtida a partir do uso do conceito de continuidade e da utilização da equação de Darcy para meios porosos. Charbeneau (2000) apresenta a equação geral da continuidade aplicada ao fluxo de água em meio não saturado:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \text{div}(\tilde{q}) = S' \quad (3.1)$$

onde: θ = conteúdo volumétrico de água [L^3L^{-3}];

$\text{div}(\cdot)$ = operador divergente;

\tilde{q} = velocidade de Darcy [LT^{-1}];

S' = fonte/sumidouro externo [$L^3T^{-1}L^{-3}$].

Em relação à Equação 3.1, o termo $\frac{\partial\theta}{\partial t}$ representa a taxa de variação do conteúdo volumétrico (θ) em relação ao tempo (t) para um determinado volume de controle. O termo $\text{div}(\tilde{q})$ representa o balanço dos fluxos de água que entram e saem do volume de controle. Finalmente, o termo S' representa uma fonte e/ou sumidouro externos e que se caracterizam por adicionar ou retirar água do volume de controle a partir de pontos no interior do mesmo, ou seja, pontos não pertencentes às fronteiras do referido volume de controle.

A Equação de Darcy para fluxo de água em meio poroso não saturado pode ser representada por (Charbeneau, 2000):

$$\tilde{q} = -K(\theta).\text{grad}(h) \quad (3.2)$$

onde: $K(\theta)$ = condutividade hidráulica no meio poroso não saturado [LT^{-1}];

$\text{grad}(\cdot)$ = operador gradiente;

h = carga hidráulica [L].

A notação $K(\theta)$ foi usada na Equação 3.2 para destacar o fato de que a condutividade hidráulica no meio não saturado é função do conteúdo volumétrico (θ). Substituindo-se \tilde{q} , a partir de sua definição expressa na Equação 3.2, e considerando-se a ausência de uma fonte e/ou sumidouro externos, a Equação 3.1 pode ser escrita novamente como:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = -\text{div}[K(\theta).\text{grad}(h)] \quad (3.3)$$

Para fluxo de água em meio poroso não saturado, a carga hidráulica (h) pode ser definida como (Charbeneau, 2000):

$$h = z - \psi \quad (3.4)$$

onde: z = cota em relação a um plano de referência arbitrado [L];

ψ = altura de pressão (ou tensão) capilar [L].

A Equação 3.4 pressupõe o eixo z orientado positivamente para cima. Por definição, a altura de tensão capilar (ψ) é positiva sempre. Substituindo-se a carga hidráulica (h), como definida pela Equação 3.4, na Equação 3.3, tem-se:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\text{div}[\mathbf{K}(\theta) \cdot \text{grad}(z - \psi)] \quad (3.5)$$

Assumindo-se escoamento unidimensional na direção vertical z , a Equação 3.5 pode ser apresentada como:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \left[\mathbf{K}(\theta) \cdot \frac{\partial(z - \psi)}{\partial z} \right] \quad (3.6)$$

Analisando-se a Equação 3.6, verifica-se a existência de duas variáveis dependentes: θ e ψ . Para a sua solução, existe a necessidade de se estabelecer uma relação entre estas duas variáveis. Assumindo-se a existência de uma relação entre o conteúdo volumétrico (θ) e a altura de tensão capilar (ψ), ou seja, $\theta = f(\psi)$, e aplicando-se a Regra da Cadeia para a derivação, pode-se escrever $\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t}$. A Equação 3.6 pode ser então escrita como:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \left[\mathbf{K}(\psi) \cdot \frac{\partial(z - \psi)}{\partial z} \right] \quad (3.7)$$

Charbeneau (2000) define a função $c(\psi) = -\frac{\partial \theta}{\partial \psi}$, que representa a declividade da relação funcional entre a altura de tensão capilar (ψ) e o conteúdo volumétrico de água (θ) para um meio poroso não saturado. Deste modo, a Equação 3.7 pode ser representada em sua forma mais usual como:

$$c(\Psi) \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\mathbf{K}(\psi) \cdot \frac{\partial(z - \psi)}{\partial z} \right] \quad (3.8)$$

Para a hipótese de escoamento unidimensional e condição de regime permanente, tem-se $\frac{\partial \psi}{\partial t} = 0$ e, portanto, a equação diferencial parcial, representada pela Equação 3.8, pode ser reduzida a uma equação diferencial ordinária em z , como apresentada a seguir:

$$\frac{d}{dz} \left[\mathbf{K}(\psi) \cdot \frac{d(z - \psi)}{dz} \right] = 0 \quad (3.9)$$

Devido à condição de derivada em relação à z igual a zero, a Equação 3.9 implica em:

$$K(\psi) \cdot \frac{d(z - \psi)}{dz} = -q = \text{constante} \quad (3.10)$$

A Equação 3.10 representa a Lei de Darcy para o escoamento em meios porosos, já expressa anteriormente pela Equação 3.2. Considerando-se as propriedades básicas de derivação, a Equação 3.10 pode ser reescrita como:

$$q = -K(\psi) \cdot \left(\frac{dz}{dz} - \frac{d\psi}{dz} \right) \text{ ou } q = -K(\psi) \cdot \left(1 - \frac{d\psi}{dz} \right) \quad (3.11)$$

É importante destacar novamente que a condutividade hidráulica (K) no meio poroso não saturado, presente nas Equações 3.10 e 3.11, não é uma constante, como no caso do fluxo em meio saturado, mas varia com a tensão capilar (ψ). Charbeneau (2000) destaca que, por conveniência, K é usualmente representado por:

$$K(\psi) = k_r(\psi) \cdot K_s \quad (3.12)$$

onde: $k_r(\psi)$ = condutividade hidráulica relativa [adimensional];

K_s = condutividade hidráulica para o meio poroso saturado [LT^{-1}].

Conforme já mencionado, existe a necessidade de se estabelecer uma relação entre as variáveis θ e ψ para a solução da equação de fluxo. Adicionalmente, deve-se conhecer também uma relação entre a condutividade hidráulica relativa (k_r) e a tensão capilar (ψ).

A relação entre θ e ψ é expressa pela curva de retenção do solo em estudo. Charbeneau (2000) descreve dois dos modelos mais utilizados para a representação da referida relação: modelo de Brooks-Corey e o modelo de van Genuchten.

No presente trabalho, descreve-se resumidamente o modelo de van Genuchten, em razão da sua utilização para representação da relação entre θ e ψ . O modelo sugerido por van Genuchten (1980) expressa a relação entre θ e ψ através da seguinte relação empírica:

$$\frac{\theta - \theta_r}{\phi - \theta_r} = \left(\frac{1}{1 + (\alpha\psi)^N} \right)^M \quad (3.13)$$

onde: θ = conteúdo volumétrico [L^3L^{-3}];

θ_r = conteúdo volumétrico residual [L^3L^{-3}];

ϕ = porosidade [L^3L^{-3}];

α = parâmetro do modelo, obtido experimentalmente [L^{-1}];

M e N = parâmetros do modelo, obtidos experimentalmente.

As relações a seguir definem conceitualmente o conteúdo volumétrico de água (θ), a porosidade do solo (ϕ) e o grau de saturação de água no solo (S):

$$\theta = \frac{V_a}{V_t} \quad \phi = \frac{V_v}{V_t} \quad S = \frac{V_a}{V_v}$$

onde: V_a = volume de água [L^3];

V_v = volume de vazios [L^3];

V_t = volume total [L^3].

A partir das definições apresentadas de conteúdo volumétrico (θ), porosidade (ϕ) e grau de saturação (S), a Equação 3.13 pode ser reescrita como:

$$\frac{S - S_r}{S_m - S_r} = \left(\frac{1}{1 + (\alpha\psi)^N} \right)^M \quad (3.14)$$

onde: S = grau de saturação [L^3L^{-3}];

S_m = grau de saturação máximo (em geral igual a 1,0) [L^3L^{-3}];

S_r = grau de saturação residual [L^3L^{-3}].

A condutividade hidráulica relativa (k_r) pode ser relacionada ao conteúdo volumétrico (θ), ao grau de saturação (S) e à tensão capilar (ψ). Charbeneau (2000) destaca que, usualmente, é preferível relacionar k_r a θ e S em razão das relações não apresentarem um comportamento histerético, o que não ocorre com a relação entre k_r e ψ .

A função $k_r = f(\psi)$ pode ser obtida pelo uso da relação entre tensão capilar (ψ) e saturação da água (S), Equação 3.14, no modelo sugerido por Mualem (1976), conforme apresentado em Cota (2000):

$$k_r = \frac{\left(1 - (\alpha\psi)^{N-1} \cdot (1 + (\alpha\psi)^N)^{-M}\right)^2}{(1 + (\alpha\psi)^N)^{M/2}} \quad (3.15)$$

3.1.1 Condições Inicial e de Contorno para o Problema de Fluxo em Meio Não Saturado

As condições iniciais necessárias para a solução do problema de fluxo transiente em meio não saturado, considerando-se a Equação 3.8, são os valores de altura de pressão no instante t igual a zero, ou seja, $\psi(z, t) = \psi(z, 0)$. No presente estudo, onde se considera o regime permanente, a solução da Equação 3.11 não exige teoricamente a definição de nenhuma condição inicial.

As condições de contorno para o problema de fluxo em meio não saturado podem ser classificadas de acordo com a mesma classificação utilizada para problemas de fluxo em meio saturado. Spitz e Moreno (1996) apresentam como tipos básicos de condições de contorno para fluxo em meio saturado:

- Tipo I - Definição da pressão ou carga hidráulica junto ao contorno: representa a condição de contorno que mais restringe a solução do modelo matemático, sendo, portanto, a de mais fácil solução (Condição de Dirichlet);
- Tipo II - Definição do fluxo volumétrico: representa a condição de contorno que menos restringe a solução do modelo matemático, sendo, portanto, a de mais difícil solução (Condição de Neumann);
- Tipo III - Contorno semi-permeável ou fluxo variável em função da carga hidráulica (Condição de Cauchy).

As condições de contorno adotadas no desenvolvimento do modelo computacional FLUX para o problema de fluxo permanente unidimensional em meio poroso não saturado foram fluxo volumétrico conhecido (condição Tipo II) para o topo da coluna de solo e carga hidráulica conhecida (condição Tipo I) para a base da coluna de solo, conforme descrito no item a seguir.

É importante destacar que as condições de contorno para o problema de fluxo no meio poroso não saturado no presente trabalho são constantes ao longo do tempo.

3.1.2 Solução Numérica da Equação do Fluxo em Meio Não Saturado

A Equação 3.11 que representa o fluxo permanente unidimensional em meio poroso não saturado foi estabelecida no item 3.1, quando foram discutidos alguns dos conceitos relativos à formulação matemática do fluxo em meio não saturado. Com as devidas manipulações algébricas, a partir da Equação 3.11, pode-se estabelecer:

$$\frac{d\psi}{dz} = \left(\frac{K(\psi) + q}{K(\psi)} \right) = f(\psi) \quad (3.16)$$

Destaca-se novamente que a Equação 3.16 foi obtida considerando-se o eixo z orientado positivamente para cima. Portanto, para fluxo descendente, tem-se q negativo. A sua solução pode ser obtida numericamente, de forma aproximada, através do uso de um esquema de diferenças finitas. Deste modo, a Equação 3.16 pode ser aproximada por:

$$\frac{\Delta\psi}{\Delta z} \cong \left(\frac{K(\psi) + q}{K(\psi)} \right) = f(\psi) \quad (3.17)$$

Usando-se um esquema de diferenças finitas ascendentes para a Equação 3.17, tem-se:

$$\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{\Delta z_i} \cong \left(\frac{K(\psi_{i+1/2}) + q}{K(\psi_{i+1/2})} \right) = f(\psi_{i+1/2}) \quad (3.18)$$

ou, de modo alternativo:

$$\psi_{i+1} \cong \psi_i + \left(\frac{K(\psi_{i+1/2}) + q}{K(\psi_{i+1/2})} \right) \cdot \Delta z_i = \psi_i + f(\psi_{i+1/2}) \cdot \Delta z_i \quad (3.19)$$

O esquema numérico, representado pela Equação 3.19, assume uma discretização espacial (Δz_i) que pode ser variável ao longo da vertical que representa a coluna de solo em análise. O esquema de discretização espacial para a solução numérica do problema do fluxo em meio poroso não saturado é apresentado na Figura 3.1. O referido esquema é denominado de esquema centrado no bloco, já que os valores de ψ são estimados para o ponto localizado no centro da célula.

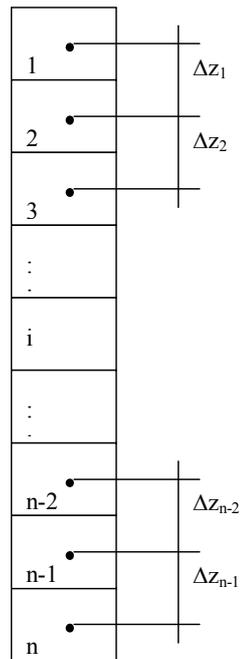


Figura 3.1 Esquema de discretização espacial para a solução do problema de fluxo em meio poroso não saturado

A versão computacional implementada adota, por hipótese, o solo como sendo homogêneo por camadas, ou seja, o solo pode apresentar camadas com características distintas. Contudo, dentro de cada camada, o solo é considerado homogêneo. Portanto, o valor de condutividade hidráulica para o meio poroso saturado (K_s) é constante ao longo de cada camada que constitui a coluna de solo.

A partir da definição de $K(\psi)$, dada pela Equação 3.12, o valor de $K(\psi_{i+1/2})$ pode ser obtido de:

$$K(\psi_{i+1/2}) = k_r(\psi_{i+1/2}) \cdot K_s \quad (3.20)$$

Lappala *et al.* (1987) destacam que, para o cálculo da condutividade hidráulica relativa entre células ($k_r(\psi_{i+1/2})$), a média geométrica das condutividades hidráulicas relativas das

células apresentam os melhores resultados nas simulações. Portanto, o valor de $k_r(\psi_{i+1/2})$ é estimado a partir de:

$$k_r(\psi_{i+1/2}) = \sqrt{k_r(\psi_i) \cdot k_r(\psi_{i+1})} \quad (3.21)$$

A condutividade hidráulica saturada (K_s), relativa à transição entre camadas adjacentes, é calculada pela média harmônica das condutividades hidráulicas saturadas das respectivas camadas, conforme sugerido por Lappala *et al.* (1987). Por exemplo, supondo duas camadas adjacentes 1 e 2, o valor de K_s é dado por:

$$\frac{1}{K_s} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{K_{s_1}} + \frac{1}{K_{s_2}} \right] \quad (3.22)$$

onde K_{s_i} representa a condutividade hidráulica saturada da camada i .

Considerando-se um modelo de fluxo permanente, não existe a necessidade de se definir uma condição inicial. No entanto, existe a necessidade de se estabelecer as condições de contorno no topo e na base da coluna de solo.

Devido à hipótese de regime permanente, as condições de contorno para o problema de fluxo são constantes ao longo do tempo. Adotou-se uma condição de fluxo volumétrico (q) constante no topo da coluna de solo. Já para a base da coluna, adotou-se o valor de $(z - \psi)$ igual a zero como condição de contorno. Arbitrando-se a base da coluna de solo não saturado como plano de referência, a referida condição de contorno representa um valor de tensão capilar (ψ) nulo junto à base da coluna. Na implementação do modelo computacional FLUX, considerou-se ainda o valor de recarga (q) igual e constante no tempo para todas as células do esquema numérico.

O estabelecimento da condição de contorno exatamente na base da coluna de solo exigiu uma modificação do esquema de discretização espacial junto à mesma, uma vez que o esquema numérico é centrado na célula. A Figura 3.2 procura destacar a modificação adotada e que vale apenas para a célula n . Verifica-se, a partir da Figura 3.2, que Δz_n corresponde à metade de Δz_{n-1} , supondo-se células de mesma espessura.

É importante também destacar que, em razão do esquema de discretização adotado (Figuras 3.1 e 3.2) e da definição de tensão capilar (ψ) nula junto à base da coluna, o

esquema numérico é calculado no sentido regressivo das células, ou seja, da célula n (base da coluna) para a célula 1 (topo da coluna).

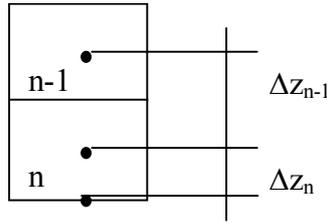


Figura 3.2 Esquema de discretização espacial para a solução do problema de fluxo em meio poroso não saturado. Detalhe da representação da célula n .

A partir das Equações 3.20 e 3.21, a Equação 3.19 pode ser reescrita como:

$$\psi_i \cong \psi_{i+1} - f(\psi_i, \psi_{i+1}) \cdot \Delta z = \psi_{i+1} - \left(\frac{\sqrt{k_r(\psi_i) \cdot k_r(\psi_{i+1})} \cdot K_s + q}{\sqrt{k_r(\psi_i) \cdot k_r(\psi_{i+1})} \cdot K_s} \right) \cdot \Delta z \quad (3.23)$$

A Equação 3.23 representa finalmente o esquema numérico adotado para o modelo FLUX. Verifica-se, a partir da análise da Equação 3.23, que o esquema numérico é um esquema implícito, já que para o cálculo de ψ_i é necessário o conhecimento de $k_r(\psi_i)$. O processo iterativo implementado para a solução da Equação 3.23 é relativamente simples, sendo constituído por:

Passo 1 – Aproximação inicial para $k_r(\psi_i)$: $k_r(\psi_i)^{(0)} = k_r(\psi_{i+1})$;

Passo 2 – Cálculo de ψ_i (Equação 3.23);

Passo 3 – Cálculo de $k_r(\psi_i)^{(k)}$ (Equação 3.15);

Passo 4 – Comparação entre os valores de $k_r(\psi_i)^{(k)}$ e $k_r(\psi_i)^{(k-1)}$.

$$\text{Se } \left| k_r(\psi_i)^{(k)} - k_r(\psi_i)^{(k-1)} \right| > \varepsilon, \text{ então voltar ao } \textit{Passo 2}, \text{ senão } \textit{Fim}.$$

3.2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO TRANSPORTE EM MEIO NÃO SATURADO

Uma revisão interessante sobre os processos básicos de fluxo de água e transporte de contaminantes em meio poroso não saturado pode ser encontrada em Nielsen *et al.* (1986). Os referidos autores apresentam a equação clássica utilizada para descrever o transporte de

contaminantes em meio poroso não saturado, considerando-se regime transiente, conforme reproduzida a seguir:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b C_s)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial z} - qC \right) + \sum_i \phi_i(C, C_s, \dots) \quad (3.24)$$

onde: C e C_s = concentrações nas fases aquosa e sólida, respectivamente [ML^{-3}];

θ = conteúdo volumétrico [L^3L^{-3}];

ρ_b = densidade aparente do solo [ML^{-3}];

D = coeficiente de dispersão [L^2T^{-1}];

q = fluxo volumétrico de água (velocidade de Darcy) [LT^{-1}];

ϕ_i = fonte/sumidouro externo [$ML^{-3} T^{-1}$].

A Equação 3.24 considera explicitamente somente os processos de difusão e advecção (convecção), representados respectivamente pelos primeiro e segundo termos do lado direito da equação. Contudo, Nielsen *et al.* (1986) comentam que o parâmetro D pode ser usado como um parâmetro empírico que inclua todos os mecanismos de dispersão que não são explicitamente representados na Equação 3.24. No entanto, destacam que o referido parâmetro é geralmente utilizado para representar apenas a difusão molecular (ou iônica) e a dispersão mecânica.

A partir das definições de conteúdo volumétrico (θ), porosidade (ϕ) e grau de saturação (S), apresentadas no item 3.1, tem-se que $\theta = \phi.S$. Já a densidade aparente do solo (ρ_b) pode ser definida como:

$$\rho_b = (1 - \phi)\rho_s \quad (3.25)$$

onde ρ_s representa a densidade dos grãos do solo.

Assumindo-se a não existência de fontes/sumidouros externos e considerando-se as definições de conteúdo volumétrico (θ), em função da porosidade (ϕ) e grau de saturação (S), e de densidade aparente (ρ_b), dada pela Equação 3.25, a Equação 3.24 pode ser escrita novamente como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi S C + \rho_s (1 - \phi) C_s) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\phi S D \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial (qC)}{\partial z} \quad (3.26)$$

O transporte de contaminantes no solo constitui um problema de transporte em um sistema multi-fásico. Quando se considera o transporte de uma substância química em sistemas multi-fásicos, uma questão fundamental é como as concentrações da substância nas diferentes fases se relacionam entre si (Charbeneau, 2000).

A abordagem mais simples e usual para o estabelecimento das relações entre as concentrações nas diferentes fases, ainda segundo Charbeneau (2000), é assumir que a taxa de transporte de massa através do solo dentro de uma fase é lenta comparada com a taxa de transferência entre fases que estão localmente em contato. Esta hipótese é chamada de hipótese de equilíbrio local.

Nielsen *et al.* (1986) destacam que a abordagem mais usual para modelar o termo de sorção é assumir adsorção ou troca instantânea (hipótese de equilíbrio local) e uma relação linear entre a concentração na fase sólida (C_s) e a concentração na fase aquosa (C), dada por:

$$C_s = K_d C \quad (3.27)$$

onde K_d é um coeficiente de distribuição.

Discussões a respeito de K_d e do processo de partição de um contaminante entre as fases sólida e aquosa podem ser encontradas em vários textos relativos ao transporte de contaminantes em meio poroso, como por exemplo, Marsily (1986), Spitz e Moreno (1996) e Charbeneau (2000). O coeficiente K_d é obtido normalmente através da relação (Cota, 2000):

$$K_d = f_{oc} K_{oc} \quad (3.28)$$

onde: K_{oc} = coeficiente de partição em relação ao carbono orgânico [$L^3 M^{-1}$];

f_{oc} = fração de carbono orgânico presente na matriz do solo [MM^{-1}].

Substituindo-se as Equações 3.27 e 3.28 na Equação 3.26, obtém-se a equação de transporte de contaminantes dissolvidos em fase aquosa na zona não saturada, tal como apresentada no trabalho de Cota (2000), e que é descrita a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(S + \frac{(1-\phi)}{\phi} \rho_s f_{oc} K_{oc} \right) C \right] = \frac{\partial}{\partial z} \left(\phi S D \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial (qC)}{\partial z} \quad (3.29)$$

A Equação 3.29, portanto, descreve o problema de transporte unidimensional em meio não saturado sob as hipóteses de equilíbrio local e relação linear entre a concentração na fase

sólida (C_s) e a concentração na fase aquosa (C). Admitindo-se, ainda, que o parâmetro D representa apenas os mecanismos de difusão molecular (ou iônica) e a dispersão mecânica, tem-se que a Equação 3.29 é aplicável aos problemas envolvendo substâncias não reativas.

A expressão contida nos parênteses internos do termo à esquerda da igualdade na Equação 3.29 pode ser reescrita em termos do fator de retardo (R), definido para o meio não saturado como (Nielsen *et al.*, 1986 e Marshall *et al.*, 2000):

$$R = 1 + \frac{\rho_b K_d}{\theta} \quad (3.30)$$

A partir das definições de ρ_b , θ e K_d , a Equação 3.30 pode ser escrita como:

$$R = 1 + \frac{(1-\phi)}{\phi S} \rho_s K_{oc} f_{oc} \quad (3.31)$$

Finalmente, substituindo a Equação 3.31 na Equação 3.29, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\phi SRC] = \frac{\partial}{\partial z} \left(\phi SD \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial (qC)}{\partial z} \quad (3.32)$$

A Equação 3.32, também apresentada em Cota (2000), descreve a variação da concentração de um contaminante não reativo na fase aquosa (C) em função do tempo (t) e da posição na coluna de solo (z), considerando-se a condição de regime transiente e as hipóteses de equilíbrio local e relação linear entre a concentração na fase sólida (C_s) e a concentração na fase aquosa (C).

Wierenga (1977), Beese e Wierenga (1980) e Marshall *et al.* (2000) investigaram o problema do efeito da variabilidade temporal de curto-termo no transporte de longo-termo de contaminantes em solos. Os resultados obtidos mostraram que a frente de contaminação média, originada a partir de uma longa seqüência de chuvas geradas aleatoriamente, tende à frente de contaminação obtida a partir da consideração de uma taxa constante de infiltração.

O uso de taxas constantes de infiltração, segundo Marshall *et al.* (2000), ao invés de taxas de infiltração variáveis ao longo de muitos anos não resulta em erros significativos na estimativa do transporte. Ainda segundo os referidos autores, esta conclusão pode resultar em uma economia em esforço computacional e coleta de dados, uma vez que dados médios anuais e intervalos de tempo de cálculo (discretização temporal) maiores devem ser

adequados para a estimativa de transporte de substâncias conservativas nos solos para simulações de longo-termo. Os referidos estudos são citados como justificativas para a adoção da hipótese de fluxo permanente adotada na presente tese.

Deste modo, considerando-se o exposto, é razoável admitir o fluxo volumétrico (q) constante ao longo do tempo e do espaço. A hipótese de q constante no tempo implica em fator de retardo (R) e grau de saturação (S) também constantes no tempo. Adicionalmente, considerando-se o meio poroso não saturado como indeformável, ou seja, ϕ constante no tempo, a Equação 3.32 pode ser reescrita como:

$$\phi SR \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\phi SD \frac{\partial C}{\partial z} \right) - q \frac{\partial C}{\partial z} \quad (3.33)$$

A Equação 3.33 representa a variação da concentração de um contaminante na fase aquosa em função do tempo (t) e da posição na coluna de solo (z), considerando-se a condição de regime permanente, ou seja, o fluxo volumétrico de água (q) constante no tempo.

3.2.1 Condições Inicial e de Contorno para o Problema de Transporte em Meio Não Saturado

As condições iniciais necessárias para a solução do problema de transporte em meio não saturado, considerando-se a Equação 3.33, são os valores de concentração do contaminante na fase aquosa para t igual a zero, ou seja, $C(z, t) = C(z, 0)$.

Marsily (1986) discute genericamente as condições de contorno para problemas de transporte em meio poroso (saturado e não saturado), destacando que estas devem ser estabelecidas levando-se em consideração as condições de fluxo junto ao contorno. O referido autor define quatro tipos de condição de contorno para o problema de transporte em meio poroso, a saber:

- Contorno com fluxo entrando no sistema: A concentração neste tipo de fronteira é determinada em função da concentração do fluxo que entra no sistema. Portanto, neste caso, $C = C_0$;

- Contorno com fluxo saindo do sistema: Neste caso, assume-se que a concentração no fluxo saindo do sistema por convecção não varia quando ele cruza o contorno. Matematicamente, para o presente trabalho, tem-se $\frac{\partial C}{\partial z} = 0$;
- Contorno com fluxo saindo do sistema, considerando ainda a dispersão: Neste caso, considera-se que existe uma diferença entre as concentrações dentro do sistema (C) e fora do sistema (C_0) e, para evitar uma descontinuidade no perfil de concentrações, assume-se uma variação linear das concentrações em uma camada de espessura arbitrária (ε).
- Contorno sem fluxo: Embora não exista transporte por advecção, uma vez que o fluxo é nulo, pode-se admitir transporte pelo processo de difusão através do contorno. Deste modo, tem-se $\frac{\partial C}{\partial z} = f$, onde f procura caracterizar o processo de difusão.

As condições de contorno adotadas no desenvolvimento do modelo TRANSP para o problema de transporte unidimensional em meio poroso não saturado sob regime permanente foram contorno com fluxo entrando no sistema no topo da coluna de solo, uma vez que adotou-se concentração constante para o topo, e contorno com fluxo saindo do sistema, uma vez que adotou-se gradiente de concentração nulo para a base da coluna, como descrito no item a seguir.

3.2.2 Solução Numérica da Equação do Transporte em Meio Não Saturado

A Equação 3.33 que representa o transporte de um contaminante em meio poroso não saturado para a condição de fluxo em regime permanente foi estabelecida no item 3.2, que trata de aspectos teóricos relacionados ao problema de transporte no meio não saturado. O presente item trata do estabelecimento do procedimento para a solução numérica da equação do transporte em meio não saturado sob regime permanente.

A discussão sobre a solução numérica da equação de transporte em meio não saturado, para a condição de regime permanente, parte do esquema numérico adotado por Cota (2000) para a solução da Equação 3.32, que representa a condição de regime transiente. O esquema numérico adotado no referido trabalho é apresentado sob a forma da Equação 3.34 a seguir:

$$\frac{\phi_i S_i^{t+1} R_i^{t+1} C_i^{t+1} - \phi_i S_i^t R_i^t C_i^t}{\Delta t} = \left[\frac{\bar{D}_{i+1/2}^{t+1}}{\Delta z_i^*} \left(\frac{C_{i+1}^{t+1} - C_i^{t+1}}{z_{i+1} - z_i} \right) - \frac{\bar{D}_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i^*} \left(\frac{C_i^{t+1} - C_{i-1}^{t+1}}{z_i - z_{i-1}} \right) \right] - \left(\frac{q_{i+1/2}^{t+1} C_{i+1/2}^{t+1} - q_{i-1/2}^{t+1} C_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i^*} \right) \quad (3.34)$$

O valor de $\bar{D}_{i\pm 1/2}^{t+1}$, presente na Equação 3.34, é definido a partir da Equação 3.35, apresentada a seguir (Cota, 2000):

$$\bar{D}_{i\pm 1/2} = \frac{\phi_i S_i Dc_i + \phi_{i\pm 1} S_{i\pm 1} Dc_{i\pm 1}}{2} \quad (3.35)$$

Na Equação 3.35, $Dc_{i\pm 1}$ representa o coeficiente de dispersão hidrodinâmico corrigido. Bear e Verruijt (1987) apresentam discussão teórica sobre a dispersão numérica introduzida pelos diferentes esquemas de diferenças finitas. No caso do uso de um esquema de diferenças central para o espaço e de diferenças finitas ascendente para o tempo, Dc pode ser calculado através de (Bear e Verruijt, 1987):

$$Dc_i = D_m + \alpha_L \frac{q_i}{\phi_i S_i} - \frac{1}{2} \Delta t \left(\frac{q_i}{\phi_i S_i} \right)^2 \quad (3.36)$$

onde: D_m = coeficiente de difusão molecular do contaminante na fase aquosa [L^2/T];

α_L = dispersividade longitudinal do meio poroso [L] e demais variáveis já definidas anteriormente.

O último termo da Equação 3.36 representa um fator de correção do coeficiente de dispersão para atenuar problemas de oscilação e dispersão numérica, possíveis de ocorrer na simulação de casos onde o fluxo advectivo é predominante (Cota, 2000).

Voltando a comentar a Equação 3.34, o valor de Δz_i^* , presente na referida equação, é dado por (Cota, 2000):

$$\Delta z_i^* = \frac{z_{i+1} - z_{i-1}}{2} \quad (3.37)$$

O esquema numérico representado pela Equação 3.34 pode ser simplificado a partir da consideração de regime permanente. A partir da Equação 3.34 e das hipóteses de fluxo volumétrico (q), fator de retardo (R), grau de saturação (S) e porosidade (ϕ) constantes no tempo, tem-se:

$$\phi_i S_i R_i \left(\frac{C_i^{t+1} - C_i^t}{\Delta t} \right) = \left[\frac{\bar{D}_{i+1/2}}{\Delta z_i^*} \left(\frac{C_{i+1}^{t+1} - C_i^{t+1}}{z_{i+1} - z_i} \right) - \frac{\bar{D}_{i-1/2}}{\Delta z_i^*} \left(\frac{C_i^{t+1} - C_{i-1}^{t+1}}{z_i - z_{i-1}} \right) \right] - \frac{q}{2\Delta z_i^*} (C_{i+1}^{t+1} - C_{i-1}^{t+1}) \quad (3.38)$$

Com as devidas manipulações algébricas, a Equação 3.38 pode ser reescrita de forma a isolar os valores de concentrações na linha de tempo $t+1$, valores desconhecidos, dos valores da linha de tempo t , valores conhecidos. Deste modo, tem-se:

$$\left(-\frac{\bar{D}_{i-1/2}}{\Delta z_i^* (z_i - z_{i-1})} - \frac{q}{2\Delta z_i^*} \right) C_{i-1}^{t+1} + \left(\frac{\bar{D}_{i-1/2}}{\Delta z_i^* (z_i - z_{i-1})} + \frac{\bar{D}_{i+1/2}}{\Delta z_i^* (z_{i+1} - z_i)} + \frac{\phi_i S_i R_i}{\Delta t} \right) C_i^{t+1} + \left(-\frac{\bar{D}_{i+1/2}}{\Delta z_i^* (z_{i+1} - z_i)} + \frac{q}{2\Delta z_i^*} \right) C_{i+1}^{t+1} = \frac{\phi_i S_i R_i}{\Delta t} C_i^t \quad (3.39)$$

Considerando-se a mesma discretização espacial utilizada para o problema de fluxo, apresentada na Figura 3.1, verifica-se que a Equação 3.39 representa um sistema de equações com $n-1$ equações e $n+1$ variáveis, onde n representa o número de células utilizadas para representar a coluna de solo. Além disso, para cada instante de tempo $t+1$, a solução no instante de tempo t é requerida. Portanto, além de uma condição inicial, são necessárias duas equações adicionais dadas pelas condições de contorno para a solução do sistema.

3.2.3 Discussão do Sistema de Equações e Método de Solução

A solução do problema de transporte em meio não saturado, como discutido no item anterior, consiste na solução de um sistema de equações para cada instante de tempo $t+1$. A dimensão do sistema de equações é definida pela discretização espacial (Δz) adotada para a representação da coluna de solo em análise.

Considerando-se n células para representação da coluna de solo, o sistema de equações terá dimensões $(n+1) \times (n+1)$. Um número de $n-1$ equações resulta diretamente do uso da Equação 3.39. As duas equações restantes resultam das condições de contorno no topo da coluna de solo e na base da coluna de solo.

A condição de contorno adotada para o topo da coluna de solo foi uma condição do tipo Dirichlet, ou seja, os valores de concentração são conhecidos ao longo do tempo. Deste modo, tem-se a função $C_1^t = f(t)$ conhecida. Esta condição implica em valor de C_1 constante para cada instante de tempo t e, por consequência, na seguinte equação adicional:

$$C_1^t = C_0(t) \quad (3.40)$$

Inicialmente, a condição de contorno adotada para a base da coluna de solo foi uma condição do tipo Neumann, ou seja, o gradiente de concentração $(\partial C/\partial z)$ junto ao contorno é conhecido ao longo do tempo. Para o presente trabalho, adotou-se gradiente de concentração nulo junto à base da coluna. Numericamente, esta hipótese pode ser aproximada por:

$$\frac{\partial C}{\partial z} \cong \frac{C_{n+1}^t - C_n^t}{\Delta z_n} = 0 \quad \text{ou} \quad -C_n^t + C_{n+1}^t = 0 \quad (3.41)$$

Este tipo de condição de contorno adotada para a base da coluna de solo implica em concentrações constantes na interface entre os meios não saturado e saturado, desprezando os prováveis efeitos de diluição em função de um maior volume de água no meio saturado.

Por questão de compatibilidade, o esquema de discretização espacial adotado junto à base da coluna de solo para o problema de transporte foi igual ao adotado para o problema de fluxo, representado na Figura 3.2.

As Equações 3.40 e 3.41 representam as duas equações adicionais necessárias para a definição do sistema de equações que permite a solução, para cada instante de tempo $t+1$, do problema de transporte unidimensional em meio não saturado sob regime permanente.

As Equações 3.39 a 3.41 definem um sistema de equações com matriz dos coeficientes banda tridiagonal, sendo representado na forma matricial pela Equação 3.42 a seguir:

$$\begin{bmatrix} F_1 & G_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ E_2 & F_2 & G_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & E_n & F_n & G_n \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & E_{n+1} & F_{n+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \cdots \\ C_n \\ C_{n+1} \end{bmatrix}_{t+1} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \cdots \\ r_n \\ r_{n+1} \end{bmatrix}_t \quad (3.42)$$

onde: $E_i = -\frac{q}{2\Delta z_i^*} - \frac{D_{i-1/2}}{\Delta z_i^*(z_i - z_{i-1})}$ para $i = 2, \dots, n$;

$E_1 = 0$ (própria definição do sistema) e $E_{n+1} = 1$ (condição de contorno na base);

$$F_i = \frac{\phi_i S_i R_i}{\Delta t} + \frac{D_{i+1/2}}{\Delta z_i^*(z_{i+1} - z_i)} + \frac{D_{i-1/2}}{\Delta z_i^*(z_i - z_{i-1})}$$
 para $i = 2, \dots, n$;

$F_1 = 1$ (condição de contorno no topo) e $F_{n+1} = -1$ (condição de contorno na base);

$$G_i = \frac{q}{2\Delta z_i^*} - \frac{D_{i+1/2}}{\Delta z_i^*(z_{i+1} - z_i)}$$
 para $i = 2, \dots, n$;

$G_1 = 0$ (condição de contorno no topo) e $G_{n+1} = 0$ (própria definição do sistema);

$$r_i = \left(\frac{\phi_i S_i R_i}{\Delta t} \right) C_i^t$$
 para $i = 2, \dots, n$;

$r_1 = C_0(t)$ (condição de contorno no topo) e $r_{n+1} = 0$ (condição de contorno na base);

O sistema de equações representado matricialmente pela Equação 3.42 é composto por uma matriz de coeficientes constante no tempo, pelo vetor \mathbf{C} que armazena os valores de concentração nas diferentes células no instante $t+1$ e pelo vetor \mathbf{r} que é obtido a partir dos valores de concentração nas diferentes células no instante t .

A forma utilizada para a representação do sistema de equações, definido pela Equação 3.42, foi estabelecida a partir do algoritmo para a solução de sistemas bandas tridiagonais apresentado em Press *et al.* (1992). O referido algoritmo aproveita a característica do sistema de possuir uma matriz de coeficientes banda tridiagonal, proporcionando economia de memória, já que são utilizados 3 vetores (E, F e G) com $n+1$ elementos cada para representar a matriz de coeficientes que, por definição, teria $(n+1) \times (n+1)$ elementos. Além disso, o algoritmo utiliza o procedimento de decomposição LU, diminuindo o número de operações necessárias para a solução do sistema.

Finalmente, adotou-se valores nulos de concentração ao longo da coluna de solo como condição inicial para o problema de transporte unidimensional em meio poroso não saturado sob regime permanente.

3.3 AVALIAÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL DE FLUXO EM MEIO POROSO NÃO SATURADO

O problema de fluxo em meio poroso não saturado e sua solução numérica foram apresentados e discutidos no item 3.1. Com base no exposto no referido item, desenvolveu-se um modelo computacional em linguagem FORTRAN, denominado de FLUX, para simular as condições de fluxo permanente unidimensional em meio não saturado.

Neste item são descritos alguns testes realizados para verificar o desempenho do modelo implementado. Os testes realizados procuraram avaliar a sensibilidade do modelo FLUX em relação à discretização espacial (Δz) e confrontar os seus resultados com os obtidos a partir do modelo VS2DTI, um modelo de fluxo transiente bidimensional em meio não saturado.

Para a avaliação do esquema numérico e do modelo FLUX, os testes utilizaram dados referentes a três tipos de solo, cujos parâmetros característicos foram obtidos de Cota (2000) e são apresentados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 Valores dos parâmetros dos solos utilizados nos testes do modelo FLUX

Variável	Solo 1	Solo 2	Solo 3
Tipo	Areia	Areia	Silte-argiloso
Porosidade (ϕ)	0,368	0,39	0,42
Grau de saturação residual (S_r)	0,2772	0,1	0,0357
Condutividade hidráulica saturada (K_s)	$9,22 \times 10^{-5}$ m/s	$3,61 \times 10^{-6}$ m/s	$2,70 \times 10^{-6}$ m/s
α	$0,0335 \text{ cm}^{-1}$	$0,059 \text{ cm}^{-1}$	$0,0004 \text{ cm}^{-1}$
N	2,0	1,48	1,65

Fonte: Cota (2000)

Os parâmetros α e N, apresentados na Tabela 3.1, correspondem aos parâmetros do modelo de Van Genuchten, Equação 3.13. Adicionalmente, adotou-se grau de saturação máxima (S_m) igual a 1 para os três solos e estimou-se o parâmetro M do modelo de van Genuchten a partir de (Charbeneau, 2000):

$$M = 1 - \frac{1}{N} \quad (3.43)$$

Com base nos estudos de Cota (2000) e levando-se em consideração as particularidades do problema de fluxo permanente em meio não saturado, foram estabelecidos

quatro cenários para os testes do modelo FLUX. Estes cenários são apresentados resumidamente na Tabela 3.2, onde se pode verificar que o comprimento da coluna de solo e o tipo de solo que compõem a coluna são os fatores que diferenciam os referidos cenários.

Tabela 3.2 Cenários utilizados para os testes do modelo FLUX

Característica do cenário	CENÁRIO			
	01	02	03	04
Tipo de solo	Solo 01	Solo 02	Solo 03	Solo 03/Solo01
Comprimento da camada	200 cm	200 cm	200 cm	100 cm (20 cm/80 cm)
Condição de contorno no topo da coluna	Recarga constante	Recarga constante	Recarga Constante	Recarga constante
Condição de contorno na base da coluna	Pressão nula	Pressão nula	Pressão nula	Pressão nula

Em relação à Tabela 3.2, a condição de contorno na base da coluna de solo, como mencionado no item 3.1.2, é obtida a partir da hipótese de valor de $(z - \psi)$ igual a zero junto à mesma e da adoção da base da coluna como plano de referência.

Para testar o modelo em diferentes condições, foram adotados três valores de recarga constante como condição de contorno no topo da coluna, a saber: 0,2 cm/h; $5,71 \times 10^{-3}$ cm/h e 0,0 cm/h. Portanto, estabeleceu-se um total de 12 testes para avaliar o desempenho do modelo, ou seja, 4 cenários e 3 valores de recarga por cenário.

Como justificativa para os valores de recarga utilizados nos testes, destaca-se que o primeiro valor de recarga (0,2 cm/h) representa um valor artificialmente alto para ser adotado como recarga anual média, mas serve como cenário crítico para a avaliação do modelo. Já o segundo valor de recarga ($5,71 \times 10^{-3}$ cm/h) é equivalente a uma recarga anual média de 500 mm, possível de ser observada em campo. Finalmente, o valor nulo de recarga representa uma condição limite que permite verificar o modelo para baixos valores de recarga e na representação da distribuição hidrostática de pressões que ocorre para a condição de fluxo nulo.

3.3.1 Análise da Sensibilidade em Relação à Discretização Espacial (Δz)

A análise de sensibilidade do modelo FLUX em relação à discretização espacial (Δz) consistiu em realizar os 12 testes relatados no item anterior para diferentes valores de Δz . Na realidade, o dado de entrada utilizado pelo modelo não é a discretização espacial (Δz), mas sim o número de células utilizadas para representar a coluna de solo.

Os diferentes testes foram realizados considerando-se o número de células igual a 10, 20, 50, 100 e 200. Estes valores correspondem a Δz igual a 20 cm, 10 cm, 4 cm, 2 cm e 1 cm, respectivamente, para os Cenários 01 a 03 e a Δz igual a 10 cm, 5 cm, 2 cm, 1 cm e 0,5 cm, respectivamente, para o Cenário 04. As variáveis analisadas foram: tensão capilar, carga total, grau de saturação e condutividade hidráulica relativa.

As Figuras 3.3 a 3.6 apresentam alguns exemplos de resultados obtidos a partir dos testes realizados para a análise de sensibilidade do modelo FLUX em relação à discretização espacial (Δz).

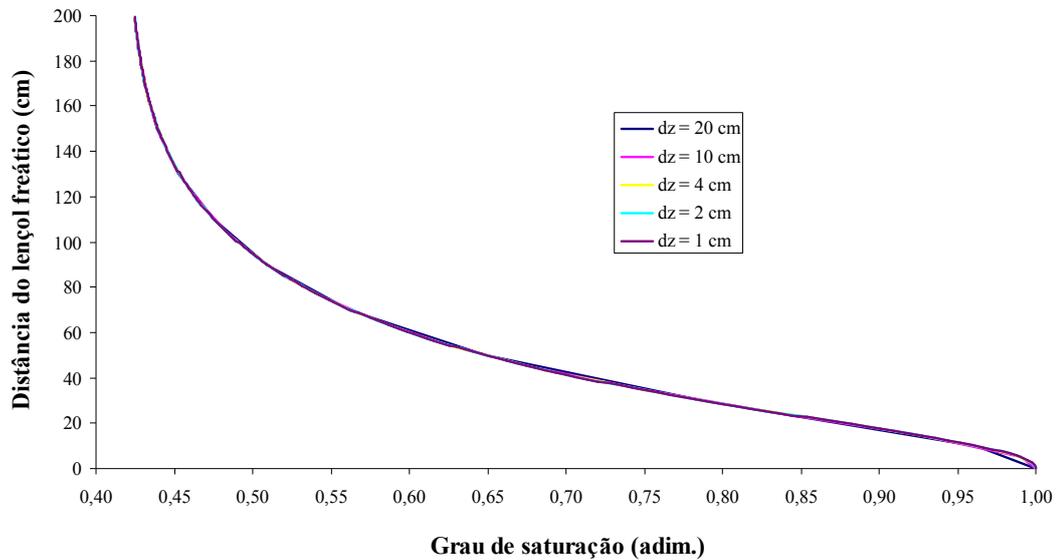


Figura 3.3 Grau de saturação (Cenário 01 – recarga = 500 mm/ano)

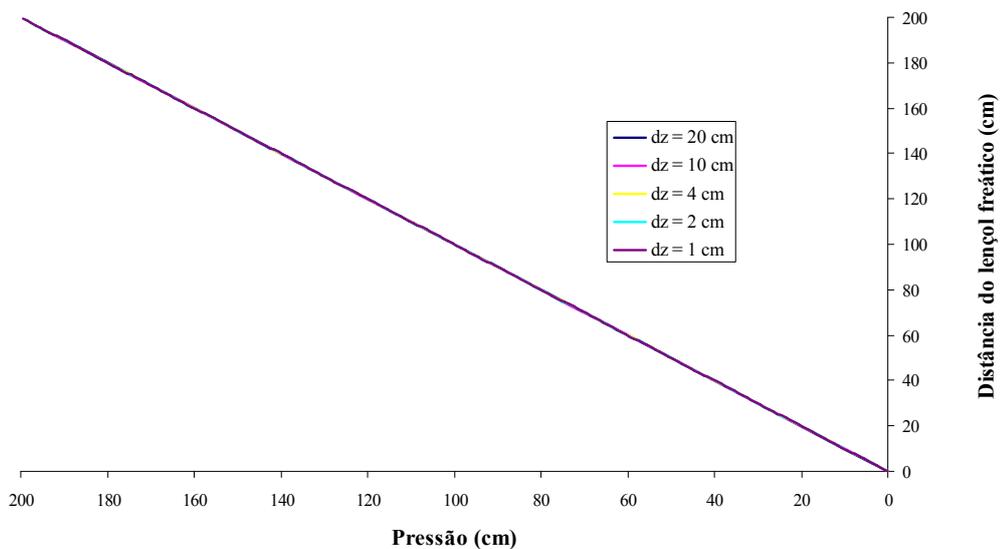


Figura 3.4 Tensão capilar (Cenário 02 – recarga = 0,0 cm/h)

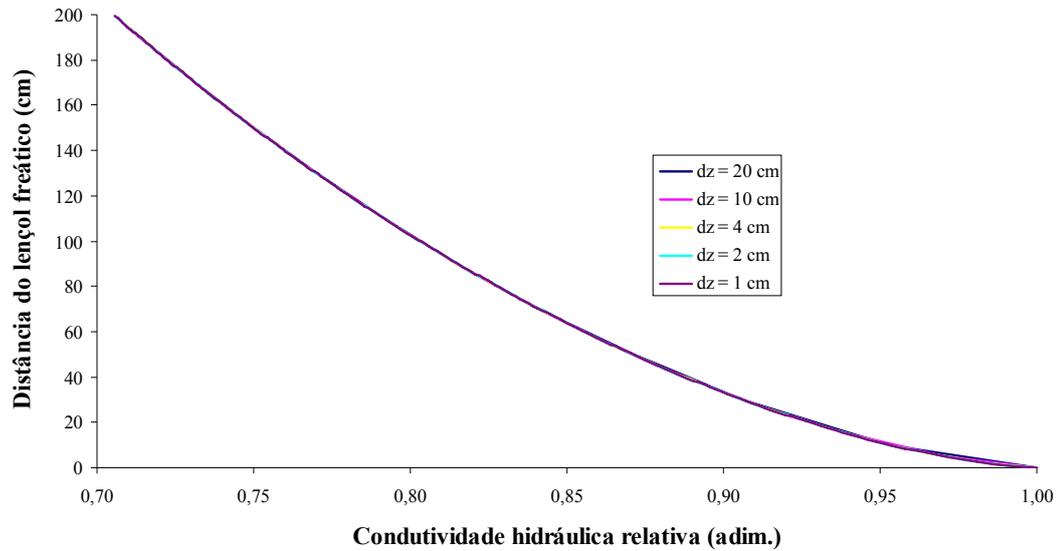


Figura 3.5 Condutividade hidráulica relativa (Cenário 03 – recarga = 0,2 cm/h)

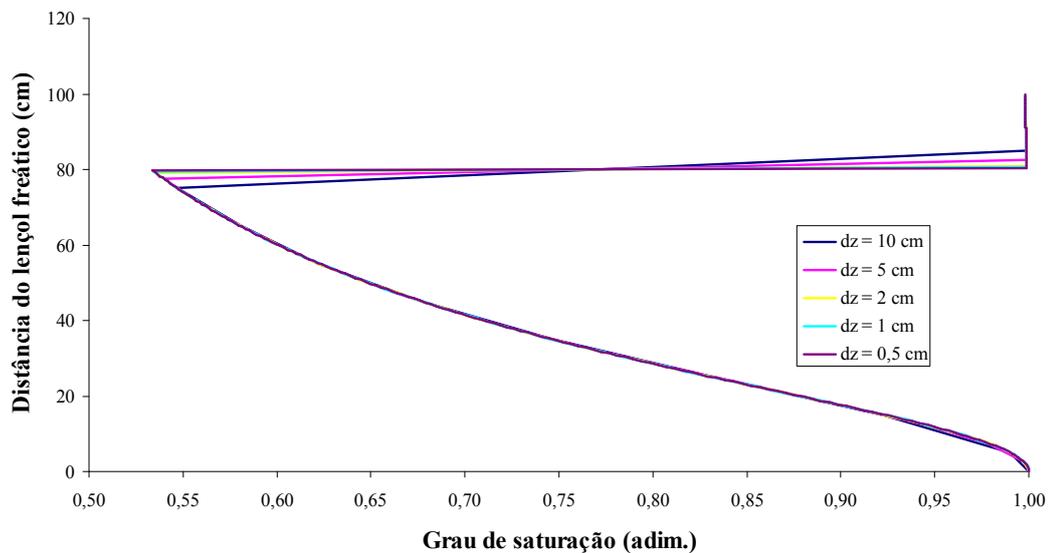


Figura 3.6 Grau de saturação (Cenário 04 – recarga = 500 mm/ano)

Em função dos resultados obtidos nos testes, verificou-se que o modelo FLUX não apresentou instabilidade numérica e o comportamento das variáveis analisadas foi relativamente próximo para os diferentes cenários e valores de recarga, mesmo considerando-se valores de Δz relativamente altos. Os resultados mostraram que o grau de saturação (S) e a condutividade hidráulica relativa (k_r) foram as variáveis que apresentaram maior influência dos valores de Δz .

Em relação aos cenários, pode-se verificar que o Cenário 04 é o mais sensível em termos de discretização espacial (Δz), em razão da mudança do tipo de solo. Uma explicação

para este resultado é o esquema numérico adotado pelo modelo FLUX (esquema centrado na célula, ver Figura 3.1) que não permite representar a interface entre os tipos de solo de modo adequado. Computacionalmente, este inconveniente pode ser contornado, mas em virtude dos resultados obtidos, concluiu-se por não haver a necessidade de nenhuma implementação computacional adicional a fim de permitir uma melhor representação da interface entre diferentes tipos de solo.

Em relação aos valores de recarga, os resultados obtidos pelo modelo FLUX mostraram um comportamento relativamente uniforme, ou seja, os resultados não apresentaram uma variação significativa do ponto de vista qualitativo, considerando-se os diferentes valores de recarga adotados.

3.3.2 Comparação em Relação ao Modelo VS2DTI

O desempenho do modelo FLUX também foi comparado aos resultados apresentados pelo modelo VS2DTI. O referido modelo simula o fluxo e o transporte de solutos em meio poroso não saturado e faz parte do pacote VS2DI, que é um pacote gráfico para a simulação de fluxo, transporte de solutos e transferência de calor, descrito resumidamente em Hsieh *et al.* (2000).

A concepção e as rotinas que procuram resolver o problema de fluxo no modelo VS2DTI são discutidas detalhadamente em Lappala *et al.* (1987). O modelo basicamente resolve o problema de fluxo transiente bidimensional em meio poroso não saturado. Já o modelo FLUX desenvolvido para o presente estudo resolve o problema de fluxo permanente unidimensional em meio poroso não saturado.

A premissa básica dos testes consistiu em verificar se o modelo VS2DTI convergia para a solução proporcionada pelo modelo FLUX, quando as condições de contorno eram mantidas constantes no tempo.

Foram utilizados os mesmos 12 testes usados na análise de sensibilidade do modelo FLUX com relação à discretização espacial (Δz), conforme descritos anteriormente. O desempenho do modelo FLUX foi avaliado pela comparação dos seus resultados com os obtidos utilizando-se o modelo VS2DTI. As variáveis analisadas foram a tensão capilar (ψ) e o grau de saturação (S).

Para os testes de comparação entre os dois modelos, adotou-se um número de 100 células para discretização espacial da coluna de solo em cada um dos cenários analisados. Isto implicou em uma discretização espacial (Δz) de 2 cm para os Cenários 01 a 03 e de 1 cm para

o Cenário 04. As Figuras 3.7 a 3.10 apresentam alguns exemplos de resultados obtidos a partir dos testes realizados para a comparação entre os modelos FLUX e VS2DTI.

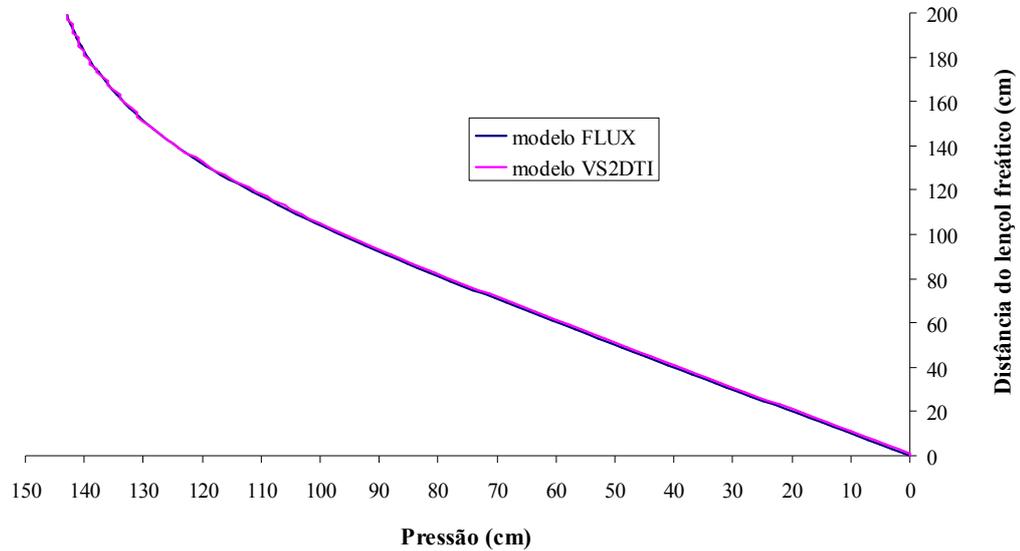


Figura 3.7 Tensão capilar (Cenário 01 – recarga = 500 mm/ano)

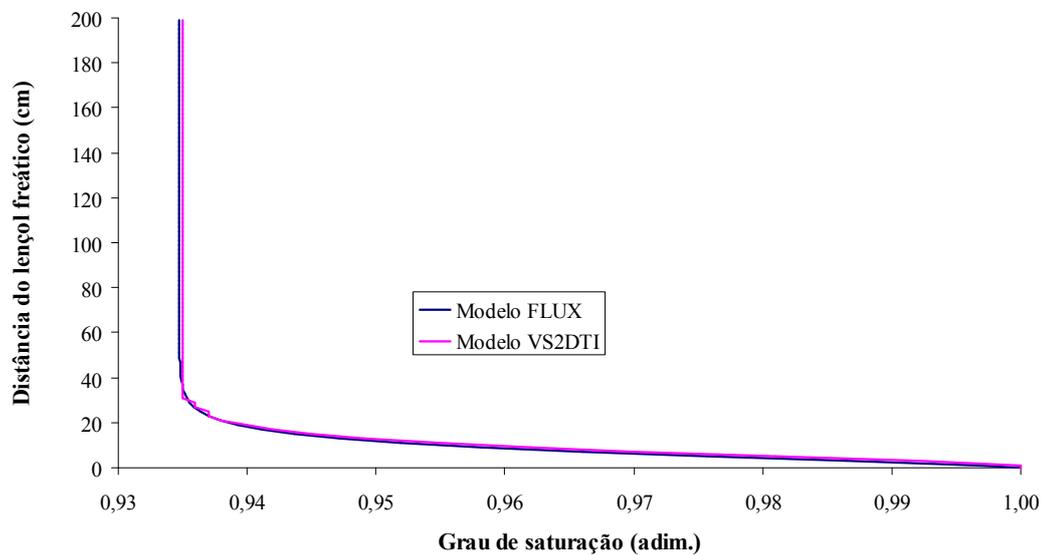


Figura 3.8 Grau de saturação (Cenário 02 – recarga = 0,2 cm/h)

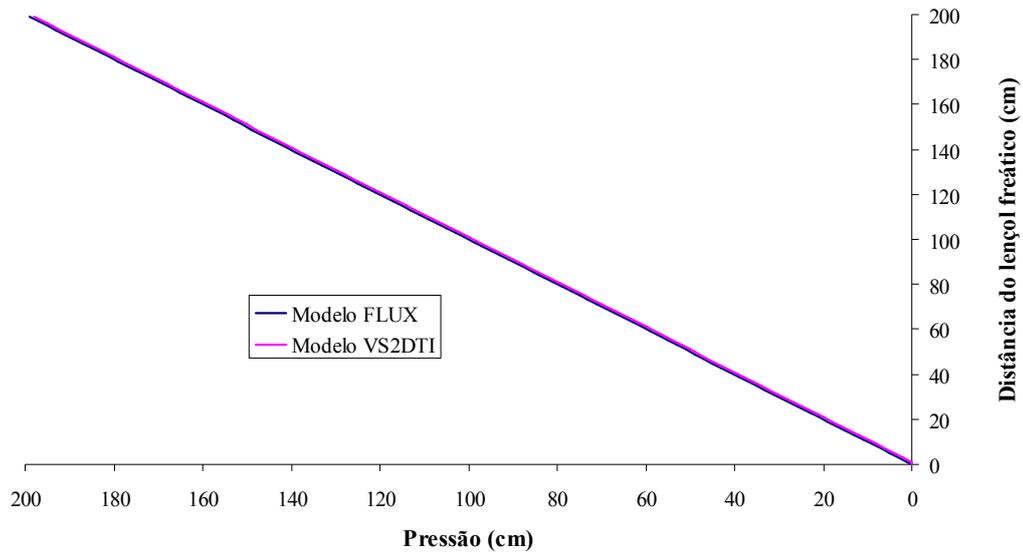


Figura 3.9 Tensão capilar (Cenário 03 – recarga = 0,0 cm/h)

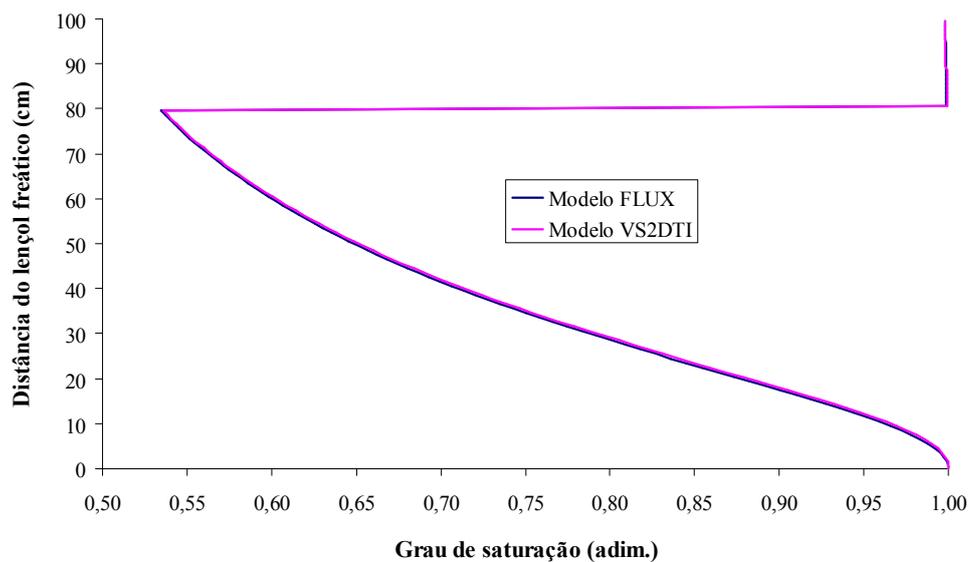


Figura 3.10 Grau de saturação (Cenário 04 – recarga = 500 mm/ano)

Em função dos testes realizados, verificou-se que os resultados dos dois modelos foram bastante próximos entre si. As maiores diferenças, em termos relativos, foram obtidas junto à base da coluna de solo e podem ser explicadas pelo modo como os dois modelos representam a condição de contorno junto à base da coluna, conforme discutido a seguir.

O modelo VS2DTI também adota um esquema numérico centrado na célula. Deste modo, a condição de contorno na base da coluna não é associada propriamente à base da coluna, mas sim a uma distância igual a $(\Delta z/2)$ da mesma. Já o modelo FLUX, embora também adote um esquema numérico centrado na célula, trata de modo diferente a última

célula (mais próxima da base da coluna). O modelo FLUX representa a última célula por dois nós: o primeiro situado na base da coluna (borda inferior da célula) e o segundo situado no meio da célula (esquema centrado na célula). Deste modo, a condição de contorno na base da coluna é associada exatamente à base da coluna.

Esta diferença no tratamento da condição de contorno junto à base da coluna faz com que os dois modelos “enxerguem” a coluna de solo com comprimentos distintos. Para uma coluna de comprimento L e para uma discretização Δz constante, o modelo FLUX representa a coluna com um comprimento igual a $(L - \Delta z/2)$, enquanto o modelo VS2DTI representa a coluna com um comprimento de $(L - \Delta z)$.

As Tabelas 3.3 e 3.4 apresentam as maiores diferenças (em módulo) entre os valores de tensão capilar e de grau de saturação calculados pelos modelos FLUX e VS2DTI, considerando-se os diferentes cenários e valores de recarga.

Tabela 3.3 Módulo da máxima diferença entre os valores de tensão capilar calculados pelos modelos FLUX e VS2DTI (em cm)

CENÁRIO	RECARGA		
	0,2 cm/h	500 mm/ano	0,0 cm/h
01	1,03	1,04	1,00
02	0,80	0,99	1,00
03	1,22	1,29	1,00
04	0,54	0,55	0,50

Tabela 3.4 Módulo da máxima diferença entre os valores de saturação calculados pelos modelos FLUX e VS2DTI

CENÁRIO	RECARGA		
	0,2 cm/h	500 mm/ano	0,0 cm/h
01	0,009	0,010	0,010
02	0,005	0,012	0,012
03	0,001	0,001	0,001
04	0,005	0,005	0,005

Verifica-se, a partir dos dados da Tabela 3.3, que as máximas diferenças entre os valores de tensão capilar resultaram na ordem de 1 cm. Já para o grau de saturação, cujos resultados são apresentados na Tabela 3.4, as máximas diferenças resultaram na ordem de 0,01. Como já destacado anteriormente, uma parcela das diferenças apresentadas pode ser creditada ao modo como os dois modelos representam as condições de contorno junto à base da coluna de solo.

3.4 AVALIAÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL DE TRANSPORTE EM MEIO NÃO SATURADO

O problema de transporte em meio poroso não saturado e sua solução numérica foram apresentados e discutidos no item 3.2. Com base no exposto no referido item, desenvolveu-se um modelo computacional em linguagem FORTRAN, denominado de TRANSP, para simular as condições de transporte unidimensional em meio não saturado sob regime permanente.

Importante destacar que o modelo TRANSP utiliza os dados gerados pelo modelo FLUX que trata do problema de fluxo permanente unidimensional em meio não saturado. Além disso, o modelo considera, como condição inicial do problema, valores nulos de concentração ao longo da coluna de solo e as condições de contorno discutidas no item 3.2.3, que são: concentração constante ao longo do tempo no topo da coluna e gradiente de concentração nulo junto à base da coluna de solo.

Este item se inicia com uma discussão teórica sobre critérios de estabilidade numérica com o objetivo de auxiliar na análise das restrições existentes aos valores de discretização espacial (Δz) e temporal (Δt) em problemas de transporte em meio poroso não saturado.

Na seqüência são apresentados alguns testes realizados para verificar o desempenho do modelo TRANSP. Os testes realizados procuram avaliar a sensibilidade do modelo em relação à discretização temporal (Δt) e à discretização espacial (Δz) e confrontar os resultados do modelo TRANSP com os resultados obtidos a partir de uma solução analítica para o problema de transporte unidimensional em meio poroso não saturado.

3.4.1 Discussão sobre Critérios de Estabilidade Numérica

Discussões sobre a estabilidade de métodos numéricos em problemas de transporte unidimensionais podem ser encontradas em Huyakorn e Pinder (1983), Noorishad *et al.* (1992) e Perrochet e Berod (1993).

Quando o domínio espaço-temporal (z, t) é discretizado, o tamanho dos elementos da grade, definidos por Δz e Δt , são estabelecidos a partir da análise de dois números adimensionais: o número de Peclet (Pe) e o número de Courant (Cr). Os referidos números podem assim ser definidos:

$$Pe = \frac{v \Delta z}{D} \quad (3.44)$$

$$Cr = \frac{q \Delta t}{\phi S R \Delta z} \quad (3.45)$$

Explicação teórica sobre o significado dos números de Peclet (Pe) e de Courant (Cr) pode ser encontrada em Marsilly (1986) e Perrochet e Berod (1993). Dos trabalhos de Noorishad *et al.* (1992) e Perrochet e Berod (1993), pode-se assumir as seguintes restrições para a estabilidade de métodos numéricos aplicados a problemas de transporte unidimensionais:

$$Pe \leq 2 \quad \text{e} \quad Pe Cr \leq 2$$

A análise teórica do valor máximo para a discretização espacial (Δz) pode ser feita a partir da análise da restrição relativa ao número de Peclet (Pe), definido pela Equação 3.44. A partir da relação entre a velocidade real do fluxo (v) e a velocidade de Darcy (q), a Equação 3.44 pode ser escrita como:

$$Pe = \frac{q \Delta z}{\phi D} \quad (3.46)$$

Considerando-se a definição do coeficiente de dispersão hidrodinâmico, dada pela Equação 3.36, sem o termo de correção e admitindo-se um valor de coeficiente de difusão molecular do contaminante na fase aquosa (D_m) relativamente pequeno, pode-se escrever:

$$D \cong \frac{\alpha_L q}{\phi S} \quad (3.47)$$

Substituindo-se o parâmetro D, definido pela Equação 3.47, na Equação 3.46 e com as devidas simplificações, tem-se:

$$Pe = \frac{S \Delta z}{\alpha_L} \quad (3.48)$$

Considerando-se a Equação 3.48 e a restrição em relação ao Número de Peclet (Pe), tem-se:

$$\frac{S \Delta z}{\alpha_L} \leq 2 \quad \text{ou} \quad \Delta z \leq \frac{2 \alpha_L}{S}$$

A condição mais restritiva em relação à Δz é obtida para grau de saturação (S) máximo. Portanto, para S igual a 1, tem-se:

$$\Delta z \leq 2 \alpha_L \quad (\text{restrição relativa à discretização espacial } \Delta z).$$

Deste modo, teoricamente, o valor de Δz deve ser no máximo o dobro do valor da dispersividade longitudinal do meio poroso (α_L).

A análise teórica do valor máximo para a discretização temporal (Δt) pode ser feita a partir da análise da restrição relativa ao produto entre o número de Courant (Cr) e o número de Peclet (Pe), definidos pelas Equações 3.45 e 3.46, respectivamente. O produto das referidas equações resulta em:

$$Pe Cr = \frac{q^2 \Delta t}{\phi^2 SRD} \quad (3.49)$$

Substituindo-se a definição de D, dada pela Equação 3.47, na Equação 3.49 e com as devidas simplificações, tem-se:

$$Pe Cr = \frac{q \Delta t}{\phi R \alpha_L} \quad (3.50)$$

Considerando-se a Equação 3.50 e a restrição em relação ao produto entre os números de Peclet (Pe) e de Courant (Cr), tem-se:

$$\frac{q \Delta t}{\phi R \alpha_L} \leq 2 \quad \text{ou} \quad \Delta t \leq \frac{2 \phi R \alpha_L}{q}$$

A condição mais restritiva em relação à Δt é obtida para o valor de coeficiente de retardo (R) mínimo. Considerando-se a definição de R, dada pela Equação 3.31, verifica-se que o valor mínimo de R é igual a 1. Portanto, tem-se:

$$\Delta t \leq \frac{2\phi\alpha_L}{q} \quad (\text{restrição relativa à discretização temporal } \Delta t).$$

Considerando-se o problema de fluxo permanente unidimensional em meio poroso não saturado, esta relação representa teoricamente o valor máximo para a discretização temporal (Δt) como função da porosidade do meio (ϕ), dispersividade longitudinal (α_L) e recarga (q).

3.4.2 Análise da Sensibilidade em Relação à Discretização Temporal (Δt)

A análise de sensibilidade do modelo computacional TRANSP em relação à discretização temporal (Δt) utilizou os mesmos 12 testes adotados na avaliação do modelo computacional FLUX, conforme descritos no item 3.3, e cujas informações principais são resumidas nas Tabelas 3.1 e 3.2

A Tabela 3.5 apresenta os dados relacionados mais especificamente ao problema de transporte em meio poroso não saturado e que foram utilizados nos testes de avaliação do modelo TRANSP. Por questão de simplicidade, os parâmetros apresentados na Tabela 3.5 foram considerados iguais para os diferentes tipos de solo.

As condições de contorno no topo e na base da coluna do solo, utilizadas na definição do modelo computacional TRANSP, foram discutidas no item 3.2.3. Adotou-se a concentração no topo da coluna como sendo constante ao longo do tempo e tendo um valor igual a 100 g/cm^3 , que pode ser considerado como um valor “unitário” representativo da concentração.

Tabela 3.5 Valores dos parâmetros dos solos utilizados nos testes do modelo TRANSP

Parâmetro	Símbolo	Unidade	Valor
Densidade dos grãos do solo	ρ_s	g/cm^3	2,65
Fração de carbono orgânico no solo	f_{oc}	---	0,001
Dispersividade longitudinal do meio poroso	α_L	cm	10
Coefficiente de partição do contaminante em relação ao carbono orgânico	K_{oc}	cm^3/g	100
Coefficiente de difusão molecular do contaminante na fase aquosa	D_m	cm^2/h	6×10^{-4}

A partir da discussão teórica sobre critérios de estabilidade numérica, apresentada no item anterior, e considerando-se os diferentes valores de ϕ , α_L e q usados nos testes para a

análise do modelo TRANSP, definiu-se valores máximos de Δt para os diferentes cenários descritos na Tabela 3.2 e que são apresentados na Tabela 3.6.

Em relação à Tabela 3.6, os valores máximos de Δt para o Cenário 04 foram estimados utilizando-se o menor valor de porosidade (ϕ) entre os dois solos que compõem o referido cenário. Os valores de Δt apresentados na Tabela 3.6 foram utilizados como indicativos para a análise de sensibilidade do modelo TRANSP em relação à discretização temporal (Δt).

Tabela 3.6 Valores máximos teóricos de discretização temporal (Δt), em horas, para os diferentes cenários de testes do modelo TRANSP

Cenário	Recarga		
	0,2 cm/h	500 mm/ano	0,0 cm/h
01	36,8	1289 (53,7 dias)	∞
02	39,0	1366 (56,9 dias)	∞
03	42,0	1471 (61,3 dias)	∞
04	36,8	1289 (53,7 dias)	∞

A análise de sensibilidade do modelo TRANSP em relação à discretização temporal (Δt) consistiu em realizar os 12 testes para diferentes valores de Δt . Adotou-se na representação da coluna de solo, um número de células igual a 20, o que implica em um valor de Δz igual a 10 cm para os Cenários 01 a 03 e igual a 5 cm para o Cenário 04.

Para cada cenário, o procedimento básico dos testes foi assumir inicialmente um valor de Δt relativamente pequeno e sucessivamente aumentar esse valor até ser observada alguma inconsistência nos resultados do modelo. O referido procedimento, além de permitir verificar a existência de alguma instabilidade numérica, permite também verificar a influência de Δt sobre a qualidade dos resultados.

Verifica-se, a partir dos valores máximos teóricos de discretização temporal (Δt), apresentados na Tabela 3.6, que a recarga (q) tem uma maior influência sobre os limites de Δt do que os cenários estabelecidos. Portanto, os valores de Δt a serem utilizados no testes foram definidos de acordo com os valores de q , ou seja, independentemente dos Cenários.

Para a recarga de 0,2 cm/h, os valores de Δt utilizados foram 1h, 2h, 4h, 6h, 12h e 24h para um horizonte de 720h (30 dias). Já para uma recarga equivalente a 500 mm/ano, foram usados os valores de Δt iguais a 6h, 12h, 24h, 48h, 72h e 144h para um horizonte de 180 dias. Finalmente, para o valor de recarga nula, foram usados valores de Δt correspondentes a 2 dias, 4 dias, 8 dias, 16 dias, 24 dias e 48 dias para um horizonte de 1440 dias (aproximadamente 4 anos). Os valores de Δt foram estabelecidos respeitando-se os valores máximos teóricos apresentados na Tabela 3.6.

As Figuras 3.11 a 3.14 apresentam alguns exemplos de resultados obtidos a partir dos testes realizados para a análise de sensibilidade do modelo TRANSP em relação à discretização temporal (Δt).

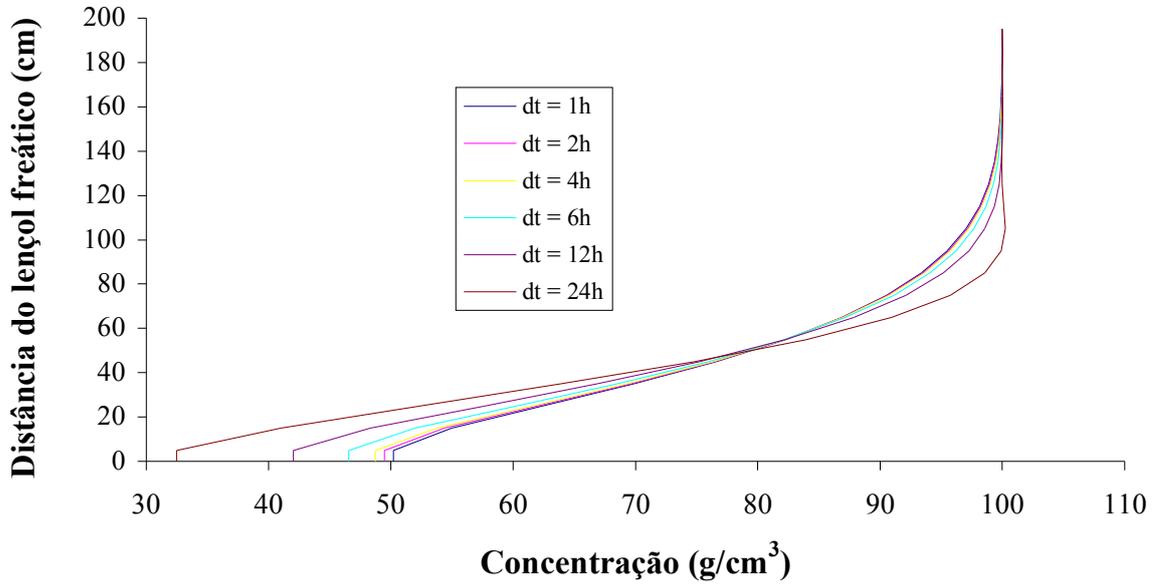


Figura 3.11 Perfil de concentração (Cenário 01, recarga = 0,2 cm/h, t = 15 dias)

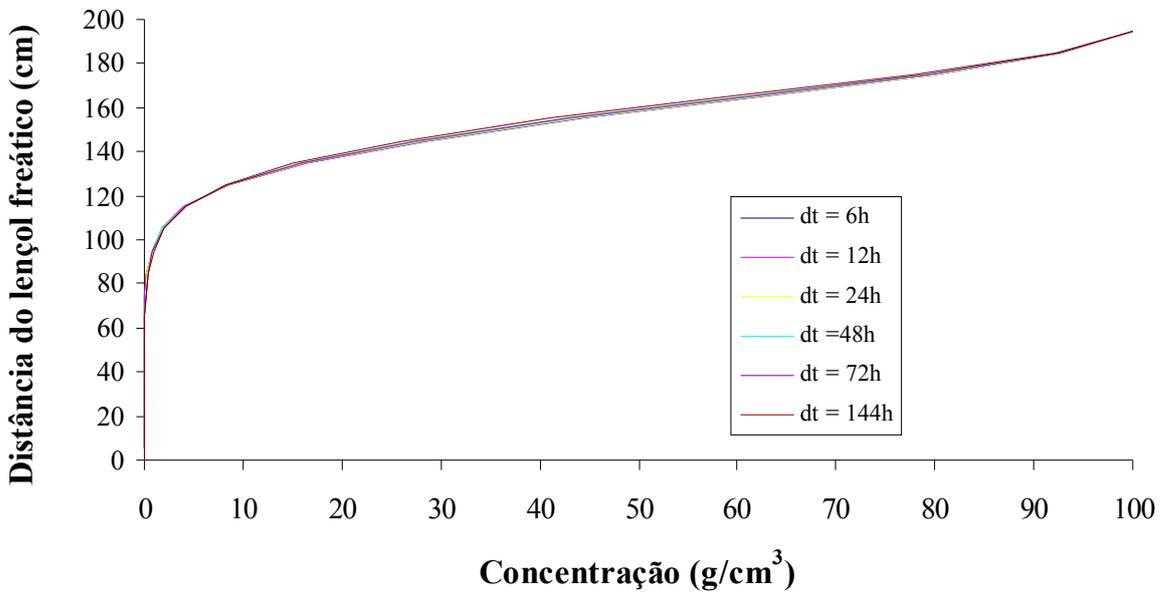


Figura 3.12 Perfil de concentração (Cenário 02, recarga = 50 cm/ano, t = 90 dias)

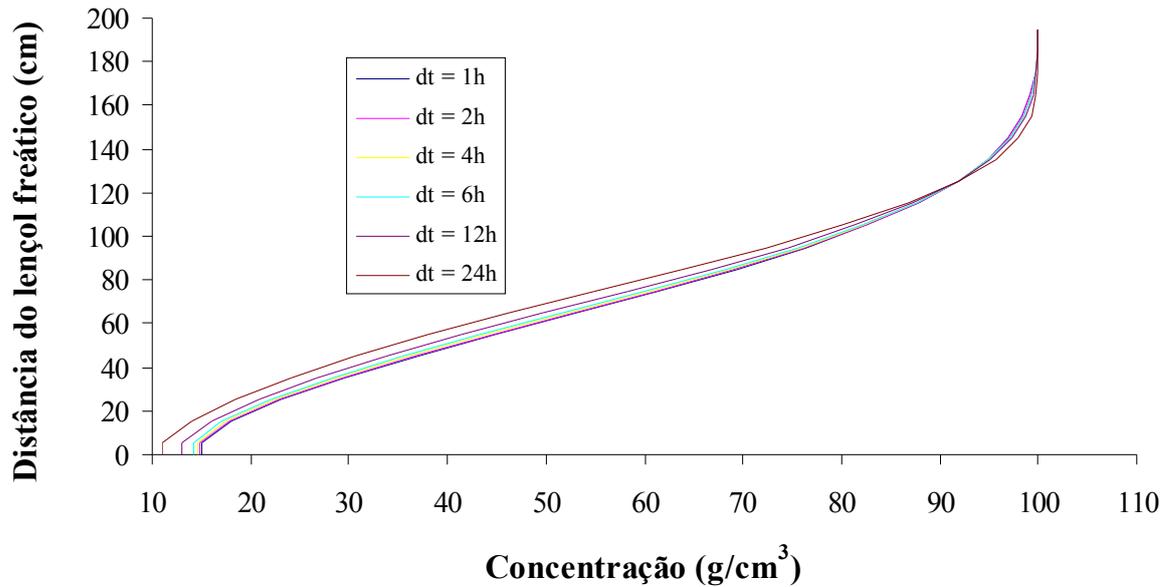


Figura 3.13 Perfil de concentração (Cenário 03, recarga = 0,2 cm/h, t = 15 dias)

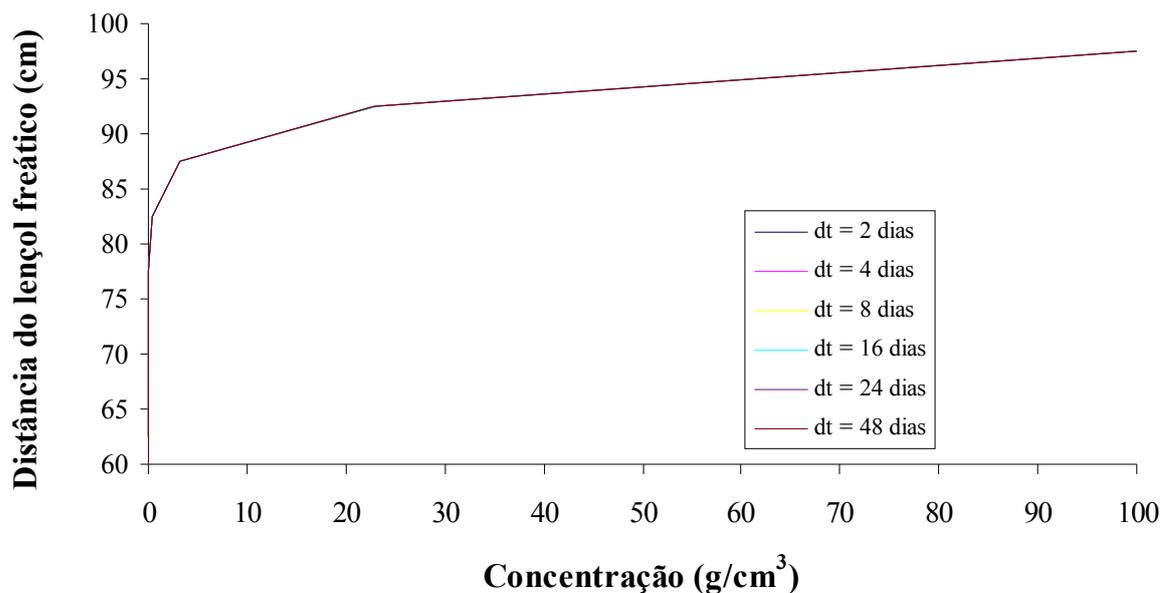


Figura 3.14 Perfil de concentração (Cenário 04, recarga = 0 cm/h, t = 720 dias)

Os perfis de concentração apresentados nas Figuras 3.11 a 3.14 são sempre referentes aos tempos relativos à metade do horizonte de tempo estabelecido para o respectivo valor de recarga analisado. É importante lembrar que a condição de concentração constante e igual a 100 foi imposta ao topo da coluna de solo. Portanto, o desenvolvimento da pluma é medido pelo afastamento que o perfil de concentrações assume em relação ao eixo vertical.

Em relação ao valor de recarga de 0,2 cm/h, em função dos resultados obtidos para os diferentes cenários, verificou-se que inconsistências numéricas são verificadas para valores Δt

maiores ou iguais a 24 h. Além disso, verificou-se que os resultados obtidos para valores de Δt iguais a 1h, 2h e 4h foram bastante próximos entre si.

Em relação ao valor de recarga de 500 mm/ano, em função dos resultados obtidos para os diferentes cenários, verificou-se que os perfis de concentração foram relativamente próximos entre si e não foram constatadas inconsistências numéricas para valores de Δt de até 144 h.

Finalmente, em relação ao valor de recarga nula, em função dos resultados obtidos para os diferentes cenários, verificou-se que os perfis de concentração foram relativamente próximos entre si e não foram constatadas inconsistências numéricas para valores de Δt de até 1152 h (48 dias).

É importante destacar que o mecanismo de advecção acaba não colaborando no processo de transporte ao longo da coluna de solo para o valor de recarga nula. Isto ajuda a explicar a proximidade entre os perfis de concentração para os diferentes valores de Δt analisados e, inclusive, o pequeno desenvolvimento dos perfis de concentração na coluna de solo ao longo do tempo.

A condição de contorno no topo da coluna de solo é outra característica do modelo implantado que é importante ressaltar. A condição de concentração constante no topo da coluna explica a tendência dos perfis de concentração convergirem para um perfil uniforme em toda a extensão da coluna de solo ao longo do tempo. De certo modo, essa condição de contorno contribui para uma “aproximação” entre os perfis de concentração relativos a diferentes Δt na medida em que o tempo t cresce.

3.4.3 Análise da Sensibilidade em Relação à Discretização Espacial (Δz)

A análise de sensibilidade do modelo TRANSP em relação à discretização espacial (Δz) consistiu em realizar novamente os 12 testes para diferentes valores de Δz . Como no modelo FLUX, o dado de entrada utilizado pelo modelo TRANSP não é a discretização espacial (Δz), mas sim o número de células utilizadas para representar a coluna de solo.

A partir da discussão teórica sobre critérios de estabilidade numérica, apresentada no item 3.4.1, e considerando-se o valor de α_L utilizado para a verificação do modelo TRANSP, apresentado na Tabela 3.5, conclui-se que o valor de Δz deve ser no máximo igual a 20 cm, o que implica em um número mínimo de 10 células para os Cenários 01 a 03 e de 5 células para o Cenário 04.

Os diferentes testes foram realizados considerando-se o número de células igual a 10, 20, 50, 100 e 200. Estes valores correspondem a valores de Δz iguais a 20 cm, 10 cm, 4 cm, 2 cm e 1 cm, respectivamente, para os Cenários 01 a 03 e a valores de Δz iguais a 10 cm, 5 cm, 2 cm, 1 cm e 0,5 cm, respectivamente, para o Cenário 04.

Para a análise de sensibilidade em relação à Δz , em função dos resultados obtidos na análise de sensibilidade à discretização temporal (Δt), discutidos no item 3.4.2, foram fixados os valores de Δt iguais a 4h, 24h e 8 dias para as condições de recarga de 0,2 cm/h, 500 mm/ano e 0,0 cm/h, respectivamente. Além disso, os horizontes de tempo adotados para a análise novamente foram de respectivamente 30 dias, 180 dias e 1440 dias (aproximadamente 4 anos) para os valores de recarga mencionados.

As Figuras 3.15 a 3.18 apresentam alguns exemplos de resultados obtidos nos testes realizados para a análise de sensibilidade do modelo TRANSP em relação à discretização espacial (Δz).

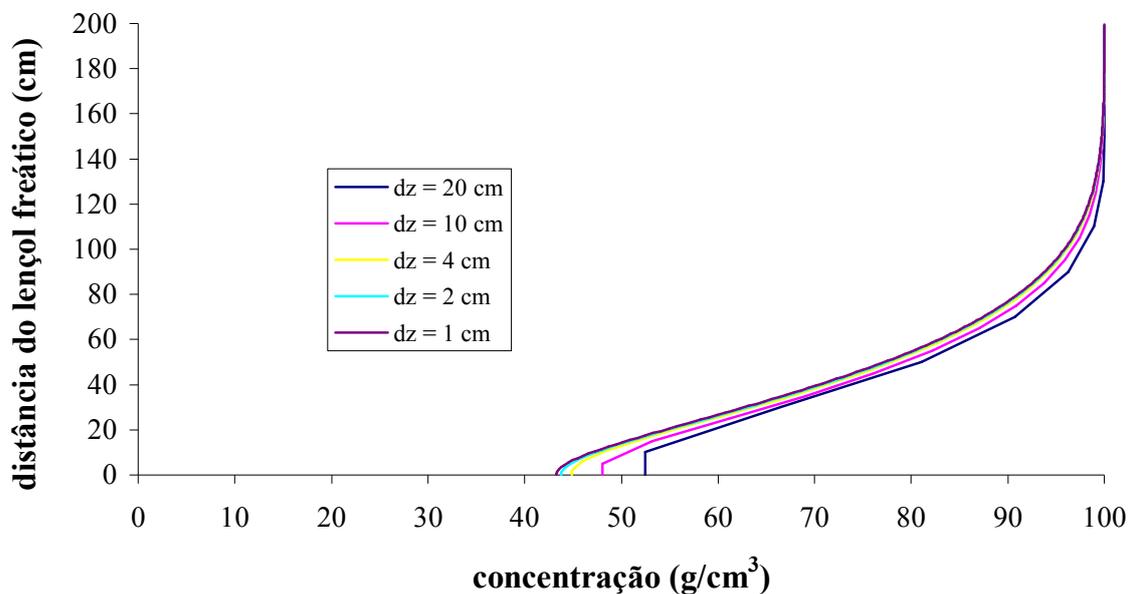


Figura 3.15 Perfil de concentração (Cenário 01, recarga = 0,2 cm/h, t = 15 dias)

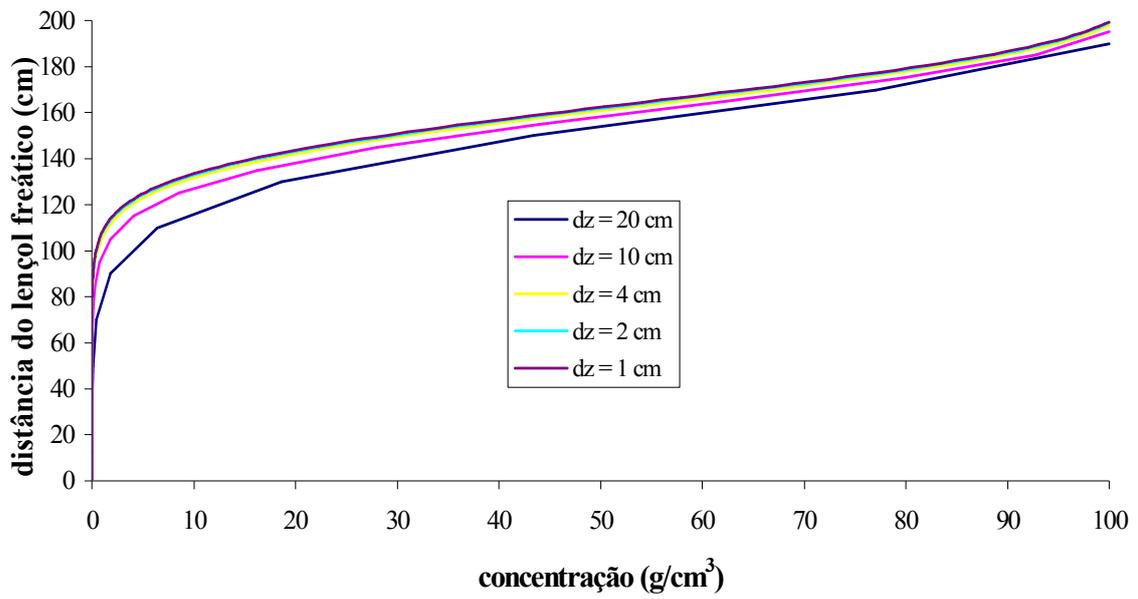


Figura 3.16 Perfil de concentração (Cenário 02, recarga = 50 cm/ano, $t = 90$ dias)

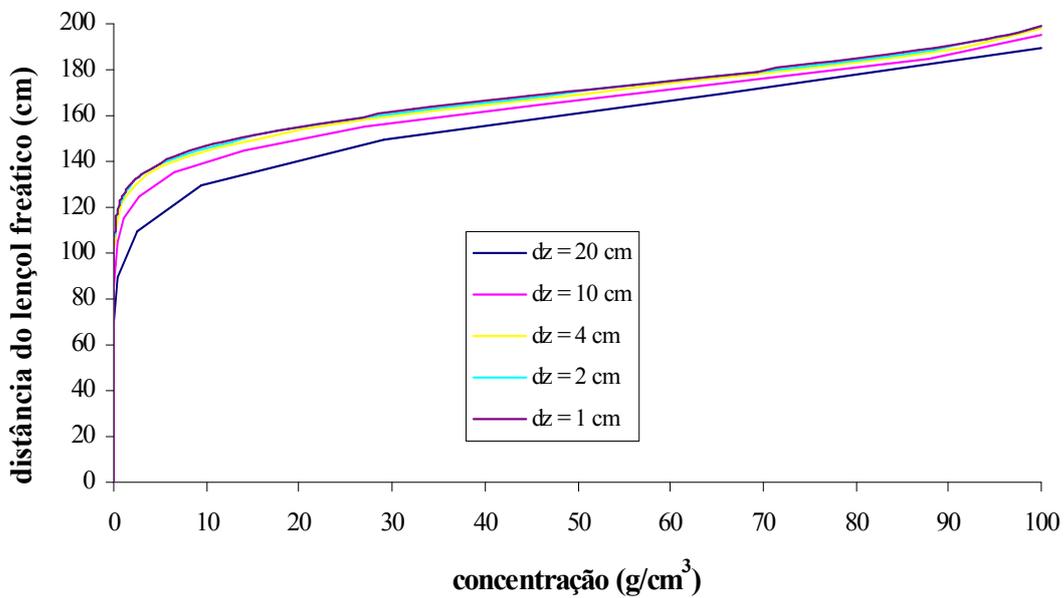


Figura 3.17 Perfil de concentração (Cenário 03, recarga = 50 cm/ano, $t = 90$ dias)

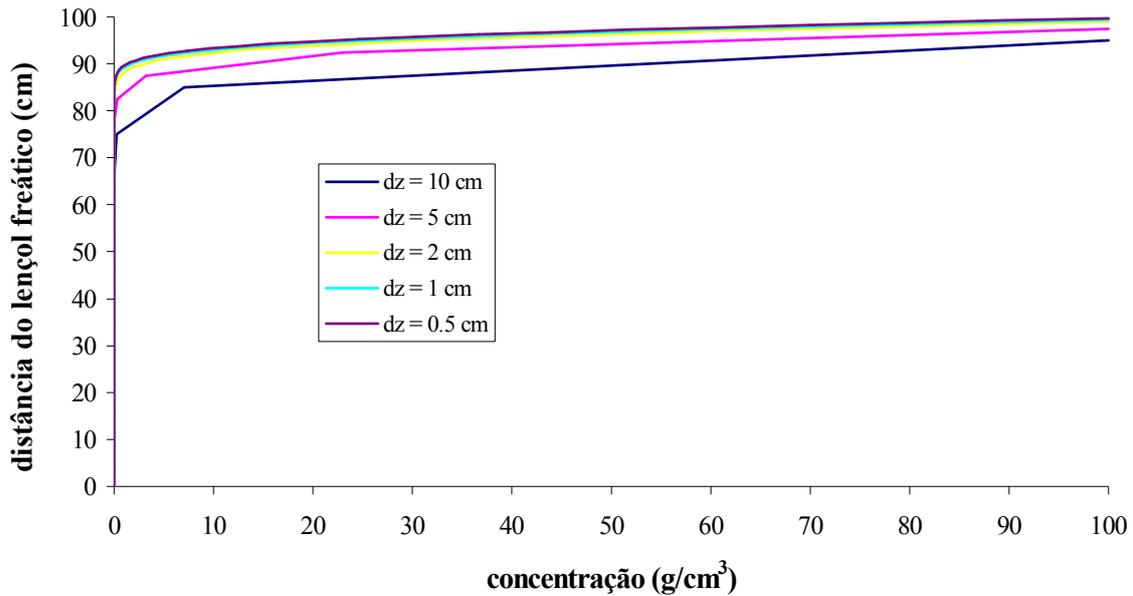


Figura 3.18 Perfil de concentração (Cenário 04, recarga = 0 cm/h, t = 720 dias)

Os perfis de concentração apresentados nas Figuras 3.15 a 3.18 são sempre referentes aos tempos relativos à metade do horizonte de tempo estabelecido para o respectivo valor de recarga analisado. É importante novamente lembrar que a condição de concentração constante e igual a 100 foi imposta ao topo da coluna de solo. Portanto, o desenvolvimento da pluma é medido pelo afastamento que o perfil de concentrações assume em relação ao eixo vertical.

De modo geral, em função dos resultados obtidos para os diferentes valores de recarga e para os diferentes cenários, verificou-se que os perfis de concentração mostraram um comportamento uniforme para os diferentes valores de Δz , não apresentando inconsistências numéricas. Este comportamento dos perfis de concentração pode ser explicado pelos valores de Δz e Δt adotados para a análise da discretização espacial (Δz).

Destaca-se que o máximo valor de Δz adotado para análise foi igual a 20 cm, respeitando os critérios estabelecidos no item 3.4.1. Adicionalmente, os valores de Δt usados na análise resultaram do item 3.4.2, que trata da análise da discretização temporal, e também respeitam os critérios estabelecidos no item 3.4.1.

Em relação aos valores numéricos obtidos para os perfis de concentração, verificou-se que, independentemente do valor de recarga, valores de Δz relativos a 1 cm, 2 cm e 4 cm para os Cenários 1 a 3 e relativos a 0,5 cm, 1 cm e 2 cm para o Cenário 04 produziram perfis de concentração relativamente próximos entre si. Os referidos valores de Δz representam para os quatro cenários analisados um número de células igual a 200, 100 e 50, respectivamente.

É importante destacar que a análise da discretização espacial (Δz) teve como objetivo principal estabelecer um número “razoável” de células para a representação da coluna de solo, considerando cada valor de recarga e cada cenário analisado. Uma possibilidade não explorada na presente análise foi o aumento de Δz , e conseqüente diminuição do número de células, para a verificação de inconsistências numéricas. Além disso, para alguns cenários quando utilizados valores de Δz superiores a 20 cm, verificou-se problemas numéricos na execução do modelo FLUX que calcula os perfis de saturação e tensão que são utilizados pelo modelo TRANSP.

3.4.4 Comparação entre a Solução Analítica e a Solução Numérica

Este item apresenta uma comparação entre a solução analítica e a solução numérica, fornecida pelo modelo TRANSP, para o problema de transporte unidimensional em meio poroso não saturado.

A Equação 3.33, usada para representar o transporte de um contaminante em meio poroso não saturado para a condição de fluxo em regime permanente, estabelecida no item 3.2, não admite uma solução analítica. Contudo, a definição de hipóteses adicionais àquelas adotadas para o estabelecimento da referida equação permite a obtenção de soluções analíticas para diferentes condições iniciais e de contorno.

A Equação 3.33 foi estabelecida sob a hipótese de fluxo volumétrico (q) constante no tempo e no espaço. A hipótese de q constante no tempo implica em grau de saturação (S), coeficiente de retardo (R) e coeficiente de dispersão (D) constantes no tempo. Já a hipótese de q constante no espaço não implica necessariamente em S , R e D constantes no espaço.

Em geral, para a obtenção de soluções analíticas para o problema de transporte unidimensional em meio não saturado sob regime de fluxo permanente, adota-se a hipótese de S , R e D também constantes no espaço. Deste modo, a Equação 3.33 pode ser reescrita como:

$$\phi SR \frac{\partial C}{\partial t} = \phi SD \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - q \frac{\partial C}{\partial z} \quad \text{ou} \quad R \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{q}{\phi S} \frac{\partial C}{\partial z} \quad (3.51)$$

Definindo-se a velocidade média (V) no nível do poro como $V = q/\phi S$ e substituindo-se na Equação 3.51, tem-se:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - V \frac{\partial C}{\partial z} \quad (3.52)$$

Na literatura são encontradas soluções analíticas para a Equação 3.52, considerando diferentes condições iniciais e de contorno e sem levar em conta o processo de adsorção, ou seja, R igual a 1. Como exemplos, podem ser citados os trabalhos de Van Genuchten (1981), Javandel *et al.* (1984), Bear e Verruijt (1987), Fetter (1999) e Charbeneau (2000).

A Equação 3.52 pode ser modificada de modo a satisfazer a forma da equação fundamental cuja solução analítica pode ser obtida a partir dos autores citados. Para tanto, basta definir $D^* = D/R$ e $V^* = V/R$ e substituindo-se na Equação 3.52, tem-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - V^* \frac{\partial C}{\partial z} \quad (3.53)$$

A Equação 3.53 é similar à forma unidimensional da clássica equação de dispersão-advecção para substâncias não reativas dissolvidas em um meio não saturado, isotrópico e homogêneo sob a condição de fluxo permanente e uniforme, como apresentada, por exemplo, em Javandel *et al.* (1984). Esta característica é consequência direta de todas as hipóteses adotadas para a obtenção da Equação 3.53.

Para a condição de contorno do tipo Dirichlet no topo da coluna, ou seja, valores de concentração (C) conhecidos ao longo do tempo, e considerando-se estes valores constantes, isto é, $C(0,t) = C_0$, tem-se a solução $C(z,t)$ da Equação 3.53 para uma condição inicial de concentração nula ao longo de uma coluna de solo de comprimento semi-infinito (Charbeneau, 2000):

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - V^* t}{2\sqrt{D^* t}} \right) + \exp \left(\frac{z V^*}{D^*} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{z + V^* t}{2\sqrt{D^* t}} \right) \right] \quad (3.54)$$

onde: z = distância do topo da coluna de solo [L];

$\operatorname{erfc}(\cdot)$ = função erro complementar.

O valor da função $\operatorname{erfc}(\cdot)$, presente na Equação 3.52, pode ser calculado de modo aproximado, usando o procedimento apresentado por Press *et al.* (1992).

Para a comparação entre a solução analítica, fornecida pela Equação 3.54, e a solução numérica fornecida pelo modelo TRANSP, houve necessidade de se produzir uma versão modificada do referido modelo para representar as mesmas hipóteses utilizadas na abordagem analítica e que levaram à obtenção da Equação 3.54.

Para a comparação das soluções numérica e analítica, adotou-se o Cenário 01, apresentado na Tabela 3.2, para a representação da coluna de solo. Além disso, adotou-se uma recarga equivalente a 500 mm/ano, valor possível de ser observado em campo e que foi utilizado previamente na análise de sensibilidade da discretização espacial (Δz) e da discretização temporal (Δt).

Já em relação aos parâmetros relativos especificamente ao problema de transporte, foram adotados os mesmos valores apresentados na Tabela 3.5. Adicionalmente, adotou-se um valor de saturação constante ao longo da coluna e igual a 0,57, que representa um valor de saturação médio obtido a partir de solução fornecida pelo modelo FLUX.

Ainda em relação à comparação das soluções numérica e analítica, foram avaliados os resultados para diferentes valores de discretização espacial (Δz), discretização temporal (Δt) e coeficiente de dispersividade longitudinal (α_L). Para Δz , foram adotados os valores de 20 cm, 10 cm, 5 cm e 1 cm. Já para Δt , foram adotados os valores de 6 h, 12 h e 24 h. Finalmente para α_L , foram adotados os valores de 5 cm, 10 cm e 20 cm. Os valores de Δz e Δt adotados são frutos das análises de sensibilidade realizadas nos itens 3.4.2 e 3.4.3. Ao todo foram realizados 8 testes de comparação entre a solução analítica e a solução numérica fornecida pelo modelo TRANSP.

As Figuras 3.19 a 3.21 apresentam alguns exemplos de resultados obtidos nos testes realizados para a comparação entre a solução numérica (modelo TRANSP) e a solução analítica. Os resultados apresentados nas Figuras 3.19 a 3.21 referem-se sempre à variação da concentração ao longo do tempo no meio da coluna de solo para diferentes valores de Δz , Δt e α_L .

Os resultados obtidos na comparação entre as soluções numérica e analítica mostraram que, em termos qualitativos, o comportamento da variação da concentração em relação ao tempo no meio da coluna de solo foi relativamente o mesmo, independente dos valores de Δt , Δz e α_L . De modo geral, os melhores resultados foram obtidos quando utilizado um valor de discretização espacial (Δz) igual a 5 cm. Destaca-se que, somente para a condição de Δt igual a 6 h e α_L igual a 5 cm, os melhores resultados foram obtidos para Δz igual a 10 cm.

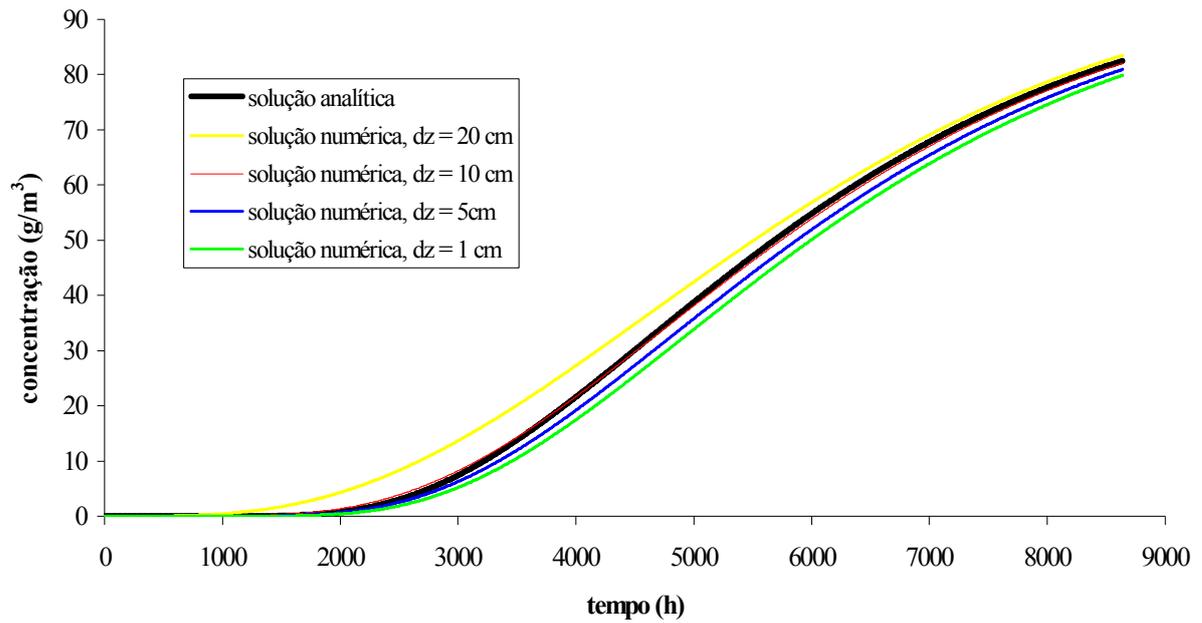


Figura 3.19 Variação da concentração na metade da coluna ($\Delta t = 6$ h e $\alpha_L = 10$ cm)

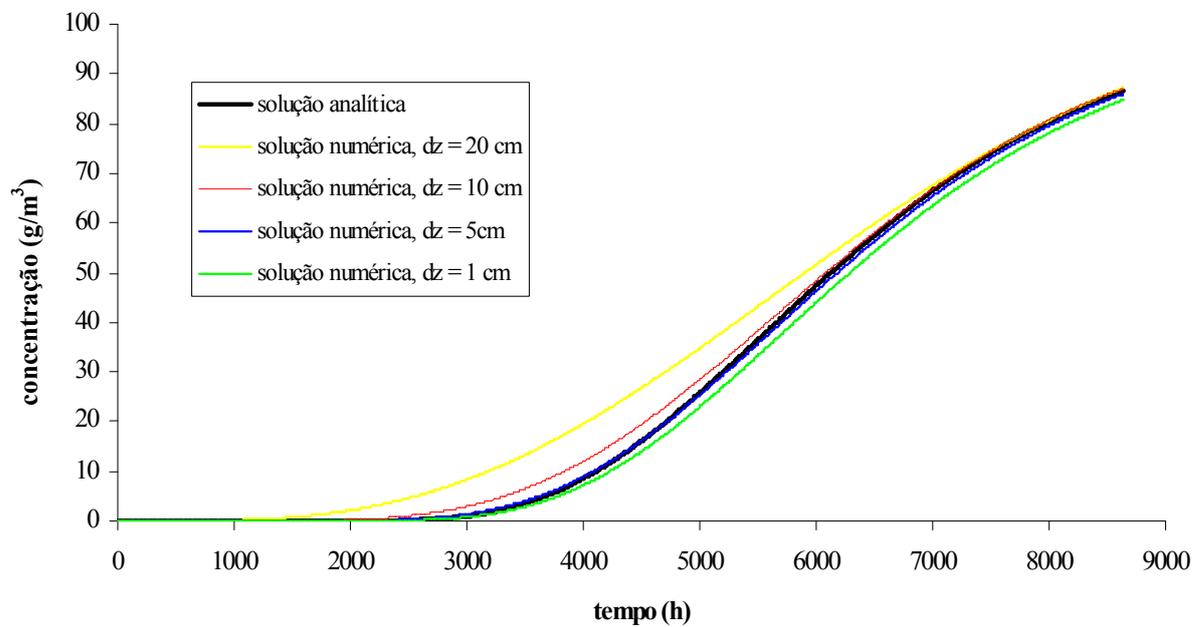


Figura 3.20 Variação da concentração na metade da coluna ($\Delta t = 12$ h e $\alpha_L = 5$ cm)

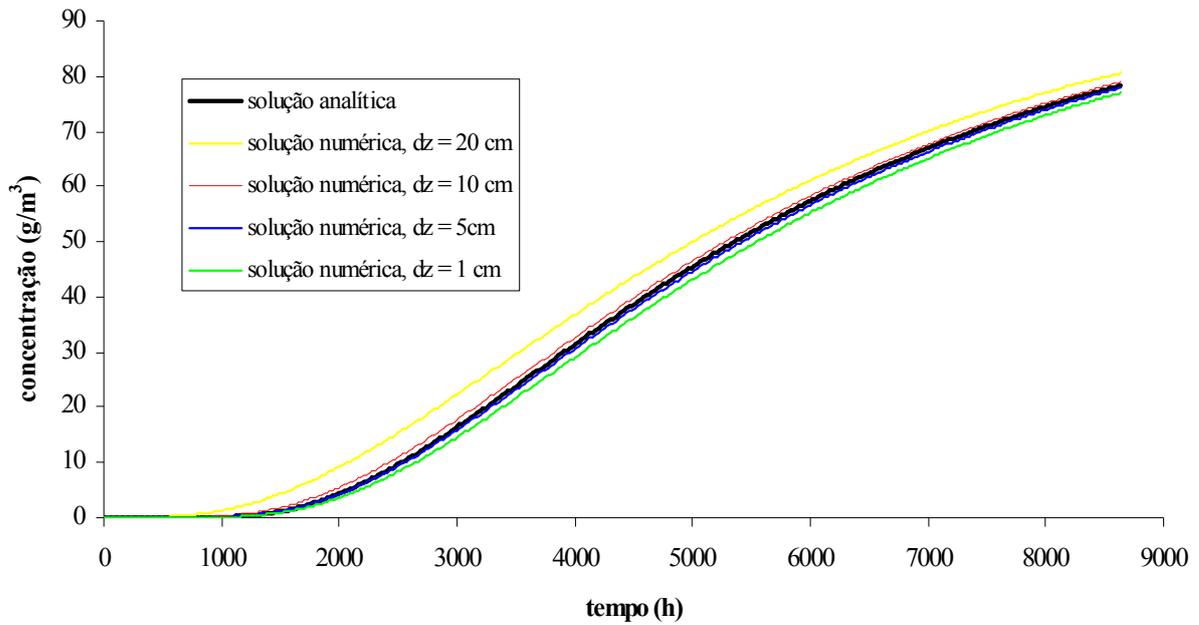


Figura 3.21 Variação da concentração na metade da coluna ($\Delta t = 24$ h e $\alpha_L = 20$ cm)

3.5 CONCLUSÕES DO CAPÍTULO 3

Como mencionado anteriormente, o presente capítulo buscou discutir o problema do fluxo e transporte em meio poroso não saturado, buscando fornecer subsídios para o desenvolvimento de um modelo computacional que resolva o problema de fluxo permanente unidimensional em meio não saturado e o problema de transporte unidimensional em meio não saturado sob regime de fluxo permanente.

Como resultado direto do desenvolvimento deste capítulo, foram implementados os modelos computacionais FLUX e TRANSP, que tratam respectivamente do problema de fluxo e transporte em meio não saturado.

O modelo FLUX foi avaliado segundo a sua sensibilidade à variação da discretização espacial (Δz) e em comparação ao modelo VS2DTI, concebido para resolver o problema de fluxo bidimensional em meio não saturado, sob regime transiente.

Em relação à análise de sensibilidade à discretização espacial (Δz), os resultados dos testes mostraram valores de tensão capilar, carga total, grau de saturação e condutividade hidráulica relativa próximos entre si independentemente dos valores de Δz usados nos testes.

Na comparação com o modelo VS2DTI, os resultados também foram próximos entre si para os valores de Δz usados nos testes. As maiores diferenças, em termos relativos, foram

obtidas junto à base da coluna de solo e são explicadas pelo modo como os dois modelos representam a condição de contorno junto à base da coluna.

Já o modelo TRANSP foi avaliado segundo a sua sensibilidade à variação da discretização temporal (Δt) e da discretização espacial (Δz) e em comparação à solução analítica do problema de transporte unidimensional em meio poroso não saturado.

A análise de sensibilidade em relação à Δt mostrou que, quando utilizado um valor de Δz igual a 10 cm (Cenários 01 a 03) e 5 cm (Cenário 04), houve inconsistências numéricas para valores de Δt superiores a 24 h para um valor de recarga de 0,2 cm/h. Já para os valores de recarga de 500 mm/ano e recarga nula não foram verificadas inconsistências numéricas para valores de Δt de até 144 h (6 dias) e 1152 h (48 dias), respectivamente.

A análise de sensibilidade em relação à Δz sugeriu um valor máximo de 20 cm. É importante destacar que, neste caso, a análise da discretização espacial (Δz) teve como objetivo principal estabelecer um número “razoável” de células para a representação da coluna de solo, considerando cada valor de recarga e cada cenário analisado. Uma possibilidade não explorada na análise seria o aumento de Δz e a conseqüente diminuição do número de células para a verificação de inconsistências numéricas.

Finalmente, na comparação entre as soluções numérica e analítica foram testados diferentes valores de discretização espacial (Δz), discretização temporal (Δt) e coeficiente de dispersividade longitudinal (α_L). Para Δz , foram adotados os valores de 20 cm, 10 cm, 5 cm e 1 cm. Já para Δt , foram adotados os valores de 6 h, 12 h e 24 h. Finalmente para α_L , foram adotados os valores de 5 cm, 10 cm e 20 cm. Os melhores resultados foram obtidos quando utilizado um valor de discretização espacial (Δz) igual a 5 cm, considerando-se os valores de Δz , Δt e α_L analisados.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BEAR, J.; VERRUIJT, A. *Modeling groundwater flow and pollution*. Dordrecht: D. Reidel Publishing Company, 1987. 414 p.
- BEESE, F.; WIERENGA, P. J. Solute transport through soil with adsorption and root water uptake computed with a transient and a constant-flux model. *Soil Science*, v. 129, p. 245-253, 1980
- CHARBENEAU, R. J. *Groundwater hydraulics and pollutant transport*. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2000. 593 p.

- COTA, S. D. S. *Modelagem da contaminação de aquíferos livres por NAPLs residuais na zona não saturada*. Porto Alegre : UFRGS : IPH, 2000. 167 p. Tese de doutoramento submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- FETTER, C. W. *Contaminant hydrogeology*. 2. ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1999. 500 p.
- FREEZE, R. A.; CHERRY, J. A. *Groundwater*. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1979. 604 p.
- HSIEH, P. A. et al. *VS2DI : a graphical software package for simulating fluid flow and solute or energy transport in variably saturated porous media*. Lakewood : U.S Geological Survey, 2000. Water Resources Investigations Report 99-4130.
- HUYAKORN, P. S.; PINDER, G. F. *Computational methods in subsurface flow*. San Diego : Academic, 1983.
- JAVANDEL, I.; DOUGHTY, C.; TSANG, C. F. *Groundwater transport : handbook of mathematical models*. Washington : America Geophysical Union, 1984. 228 p. (Water Resources Monograph Series; 10)
- LAPPALA, E. G. et al. *Documentation of computer program VS2D to solve the equations of fluid flow in variably saturated porous media*. Denver : U. S. Geological Survey, 1987. Water-Resources Investigations Report 83-4099.
- MARSHALL, J. D.; SHIMADA, B. W.; JAFFE, P. R. Effect of temporal variability in infiltration on contaminant transport in the unsaturated zone. *Journal of Contaminant Hydrology*, v. 46, pp. 151-161, 2000.
- MARSILY, G. de *Quantitative hydrogeology: groundwater hydrology for engineers*. San Diego: Academic Press Corporation, 1986. 440 p.
- McWHORTER D. B.; SUNADA, D. K. *Ground-Water Hydrology and Hydraulics*. Ann Arbor : Water Resources Publication, 1981. 290 p.
- MUALLEM, Y. *A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media*. *Water Resources Research*, v.12, n. 3, pp. 513-522, 1976.
- NIELSEN, D. R.; VAN GENUCHTEN, M. T.; BIGGAR, J. W. Water flow and solute transport processes in the unsaturated zone. *Water Resources Research*. v. 22, n. 9, p. 89S-108S, 1986.
- NOORISHAD, J.; TSANG, C. F.; PERROCHET, P.; MUSY, A. A perspective on the numerical solution of the convection dominated transport problem: A price to pay for the easy way out. *Journal of Hydrology*, v. 28, n. 2, p. 551-561, 1992.

- PERROCHET , P.; BÉROD, D. Stability of the standard Crank-Nicholson-Galerkin scheme applied to the diffusion-convection equation: some new insights. *Water Resources Research*, v. 29, n. 9, pp. 3291-3297, 1993.
- PRESS, W. H et al. *Numerical recipes in Fortran 77 : the art of scientific computing*. 2. ed. Cambridge : Cambridge University Press, 1992. volume 1. 933 p.
- SPITZ, K.; MORENO, J. *A practical guide to groundwater and solute transport modeling*. New York: John Wiley & Sons, 1996. 461 p.
- VAN GENUCHTEN, M. T. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society America Journal*, 1980. vol. 44. p 892-898, 1980.
- VAN GENUCHTEN, M. T. Analytical solutions for chemical transport with simultaneous adsorption, zero-order production and first-order decay. *Journal of Hydrology*, 1981. vol. 49. p 213-233, 1981.
- WIERENGA, P. J. Solute distribution profiles computed with steady-state and transient water movement models. *Soil Science Society American Journal*, v. 41, p. 1050-1055, 1977.

4. FLUXO E TRANSPORTE EM MEIO POROSO SATURADO

O presente capítulo busca apresentar conceitos básicos relativos ao fluxo e ao transporte em meio poroso saturado, visando fornecer subsídios para o desenvolvimento dos modelos computacionais que resolvam os problemas de fluxo permanente tridimensional e de transporte tridimensional sob regime de fluxo permanente, ambos em meio poroso saturado. Novamente, destaca-se que os referidos problemas são equacionados e resolvidos de modo desacoplado sob a hipótese de que as concentrações dos contaminantes são pequenas e não alteram significativamente a densidade da água e as características hidráulicas do meio.

Inicialmente, são discutidos aspectos teóricos relativos à formulação matemática do problema de fluxo em meio poroso saturado. Na seqüência, procura-se descrever, de modo sucinto, o esquema numérico e as principais características do modelo computacional FLUXSAT para a solução do problema de fluxo permanente.

Na seqüência, são discutidos aspectos teóricos relativos à formulação matemática do problema de transporte em meio poroso saturado. São também apresentados o esquema numérico e as principais características do modelo computacional TRANSPSAT para a solução do problema de transporte sob regime de fluxo permanente. Finalmente, são descritos os testes realizados com os modelos FLUXSAT e TRANSPSAT, procurando avaliar o desempenho de ambos.

4.1 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO FLUXO EM MEIO SATURADO

Neste item são apresentados, de modo sucinto, alguns conceitos básicos relacionados à formulação matemática do fluxo em meio poroso saturado, estabelecendo algumas comparações com o fluxo em meio poroso não saturado. Portanto, não se trata de uma revisão exaustiva sobre todos os conceitos envolvidos na descrição do problema de fluxo em meio saturado, que constitui um tema bastante discutido do ponto de vista técnico e científico. Existem na literatura técnica, diversos textos clássicos relacionados ao referido tema, dentre os quais, pode-se citar Freeze e Cherry (1979), McWhorter e Sunada (1981), Marsily (1986), Bear e Verruijt (1987), Spitz e Moreno (1996) e Charbeneau (2000).

A equação que descreve o fluxo de água em meio saturado, a exemplo da formulação matemática do fluxo em meio não saturado, pode também ser obtida a partir do conceito de continuidade e do uso da equação de Darcy para meios porosos. Charbeneau (2000) apresenta a equação geral da continuidade aplicada ao fluxo de água em um meio poroso saturado:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \text{div}(\tilde{q}) = W' \quad (4.1)$$

onde: h = carga hidráulica [L];
 S_s = armazenamento específico [L^{-1}];
 $\text{div}(\cdot)$ = operador divergente;
 \tilde{q} = velocidade de Darcy [LT^{-1}];
 W' = fonte/sumidouro externo [$L^3T^{-1}L^{-3}$].

A Equação 4.1 representa a equação geral do fluxo de água em meio poroso saturado (Bear e Verruijt, 1987; Smedt, 1998 e Charbeneau, 2000), sendo válida indistintamente para aquíferos confinados e não confinados. Discussões sobre as hipóteses utilizadas para a obtenção da Equação 4.1 podem ser encontradas, por exemplo, em Marsily (1986), Bear e Verruijt (1987), Smedt (1998) e Charbeneau (2000).

O armazenamento específico (S_s), presente na Equação 4.1, é definido como sendo igual ao volume de água adicionado ou subtraído de um determinado volume de controle por unidade de volume por unidade de variação da carga hidráulica (h) e está relacionado com o mecanismo de liberação de água em um aquífero. No caso dos aquíferos não confinados, a liberação de água se dá pela drenagem dos poros do solo. Já para os aquíferos confinados, o armazenamento específico (S_s) é basicamente função da compressibilidade da água e da deformação da matriz do solo. Discussão teórica sobre o armazenamento específico (S_s) pode ser encontrada, por exemplo, em Bear e Verruijt (1987) e Smedt (1998).

Deste modo, o termo $S_s \cdot \frac{\partial h}{\partial t}$ representa a taxa de variação do volume de água armazenado em um determinado volume de controle em relação ao tempo. Já o termo $\text{div}(\tilde{q})$ representa o balanço dos fluxos de água que entram e saem do volume de controle. Finalmente, o termo W' representa uma fonte e/ou sumidouro externos e que se caracterizam por adicionar ou retirar água do volume de controle a partir de pontos no interior do mesmo, ou seja, pontos não pertencentes às fronteiras do referido volume de controle.

É interessante comparar a Equação 4.1, que representa o conceito de continuidade para um meio poroso saturado, com a Equação 3.1, que representa o mesmo conceito, porém para um meio poroso não saturado. Em princípio, a diferença básica refere-se ao termo que representa a variação em relação ao tempo do volume de água armazenado em um determinado volume de controle.

No caso específico de um meio poroso não saturado, ver Equação 3.1, a variação temporal do volume de água armazenado é representado pela variação no tempo do conteúdo volumétrico de água, expressa pelo termo $\frac{\partial \theta}{\partial t}$. De modo simples, considerando-se a porosidade constante, a variação do volume armazenado pode ser explicada pela variação do grau de saturação (S) ao longo do tempo.

Já no caso específico de um meio poroso saturado, ver Equação 4.1, a variação temporal do volume de água armazenado é proporcional à variação no tempo da carga hidráulica, expressa pelo termo $S_s \cdot \frac{\partial h}{\partial t}$. De modo simples, para aquíferos não confinados, a variação do volume armazenado pode ser explicada pela variação da posição da superfície freática.

A Equação de Darcy para o fluxo de água em meio poroso saturado pode ser representada por (Charbeneau, 2000):

$$\tilde{q} = -K \cdot \text{grad}(h) \quad (4.2)$$

onde: \tilde{q} = velocidade de Darcy [LT^{-1}];

K = condutividade hidráulica no meio saturado [LT^{-1}];

h = carga hidráulica [L];

$\text{grad}(\cdot)$ = operador gradiente.

A Equação 4.2 é obtida considerando-se a adoção de uma série de hipóteses, cuja descrição e discussão podem ser encontradas, por exemplo, em Charbeneau (2000). Discussões sobre os limites de validade da Equação 4.2 e generalizações da mesma podem ser encontradas em Bear e Verruijt (1987).

Em comparação à Equação 3.2, que trata do fluxo em meio poroso não saturado, tem-se que a condutividade hidráulica (K) no meio saturado é constante, já que não há variação do conteúdo volumétrico (θ). Substituindo-se \tilde{q} , a partir de sua definição expressa na Equação 4.2, a Equação 4.1 pode ser escrita como:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \text{div}[K \text{ grad}(h)] + W' \quad \text{ou}$$

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) + W' \quad (4.3)$$

A Equação 4.3, segundo em McDonald e Harbaugh (1988), representa a equação de fluxo transiente em meio poroso saturado não homogêneo e anisotrópico. Duas hipóteses importantes relacionadas à Equação 4.3 são a densidade da água constante e o alinhamento dos eixos coordenados x , y e z com as direções principais do tensor da condutividade hidráulica.

A Equação 4.3 pode ser usada indistintamente para aquíferos confinados e não confinados. A principal diferença está na interpretação física do armazenamento específico (S_s). Para aquíferos não confinados, S_s está relacionado à variação do volume de água armazenado em função da mudança da posição do lençol freático devido a variações da carga hidráulica. Para aquíferos confinados, S_s está relacionado aos efeitos de compressibilidade da água e de deformação da matriz do solo também resultantes de variações da carga hidráulica no aquífero. Conforme já mencionado, discussão teórica sobre o armazenamento específico (S_s) pode ser encontrada em Bear e Verruijt (1987) e Smedt (1998).

A Equação 4.3, que trata do problema de fluxo em meio saturado, pode ser comparada à Equação 3.3, que trata do problema de fluxo em meio não saturado. Além da diferença no termo $(S_s \cdot \partial h / \partial t)$, já discutida anteriormente, tem-se que os valores de condutividade hidráulica (K) independem do conteúdo volumétrico (θ) e, por conseqüência, do grau de saturação (S), já que ambos são constantes para o meio poroso saturado.

A Equação 4.3 pode ser ainda particularizada para o caso de fluxo em regime permanente. Considerando-se a ausência de fontes e/ou sumidouros externos e para a condição de regime permanente, a Equação 4.3 pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) = 0 \quad (4.4)$$

A Equação 4.4, portanto, representa a equação do fluxo permanente em meio poroso saturado não homogêneo e anisotrópico. A solução da referida equação é representada por uma função do tipo $h = f(x,y,z)$ e, em geral, é obtida numericamente. Algumas soluções analíticas para o problema de fluxo permanente em meio poroso saturado podem ser obtidas a partir da adoção de hipóteses adicionais. Por exemplo, para um meio homogêneo e isotrópico, a Equação 4.4 se reduz a:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = 0 \quad (4.5)$$

A Equação 4.5 representa, portanto, a equação do fluxo permanente em meio poroso saturado homogêneo e isotrópico. Exemplos de soluções para a referida equação, conhecida como Equação de Laplace, podem ser encontrados, por exemplo, em Strack (1989).

4.1.1 Condições Inicial e de Contorno para o Problema de Fluxo em Meio Saturado

As condições iniciais necessárias para a solução do problema de fluxo transiente em meio poroso saturado, considerando-se a Equação 4.3, são os valores de carga hidráulica (h) no instante t igual a zero, ou seja, $h(x,y,z,t) = h(x,y,z,0)$. Na presente tese, onde se considera o problema de fluxo em regime permanente, não existe teoricamente a necessidade de definição de nenhuma condição inicial.

As condições de contorno para o problema de fluxo em meio poroso saturado seguem a classificação apresentada no item 3.1.1, reproduzida resumidamente a seguir, considerando o exposto em Spitz e Moreno (1996):

- Tipo I - Definição da pressão ou carga hidráulica junto ao contorno (Condição de Dirichlet);
- Tipo II - Definição do fluxo volumétrico (Condição de Neumann);
- Tipo III - Contorno semi-permeável ou fluxo variável em função da carga hidráulica (Condição de Cauchy).

É importante destacar que as condições de contorno para o problema de fluxo são constantes ao longo do tempo, uma vez que se adotou, por hipótese, fluxo permanente. Marsily (1986), Bear e Verruijt (1987) e Spitz e Moreno (1996) apresentam discussão mais detalhada sobre condições de contorno nos problemas de fluxo em meio poroso saturado.

4.1.2 Solução Numérica do Problema de Fluxo em Meio Saturado

Este item apresenta o esquema numérico adotado para o desenvolvimento do modelo computacional FLUXSAT que trata do problema de fluxo permanente em meio poroso saturado.

O desenvolvimento do modelo FLUXSAT foi baseado principalmente no trabalho de McDonald e Harbaugh (1988) que descreve um modelo computacional de fluxo transiente

tridimensional em meio poroso saturado, baseado em um esquema de diferenças finitas. O referido trabalho representa a base do modelo computacional MODFLOW, provavelmente o mais popular dos modelos computacionais de fluxo em meio poroso saturado. Um breve e interessante histórico sobre o desenvolvimento do modelo computacional MODFLOW é apresentado em McDonald e Harbaugh (2003).

É importante destacar que o modelo FLUXSAT foi desenvolvido visando principalmente o estudo de caso que é objeto de análise da presente tese. Portanto, apesar de baseado no trabalho de McDonald e Harbaugh (1988), todo o código do referido modelo foi desenvolvido especificamente para o presente trabalho e apresenta algumas simplificações e características próprias, tais como: fluxo em regime permanente; condição de recarga permanente no topo do aquífero; e representação de conexão hidráulica entre o aquífero e uma lagoa, como será apresentado na seqüência.

O modelo FLUXSAT resolve numericamente a Equação 4.4 que descreve o fluxo permanente em meio poroso saturado não homogêneo e anisotrópico. Como já mencionado, a solução da Equação 4.4 é representada por uma função do tipo $h = f(x,y,z)$ e, em geral, é obtida numericamente.

A discretização espacial utilizada para a representação de um aquífero hipotético é apresentada pela Figura 4.1. Deste modo, o aquífero hipotético é representado por uma matriz tridimensional, cujas dimensões são os números de linhas ($nlin$), colunas ($ncol$) e camadas ($ncam$). Neste caso, o número de células da matriz tridimensional é dado pelo produto [$nlin \times ncol \times ncam$].

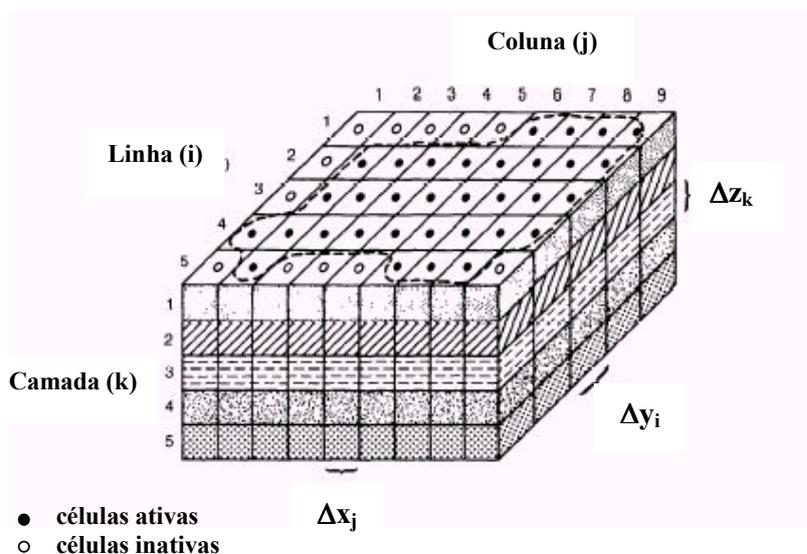


Figura 4.1 Representação discretizada de um aquífero hipotético
(adaptado de McDonald e Harbaugh, 1988)

Adotou-se, por convenção, que os eixos x e y são paralelos, respectivamente, às linhas e colunas da matriz tridimensional apresentada na Figura 4.1, enquanto o eixo z é orientado verticalmente e positivamente para cima. É importante comentar que um aquífero real, em geral, não pode ser representado exatamente por um arranjo tridimensional, como o mostrado na Figura 4.1. Em razão disso, a representação discretizada do aquífero hipotético (Figura 4.1) apresenta células ativas, para as quais são escritas as equações de diferenças, e células inativas, para as quais não são escritas as equações de diferenças.

Ainda em relação à Figura 4.1, em termos de variação dos índices i, j e k , tem-se que um incremento no índice i corresponde a um decréscimo no valor de y ; um incremento no índice j corresponde a um acréscimo no valor de x ; e um incremento no índice k corresponde a um decréscimo no valor de z . A notação utilizada aqui para representar a discretização espacial nas direções x, y e z difere da notação usada em McDonald e Harbaugh (1988). A Figura 4.2 apresenta o esquema de discretização espacial centrado na célula e que foi utilizado no modelo FLUXSAT, seguindo notação definida na Figura 4.1.

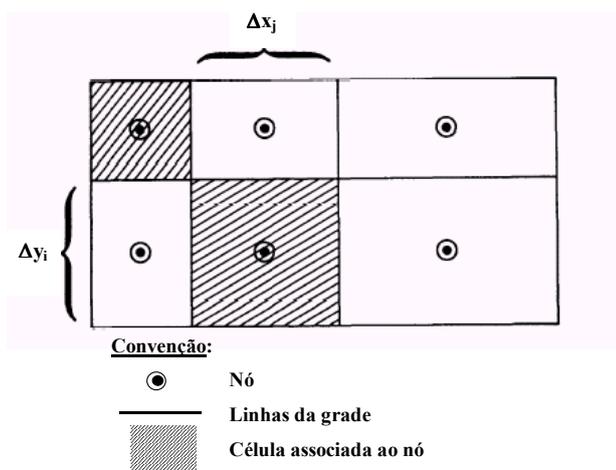


Figura 4.2 Representação do esquema de discretização espacial centrado na célula (adaptado de McDonald e Harbaugh, 1988)

McDonald e Harbaugh (1988) apresentam um esquema de solução numérica para a Equação 4.3, que trata do problema de fluxo sob regime transiente, obtido a partir do conceito de continuidade aplicado a uma célula (i,j,k) qualquer do aquífero em função das células adjacentes, conforme notação apresentada na Figura 4.3.

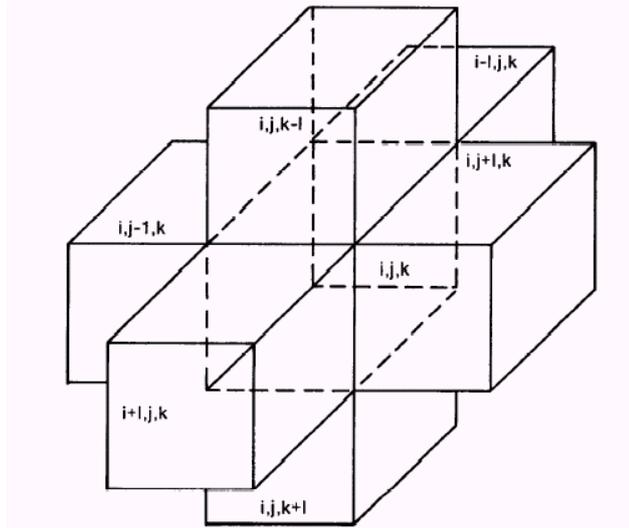


Figura 4.3 Representação das células (i,j,k) e das respectivas células adjacentes (McDonald e Harbaugh, 1988)

O conceito de continuidade aplicado a uma célula (i,j,k) qualquer implica em que a soma de todos os fluxos entrando e saindo da célula (i,j,k) deve ser igual à taxa de variação do armazenamento dentro da mesma, sendo representado matematicamente por (McDonald e Harbaugh, 1988):

$$\begin{aligned}
 & Cx_{i,j-\frac{1}{2},k} (h_{i,j-1,k} - h_{i,j,k}) + Cx_{i,j+\frac{1}{2},k} (h_{i,j+1,k} - h_{i,j,k}) + \\
 & Cy_{i-\frac{1}{2},j,k} (h_{i-1,j,k} - h_{i,j,k}) + Cy_{i+\frac{1}{2},j,k} (h_{i+1,j,k} - h_{i,j,k}) + \\
 & Cz_{i,j,k-\frac{1}{2}} (h_{i,j,k-1} - h_{i,j,k}) + Cz_{i,j,k+\frac{1}{2}} (h_{i,j,k+1} - h_{i,j,k}) + \\
 & P_{i,j,k} h_{i,j,k} + Q_{i,j,k} = SS_{i,j,k} \Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k \Delta h_{i,j,k} / \Delta t
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

onde Cx , Cy e Cz representam as condutâncias nas direções x , y e z , respectivamente, e os termos $P_{i,j,k} h_{i,j,k}$ e $Q_{i,j,k}$ representam fluxos provenientes de processos externos ao aquífero, como recarga, evapotranspiração, interação com rios e lagoas, entre outros.

A Equação 4.6 traduz o conceito de continuidade aplicado ao problema de fluxo transiente em meio poroso saturado. A referida equação pode ser facilmente modificada para contemplar o problema de fluxo permanente, representado pela Equação 4.7 a seguir. É importante destacar que tanto a Equação 4.6, extraída de McDonald e Harbaugh (1988), quanto a Equação 4.7 seguem a notação definida na Figura 4.1.

$$\begin{aligned}
& Cx_{i,j-\frac{1}{2},k} (h_{i,j-1,k} - h_{i,j,k}) + Cx_{i,j+\frac{1}{2},k} (h_{i,j+1,k} - h_{i,j,k}) + \\
& Cy_{i-\frac{1}{2},j,k} (h_{i-1,j,k} - h_{i,j,k}) + Cy_{i+\frac{1}{2},j,k} (h_{i+1,j,k} - h_{i,j,k}) + \\
& Cz_{i,j,k-\frac{1}{2}} (h_{i,j,k-1} - h_{i,j,k}) + Cz_{i,j,k+\frac{1}{2}} (h_{i,j,k+1} - h_{i,j,k}) + \\
& P_{i,j,k} h_{i,j,k} + Q_{i,j,k} = 0
\end{aligned} \tag{4.7}$$

A Equação 4.7 aplicada às células ativas da matriz, utilizada para representar conceitualmente o aquífero, resulta em um sistema de equações lineares e que será ainda objeto de discussão neste capítulo.

As condutâncias Cx , Cy e Cz , presentes nas Equações 4.6 e 4.7, podem ser assim definidas (McDonald e Harbaugh, 1988):

$$Cx_{i,j\pm\frac{1}{2},k} = \frac{Kx_{i,j\pm\frac{1}{2},k} \Delta y_i \Delta z_k}{\Delta x_{j\pm\frac{1}{2}}} \tag{4.8}$$

$$Cy_{i\pm\frac{1}{2},j,k} = \frac{Ky_{i\pm\frac{1}{2},j,k} \Delta x_j \Delta z_k}{\Delta y_{i\pm\frac{1}{2}}} \tag{4.9}$$

$$Cz_{i,j,k\pm\frac{1}{2}} = \frac{Kz_{i,j,k\pm\frac{1}{2}} \Delta x_j \Delta y_i}{\Delta z_{k\pm\frac{1}{2}}} \tag{4.10}$$

onde Kx , Ky e Kz são as condutividades hidráulicas nas direções x , y e z , respectivamente. As Equações 4.8 a 4.10 também seguem a notação definida na Figura 4.1.

A título de exemplo, para ilustrar a origem das Equações 4.6 e 4.7, a Figura 4.4 apresenta o esquema usado para o cálculo do fluxo de uma célula $(i,j-1,k)$ para uma célula (i,j,k) .

Considerando-se a Figura 4.4 e a Equação 4.2 particularizada para uma única dimensão, o cálculo do fluxo de uma célula $(i,j-1,k)$ para uma célula (i,j,k) ficaria assim definido:

$$q_{i,j-\frac{1}{2},k} = Kx_{i,j-\frac{1}{2},k} \Delta y_i \Delta z_k \frac{(h_{i,j-1,k} - h_{i,j,k})}{\Delta x_{j-\frac{1}{2}}} \tag{4.11}$$

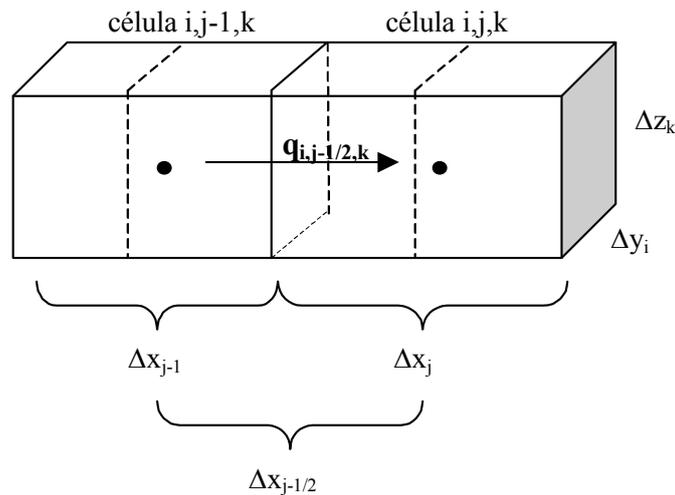


Figura 4.4 Esquema para o cálculo do fluxo da célula $i,j-1,k$ para a célula i,j,k

A partir da definição de C_x , apresentada na Equação 4.8, a Equação 4.11 pode ser escrita como:

$$q_{i,j-1/2,k} = C_{x_{i,j-1/2,k}} (h_{i,j-1,k} - h_{i,j,k}) \quad (4.12)$$

O mesmo raciocínio pode ser aplicado para calcular os fluxos entre as outras cinco células adjacentes e a célula (i,j,k) e que aparecem como termos das Equações 4.6 e 4.7. Na seqüência, descreve-se o procedimento utilizado para a determinação das condutâncias nas direções x , y e z .

4.1.3 Cálculo das Condutâncias nas Direções x , y e z

As condutâncias nas direções x , y e z , como definidas pelas Equações 4.8 a 4.10, se referem às condutâncias “entre células”. No entanto, como são fornecidos os valores de condutividade hidráulica das células nas direções x , y e z como dados de entrada do modelo FLUXSAT, existe a necessidade de se obter as condutividades hidráulicas e as condutâncias “entre células” a partir das condutividades hidráulicas e das condutâncias das células.

McDonald e Harbaugh (1988) apresentam uma discussão detalhada sobre a obtenção das condutâncias “entre células” nas direções x , y e z a partir da condutividade hidráulica das células nas referidas direções. Uma descrição mais resumida sobre a obtenção das

condutâncias “entre células” é apresentada em Charbeneau (2000), a partir do trabalho desenvolvido por McDonald e Harbaugh (1988).

Para um conjunto de condutâncias dispostas em série, o inverso da condutância equivalente é igual à soma dos inversos das condutâncias individuais. A Figura 4.5 apresentada a seguir ajuda a ilustrar a obtenção das condutâncias “entre células”.

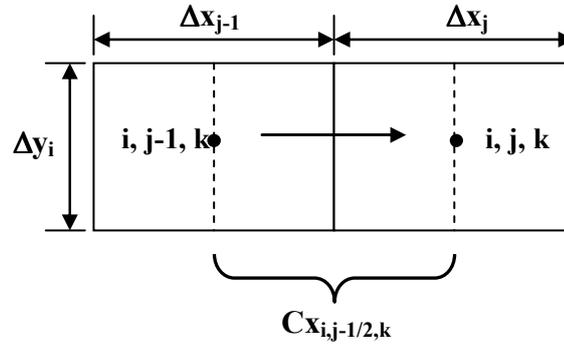


Figura 4.5 Esquema para o cálculo da condutância na direção x

A título de exemplo e considerando-se a Equação 4.8 e a Figura 4.5, a condutância equivalente na direção x entre duas células $(i,j-1,k)$ e (i,j,k) pode ser obtida a partir da Equação 4.13 a seguir:

$$\frac{1}{C_{x_{i,j-1/2,k}}} = \frac{1}{\left(\frac{K_{x_{i,j-1,k}} \cdot \Delta z_k \cdot \Delta y_i}{\Delta x_{j-1}/2} \right)} + \frac{1}{\left(\frac{K_{x_{i,j,k}} \cdot \Delta z_k \cdot \Delta y_i}{\left(\Delta x_j / 2 \right)} \right)} \quad (4.13)$$

A partir da Equação 4.13, com as devidas manipulações algébricas, o valor de $C_{x_{i,j-1/2,k}}$ pode ser obtido através de:

$$C_{x_{i,j-1/2,k}} = 2\Delta y_i \Delta z_k \frac{K_{x_{i,j-1,k}} \cdot K_{x_{i,j,k}}}{\left(K_{x_{i,j-1,k}} \Delta x_j + K_{x_{i,j,k}} \Delta x_{j-1} \right)} \quad (4.14)$$

O mesmo raciocínio aplicado às direções y e z permite o estabelecimento das Equações 4.15. e 4.16, apresentadas a seguir e que podem ser utilizadas para a obtenção das condutâncias nas referidas direções.

$$C_{y_{i-1/2,j,k}} = 2\Delta x_j \Delta z_k \frac{K_{y_{i-1,j,k}} \cdot K_{y_{i,j,k}}}{(K_{y_{i-1,j,k}} \Delta y_i + K_{y_{i,j,k}} \Delta y_{i-1})} \quad (4.15)$$

$$C_{z_{i,j,k-1/2}} = 2\Delta x_j \Delta y_i \frac{K_{z_{i,j,k-1}} \cdot K_{z_{i,j,k}}}{(K_{z_{i,j,k-1}} \Delta z_k + K_{z_{i,j,k}} \Delta z_{k-1})} \quad (4.16)$$

As Equações 4.14 a 4.16 são utilizadas então para o cálculo das condutâncias nas direções x , y e z , considerando-se que a célula (i,j,k) e as respectivas células adjacentes, ver Figura 4.3, encontram-se completamente saturadas.

4.1.3.1 Cálculo da condutância para as direções x e y (células parcialmente saturadas)

No caso de problemas de fluxo em aquíferos livres, a camada superior, em geral, apresenta células parcialmente saturadas, em razão da posição do lençol freático relativamente à posição do topo das células da referida camada.

Em razão do exposto, as Equações 4.14 a 4.16 precisam ser adaptadas para levar em consideração o caso em que a célula (i,j,k) ou algumas de suas células adjacentes é parcialmente saturada, como discutido a seguir. Inicialmente é apresentado o procedimento utilizado para o cálculo da condutância nas direções x e y (plano horizontal) e na seqüência apresenta-se o procedimento para o cálculo da condutância na direção z (plano vertical).

Considerando-se o esquema de discretização espacial mostrado na Figura 4.1, as células de uma determinada camada k apresentam as mesmas cotas de base e de topo, ou seja, a base e o topo da camada são definidos por planos horizontais.

As Equações 4.14 e 4.15, como mencionado anteriormente, são utilizadas para o cálculo das condutâncias nas direções x e y quando a célula (i,j,k) e as respectivas células adjacentes encontram-se completamente saturadas. Neste caso, o fluxo horizontal se dá em toda a espessura (Δz) da célula. Já no caso de uma célula parcialmente saturada, o fluxo não se dá mais em toda a espessura (Δz) da célula, mas sobre uma espessura igual à diferença entre a carga hidráulica (h) da célula e a base da camada k à qual a célula pertence.

Supondo-se, por exemplo, o fluxo na direção x entre as células $(i,j-1,k)$ e (i,j,k) , a Equação 4.14 pode ser escrita como:

$$C_{x_{i,j-1/2,k}} = 2\Delta y_i \frac{K_{x_{i,j-1,k}} \cdot \Delta z_{i,j-1,k} \cdot K_{x_{i,j,k}} \cdot \Delta z_{i,j,k}}{(K_{x_{i,j-1,k}} \cdot \Delta z_{i,j-1,k} \cdot \Delta x_j + K_{x_{i,j,k}} \cdot \Delta z_{i,j,k} \cdot \Delta x_{j-1})} \quad (4.17)$$

A partir do valor da carga hidráulica (h) da célula (i,j,k) , da espessura Δz_k da camada k e do topo e base da camada k , o valor de $\Delta z_{i,j,k}$, presente na Equação 4.17, é obtido através do procedimento apresentado a seguir:

Se ($h_{i,j,k} >$ topo da camada k) então

$$\Delta z_{i,j,k} = \Delta z_k \text{ (célula completamente saturada)}$$

senão

$$\Delta z_{i,j,k} = h_{i,j,k} - \text{base da camada } k \text{ (célula parcialmente saturada)}$$

Fim Se

O procedimento descrito é aplicado também na determinação do valor de $\Delta z_{i,j-1,k}$, a partir do valor da carga hidráulica (h) da célula $(i,j-1,k)$, da espessura (Δz_k) da camada k e do topo e base da camada k .

O mesmo procedimento pode ser aplicado ao fluxo entre as células $(i-1,j,k)$ e (i,j,k) na direção y , considerando-se a Equação 4.15 escrita como:

$$C_{y_{i-1/2,j,k}} = 2\Delta x_j \frac{K_{y_{i-1,j,k}} \cdot \Delta z_{i-1,j,k} \cdot K_{y_{i,j,k}} \cdot \Delta z_{i,j,k}}{(K_{y_{i-1,j,k}} \cdot \Delta z_{i-1,j,k} \cdot \Delta y_i + K_{y_{i,j,k}} \cdot \Delta z_{i,j,k} \cdot \Delta y_{i-1})} \quad (4.18)$$

O mesmo procedimento utilizado para o cálculo de $\Delta z_{i,j-1,k}$ e $\Delta z_{i,j,k}$ é usado para o cálculo de $\Delta z_{i-1,j,k}$.

4.1.3.2 Cálculo da condutância para a direção z (células parcialmente saturadas)

A Equação 4.16, como já mencionado, é usada para o cálculo da condutância na direção z quando a célula (i,j,k) e as respectivas células adjacentes encontram-se completamente saturadas.

No caso de um aquífero não confinado, a condutância na direção z de uma célula (i,j,k) parcialmente saturada é calculada do mesmo modo que uma célula completamente saturada, usando-se portanto a Equação 4.16, desde que a carga hidráulica (h) da célula seja superior à cota da base da camada k . Caso contrário, o valor de C_z é considerado igual a zero.

4.1.4 Representação dos Processos Externos ao Aquífero

Os termos $P_{i,j,k}h_{i,j,k}$ e $Q_{i,j,k}$, presentes nas Equações 4.6 e 4.7, representam fluxos provenientes de processos externos ao aquífero, como recarga, evapotranspiração, interação com rios e lagoas, entre outros.

O fluxo entrando ou saindo de uma dada célula (i,j,k) devido a processos externos ao aquífero, segundo McDonald e Harbaugh (1988), pode ser dependente ou independente da carga hidráulica (h) da própria célula (i,j,k) . Deste modo, o fluxo devido a processos externos ao aquífero pode ser representado por (McDonald e Harbaugh 1988):

$$a_{i,j,k,n} = p_{i,j,k,n}h_{i,j,k} + q_{i,j,k,n} \quad (4.19)$$

onde $a_{i,j,k,n}$ representa o fluxo proveniente da n -ésima fonte externa para a célula (i,j,k) e $p_{i,j,k,n}$ e $q_{i,j,k,n}$ são constantes de dimensões $[L^2T^{-1}]$ e $[L^3T^{-1}]$, respectivamente. No caso do fluxo da n -ésima fonte externa para a célula (i,j,k) ser independente da carga hidráulica da referida célula, $p_{i,j,k,n}$ é igual a zero. No caso de uma mesma célula (i,j,k) receber o fluxo de mais de uma fonte externa, o fluxo total externo (QS) é obtido por (McDonald e Harbaugh 1988):

$$QS_{i,j,k} = \sum_{n=1}^N a_{i,j,k,n} = \left(\sum_{n=1}^N p_{i,j,k,n} \right) h_{i,j,k} + \left(\sum_{n=1}^N q_{i,j,k,n} \right) \quad (4.20)$$

Portanto, a partir da Equação 4.20, as constantes $P_{i,j,k}$ e $Q_{i,j,k}$, presentes nas Equações 4.6 e 4.7, podem ser definidas através das seguintes expressões (McDonald e Harbaugh 1988):

$$P_{i,j,k} = \sum_{n=1}^N p_{i,j,k,n} \quad e \quad (4.21)$$

$$Q_{i,j,k} = \sum_{n=1}^N q_{i,j,k,n} \quad (4.22)$$

Deste modo, a Equação 4.20 passa a ser escrita como:

$$QS_{i,j,k} = P_{i,j,k} \cdot h_{i,j,k} + Q_{i,j,k} \quad (4.23)$$

No modelo FLUXSAT, em razão do caso específico a ser estudado, foram considerados somente dois processos externos ao aquífero: recarga e conexão hidráulica com uma lagoa.

Adotou-se, por hipótese, que a lagoa caracteriza-se por ocupar toda a área de uma célula, como será discutido no item 4.1.4.2. Como consequência, exclui-se a possibilidade de uma mesma célula receber a contribuição simultânea dos dois processos externos considerados. Portanto, uma dada célula recebe a contribuição de, no máximo, um processo externo. Isto implica necessariamente em valores de n , presentes nas Equações 4.20 a 4.22, iguais a zero ou um. Deste modo, é possível utilizar as Equações 4.20 e 4.23 indistintamente.

Os procedimentos usados para representar a recarga do aquífero e a conexão hidráulica do aquífero com uma lagoa são descritos a seguir.

4.1.4.1 Representação da recarga do aquífero

Em geral, a recarga do aquífero ocorre como o resultado de uma parcela da precipitação que infiltra e percola até atingir o aquífero. Matematicamente, a recarga pode ser representada por (McDonald e Harbaugh, 1988):

$$QR_{i,j} = I_{i,j} \cdot \Delta x_j \cdot \Delta y_i \quad (4.24)$$

onde: $QR_{i,j}$ = recarga aplicada a uma célula localizada na posição (i,j) [L^3T^{-1}];

$I_{i,j}$ = taxa de recarga aplicada a uma célula localizada na posição (i,j) [LT^{-1}];

$\Delta x_j \Delta y_i$ = área (plano horizontal) da célula na posição (i,j) [L^2].

A recarga $QR_{i,j}$ é aplicada a uma única célula dentro do conjunto de células pertencente à coluna vertical (i,j) . Portanto, um dado adicional que deve ser fornecido é em qual célula pertencente à coluna vertical (i,j) deve-se aplicar a recarga. Em outras palavras, deve-se informar em qual camada a recarga deve ser aplicada, considerando-se a posição (i,j) .

McDonald e Harbaugh (1988) apresentam três modos distintos de especificar em qual célula da coluna vertical (i,j) aplica-se a recarga, a saber:

Opção 01: a recarga é sempre aplicada à camada 1 (camada superior) do modelo;

Opção 02: a recarga é aplicada a qualquer célula pertencente à coluna vertical (i,j) através de um índice k especificado para cada posição (i,j) de uma matriz bidimensional IRECH;

Opção 03: a recarga é aplicada à célula ativa superior da coluna vertical (i,j) , desde que não haja nenhuma célula com condição de carga constante acima da referida célula na coluna.

No modelo FLUXSAT foi implantada apenas a opção 02, representada a seguir através da Figura 4.6, considerando-se um plano vertical. Destaca-se que a opção 02 pode ser usada para representar a opção 01, bastando-se especificar o índice k como sendo igual a 1 para todas os elementos da matriz IRECH. No caso de não haver recarga em uma determinada coluna (i,j) , é atribuído o valor zero para o índice k .

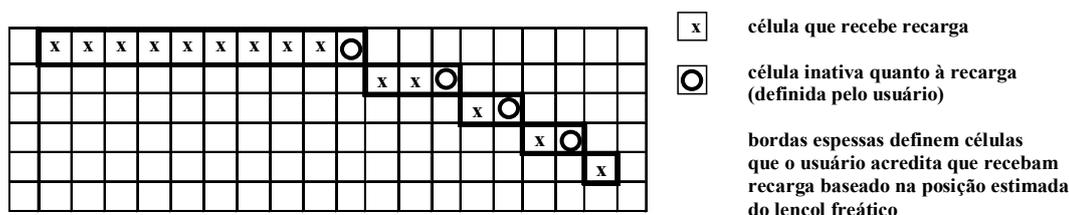


Figura 4.6 Esquema para definição da camada para aplicação da recarga (plano vertical)

Do ponto de vista de representação matemática dos processos externos ao aquífero, a partir da Equação 4.23, a definição da recarga aplicada a uma célula localizada na posição (i,j) pelo uso da Equação 4.24 implica em $P_{i,j,k} = 0$ e $Q_{i,j,k} = I_{i,j} \cdot \Delta x_j \cdot \Delta y_i$.

No modelo FLUXSAT não foi implementado nenhum procedimento para a condição de uma célula secar durante o processo de convergência para a solução do sistema de equações. Portanto, é recomendável que a discretização vertical do aquífero e a aproximação inicial para as cargas hidráulicas sejam estabelecidas levando em consideração esta limitação do modelo.

4.1.4.2 Representação da conexão hidráulica entre o aquífero e uma lagoa

A conexão hidráulica entre o aquífero e uma lagoa é representada conceitualmente no modelo FLUXSAT como exemplificado através da Figura 4.7. A lagoa é considerada como

sendo delimitada verticalmente por paredes impermeáveis. Portanto, o fluxo entre o aquífero e a lagoa se dá apenas no sentido vertical através do fundo da lagoa.

Os dados básicos para o cálculo do fluxo entre a lagoa e o aquífero são: a espessura do leito (e_L), a condutividade hidráulica vertical do material do leito (K_L) e o nível da superfície livre da lagoa (h_L). Além disso, deve ser informada qual camada k do aquífero interage com a lagoa. Como o modelo FLUXSAT trata do problema de fluxo permanente, o nível da superfície livre da lagoa (h_L) é considerado constante.

Outro aspecto a destacar é o de que, por hipótese, o nível do lençol freático é no mínimo igual ao nível do fundo da lagoa. Esta hipótese implica em não existir nenhuma faixa de solo não saturado situada entre o fundo da lagoa e o lençol freático.

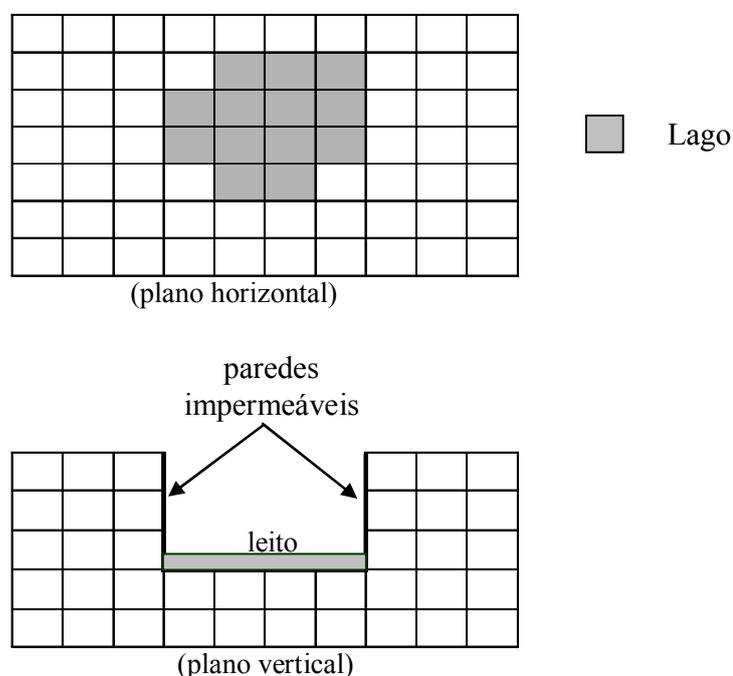


Figura 4.7 Representação esquemática da interação entre o aquífero e uma lagoa

No modelo FLUXSAT, a camada k do aquífero que interage com a lagoa é definida por uma matriz bidimensional ILAGO, que armazena um valor constante que define a referida camada para cada posição (i,j) da matriz ILAGO. Para uma célula situada em uma posição (i,j) fora da área da lagoa, a constante armazenada em ILAGO é igual a zero. Com este procedimento, pode-se representar a interação entre a lagoa e o aquífero em distintas camadas, procurando reproduzir de modo mais flexível a variação da profundidade da lagoa ao longo da sua área.

Matematicamente, a conexão hidráulica entre o aquífero e a lagoa é representada no modelo FLUXSAT através da Equação 4.25, apresentada a seguir:

$$QL_{i,j} = CL_{i,j}(h_L - h_{i,j,kl}) \quad (4.25)$$

onde: $QL_{i,j}$ = fluxo entre a lagoa e o aquífero na coluna vertical (i,j) [L^3T^{-1}];

$CL_{i,j}$ = condutância entre a lagoa e o aquífero na coluna vertical (i,j) [L^2T^{-1}];

h_L = nível de água da lagoa [L];

$h_{i,j,kl}$ = carga hidráulica da célula situada na posição (i,j,kl) [L].

Destaca-se que, na Equação 4.25, o índice kl representa a camada do aquífero que interage com a lagoa na coluna vertical (i,j) . Verifica-se que a Equação 4.25 permite representar as condições de fluxo descendente ($h_L > h_{i,j,kl}$) e ascendente ($h_L < h_{i,j,kl}$).

Para o cálculo da condutância entre a lagoa e o aquífero na coluna vertical (i,j) , considera-se o fluxo de água sobre dois meios distintos: o leito da lagoa, com espessura (e_L) e condutividade hidráulica (K_L), e o aquífero. A Figura 4.8 apresenta o esquema usado para o cálculo da condutância $CL_{i,j}$.

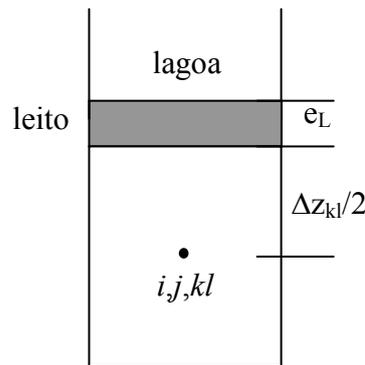


Figura 4.8 Esquema para o cálculo da condutância $CL_{i,j}$

Considerando-se a interação entre o aquífero e a lagoa em uma camada kl em uma posição (i,j) qualquer, representada esquematicamente pela Figura 4.8, a condutância equivalente $CL_{i,j}$ pode ser obtida utilizando o conceito de condutância em série, através da Equação 4.26 a seguir:

$$\frac{1}{CL_{i,j}} = \frac{1}{\left(\frac{K_L \Delta x_j \Delta y_i}{e_L} \right)} + \frac{1}{\left(\frac{K_{z_{i,j,kl}} \Delta x_j \Delta y_i}{\Delta z_{kl}/2} \right)} \quad (4.26)$$

Os denominadores das frações à direita da igualdade na Equação 4.26 representam, respectivamente, as condutâncias do leito da lagoa e da camada kl do aquífero. A distância $\Delta z_{kl}/2$ representa a distância entre a interface lagoa/aquífero e o centro da célula na coluna vertical (i,j) na camada kl . Com as devidas manipulações algébricas, a partir da Equação 4.26, obtém-se:

$$CL_{i,j} = 2\Delta x_j \Delta y_i \left(\frac{K_L \cdot Kz_{i,j,kl}}{2Kz_{i,j,kl} e_L + K_L \Delta z_{kl}} \right) \quad (4.27)$$

Do ponto de vista de representação matemática dos processos externos ao aquífero, a partir da Equação 4.23, a contribuição da lagoa para uma célula na posição (i,j) pelo uso da Equação 4.25 implica em $P_{i,j,k} = CL_{i,j}$ e $Q_{i,j,k} = -CL_{i,j} h_L$.

A adoção da hipótese de que o nível da superfície da lagoa (h_L) permanece constante simplifica bastante a rotina computacional para representação da conexão hidráulica entre a lagoa e o aquífero. Além disso, na hipótese de fluxo permanente, a mesma rotina usada para representar a conexão hidráulica entre uma lagoa e um aquífero pode ser utilizada para representar a conexão hidráulica entre um reservatório e um aquífero.

A concepção de modelos mais complexos de representação da conexão hidráulica entre uma lagoa e um aquífero, inclusive para condição de fluxo sob regime transiente, pode ser encontrada em, por exemplo, Cheng e Anderson (1993) e Merritt e Konikow (2000). Já Fenske, Leake e Prudic (1996) tratam da interação entre um reservatório e um aquífero, inclusive permitindo a representação de mudanças dos níveis do reservatório em um curto espaço de tempo.

4.1.5 Discussão do Sistema de Equações e Método de Solução

O problema de fluxo permanente em meio poroso saturado não homogêneo e anisotrópico pode ser representado matematicamente, como discutido anteriormente, pela Equação 4.4. Numericamente, conforme abordagem encontrada em McDonald e Harbaugh (1988) e implantada no modelo FLUXSAT, a solução do referido problema é genericamente representada pela Equação 4.7.

Considerando-se a discretização espacial utilizada para a representação de um aquífero hipotético, apresentada na Figura 4.1, o uso da Equação 4.7 implica na resolução de um

sistema de equações lineares, cujas incógnitas representam a carga hidráulica relativa a cada célula ativa da matriz usada para a representação discreta do aquífero em estudo.

Teoricamente, a dimensão do sistema é dada pelo produto $[nlin \times ncol \times ncam]$, onde $nlin$, $ncol$ e $ncam$ representam respectivamente os números de linhas, colunas e camadas adotadas para a representação do aquífero. De fato, o produto $[nlin \times ncol \times ncam]$ representa a máxima dimensão possível do sistema de equações, uma vez que a existência de células inativas e as condições de contorno reduzem o número de incógnitas e, por conseqüência, as dimensões do sistema.

Uma das características mais importantes do sistema de equações relacionado à solução de um problema de fluxo em meio poroso saturado é a de que a matriz dos coeficientes do sistema resulta em uma matriz esparsa. Portanto, é recomendável o uso de métodos de solução que permitam a economia de memória e de tempo de processamento, através de um tratamento computacional adequado que considere essa característica peculiar do sistema de equações.

Uma interessante discussão sobre tipos de métodos para solução de sistema de equações, voltados especificamente aos problemas relacionados ao fluxo em meio poroso, pode ser encontrada em Remson, Hornberger e Molz (1971).

O método utilizado no modelo FLUXSAT foi o método SIP (*Strongly Implicit Procedure*), apresentado por Stone (1968), e que constitui um dos métodos usados no trabalho de McDonald e Harbaugh (1988), discutido resumidamente a seguir. Descrição do referido método pode ser encontrada em Weinsten, Stone e Kwan (1969), Remson, Hornberger e Molz (1971), Huyakorn e Pinder (1983) e McDonald e Harbaugh (1988).

Como já mencionado, o uso da Equação 4.7 aplicada a cada célula ativa do esquema de discretização espacial utilizado para a representação do aquífero hipotético conduz a um sistema de equações lineares que pode ser representado matricialmente por:

$$[A] \{h\} = \{q\} \quad (4.28)$$

onde $[A]$, $\{h\}$ e $\{q\}$ representam respectivamente a matriz dos coeficientes do sistema, o vetor de incógnitas (cargas hidráulicas) e o vetor dos termos independentes. Destaca-se novamente que a matriz $[A]$ é uma matriz esparsa, ou seja, possui poucos elementos diferentes de zero.

De modo simples, o método SIP procura encontrar uma matriz $[B]$ tal que a matriz-soma $[A + B]$ possa ser facilmente fatorada em duas matrizes $[L]$ e $[U]$, onde $[A + B]$, $[L]$ e $[U]$ devem satisfazer as seguintes condições (McDonald e Harbaugh, 1988):

- $[A + B]$ é “próxima” de $[A]$;
- $[L]$ é uma matriz triangular inferior, enquanto $[U]$ é uma matriz triangular superior com os elementos da diagonal principal iguais à unidade;
- $[L]$ e $[U]$ são ambas esparsas;
- $[L]$ e $[U]$ apresentam apenas quatro diagonais não nulas.

Supondo-se a matriz $[B]$, obtida a partir destas condições, o sistema de equações, representado matricialmente pela Equação 4.28, pode ser escrito como:

$$[A + B] \{h\} = \{q\} + [B] \{h\} \quad (4.29)$$

A Equação 4.29 permite a adoção de um processo iterativo de solução, desde que seja expressa da seguinte forma:

$$[A + B] \{h^m\} = \{q\} + [B] \{h^{m-1}\} \quad (4.30)$$

onde os vetores $\{h^{m-1}\}$ e $\{h^m\}$ representam as soluções aproximadas do sistema de equações nas iterações $m-1$ e m , respectivamente. Para a redução dos erros de arredondamento, segundo Weinsten, Stone e Kwan (1969), é aconselhável a solução do sistema na sua forma residual que é obtida subtraindo-se $[A + B] \{h^{m-1}\}$ em ambos os lados da Equação 4.30, obtendo-se:

$$[A + B] \{h^m\} - [A + B] \{h^{m-1}\} = \{q\} - [A] \{h^{m-1}\} \quad (4.31)$$

Com as devidas simplificações, a Equação 4.31 pode ser apresentada como:

$$[A + B] \{h^m - h^{m-1}\} = \{q\} - [A] \{h^{m-1}\}$$

ou,

$$[A + B] \{\Delta h^m\} = \{q\} - [A] \{h^{m-1}\} \quad (4.32)$$

onde o vetor $\{\Delta h^m\}$ representa a variação dos valores da carga hidráulica da iteração $m-1$ para a iteração m . Portanto, a partir da solução do sistema de equações, representado matricialmente pela Equação 4.32, o vetor $\{h^m\}$ pode ser obtido através de:

$$\{h^m\} = \{h^{m-1}\} + \{\Delta h^m\}$$

Respeitadas as condições impostas para a obtenção da matriz B, o sistema de equações representado pela Equação 4.32 pode ser resolvido pelo processo de fatoração LU, onde a matriz dos coeficientes $[A + B]$ é substituída pelo produto de duas matrizes $[L]$, triangular inferior, e $[U]$, triangular superior. Desta forma, a Equação 4.32 passa a ser escrita como:

$$[L][U] \{\Delta h^m\} = \{q\} - [A] \{h^{m-1}\} \quad (4.33)$$

Definindo-se uma nova variável $\{q^*\} = [U] \{\Delta h^m\}$, o sistema de equações, representado matricialmente pela Equação 4.33, pode então ser desacoplado em dois sistemas de fácil solução, representados por:

$$[L] \{q^*\} = \{q\} - [A] \{h^{m-1}\} \quad (4.34)$$

$$[U] \{\Delta h^m\} = \{q^*\} \quad (4.35)$$

Os sistemas de equações, representados matricialmente pelas Equações 4.34 e 4.35, são resolvidos respectivamente por substituição-avante e retrossubstituição, uma vez que as matrizes $[L]$ e $[U]$ são matrizes triangulares inferior e superior, respectivamente, e já escalonadas.

No modelo FLUXSAT, do ponto de vista de algoritmo, a solução do sistema de equações, representado matricialmente pelas Equações 4.34 e 4.35, pode ser descrito resumidamente como:

Passo 1 – Adoção de uma aproximação inicial

$$\{h^0\} = \{h_0\}$$

Passo 2 – Cálculo das matrizes $[L]$ e $[U]$;

Passo 3 – Cálculo do vetor $\{q^*\}$

$$\text{Resolução do sistema: } [L] \{q^*\} = \{q\} - [A] \{h^{m-1}\} \text{ (substituição-avante)}$$

Passo 4 – Cálculo do vetor $\{\Delta h^m\}$

$$\text{Resolução do sistema: } [U] \{\Delta h^m\} = \{q^*\} \text{ (retrossubstituição)}$$

Passo 5 – Atualização do vetor $\{h^m\}$

$$\{h^m\} = \{h^{m-1}\} + \{\Delta h^m\}$$

Passo 6 – Realização do teste de parada

Se $\{\Delta h^m\} >$ precisão adotada *então*

voltar ao *Passo 2*

senão

Fim

No procedimento descrito aqui resumidamente, não existe a necessidade da obtenção da matriz $[B]$ e, portanto, nem da matriz $[A + B]$, já que a solução é definida a partir da obtenção das matrizes $[L]$ e $[U]$ que podem ser determinadas diretamente da matriz $[A]$. O procedimento para a obtenção das matrizes $[L]$ e $[U]$ não é aqui discutido, mas seguiu o apresentado em McDonald e Harbaugh (1988). Detalhes quanto ao método SIP, como discussão sobre convergência do método, parâmetros de iteração e parâmetro de relaxação/aceleração de convergência podem ser encontrados em Weinsten, Stone e Kwan (1969), Remson, Hornberger e Molz (1971), Huyakorn e Pinder (1983) e McDonald e Harbaugh (1988).

4.2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO TRANSPORTE EM MEIO SATURADO

O problema de transporte de contaminantes também constitui um tema bastante explorado, podendo-se citar, como referências, Fetter (1999) e Charbeneau (2000). Marsily (1986) também constitui uma importante referência no tocante tanto ao problema de fluxo quanto ao problema de transporte em meio poroso saturado. Em termos de modelagem numérica do problema de transporte de contaminantes em meio poroso são referências clássicas os trabalhos de Remson, Hornberger e Molz (1971), Huyakorn e Pinder (1983), Bear e Verruijt (1987) e, mais recentemente, Zheng e Bennett (2002).

Javandel *et al.* (1984) trazem uma compilação de modelos matemáticos aplicados ao problema de transporte de contaminantes em meio poroso saturado. Aspectos práticos sobre a modelagem matemática do fluxo e transporte em meio saturado são discutidos em Spitz e Moreno (1996), onde se apresenta também um sumário dos modelos computacionais de fluxo e transporte mais difundidos.

A equação diferencial parcial que descreve o transporte de solutos em meio poroso saturado, como apresentada em Javandel *et al.* (1984), e seguindo notação usada em Zheng (1990), é definida por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} (C v_i) + \frac{q_e}{\phi_e} C_e + \sum_{k=1}^N R_k \quad (4.36)$$

onde: C = concentração do contaminante dissolvido na água subterrânea [ML^{-3}];

x_i = distância ao longo do respectivo eixo coordenado x_i [L];

D_{ij} = coeficiente de dispersão hidrodinâmica [L^2T^{-1}];

v_i = velocidade média na escala do poro na direção do eixo coordenado x_i [LT^{-1}];

q_e = fluxo volumétrico de fonte/sumidouro externos por unidade de volume do aquífero [T^{-1}];

C_e = concentração de contaminante dissolvido em fonte/sumidouro externos [ML^{-3}];

ϕ_e = porosidade efetiva [adimensional];

$\sum_{k=1}^N R_k$ = termo representando as reações químicas [ML^3T^{-1}].

Analisando-se cada um dos termos da Equação 4.36, tem-se que o termo à esquerda da igualdade representa a variação da concentração de um determinado contaminante em relação ao tempo t . Já as duas primeiras parcelas da soma que define o lado direito da igualdade representam respectivamente as contribuições dos processos de dispersão e advecção para a variação da concentração do contaminante ao longo do tempo. A terceira parcela da soma caracteriza a contribuição dos processos externos ao aquífero e, finalmente, a última parcela da soma à direita da igualdade representa as reações químicas no interior do aquífero.

Como já destacado no Capítulo 03, o transporte de contaminantes no solo constitui um problema de transporte em um sistema multi-fásico. A abordagem mais simples e usual para o estabelecimento das relações entre as concentrações nas diferentes fases, segundo Charbeneau (2000), é assumir que a taxa de transporte de massa através do solo dentro de uma fase é lenta, quando comparada à taxa de transferência entre fases que estão localmente em contato. Esta hipótese é chamada de hipótese de equilíbrio local, conforme também já mencionado no Capítulo 03.

Sob a hipótese de equilíbrio local e assumindo-se apenas taxas de reações químicas de primeira ordem irreversíveis, o termo representando as reações químicas na Equação 4.36 pode ser expresso como (Grove e Stollenwerk, 1984):

$$\sum_{k=1}^N R_k = -\frac{\rho_b}{\phi_e} \frac{\partial C_s}{\partial t} - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{\phi_e} C_s \right) \quad (4.37)$$

onde: ρ_b = densidade aparente do solo [ML^{-3}];

λ = taxa constante de reação para reações químicas de primeira ordem [T^{-1}];

C_s = concentração mássica na fase sólida [MM^{-1}]; e demais variáveis já definidas.

Na Equação 4.37, o primeiro termo do lado direito da igualdade representa o processo de sorção (linear ou não-linear). Já o segundo termo representa a variação da concentração em função das reações químicas de degradação. Na hipótese de substâncias conservativas, a Equação 4.37 se reduz a:

$$\sum_{k=1}^N R_k = -\frac{\rho_b}{\phi_e} \frac{\partial C_s}{\partial t} \quad (4.38)$$

A partir da Equação 4.38, a Equação 4.36 pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} (Cv_i) + \frac{q_e}{\phi_e} C_e - \frac{\rho_b}{\phi_e} \frac{\partial C_s}{\partial t} \quad (4.39)$$

Considerando-se o uso da regra da cadeia para a derivação, a Equação 4.39 pode ser apresentada como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} (Cv_i) + \frac{q_e}{\phi_e} C_e - \frac{\rho_b}{\phi_e} \frac{\partial C_s}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t}$$

ou,

$$\left(1 + \frac{\rho_b}{\phi_e} \frac{\partial C_s}{\partial C} \right) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} (Cv_i) + \frac{q_e}{\phi_e} C_e \quad (4.40)$$

Pode-se definir um coeficiente de retardo (R) devido ao processo de sorção como em Zheng (1990):

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\phi_e} \frac{\partial C_s}{\partial C} \quad (4.41)$$

A partir das Equações 4.40 e 4.41, tem-se:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} (C v_i) + \frac{q_e}{\phi_e} C_e \quad (4.42)$$

As Equações 4.39 e 4.40 apresentam explicitamente a concentração mássica na fase sólida (C_s). Já na Equação 4.42, C_s aparece implicitamente na definição de R , conforme expresso na Equação 4.41.

A discussão da representação da relação entre C e C_s pode ser encontrada em vários textos relativos ao transporte de contaminantes em meio poroso, como por exemplo, Nielsen *et al.* (1986), Marsily (1986), Spitz e Moreno (1996) e Charbeneau (2000). Sob a hipótese de equilíbrio local e considerando-se uma relação linear entre C e C_s , tem-se:

$$\frac{\partial C_s}{\partial C} = K_d \quad (4.43)$$

onde K_d representa o coeficiente de distribuição, já introduzido no Capítulo 03. Portanto, o coeficiente de retardo (R), a partir da Equação 4.41, passa a ser definido como:

$$R = 1 + \frac{\rho_b K_d}{\phi_e} \quad (4.44)$$

Conforme já destacado no capítulo anterior, discussões a respeito de K_d e do processo de partição de um contaminante entre as fases sólida e aquosa também podem ser encontradas em vários textos relativos ao transporte de contaminantes em meio poroso, como por exemplo, Marsily (1986), Spitz e Moreno (1996) e Charbeneau (2000).

A Equação 4.42, considerando-se o coeficiente de retardo (R) definido a partir da Equação 4.44, é utilizada para representar o transporte de um contaminante dissolvido em um meio poroso saturado sujeito aos processos de dispersão, advecção e sorção. Zheng (1990) traz outras definições para R , considerando relações não lineares entre C e C_s .

4.2.1 Condições Inicial e de Contorno para o Problema de Transporte em Meio Saturado

As condições iniciais necessárias para a solução do problema de transporte em meio poroso saturado, considerando-se a Equação 4.42, são os valores de concentração do contaminante na fase aquosa para t igual a zero, ou seja, $C(z, t) = C(z, 0)$.

Javandel *et al.* (1984) classificam as condições de contorno para o problema de transporte em meio poroso saturado em três grandes grupos, a saber:

Tipo I – Valores de concentração conhecidos ao longo do contorno: Neste tipo de condição, chamada de condição de Dirichlet, a concentração no contorno é conhecida ao longo do tempo, ou seja, a função $C = f(x, y, z, t)$ é conhecida;

Tipo II – Valores do gradiente de concentração normal ao contorno conhecidos: Neste tipo de condição, chamada de condição de Neumann, o gradiente de concentração normal ao contorno é conhecido. Neste caso, tem-se que:

$$\left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] n_i = g(x, y, z, t)$$

onde g é uma função conhecida e n_i representa o cosseno diretor na direção i ;

Tipo III – Valores da concentração e do gradiente de concentração conhecidos ao longo do contorno: Para este tipo de condição, chamada de condição de Cauchy, a concentração e o gradiente de concentração normal ao contorno são conhecidos ao longo do contorno. Neste caso, tem-se que:

$$\left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - v_i C \right] n_i = g(x, y, z, t)$$

onde g é uma função conhecida. O primeiro termo no lado esquerdo da igualdade representa o transporte do contaminante devido à dispersão, enquanto o segundo termo representa o transporte devido à advecção.

Já Marsily (1986), como mencionado anteriormente no item 3.2.1, discute genericamente as condições de contorno para problemas de transporte em meio poroso (saturado e não saturado), destacando que as condições de contorno devem ser estabelecidas levando-se em consideração as condições de fluxo junto ao contorno. O referido autor define quatro tipos de condição de contorno para o problema de transporte em meio poroso, a saber:

- contorno com fluxo entrando no sistema;
- contorno com fluxo saindo do sistema;
- contorno com fluxo saindo do sistema, considerando ainda a dispersão;
- contorno sem fluxo.

Bear e Verruijt (1987) apresentam discussão um pouco mais detalhada sobre as condições de contorno para problemas de transporte em meio poroso (saturado e não saturado). Os referidos autores partem de uma chamada condição de contorno “genérica” e particularizam esta condição de acordo com diferentes casos, como:

- contorno com concentração conhecida (condição de Dirichlet);
- contorno com fluxo conhecido (condição de Cauchy);
- contorno impermeável (condição de Neumann). Constitui um caso especial da condição de contorno com fluxo conhecido;
- contorno entre dois meios porosos distintos;
- contorno com zona de mistura homogênea;
- contorno com saída para a atmosfera.

4.2.2 Solução Numérica do Problema de Transporte em Meio Saturado

Este item apresenta o esquema numérico adotado para o desenvolvimento do modelo TRANSPSAT que trata do transporte de contaminante na fase dissolvida em meio poroso saturado sob regime de fluxo permanente. O referido modelo computacional adota o método das características modificado (MMOC) para a solução da equação de transporte em meio poroso saturado.

Uma breve descrição das categorias de métodos numéricos para a solução da equação de advecção-dispersão-reação, Equação 4.36, pode ser encontrada em Neuman (1984). O referido autor classifica estes métodos em Eulerianos, Lagrangeanos ou mistos Eulerianos-

Lagrangeanos, procurando destacar as principais características e vantagens de cada tipo de método, descritas resumidamente a seguir.

Nos métodos eulerianos, a equação que rege o problema de transporte em meio poroso é resolvida numericamente considerando uma grade espacial fixa. Esta categoria de métodos apresenta a simplicidade do uso de uma grade fixa como vantagem, contudo são inadequados para tratar de problemas envolvendo frentes abruptas de contaminação.

Os métodos lagrangeanos utilizam ou uma grade espacial que se deforma ao longo do tempo ou uma grade espacial fixa, mas cujo sistema de coordenadas varia ao longo do tempo. Estes métodos são capazes de representar frentes abruptas de contaminação, porém apresentam dificuldades para resolver problemas envolvendo meio heterogêneo com múltiplas fontes e condições de contorno complexas.

Os métodos mistos eulerianos-lagrangeanos, segundo Neuman (1984), tentam eliminar as desvantagens dos métodos eulerianos e dos métodos lagrangeanos, procurando combinar a simplicidade de uma grade espacial fixa no tempo com o poder computacional da abordagem lagrangeana.

Zheng e Wang (1999) apresentam uma revisão dos diferentes esquemas numéricos que podem ser utilizados para a solução de problemas de transporte em meio poroso saturado. São mencionados pelos referidos autores, os seguintes métodos: Método de diferenças finitas explícito; Método de diferenças finitas implícito; Método de “decréscimo da variação total” (*total variation diminishing* - TVD) de terceira ordem; Método das características (MOC); Método das características modificado (MMOC); e Método das características híbrido (HMOC).

Os métodos de diferenças finitas explícito e implícito e o método TVD de terceira ordem podem ser classificados como métodos eulerianos, uma vez que usam o conceito de diferenças finitas sobre uma grade fixa no espaço. Já os métodos MOC, MMOC e HMOC são classificados como métodos eulerianos-lagrangeanos de solução, uma vez que utilizam técnicas de rastreamento de partículas (*particle tracking*) para a representação do termo de advecção e diferenças finitas sobre uma grade fixa para a representação dos demais termos da equação de transporte em meio saturado.

Zheng e Bennett (2002) constituem uma importante referência na área de modelagem matemática do transporte de contaminantes em meio poroso saturado, onde são apresentadas algumas das técnicas mais utilizadas na solução do problema de transporte, discutindo suas vantagens e limitações relativas.

O desenvolvimento do modelo TRANSPSAT foi baseado principalmente no trabalho de Zheng (1990) que descreve um modelo computacional de transporte tridimensional para a

simulação dos processos de dispersão, advecção e reações químicas de contaminantes dissolvidos em meio poroso saturado sob regime transiente. O referido trabalho representa a base do modelo computacional MT3D, um dos mais populares modelos computacionais de transporte em meio poroso saturado.

É importante destacar que o modelo TRANSPSAT foi desenvolvido visando principalmente o estudo de caso que é objeto de análise da presente tese. Portanto, apesar de baseado no trabalho de Zheng (1990), todo o código do referido modelo foi desenvolvido especificamente para este estudo e apresenta algumas simplificações e características próprias, tais como: fluxo em regime permanente; condição de recarga permanente no topo do aquífero; e representação de conexão hidráulica entre o aquífero e uma lagoa. Além disso, adotou-se o método das características modificado (MMOC) para a solução numérica do problema de transporte, principalmente pela sua relativa simplicidade de implementação computacional.

O método das características modificado (MMOC), assim como o método das características (MOC) e o método das características híbrido (HMOC), constitui, como já mencionado anteriormente, uma solução Euleriana-Lagrangeana para o problema de transporte em meio poroso saturado. Neste tipo de solução, o termo de advecção é resolvido separadamente usando uma abordagem lagrangeana. São referências para o MOC, os trabalhos de Konikow e Bredehoeft (1978), Konikow, Goode e Hornberger (1996) e Kipp, Konikow e Hornberger (1998). Já para o MMOC podem ser citados os trabalhos de Russel e Wheeler (1983) e Cheng (1984). Finalmente, como referências para o HMOC, são citados os trabalhos de Neumann (1984) e Zheng (1990).

O modelo TRANSPSAT procura resolver a Equação 4.42, utilizada para representar o transporte de um contaminante dissolvido em um meio poroso saturado não homogêneo e anisotrópico, sujeito aos processos de dispersão, advecção e sorção. A solução da referida equação é representada por uma função do tipo $C = f(x,y,z,t)$ e, em geral, é obtida numericamente.

Para apresentar uma breve descrição do método MMOC, a Equação 4.42 é apresentada na forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x_i} (Cv_i) + \frac{q_e}{R\phi_e} C_e \quad (4.45)$$

O termo $\frac{\partial}{\partial x_i} (Cv_i)$, presente na Equação 4.45, pode ser reescrito, considerando-se a regra da cadeia para a derivação, como se segue:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(Cv_i) = v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} + C \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (4.46)$$

Substituindo-se a Equação 4.46 na Equação 4.45, tem-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{v_i}{R} \frac{\partial C}{\partial x_i} - \frac{C}{R} \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + \frac{q_e}{R\phi_e} C_e \quad (4.47)$$

A partir da definição de $v_i^* = v_i/R$, que representa a velocidade real do contaminante na direção x_i devido à influência da sorção, a Equação 4.47 pode ser expressa como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - v_i^* \frac{\partial C}{\partial x_i} - C \frac{\partial v_i^*}{\partial x_i} + \frac{q_e}{R\phi_e} C_e \quad (4.48)$$

O termo $C \frac{\partial v_i^*}{\partial x_i}$, presente na Equação 4.48, pode ser entendido como a taxa de variação da massa do contaminante em razão apenas da variação do armazenamento, ou seja, a diferença entre o fluxo que entra e o fluxo que sai de um determinado volume de controle provoca uma variação da massa dentro do mesmo. Zheng e Wang (1999) destacam que o referido termo funciona com uma espécie de fonte/sumidouro interno. Deste modo, a Equação 4.48 pode ser escrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - v_i^* \frac{\partial C}{\partial x_i} - \frac{q_e}{R\phi_e} (C - C_e) \quad (4.49)$$

A Equação 4.49 pode ser obtida a partir de Zheng (1990), sob a hipótese do contaminante ser uma substância conservativa, ou seja, assumindo-se taxa de reação de primeira ordem (λ) igual a zero. Ainda segundo Zheng (1990), a Equação 4.49 é uma representação euleriana do equacionamento do problema de transporte em meio poroso saturado, onde o termo $\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)$ representa a taxa de variação no tempo da concentração do contaminante em um ponto fixo do espaço. A referida equação também pode ser representada como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_i^* \frac{\partial C}{\partial x_i} = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{q_e}{R\phi_e} (C - C_e) \quad (4.50)$$

Pode-se agora definir a derivada material $\left(\frac{DC}{Dt}\right)$ como:

$$\frac{DC}{DT} = \frac{\partial C}{\partial t} + v_i^* \frac{\partial C}{\partial x_i} \quad (4.51)$$

A partir da definição de $\left(\frac{DC}{Dt}\right)$, como expressa na Equação 4.51, a Equação 4.50 pode ser escrita como:

$$\frac{DC}{Dt} = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{q_e}{R\phi_e} (C - C_e) \quad (4.52)$$

A Equação 4.52 é uma representação lagrangeana do equacionamento do problema de transporte em meio poroso saturado. Segundo Zheng (1990), o termo $\left(\frac{DC}{Dt}\right)$ representa a taxa de variação no tempo da concentração do contaminante ao longo da trajetória de uma partícula contaminada. A referida equação pode então ser aproximada por um esquema de diferenças finitas, como apresentado a seguir:

$$\frac{C_m^{t+1} - C_m^{t^*}}{\Delta t} = \left[\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{q_e}{R\phi_e} (C - C_e) \right]_m^{t^*} \quad \text{ou} \quad (4.53)$$

$$C_m^{t+1} = C_m^{t^*} + \Delta t \left[\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{q_e}{R\phi_e} (C - C_e) \right]_m^{t^*} \quad (4.54)$$

onde: C_m^{t+1} = valor de concentração média para uma célula m no instante de tempo $t+1$;

$C_m^{t^*}$ = valor de concentração média para uma célula m no instante de tempo t^* , que representa um instante de tempo intermediário entre t e $t+1$;

Δt = discretização temporal.

Conforme o modo como o lado direito da igualdade na Equação 4.53 é avaliado, o esquema de diferenças finitas será explícito ou implícito. Para t_e igual a t , o esquema é dito explícito, enquanto que para t_e igual a $t+I$, o esquema é dito implícito.

A Equação 4.54, como destacado em Zheng (1990) e Zheng e Wang (1999), constitui o algoritmo básico para o método misto Euleriano-Lagrangeano usado no modelo computacional MT3D. A referida equação apresenta uma soma de duas parcelas no lado direito da igualdade. A primeira parcela, representada pelo termo C_m^* , leva em consideração o efeito da advecção, sendo estimada por um método lagrangeano com um sistema de coordenadas móvel. Já a segunda parcela leva em consideração os processos de dispersão, fontes/sumidouros externos e sorção, sendo estimada por um método euleriano, através de um esquema de diferenças finitas sobre uma grade espacial fixa.

4.2.2.1 Tratamento matemático do processo de advecção

O primeiro passo do método MMOC é mover uma partícula localizada em um ponto nodal de modo retrógrado no tempo usando técnicas de rastreamento de partículas (*particle tracking*). O objetivo de tal procedimento é encontrar a posição onde a partícula estaria no início do intervalo Δt de tal modo a atingir o ponto nodal no fim do intervalo Δt . A concentração associada àquela posição, representada por $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$, é a concentração da célula devida apenas ao processo de advecção (Zheng, 1990). A concentração na posição $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ é obtida por uma interpolação polinomial de primeira ordem dada por (Zheng, 1990):

$$\begin{aligned}
 C(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = & (1-w_x)(1-w_y)(1-w_z)C_{i-1,j-1,k-1} + (1-w_x)w_y(1-w_z)C_{i,j-1,k-1} \\
 & + w_x(1-w_y)(1-w_z)C_{i-1,j,k-1} + w_xw_y(1-w_z)C_{i,j,k-1} \\
 & + (1-w_x)(1-w_y)w_zC_{i-1,j-1,k} + (1-w_x)w_yw_zC_{i,j-1,k} \\
 & + w_x(1-w_y)w_zC_{i-1,j,k} + w_xw_yw_zC_{i,j,k}
 \end{aligned} \tag{4.55}$$

A Equação 4.55 assume, por hipótese, que \hat{x} está localizado entre x_{j-1} e x_j , que \hat{y} está localizado entre y_{i-1} e y_i e que \hat{z} está localizado entre z_{k-1} e z_k . Os pesos w_x , w_y e w_z , presentes na Equação 4.55, são obtidos pelas equações a seguir (Zheng, 1990):

$$w_x = \frac{\hat{x} - x_{j-1}}{0,5\Delta x_j + 0,5\Delta x_{j-1}} \quad w_y = \frac{\hat{y} - y_{i-1}}{0,5\Delta y_i + 0,5\Delta y_{i-1}} \quad w_z = \frac{\hat{z} - z_{k-1}}{0,5\Delta z_k + 0,5\Delta z_{k-1}} \tag{4.56}$$

Na hipótese de fluxo permanente, o campo de velocidades é também constante no tempo. Deste modo, a posição $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ de uma partícula é determinada uma única vez. O modelo TRANSPSAT procura garantir que a posição $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ de uma partícula relativa ao ponto nodal (i,j,k) esteja sempre no interior da célula (i,j,k) . Numericamente, isto equivale a estabelecer que a posição $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ deve respeitar as seguintes condições:

$$|\hat{x} - x_j| < \frac{\Delta x_j}{2}; \quad |\hat{y} - y_i| < \frac{\Delta y_i}{2} \quad \text{e} \quad |\hat{z} - z_k| < \frac{\Delta z_k}{2}$$

O respeito às restrições impostas à posição $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ é obtida através da mudança da discretização temporal (Δt) . No modelo TRANSPSAT, quando as referidas restrições não são obedecidas, o valor de Δt é dividido pela metade e uma nova posição $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ é estabelecida. Este procedimento é repetido até que as restrições sejam obedecidas.

4.2.2.2 Tratamento matemático do processo de dispersão

O termo que representa o processo de dispersão e a sua expansão considerando um sistema de coordenadas cartesiano em um espaço tridimensional é apresentado a seguir (Zheng e Wang, 1999):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (4.57)$$

Uma aproximação numérica por diferenças finitas para a Equação 4.57 pode ser encontrada em Zheng (1990) e Zheng e Wang (1999), sendo apresentada a seguir:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) = D_{xx_{i,j+1/2,k}} \frac{C_{i,j+1,k}^t - C_{i,j,k}^t}{\Delta x_j (0,5\Delta x_j + 0,5\Delta x_{j+1})} - D_{xx_{i,j-1/2,k}} \frac{C_{i,j,k}^t - C_{i,j-1,k}^t}{\Delta x_j (0,5\Delta x_{j-1} + 0,5\Delta x_j)} \\
& + D_{xy_{i,j+1/2,k}} \frac{w_{x_{j+1/2}} C_{i+1,j,k}^t + (1-w_{x_{j+1/2}}) C_{i+1,j+1,k}^t - w_{x_{j+1/2}} C_{i-1,j,k}^t - (1-w_{x_{j+1/2}}) C_{i-1,j+1,k}^t}{\Delta x_j (0,5\Delta y_{i-1} + \Delta y_i + 0,5\Delta y_{i+1})} \\
& - D_{xy_{i,j-1/2,k}} \frac{w_{x_{j-1/2}} C_{i+1,j-1,k}^t + (1-w_{x_{j-1/2}}) C_{i+1,j,k}^t - w_{x_{j-1/2}} C_{i-1,j-1,k}^t - (1-w_{x_{j-1/2}}) C_{i-1,j,k}^t}{\Delta x_j (0,5\Delta y_{i-1} + \Delta y_i + 0,5\Delta y_{i+1})} \\
& + D_{xz_{i,j+1/2,k}} \frac{w_{x_{j+1/2}} C_{i,j,k+1}^t + (1-w_{x_{j+1/2}}) C_{i,j+1,k+1}^t - w_{x_{j+1/2}} C_{i,j,k-1}^t - (1-w_{x_{j+1/2}}) C_{i,j+1,k-1}^t}{\Delta x_j (0,5\Delta z_{k-1} + \Delta z_k + 0,5\Delta z_{k+1})} \\
& - D_{xz_{i,j-1/2,k}} \frac{w_{x_{j-1/2}} C_{i,j-1,k+1}^t + (1-w_{x_{j-1/2}}) C_{i,j,k+1}^t - w_{x_{j-1/2}} C_{i,j-1,k-1}^t - (1-w_{x_{j-1/2}}) C_{i,j,k-1}^t}{\Delta x_j (0,5\Delta z_{k-1} + \Delta z_k + 0,5\Delta z_{k+1})} \\
& + D_{yx_{i+1/2,j,k}} \frac{w_{y_{i+1/2}} C_{i,j+1,k}^t + (1-w_{y_{i+1/2}}) C_{i+1,j+1,k}^t - w_{y_{i+1/2}} C_{i,j-1,k}^t - (1-w_{y_{i+1/2}}) C_{i+1,j-1,k}^t}{\Delta x_j (0,5\Delta y_{i-1} + \Delta y_i + 0,5\Delta y_{i+1})} \\
& - D_{yx_{i-1/2,j,k}} \frac{w_{y_{i-1/2}} C_{i-1,j+1,k}^t + (1-w_{y_{i-1/2}}) C_{i,j+1,k}^t - w_{y_{i-1/2}} C_{i-1,j-1,k}^t - (1-w_{y_{i-1/2}}) C_{i,j-1,k}^t}{\Delta y_i (0,5\Delta x_{j-1} + \Delta x_j + 0,5\Delta x_{j+1})} \\
& + D_{yy_{i+1/2,j,k}} \frac{C_{i+1,j,k}^t - C_{i,j,k}^t}{\Delta y_i (0,5\Delta y_i + 0,5\Delta y_{i+1})} - D_{yy_{i-1/2,j,k}} \frac{C_{i,j,k}^t - C_{i-1,j,k}^t}{\Delta y_i (0,5\Delta y_{i-1} + 0,5\Delta y_i)} \\
& + D_{yz_{i+1/2,j,k}} \frac{w_{y_{i+1/2}} C_{i,j,k+1}^t + (1-w_{y_{i+1/2}}) C_{i+1,j,k+1}^t - w_{y_{i+1/2}} C_{i,j,k-1}^t - (1-w_{y_{i+1/2}}) C_{i+1,j,k-1}^t}{\Delta y_i (0,5\Delta z_{k-1} + \Delta z_k + 0,5\Delta z_{k+1})} \\
& - D_{yz_{i-1/2,j,k}} \frac{w_{y_{i-1/2}} C_{i-1,j,k+1}^t + (1-w_{y_{i-1/2}}) C_{i,j,k+1}^t - w_{y_{i-1/2}} C_{i-1,j,k-1}^t - (1-w_{y_{i-1/2}}) C_{i,j,k-1}^t}{\Delta y_i (0,5\Delta z_{k-1} + \Delta z_k + 0,5\Delta z_{k+1})} \\
& + D_{zx_{i,j,k+1/2}} \frac{w_{z_{k+1/2}} C_{i,j+1,k}^t + (1-w_{z_{k+1/2}}) C_{i+1,j+1,k}^t - w_{z_{k+1/2}} C_{i,j-1,k}^t - (1-w_{z_{k+1/2}}) C_{i+1,j-1,k}^t}{\Delta z_k (0,5\Delta x_{j-1} + \Delta x_j + 0,5\Delta x_{j+1})} \\
& - D_{zx_{i,j,k-1/2}} \frac{w_{z_{k-1/2}} C_{i,j+1,k-1}^t + (1-w_{z_{k-1/2}}) C_{i+1,j+1,k}^t - w_{z_{k-1/2}} C_{i,j-1,k-1}^t - (1-w_{z_{k-1/2}}) C_{i,j-1,k}^t}{\Delta z_k (0,5\Delta x_{j-1} + \Delta x_j + 0,5\Delta x_{j+1})} \\
& + D_{zy_{i,j,k+1/2}} \frac{w_{z_{k+1/2}} C_{i+1,j,k}^t + (1-w_{z_{k+1/2}}) C_{i+1,j,k+1}^t - w_{z_{k+1/2}} C_{i-1,j,k}^t - (1-w_{z_{k+1/2}}) C_{i-1,j,k+1}^t}{\Delta z_k (0,5\Delta y_{i-1} + \Delta y_i + 0,5\Delta y_{i+1})} \\
& - D_{zy_{i,j,k-1/2}} \frac{w_{z_{k-1/2}} C_{i+1,j,k-1}^t + (1-w_{z_{k-1/2}}) C_{i+1,j,k}^t - w_{z_{k-1/2}} C_{i-1,j,k-1}^t - (1-w_{z_{k-1/2}}) C_{i-1,j,k}^t}{\Delta z_k (0,5\Delta y_{i-1} + \Delta y_i + 0,5\Delta y_{i+1})} \\
& + D_{zz_{i,j,k+1/2}} \frac{C_{i,j,k+1}^t - C_{i,j,k}^t}{\Delta z_k (0,5\Delta z_k + 0,5\Delta z_{k+1})} - D_{zz_{i,j,k-1/2}} \frac{C_{i,j,k}^t - C_{i,j,k-1}^t}{\Delta z_k (0,5\Delta z_{k-1} + 0,5\Delta z_k)}
\end{aligned} \tag{4.58}$$

A Equação 4.58 representa uma aproximação da Equação 4.57, usando um esquema de diferenças finitas central totalmente explícito. Os pesos w_x , w_y e w_z são definidos conforme as Equações 4.56 apresentadas anteriormente.

Bear e Verruijt (1987) apresentam discussão sobre a natureza física e a representação matemática dos coeficientes de dispersão hidrodinâmica (D_{ij}), presentes na Equação 4.57. Considerando-se um sistema de coordenadas cartesiano e meio poroso isotrópico, os coeficientes de dispersão hidrodinâmica (D_{ij}) podem ser obtidos através de (Bear e Verruijt, 1987):

$$\begin{aligned}
 D_{xx} &= \alpha_L \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_z^2}{|v|} + D_m \\
 D_{yy} &= \alpha_L \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_z^2}{|v|} + D_m \\
 D_{zz} &= \alpha_L \frac{v_z^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_y^2}{|v|} + D_m \\
 D_{xy} &= D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_y}{|v|} \\
 D_{xz} &= D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_z}{|v|} \\
 D_{yz} &= D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_y v_z}{|v|}
 \end{aligned} \tag{4.59}$$

onde α_L e α_T representam coeficientes de dispersividade longitudinal e transversal, apresentando dimensão de comprimento [L]. Zheng (1990) destaca que é prática corrente na modelagem de transporte em meio poroso assumir que as Equações 4.59 são também aplicáveis para meios porosos anisotrópicos.

A estimativa dos coeficientes de dispersão hidrodinâmica (D_{ij}), presentes na Equação 4.57, requer a definição de esquemas de interpolação para os valores de velocidades médias na escala do poro na direção i (v_i), da porosidade (ϕ) e dos coeficientes de dispersividade longitudinal (α_L) e transversal (α_T).

Zheng (1990) e Zheng e Wang (1999) apresentam esquemas de interpolação para a estimativa de v_x , v_y , v_z , ϕ , α_L e α_T nas interfaces das células. Como exemplo, a Figura 4.9 ilustra o esquema de interpolação, apresentado em Zheng (1990) e Zheng e Wang (1999), para a obtenção dos valores de v_x e v_y na interface entre as células (i,j,k) e $(i,j+1,k)$ para o cálculo de D_{xx} , D_{xy} e D_{xz} .

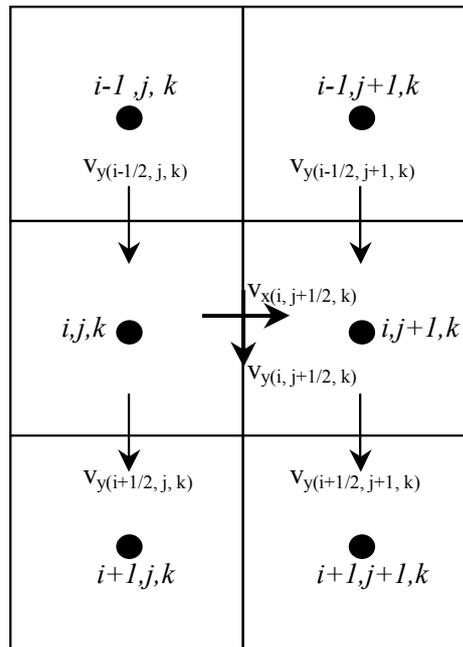


Figura 4.9 Avaliação dos componentes da velocidade na interface das células (i, j, k) e $(i, j+1, k)$ no cálculo dos coeficientes de dispersão D_{xx} , D_{xy} e D_{xz} (adaptado de Zheng, 1990)

Os valores de v_x , v_y , v_z , v , ϕ , α_L e α_T , usados para o cálculo dos coeficientes de dispersão D_{xx} , D_{xy} e D_{xz} , são estimados pelas Equações a 4.60 a 4.62 a seguir:

$$\begin{aligned}
 v_{x_{i,j+1/2,k}} &= \frac{q_{x_{i,j+1/2,k}}}{\phi_{i,j+1/2,k}} \\
 v_{y_{i,j+1/2,k}} &= \frac{0,5}{\phi_{i,j+1/2,k}} \left[(q_{y_{i-1/2,j,k}} + q_{y_{i+1/2,j,k}}) w_{x_{j+1/2}} + (q_{y_{i-1/2,j+1,k}} + q_{y_{i+1/2,j+1,k}}) (1 - w_{x_{j+1/2}}) \right] \\
 v_{z_{i,j+1/2,k}} &= \frac{0,5}{\phi_{i,j+1/2,k}} \left[(q_{z_{i,j,k-1/2}} + q_{z_{i,j,k+1/2}}) w_{x_{j+1/2}} + (q_{z_{i,j+1,k-1/2}} + q_{z_{i,j+1,k+1/2}}) (1 - w_{x_{j+1/2}}) \right] \\
 v_{i,j+1/2,k} &= \sqrt{v_{x_{i,j+1/2,k}}^2 + v_{y_{i,j+1/2,k}}^2 + v_{z_{i,j+1/2,k}}^2}
 \end{aligned} \quad (4.60)$$

$$\phi_{i,j+1/2,k} = \phi_{i,j,k} w_{x_{j+1/2}} + \phi_{i,j+1,k} (1 - w_{x_{j+1/2}}) \quad (4.61)$$

$$\begin{aligned}
 \alpha_{L_{i,j+1/2,k}} &= \alpha_{L_{i,j,k}} w_{x_{j+1/2}} + \alpha_{L_{i,j+1,k}} (1 - w_{x_{j+1/2}}) \\
 \alpha_{T_{i,j+1/2,k}} &= \alpha_{T_{i,j,k}} w_{x_{j+1/2}} + \alpha_{T_{i,j+1,k}} (1 - w_{x_{j+1/2}})
 \end{aligned} \quad (4.62)$$

Os valores de velocidade de Darcy (q), presentes nas Equações 4.60, são obtidos diretamente do modelo FLUXSAT, que trata do problema de fluxo no meio poroso saturado, discutido no item 4.1.

A partir da definição das Equações 4.60 e 4.62 e considerando-se a Equação 4.59, os valores de D_{xx} , D_{xy} e D_{xz} , avaliados na interface entre as células (i,j,k) e $(i,j+1,k)$ ao longo da direção x , podem ser estimados a partir de (Zheng, 1990 e Zheng e Wang, 1999):

$$\begin{aligned}
 D_{xx_{i,j+1/2,k}} &= \alpha_{L_{i,j+1/2,k}} \frac{v_{i,j+1/2,k}^2}{|v_{i,j+1/2,k}|} + \alpha_{T_{i,j+1/2,k}} \frac{v_{i,j+1/2,k}^2}{|v_{i,j+1/2,k}|} + \alpha_{T_{i,j+1/2,k}} \frac{v_{i,j+1/2,k}^2}{|v_{i,j+1/2,k}|} + D_m \\
 D_{xy_{i,j+1/2,k}} &= \left(\alpha_{L_{i,j+1/2,k}} - \alpha_{T_{i,j+1/2,k}} \right) \frac{v_{i,j+1/2,k}^x v_{i,j+1/2,k}^y}{|v_{i,j+1/2,k}|} \\
 D_{xz_{i,j+1/2,k}} &= \left(\alpha_{L_{i,j+1/2,k}} - \alpha_{T_{i,j+1/2,k}} \right) \frac{v_{i,j+1/2,k}^x v_{i,j+1/2,k}^z}{|v_{i,j+1/2,k}|}
 \end{aligned} \tag{4.63}$$

De modo similar, os valores de D_{yx} , D_{yy} e D_{yz} são avaliados nas interfaces das células ao longo da direção y e D_{zx} , D_{zy} e D_{zz} são avaliados nas interfaces das células ao longo da direção z , utilizando o mesmo procedimento definido pelas Equações 4.60 a 4.63.

4.2.2.3 Tratamento matemático do termo de reações químicas

As reações químicas, representadas na Equação 4.36 pelo termo $\sum_{k=1}^N R_k$, quando adotadas as hipóteses de equilíbrio local e de substâncias conservativas, ficam reduzidas ao processo de sorção, conforme discutido anteriormente. O referido processo, quando usada a hipótese de sorção linear, é representado por um coeficiente de retardo (R), definido pela Equação 4.44. Ainda como consequência da adoção da hipótese de sorção linear, o coeficiente de retardo (R) é independente do campo de concentrações, sendo calculado uma única vez na simulação do transporte em meio poroso saturado.

4.2.2.4 Algoritmo simplificado do método MMOC

Este item procura apresentar um algoritmo simplificado do método MMOC com o objetivo de sintetizar os itens discutidos anteriormente e fornecer uma visão geral do referido método. Zheng e Bennett (2002) descrevem a lógica subjacente ao algoritmo MMOC para a solução da equação de advecção-dispersão, apresentada resumidamente a seguir.

Considerando-se o problema da estimativa da concentração no ponto nodal m em um novo instante de tempo $t+1$, ou seja, estabelecer C_m^{t+1} a partir da Equação 4.54, a seqüência de passos seria (adaptado de Zheng e Bennett, 2002):

- Passo 1 – Retroceder no tempo, do instante $t+1$ até o instante t , para determinar a posição anterior $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})_P$ de uma partícula P que está localizada no ponto nodal m no instante $t+1$;
- Passo 2 – Calcular a concentração (C_P^t) da partícula P na posição $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})_P$ no instante t , a partir da média ponderada das concentrações dos pontos nodais vizinhos à partícula;
- Passo 3 – Estimar a concentração (C_m^{t*}) da partícula P no ponto nodal m no instante $t+1$, considerando-se somente o processo de advecção. Quando considerado somente o processo de advecção, tem-se C_m^{t*} igual a C_P^t ;
- Passo 4 – Calcular a variação da concentração (ΔC_m^{t+1}) no ponto nodal m no instante $t+1$ devida aos processos de dispersão e de reações químicas, usando o valor C_m^{t*} , obtido no Passo 3;
- Passo 5 – Calcular a concentração (C_m^{t+1}) no ponto nodal m no instante $t+1$, obtida pela soma de C_m^{t*} e ΔC_m^{t+1} , obtidos nos Passos 3 e 4, respectivamente.

Zheng e Bennett (2002) citam que o valor de ΔC_m^{t+1} , obtido no Passo 4, pode ser calculado usando o método de diferenças finitas ou o método dos elementos finitos. Zheng (1990) utiliza um esquema de diferenças finitas para o cálculo de ΔC_m^{t+1} na implantação do método MMOC no modelo MT3D. Além disso, o referido autor sugere a utilização de uma ponderação entre os valores de C_m^t e C_m^{t*} para o cálculo de ΔC_m^{t+1} , justificando que os processos de dispersão e de reações químicas se dão ao longo do intervalo de tempo $[t, t+1]$.

4.2.3 Representação dos Processos Externos ao Aquífero

No modelo TRANSPSAT, assim como no modelo FLUXSAT, foram considerados somente dois processos externos ao aquífero: recarga e conexão hidráulica com uma lagoa.

Como já mencionado, esta decisão foi em razão do caso específico a ser estudado e que é objeto de análise da presente tese.

No modelo TRANSPSAT, a diferença básica do modo de contribuição para o problema de transporte dos dois processos externos mencionados é que, em termos de entrada de massa de contaminante no aquífero, a contribuição da recarga é variável no tempo, enquanto a contribuição da lagoa é constante no tempo.

A contribuição da recarga é variável no tempo, em função da variação da concentração de contaminante na interface entre os meios saturado e não saturado e não propriamente em razão da variação da recarga, uma vez que a mesma é considerada constante no tempo. Esta variação de concentração é conseqüência do fluxo e transporte do contaminante através do meio não saturado.

Os procedimentos usados para representar as contribuições da recarga do aquífero e da conexão hidráulica do aquífero com uma lagoa, em termos do problema de transporte, são descritos a seguir.

4.2.3.1 Representação da Contribuição da Recarga do Aquífero

A contribuição da recarga do aquífero, em termos de transporte de contaminantes, tem por objetivo permitir a representação da contribuição de possíveis colunas de solo contaminadas e localizadas no meio poroso não saturado, nas quais o contaminante pode migrar verticalmente até atingir a superfície freática.

A interação entre os meios saturado e não saturado é representada pela recarga do aquífero (problema de fluxo) e pela variação ao longo do tempo da concentração de um determinado contaminante na base de uma coluna de solo contaminada, localizada no meio não saturado e que representa a interface com o aquífero (problema de transporte). É importante destacar que a variação da concentração na base da coluna de solo é obtida a partir dos resultados do modelo TRANSP, discutido no capítulo anterior, e que trata do transporte unidimensional em meio poroso não saturado.

Outro aspecto a destacar é que a adoção da hipótese de fluxo permanente na representação do fluxo de água nos meios saturado e não saturado representa uma simplificação importante na caracterização da interface entre os referidos meios, uma vez que a posição da superfície freática resulta constante no tempo. Implicações do fluxo transiente (não permanente) na modelagem da interação entre os meios porosos saturado e não saturado é amplamente discutida em Cota (2000).

Existe uma diferença importante do modelo TRANSPSAT em relação ao modelo FLUXSAT no tocante à representação da recarga, discutida sucintamente a seguir.

No modelo FLUXSAT, pode-se associar somente duas condições de recarga para uma determinada célula, ou seja, basicamente recarga nula ou recarga não nula. Como discutido no item 4.1.4.1, a representação da recarga é feita através de uma matriz bidimensional IRECH, onde cada elemento (i,j) da referida matriz recebe um índice k que indica em que camada k a recarga deverá ser adicionada.

No modelo TRANSPSAT, pode-se associar três condições de contribuição da recarga para o problema de transporte: a) recarga nula; b) recarga não nula e concentração nula; e c) recarga não nula e concentração não nula. Uma quarta condição poderia ser estabelecida, considerando-se o caso de recarga nula e transporte de massa por difusão molecular. Contudo, a referida condição não foi considerada na elaboração do modelo TRANSPSAT.

As três condições descritas de contribuição da recarga para o problema de transporte podem ser reduzidas a apenas duas, quando se considera que os problemas de fluxo e de transporte são resolvidos separadamente, ou seja, de forma desacoplada. De modo simples, as duas condições que interessam do ponto de vista do transporte são concentração nula e concentração não nula, ambas para o caso de recarga não nula. No caso de recarga nula, não há contribuição para o transporte, uma vez que o transporte apenas por difusão molecular não foi considerado.

Em função do exposto, a representação da contribuição da recarga para o problema de transporte no modelo TRANSPSAT foi baseada no mesmo tipo de solução adotada para o modelo FLUXSAT. A representação da contribuição da recarga também é feita através de uma matriz bidimensional, chamada de ICOL, onde cada elemento (i,j) da referida matriz recebe um índice k que indica em que camada k a contribuição da recarga, em termos de entrada de contaminante, deverá ser adicionada. No caso de não haver contribuição da recarga em determinado elemento (i,j) , o valor zero é atribuído para o índice k . O procedimento descrito tem a característica interessante de permitir a definição de diferentes áreas de contaminação, não necessariamente adjacentes.

As fontes/sumidouros externos (S_e) são representados pelo termo a seguir, presente nas Equações 4.49, 4.50 e 4.52:

$$S_e = \frac{q_e}{R\phi_e}(C - C_e) \quad (4.64)$$

O valor de C utilizado na Equação 4.64 é uma ponderação entre os valores de C_m^t e C_m^{t*} , conforme sugerido por Zheng (1990) e discutido no item 4.2.2.4. Destaca-se novamente que, para a contribuição da recarga, o valor de C_e é variável no tempo, em razão da propagação do contaminante pelo meio poroso não saturado.

Como os valores de C_e são gerados a partir do modelo TRANSP, discutido no Capítulo 03, o modelo TRANSPSAT prevê a possibilidade da discretização temporal (Δt) não ser a mesma nos dois modelos. Para tanto, os valores de C_e são lidos e interpolados linearmente no tempo, levando em consideração os valores de Δt utilizados nas soluções dos problemas de transporte no meio poroso não saturado (modelo TRANSP) e no meio poroso saturado (modelo TRANSPSAT).

4.2.3.2 Representação da Contribuição da Lagoa para o Aquífero

A contribuição da lagoa para o aquífero, em termos de transporte de contaminantes, tem por objetivo permitir a representação da transferência de massa de contaminante entre a lagoa e o aquífero em razão do gradiente hidráulico e do gradiente de concentração existente entre os dois.

A contribuição da lagoa para o aquífero devido ao gradiente hidráulico entre ambos é calculada pelo modelo FLUXSAT, que resolve o problema de fluxo no meio poroso saturado, como discutido no item 4.1.4.2. Como o fluxo é tratado como permanente, o valor da contribuição não varia no tempo. Uma hipótese adicional é a de que a concentração de contaminante na lagoa também não varia no tempo. Deste modo, tem-se que a contribuição da lagoa para o aquífero, em termos de massa de contaminante, é constante ao longo do tempo. Esta característica representa uma diferença importante em relação à contribuição da recarga, discutida no item anterior, que é variável no tempo.

A representação da contribuição da lagoa para o aquífero, em termos de transporte de contaminantes, no modelo TRANSPSAT foi também baseada no mesmo tipo de solução adotada para o modelo FLUXSAT. A representação desta contribuição é feita através de uma matriz bidimensional, chamada de ILAGO, onde cada elemento (i,j) da referida matriz recebe um índice k que indica em qual camada a contribuição, em termos de contaminante, deverá ser adicionada. No caso de não haver contribuição da lagoa em determinado elemento (i,j) , é atribuído o valor zero para o índice k .

Como discutido no item anterior, as fontes/sumidouros externos (S_e) são representados pela Equação 4.64, sendo que a diferença básica entre os dois processos, conforme já destacado anteriormente, é o de que, neste caso, o valor de C_e é constante no tempo.

4.3 AVALIAÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL DE FLUXO EM MEIO SATURADO

O problema de fluxo em meio saturado e sua solução numérica foram apresentados e discutidos no item 4.1. Com base no exposto no referido item, desenvolveu-se um modelo computacional em linguagem FORTRAN, denominado FLUXSAT, para simular as condições de fluxo permanente tridimensional em meio poroso saturado.

O modelo computacional FLUXSAT foi avaliado através de alguns testes computacionais envolvendo problemas de fluxo permanente em meio saturado de natureza unidimensional, bidimensional e tridimensional. Os resultados do modelo FLUXSAT para os problemas de natureza unidimensional foram comparados a soluções analíticas e a resultados obtidos a partir do modelo computacional ASMWIN (*Aquifer Simulation Model for Windows*) (Chiang, Kinzelbach e Rausch, 1998). Para os problemas de natureza bidimensional, os resultados do modelo FLUXSAT foram novamente comparados a resultados obtidos a partir do modelo ASMWIN. Finalmente, para os problemas de natureza tridimensional, os resultados do modelo FLUXSAT foram comparados a resultados obtidos a partir do modelo computacional *Groundwater Vistas* (Rumbaugh e Rumbaugh, 2001).

4.3.1 Caso 01 – Problema Unidimensional

Os resultados do modelo FLUXSAT para os problemas de fluxo permanente em meio saturado de natureza unidimensional, como mencionado anteriormente, foram comparados a soluções analíticas e a resultados obtidos a partir do modelo computacional ASMWIN (*Aquifer Simulation Model for Windows*) (Chiang, Kinzelbach e Rausch, 1998), que trata do fluxo transiente bidimensional em meio saturado.

4.3.1.1 Comparação com solução analítica

A comparação dos resultados do modelo FLUXSAT com soluções analíticas para problemas particulares de fluxo unidimensional em meio poroso saturado teve por objetivo verificar o comportamento do referido modelo na obtenção da solução numérica de problemas de fluxo relativamente simples.

A solução analítica de alguns problemas particulares de fluxo permanente unidimensional em meio saturado pode ser encontrada com relativa frequência em textos clássicos na área de escoamento em meio poroso, como, por exemplo, Marsily (1986) e Charbeneau (2000).

Para o problema específico de fluxo permanente unidimensional em um aquífero homogêneo não confinado, sujeito a um valor de recarga (q) constante ao longo de todo o aquífero, Charbeneau (2000) apresenta como solução analítica para determinação da carga hidráulica (h):

$$h^2 + \frac{q}{K}x^2 = Ax + B \quad (4.65)$$

onde K é a condutividade hidráulica do meio saturado e A e B são constantes de integração que dependem das condições de contorno. Estabelecendo-se como condições de contorno, $h(x=0) = H_0$ e $h(x=L) = H_L$, tem-se:

$$h^2 = H_0^2 + \left[\frac{H_L^2 - H_0^2}{L} + \frac{qL}{K} \right]x - \frac{q}{K}x^2 \quad (4.66)$$

A Equação 4.66 foi então utilizada para a comparação entre os resultados dos testes efetuados no modelo FLUXSAT e a solução analítica.

A geometria do aquífero livre hipotético foi bastante simples, sendo representada por um paralelepípedo (ortóedro) com 2 km de comprimento, 100 m de largura e 10 m de espessura, sendo o mesmo ainda considerado homogêneo. Os números de células utilizadas para representar o comprimento do aquífero foram de 10 e 100, representando espaçamentos Δx de 200 m e 20 m, respectivamente.

Adotou-se, como condições de contorno, carga hidráulica (h) constante e igual a 10 m para $x = 0$ m e dois valores de carga hidráulica (h) constante para $x = 2000$ m, iguais a 9 m e 5 m, com a finalidade de testar diferentes gradientes hidráulicos.

Em relação à condutividade hidráulica (K), foram adotados dois valores distintos, a saber: $9,22 \times 10^{-5}$ m/s e $2,70 \times 10^{-6}$ m/s. Estes valores correspondem às condutividades hidráulicas dos solos 1 e 3, utilizados no capítulo 03 para análise dos modelos FLUX e TRANSP, conforme apresentados na Tabela 3.1. É importante destacar que estes valores foram escolhidos para analisar a resposta do modelo a solos distintos em relação à sua condutividade hidráulica. Adicionalmente, considerou-se uma condição de inexistência de recarga e uma condição de recarga equivalente a 500 mm/ano aplicada no topo do aquífero.

A combinação das diferentes condições de contorno e dos valores distintos de discretização espacial (Δx), condutividade hidráulica (K) e recarga (q) conduziu a um número total de 16 testes.

As Figuras 4.10 a 4.13 apresentam alguns resultados dos testes de comparação entre o modelo FLUXSAT e a solução analítica de problemas unidimensionais de fluxo permanente em meio poroso saturado.

De modo geral, os resultados dos testes mostraram uma boa concordância entre os resultados do modelo FLUXSAT e a solução analítica, mesmo para uma discretização relativamente grosseira ($\Delta x = 200$ m), exceção feita aos resultados apresentados na Figura 4.13. Neste caso, a adoção de Δx igual a 200 m conduziu a resultados bastante discrepantes entre modelo FLUXSAT e a solução analítica.

Uma justificativa para essa discrepância seria o valor de recarga (500 mm/ano) excessivamente alto em relação ao valor de condutividade hidráulica ($2,70 \times 10^{-6}$ m/s). Como conseqüência, tem-se ao longo do aquífero, valores de carga hidráulica bem superiores à espessura (10 m) adotada para o aquífero hipotético. Pode-se, inclusive, questionar a validade da solução analítica, Equação 4.66, para o caso em questão.

As diferenças que se observam nas Figuras 4.10 a 4.13 entre as soluções analíticas para as discretizações de 200 m e 20 m são explicadas pela definição de comprimentos diferentes para o aquífero. Tal procedimento foi adotado para possibilitar uma comparação mais realista entre a solução analítica e a solução numérica. Considerando-se que o modelo FLUXSAT usa um esquema numérico centrado na célula, a adoção de Δx igual a 200 m implica em um comprimento de aquífero de 1800 m, enquanto a adoção de Δx igual a 20 m implica em um comprimento de aquífero de 1980 m.

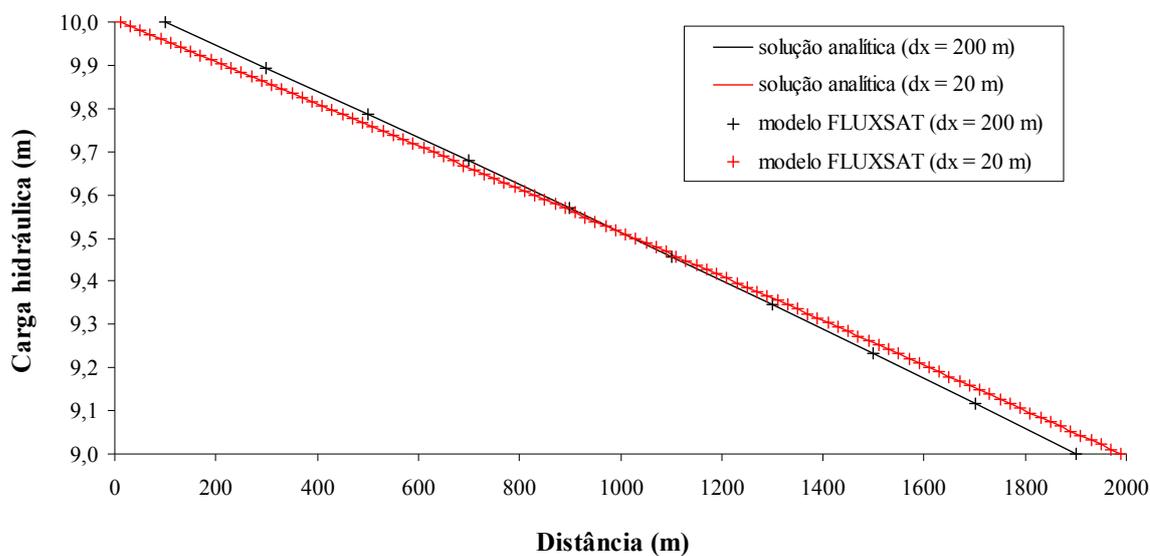


Figura 4.10 Comparação entre os resultados 1D do modelo FLUXSAT e a solução analítica
(Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $q = 0,0$ cm/h)

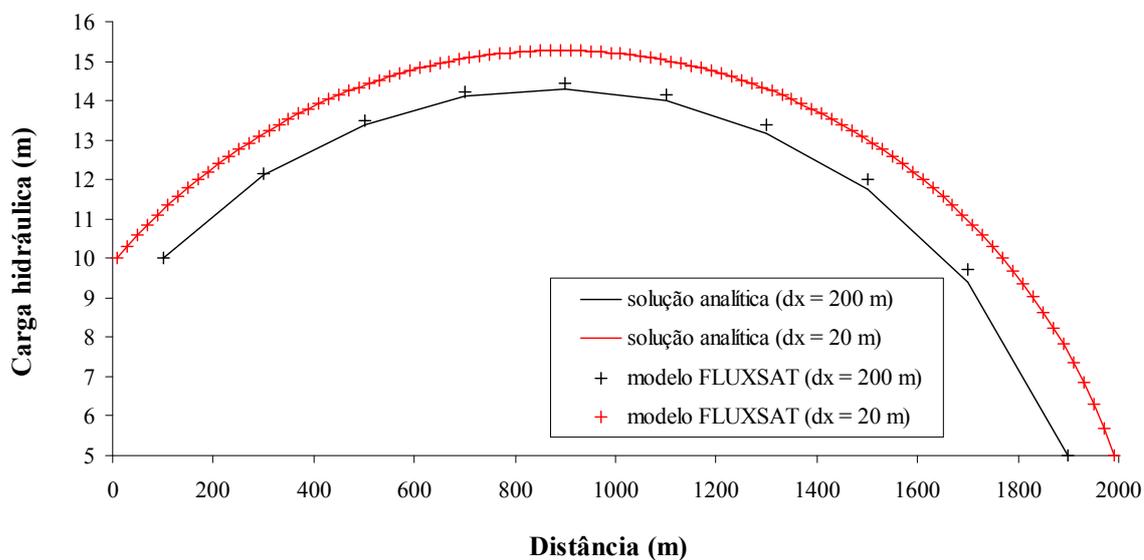


Figura 4.11 Comparação entre os resultados 1D do modelo FLUXSAT e a solução analítica
(Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $q = 500$ mm/ano)

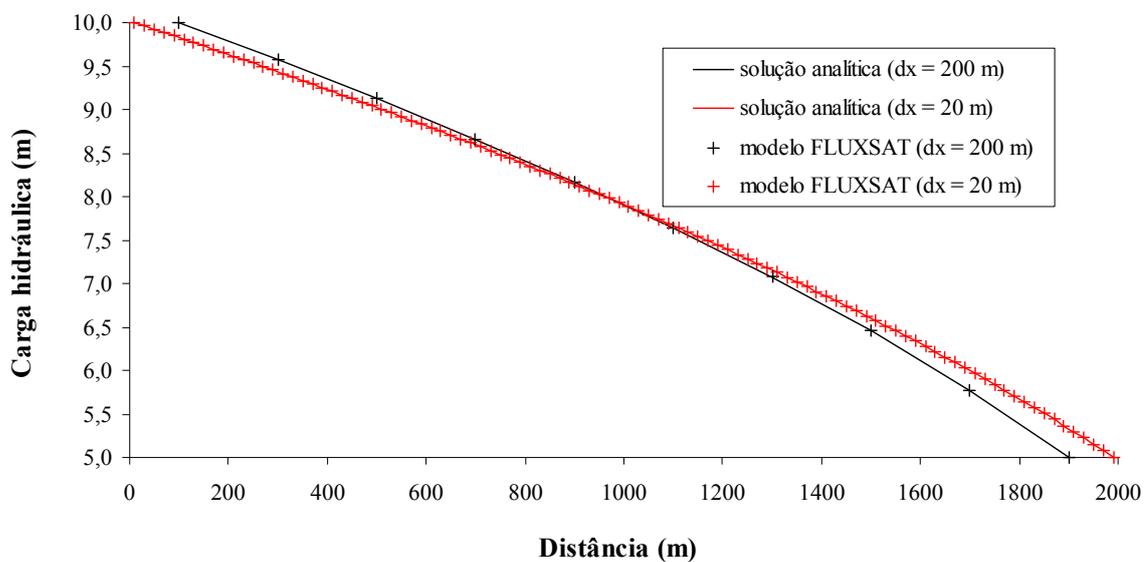


Figura 4.12 Comparação entre os resultados 1D do modelo FLUXSAT e a solução analítica
(Dados: $K_x = 2,70 \times 10^{-6}$ m/s; $q = 0,0$ cm/h)

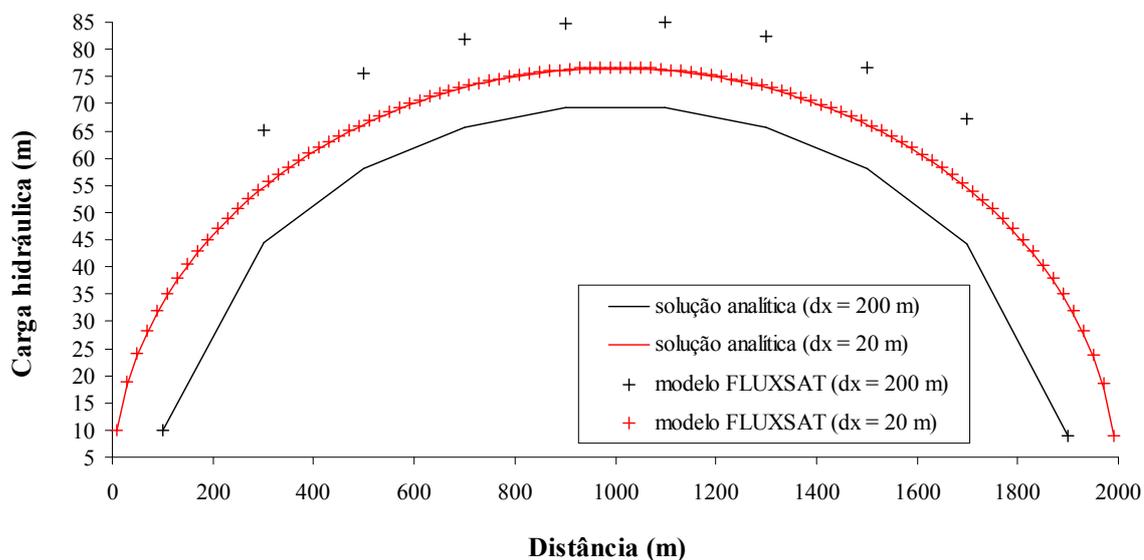


Figura 4.13 Comparação entre os resultados 1D do modelo FLUXSAT e a solução analítica
(Dados: $K_x = 2,70 \times 10^{-6}$ m/s; $q = 500$ mm/ano)

4.3.1.2 Comparação com o modelo computacional ASMWIN

A próxima fase de testes do modelo FLUXSAT, ainda se tratando de problemas unidimensionais, foi a comparação dos seus resultados com os resultados obtidos a partir do modelo computacional ASMWIN - *Aquifer Simulation Model for Windows* (Chiang, Kinzelbach e Rausch, 1998).

O modelo ASMWIN trata de problemas transientes bidimensionais de fluxo e transporte em meio poroso saturado e é constituído por interface gráfica, modelo de fluxo em diferenças finitas, ferramenta para calibração automática do modelo de fluxo, modelo de rastreamento de partículas (*particle tracking*), modelo de transporte de passeio aleatório (*random walk model*) e modelo de transporte em diferenças finitas. A versão utilizada (versão 6.0) tem capacidade de representação de 150 x 150 células e 1000 intervalos de tempo (Chiang, Kinzelbach e Rausch, 1998).

Os testes realizados nesta etapa tiveram como principal objetivo testar a rotina do modelo FLUXSAT que trata da interação entre o aquífero e a lagoa. Adotou-se a mesma geometria usada no item anterior para a representação do aquífero hipotético, ou seja, um paralelepípedo (ortóedro) com 2 km de comprimento, 100 m de largura e 10 m de espessura, sendo o mesmo considerado homogêneo. Novamente, os números de células usadas para representar o comprimento do aquífero foram de 10 e 100, representando espaçamentos Δx de 200 m e 20 m, respectivamente.

Foram adotados as mesmas condições de contorno e os mesmos valores de condutividade hidráulica utilizados no item anterior, ou seja, carga hidráulica (h) constante e igual a 10 m para $x = 0$ m; dois valores de carga hidráulica (h) constante para $x = 2000$ m, iguais a 9 m e 5 m; e condutividades hidráulicas de $9,22 \times 10^{-5}$ m/s e $2,70 \times 10^{-6}$ m/s. Finalmente, considerou-se somente a condição de inexistência de recarga.

A combinação das diferentes condições de contorno e dos valores distintos de discretização espacial (Δx), condutividade hidráulica (K) e recarga (q) conduziu a um número total de 8 testes.

A representação da conexão hidráulica entre o aquífero e uma lagoa adotada no modelo FLUXSAT foi discutida no item 4.1.4.2 e é representada conceitualmente através das Figuras 4.7 e 4.8.

A Equação 4.25 define o fluxo entre a lagoa e o aquífero como uma função da condutância entre a lagoa e o aquífero ($CL_{i,j}$), o nível da lagoa (h_L) e a carga hidráulica ($h_{i,j,k}$) da célula (i,j,k) que interage com a lagoa. Já a condutância entre a lagoa e o aquífero ($CL_{i,j}$) é definida como uma função da condutividade hidráulica vertical do leito da lagoa (K_L), da

condutividade hidráulica vertical do aquífero ($Kz_{i,j,k}$) para a célula (i,j,k), da espessura do leito da lagoa (e_L) e das dimensões da célula (i,j,k) que interage com a lagoa, conforme expresso através da Equação 4.27.

Portanto, os dados específicos básicos para o cálculo do fluxo entre a lagoa e o aquífero são: a espessura do leito da lagoa (e_L), a condutividade hidráulica vertical do material do leito (K_L) e o nível da superfície da lagoa (h_L). Para os testes de comparação entre os modelos computacionais FLUXSAT e ASMWIN, foram adotados os valores de e_L igual a 0,30 m; K_L igual a $4,17 \times 10^{-7}$ m/h; e h_L igual a 14,0 m.

No modelo ASMWIN, o fluxo entre uma lagoa e o aquífero pode ser simulado através da opção LEAKAGE e os dados específicos básicos para o cálculo do referido fluxo são o fator de drenança (*leakage factor* - L), o nível da lagoa (h_L) e a elevação (B) do fundo da célula (i,j,k) que interage com a lagoa. Matematicamente, o fluxo entre a lagoa e o aquífero é calculado através de (Chiang, Kinzelbach e Rausch, 1998):

$$QL_{i,j} = L_{i,j} \Delta x_j \Delta y_i (h_L - h_{i,j,k}) \quad \text{para } h_{i,j,k} \geq B$$

ou

(4.67)

$$QL_{i,j} = L_{i,j} \Delta x_j \Delta y_i (h_L - B) \quad \text{para } h_{i,j,k} < B$$

Comparando-se as Equações 4.25 e 4.67, verifica-se que a relação entre o fator de drenança (L), usado pelo modelo ASMWIN, e a condutância (CL), utilizada pelo modelo FLUXSAT, pode ser expressa por:

$$L_{i,j} = \frac{CL_{i,j}}{\Delta x_j \Delta y_i} \quad (4.68)$$

Considerando-se ainda a definição de $CL_{i,j}$, dada pela Equação 4.27, a Equação 4.68 pode ser escrita como:

$$L_{i,j} = \left(\frac{2.K_L.Kz_{i,j,kl}}{2.Kz_{i,j,kl}.e_L + K_L.\Delta z_{kl}} \right) \quad (4.69)$$

A Equação 4.69 foi então usada para obter o fator de drenança (L) para o modelo ASMWIN a partir dos dados usados nas simulações com o modelo FLUXSAT. Para o cálculo do fator de drenança (L), adotou-se ainda uma relação K_z/K_x igual a 0,1. Portanto, para os valores de K_x iguais a $9,22 \times 10^{-5}$ m/s e $2,70 \times 10^{-6}$ m/s, foram estimados valores de L iguais a $3,86 \times 10^{-10}$ s $^{-1}$ e $3,83 \times 10^{-10}$ s $^{-1}$, respectivamente, considerando-se os valores de e_L , K_L e h_L , apresentados anteriormente. Os valores de L resultaram próximos entre si porque o valor de K_L adotado é bem inferior aos valores de K_x usados nos testes.

Adotou-se, por hipótese, que a interação entre a lagoa e o aquífero se dá ao longo de um comprimento de 400 m, iniciando em $x = 400$ m e terminando em $x = 800$ m. Como consequência, para Δx igual a 200 m, esta interação abrange 2 células do modelo numérico e para Δx igual a 20 m, 20 células. A Figura 4.14 representa esquematicamente o posicionamento das células que interagem com a lagoa para Δx igual a 200 m.



Figura 4.14 Representação esquemática da posição da lagoa em relação ao aquífero para uma discretização espacial Δx de 200 m (Caso unidimensional).

As Figuras 4.15 a 4.18 resumem os resultados obtidos nos testes de comparação entre os modelos FLUXSAT e ASMWIN para problemas unidimensionais de fluxo permanente em meio poroso saturado.

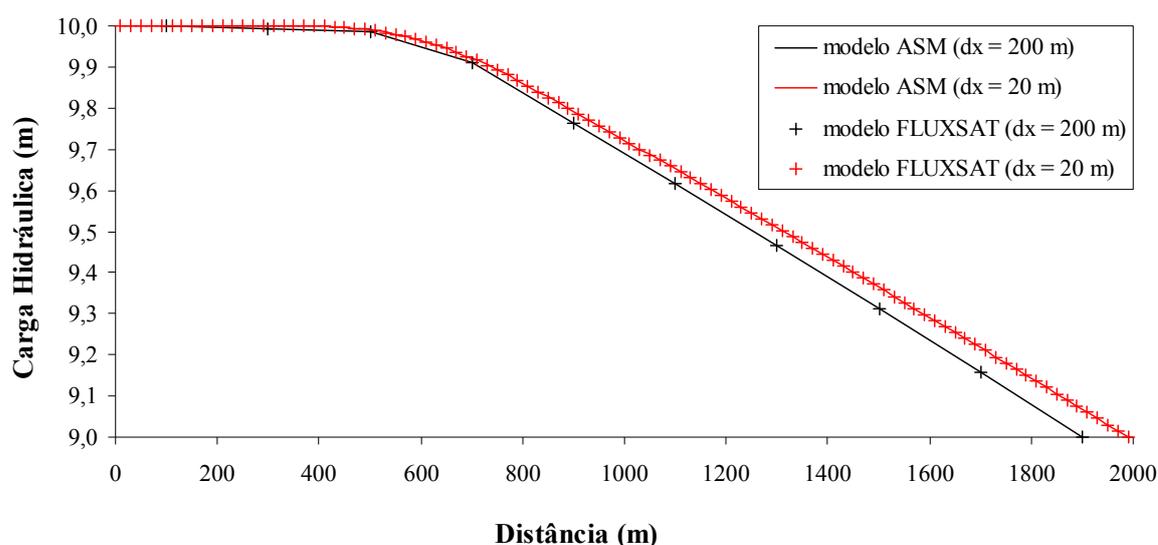


Figura 4.15 Comparação entre os resultados 1D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN (Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $h(x = 2000 \text{ m}) = 9,0$ m)

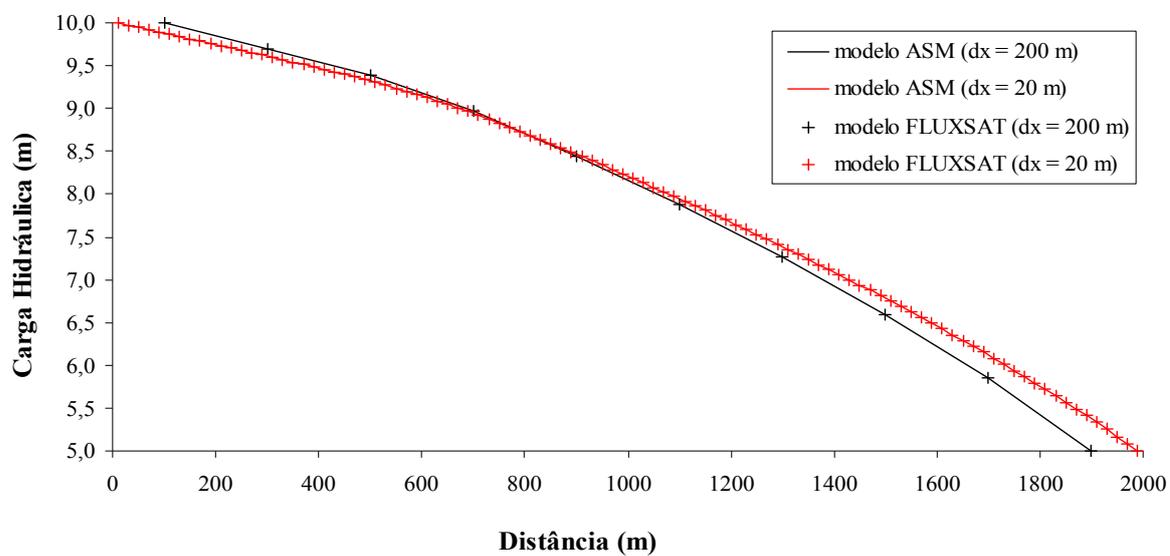


Figura 4.16 Comparação entre os resultados 1D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN

(Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5} \text{ m/s}$; $h(x = 2000 \text{ m}) = 5,0 \text{ m}$)

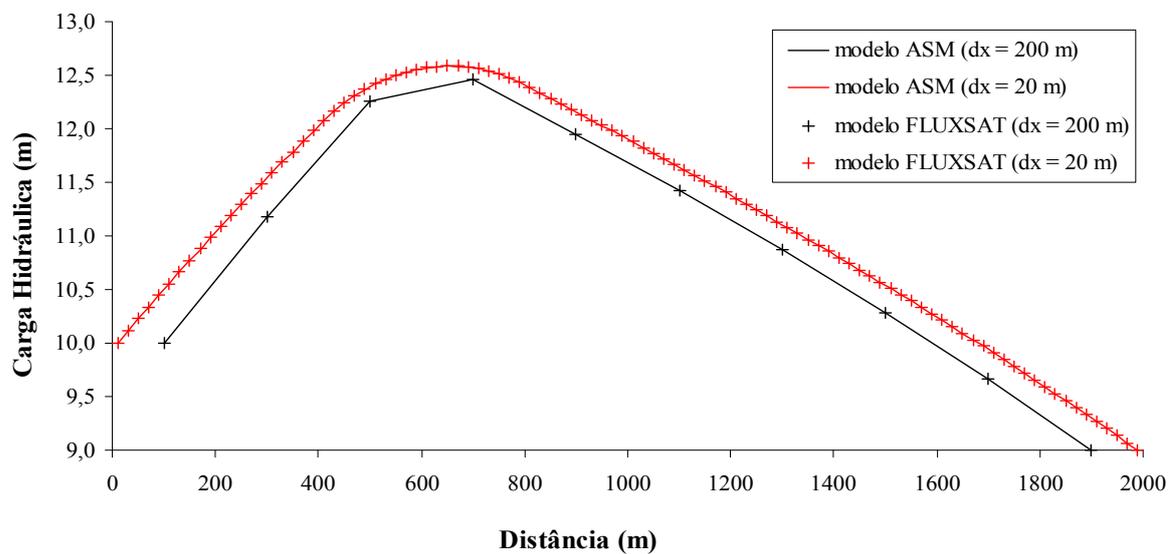


Figura 4.17 Comparação entre os resultados 1D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN

(Dados: $K_x = 2,70 \times 10^{-6} \text{ m/s}$; $h(x = 2000 \text{ m}) = 9,0 \text{ m}$)

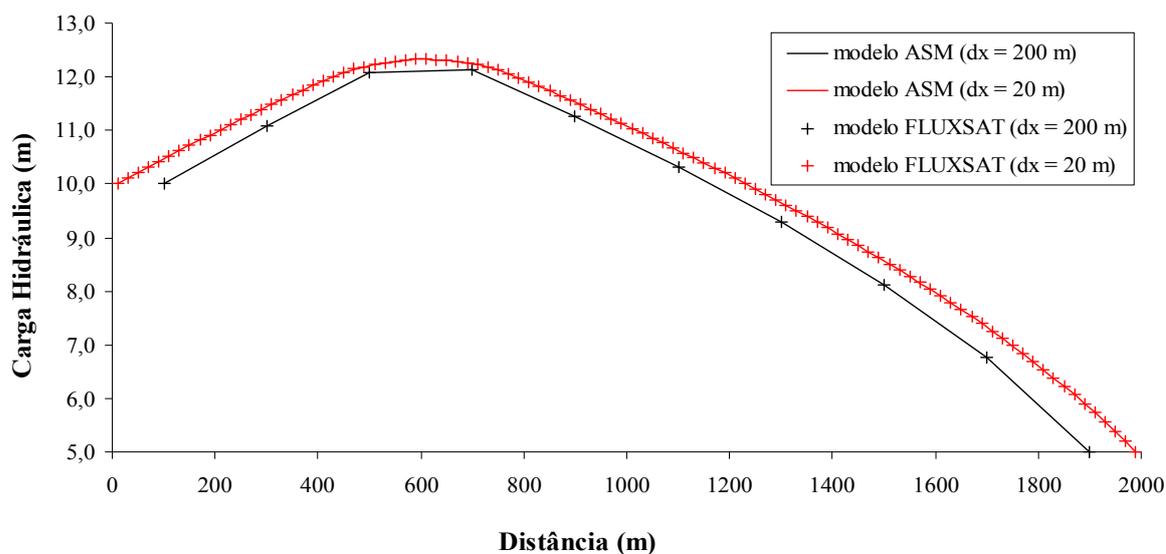


Figura 4.18 Comparação entre os resultados 1D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN
(Dados: $K_x = 2,70 \times 10^{-6}$ m/s; $h(x = 2000 \text{ m}) = 5,0$ m)

A comparação dos resultados entre os modelos FLUXSAT e ASMWIN para problemas de fluxo unidimensional em meio poroso saturado mostraram uma boa concordância entre os dois modelos, comprovando a adequação da rotina implantada no modelo FLUXSAT para a representação da interação entre a lagoa e o aquífero.

As diferenças entre os valores de carga hidráulica (h) calculados pelos dois modelos foram, no máximo, da ordem de 1 mm, podendo inclusive serem creditadas ao uso de diferentes métodos numéricos de solução do sistema de equações e à adoção de diferentes critérios de parada. A título de informação, o modelo FLUXSAT utiliza o método SIP (*Strongly Implicit Procedure*), apresentado por Stone (1968) e descrito resumidamente no item 4.1.5, enquanto o modelo ASMWIN usa o método PCG - *preconditioned conjugate gradient* (Chiang, Kinzelbach e Rausch, 1998).

4.3.2 Caso 02 – Problema Bidimensional

Os resultados do modelo FLUXSAT para os problemas de fluxo permanente em meio poroso saturado de natureza bidimensional, como mencionado anteriormente, foram comparados aos resultados obtidos a partir do modelo computacional ASMWIN (Chiang, Kinzelbach e Rausch, 1998), descrito resumidamente no item anterior.

A comparação entre os resultados dos modelos FLUXSAT e ASMWIN para problemas de fluxo bidimensional em meio poroso saturado teve por objetivo verificar o

comportamento do modelo FLUXSAT na obtenção da solução numérica de problemas de fluxo com um grau de complexidade um pouco maior em relação aos problemas unidimensionais, uma vez que uma dimensão a mais é representada na discretização do modelo numérico. Além disso, procurou-se novamente avaliar a rotina de interação entre a lagoa e o aquífero, bem como, a questão da anisotropia, adotando-se para algumas simulações uma relação entre K_y e K_x diferente da unidade.

A geometria do aquífero livre hipotético foi novamente bastante simples, sendo representada por um paralelepípedo (ortopedro) com 2 km de comprimento, 1 km de largura e 10 m de espessura, sendo o mesmo ainda considerado homogêneo. Portanto, alterou-se a largura do aquífero em relação aos problemas unidimensionais. Os números de células usadas para representar o comprimento do aquífero foram 10 e 50, representando espaçamentos Δx de 200 m e 40 m, respectivamente. Para a representação da largura do aquífero foram também utilizadas 10 e 50 células, representando espaçamentos Δy de 100 m e 20 m, respectivamente.

O uso de um refinamento maior do modelo numérico com a adoção de 50 células em ambas as direções x e y teve por objetivo verificar a ocorrência ou não da propagação de erros numéricos na solução do problema, bem como, o tempo de processamento para sistemas relativamente grandes, compostos de aproximadamente 50×50 equações.

Novamente, adotou-se carga hidráulica (h) constante e igual a 10 m para $x = 0$ m e dois valores distintos de carga hidráulica (h) constante (9 m e 5 m) para $x = 2000$ m como condições de contorno. Os testes levaram em consideração apenas o valor de $9,22 \times 10^{-5}$ m/s para a condutividade hidráulica (K_x) do aquífero, considerado como homogêneo. Adicionalmente, foram considerados dois valores para a relação K_y/K_x . A saber, uma relação igual à unidade, representando uma condição de isotropia, e uma relação igual a 0,1, representando uma condição de anisotropia.

Considerou-se ainda uma condição de inexistência de recarga e uma condição de recarga equivalente a 500 mm/ano aplicada ao topo do aquífero, com exceção feita à área correspondente à interação entre a lagoa e o aquífero. Os valores de e_L , h_L e K_L foram os mesmos utilizados nos testes envolvendo fluxo unidimensional, apresentados no item anterior.

A combinação das diferentes condições de contorno e dos diversos valores de discretização espacial (Δx e Δy), condutividade hidráulica (K_x), recarga (q) e relação de anisotropia (K_y/K_x) conduziu a um número total de 16 testes.

A lagoa foi representada por uma área de forma retangular de (400 m x 200 m), sendo seus vértices definidos pelas coordenadas: (400 m, 600 m), (800 m, 600 m), (400 m, 800 m) e (800 m, 800 m). Como consequência, para Δx e Δy iguais a 200 m e 100 m, a interação entre a lagoa e o aquífero compreendeu 4 células do modelo numérico, e para Δx e Δy iguais a 40 m

e 20 m, 100 células. A Figura 4.19 representa esquematicamente o posicionamento das células que interagem com a lagoa para Δx e Δy iguais a 200 m e 100 m, respectivamente.



Figura 4.19 Representação esquemática da posição da lagoa em relação ao aquífero para Δx igual a 200 m e Δy igual a 100 m (Caso bidimensional)

As Figuras 4.20 a 4.23 apresentam alguns exemplos de resultados obtidos nos testes de comparação entre os modelos FLUXSAT e ASMWIN para problemas bidimensionais de fluxo permanente em meio poroso saturado.

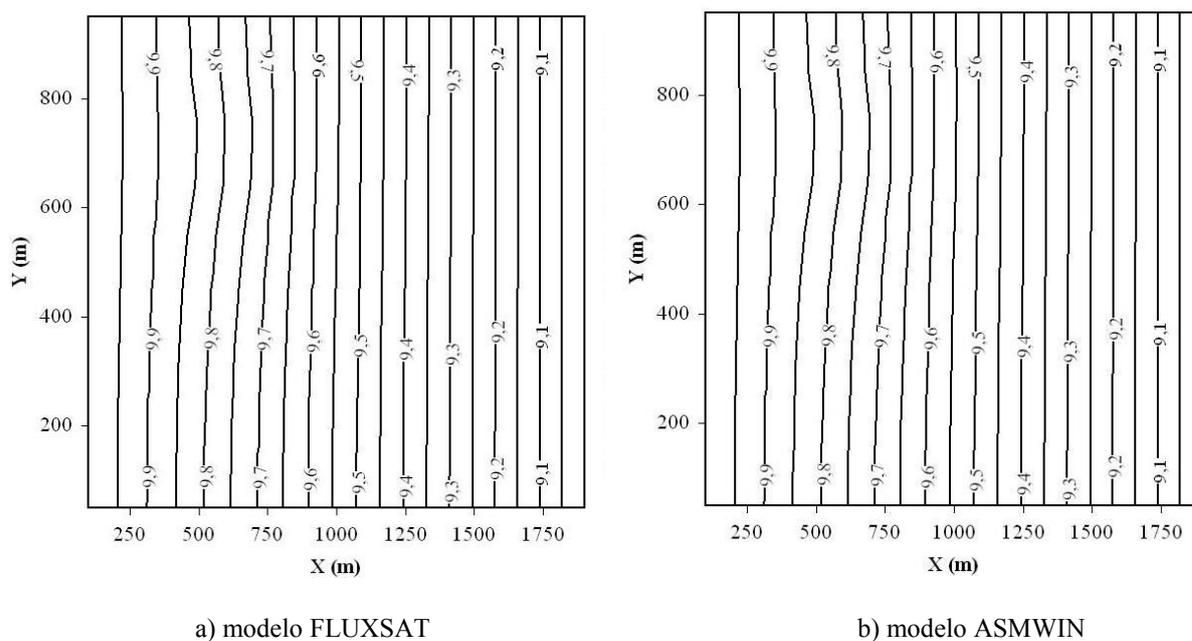


Figura 4.20 Comparação entre os resultados 2D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN (Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $K_y/K_x = 1,0$; $q = 0,0$ cm/h; $\Delta x = 200$ m; $\Delta y = 100$ m)

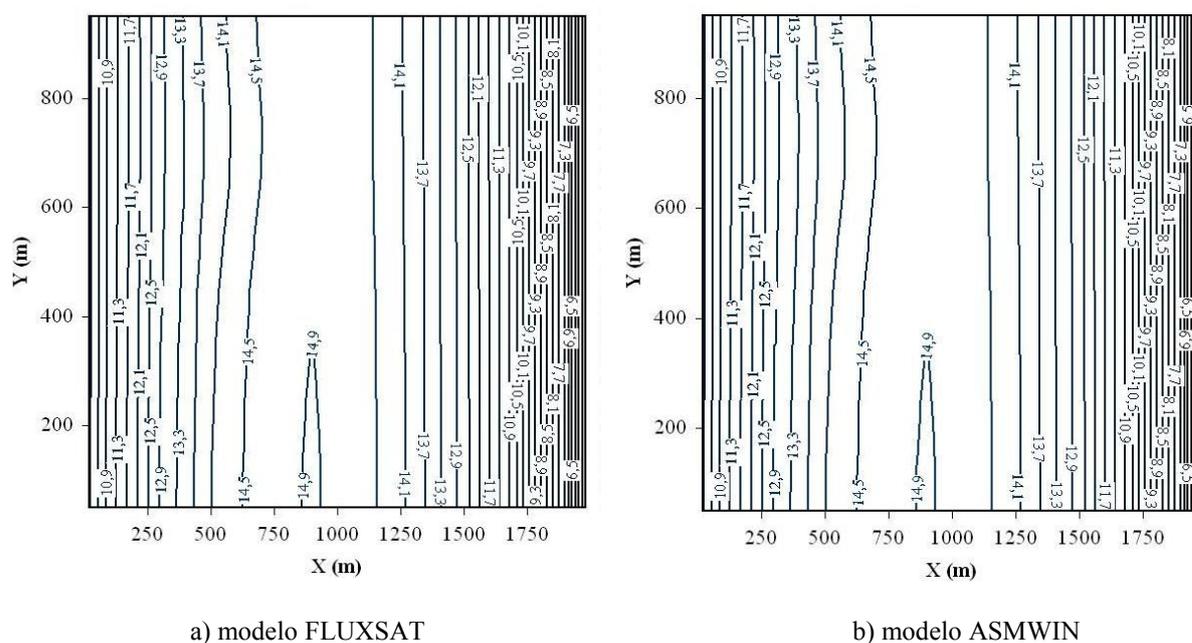


Figura 4.21 Comparação entre os resultados 2D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN
(Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $K_y/K_x = 1,0$; $q = 500$ mm/ano; $\Delta x = 40$ m; $\Delta y = 20$ m)

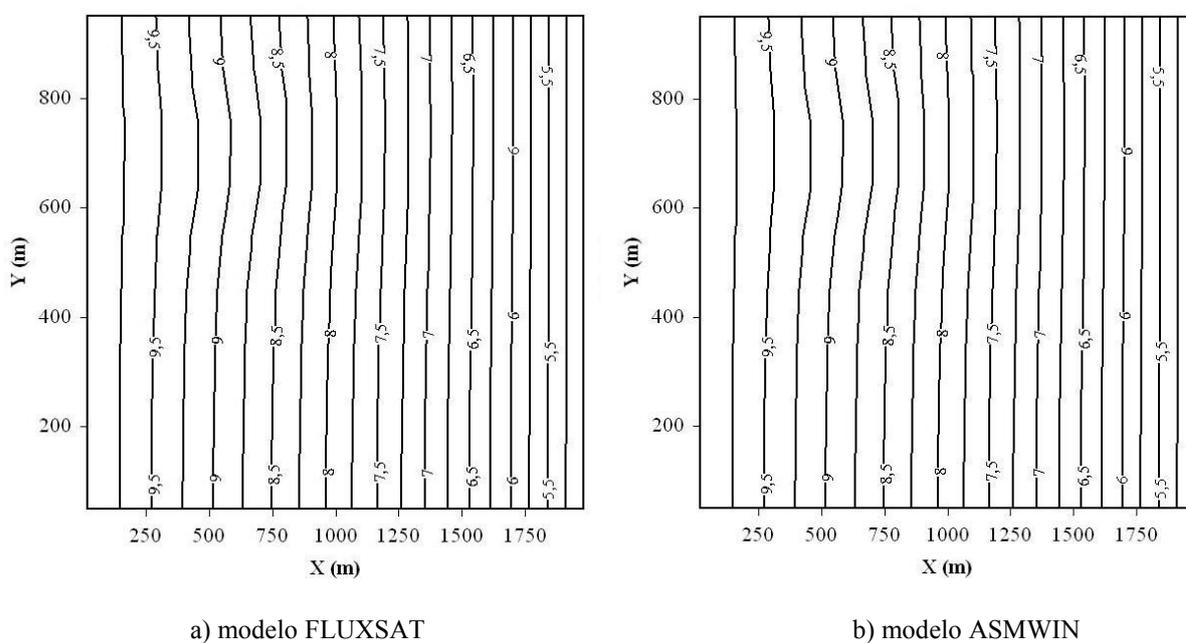


Figura 4.22 Comparação entre os resultados 2D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN
(Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $K_y/K_x = 0,1$; $q = 0,00$ cm/h; $\Delta x = 40$ m; $\Delta y = 20$ m)

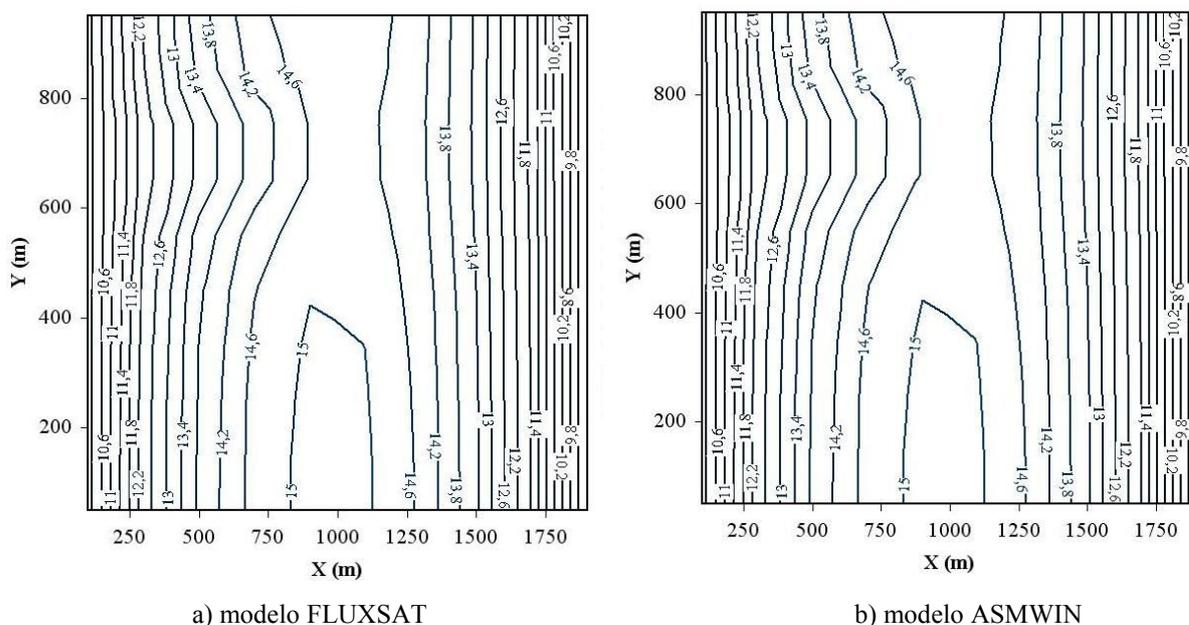


Figura 4.23 Comparação entre os resultados 2D dos modelos FLUXSAT e ASMWIN
(Dados: $K_x = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $K_y/K_x = 0,1$; $q = 500$ mm/ano; $\Delta x = 200$ m; $\Delta y = 100$ m)

A comparação dos resultados dos modelos FLUXSAT e ASMWIN para problemas de fluxo permanente bidimensional em meio poroso saturado mostrou uma boa concordância entre os resultados dos dois modelos. As maiores diferenças (desvios) entre os valores de carga hidráulica obtidos pelos dois modelos foram da ordem de 2 mm para cargas hidráulicas da ordem de 10 m. As diferenças observadas podem novamente ser creditadas ao uso de diferentes métodos numéricos de solução do sistema de equações e à adoção de diferentes critérios de parada, conforme já destacado no item anterior.

Os resultados obtidos novamente confirmaram a adequação da rotina implantada no modelo FLUXSAT para a representação da interação entre a lagoa e o aquífero. Além disso, destaca-se que os testes levaram em consideração valores de recarga diferentes de zero e relação K_y/K_x diferentes da unidade, indicando anisotropia, ou seja, cenários que não foram considerados no item 4.4.1.2, que tratou da comparação entre os modelos FLUXSAT e ASMWIN para problemas unidimensionais.

Finalmente, não foram verificados problemas de propagação de erros numéricos e de tempo de execução na solução numérica de sistemas de equações relativamente grandes com aproximadamente (50 x 50) equações nos testes realizados com o modelo FLUXSAT nesta etapa.

4.3.3 Caso 03 – Problema Tridimensional

Os resultados do modelo FLUXSAT para os problemas de fluxo permanente em meio saturado de natureza tridimensional, como mencionado anteriormente, foram comparados a resultados obtidos a partir do modelo computacional *Groundwater Vistas* (Rumbaugh e Rumbaugh, 2001). O referido modelo constitui um ambiente de modelagem em águas subterrâneas para o sistema operacional *Microsoft Windows* e suporta vários modelos de fluxo e transporte de contaminantes em meio poroso saturado, incluindo os modelos MODFLOW (*versão original*) e o MODFLOW 2000, que tratam do problema de fluxo transiente tridimensional em meio poroso saturado. Destaca-se que os resultados do modelo FLUXSAT foram comparados aos resultados obtidos a partir do modelo MODFLOW (*versão original*), executado dentro do ambiente proporcionado pelo modelo *Groundwater Vistas*.

A comparação entre os resultados dos modelos FLUXSAT e *Groundwater Vistas* para problemas de fluxo tridimensional em meio poroso saturado teve por objetivo verificar o comportamento do modelo FLUXSAT na resolução de problemas de fluxo em meio poroso saturado não homogêneo. Além disso, procurou-se avaliar o desempenho do modelo FLUXSAT para problemas envolvendo aquíferos com geometria irregular.

Em relação à geometria do aquífero livre hipotético foram analisadas duas configurações. A primeira geometria analisada foi representada por um paralelepípedo (ortopedro) de 2 km de comprimento, 1 km de largura e 10 m de espessura, sendo aqui chamada de geometria regular. O número de células utilizadas para representar o comprimento do aquífero foram 10, representando um espaçamento Δx de 200 m. Para a representação da largura do aquífero foram também utilizadas 10 células, representando um espaçamento Δy de 100 m. Finalmente, para a representação da espessura do aquífero foram utilizadas 4 células (4 camadas), representando um espaçamento Δz de 2,5 m. Portanto, o modelo numérico conceitual foi composto por um número total de 400 células.

A segunda geometria analisada foi um pouco mais complexa em relação à primeira e em relação aos problemas de fluxo uni e bidimensionais, como pode ser verificado na Figura 4.24, sendo aqui chamada de geometria irregular. De modo simples, a geometria irregular foi obtida a partir da geometria regular, definindo-se algumas células do modelo numérico conceitual como sendo inativas. A Figura 4.24 representa a configuração das células (ativas e inativas) para uma das camadas e que foi mantida constante para todas as camadas do modelo conceitual do aquífero com geometria irregular.

independentemente da geometria analisada. Considerou-se ainda uma condição de inexistência de recarga.

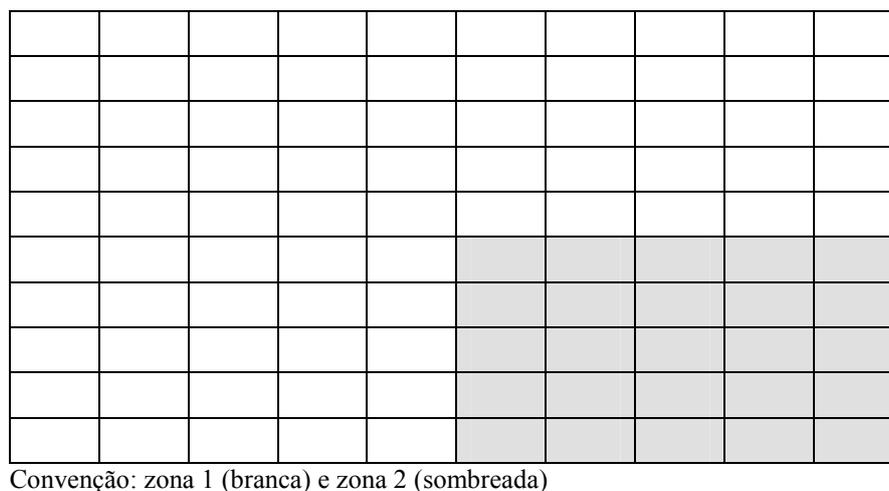


Figura 4.25 Representação esquemática (em planta) da distribuição espacial da condutividade hidráulica (K_x) para a configuração de aquífero heterogêneo usada nos testes relacionados aos problemas de fluxo tridimensional

A combinação das diferentes configurações de geometria e de condutividade hidráulica conduziu a um número total de 6 testes. As Figuras 4.26 a 4.31 resumem os resultados dos testes de comparação entre os modelos FLUXSAT e *Groundwater Vistas* para problemas tridimensionais de fluxo permanente em meio poroso saturado.

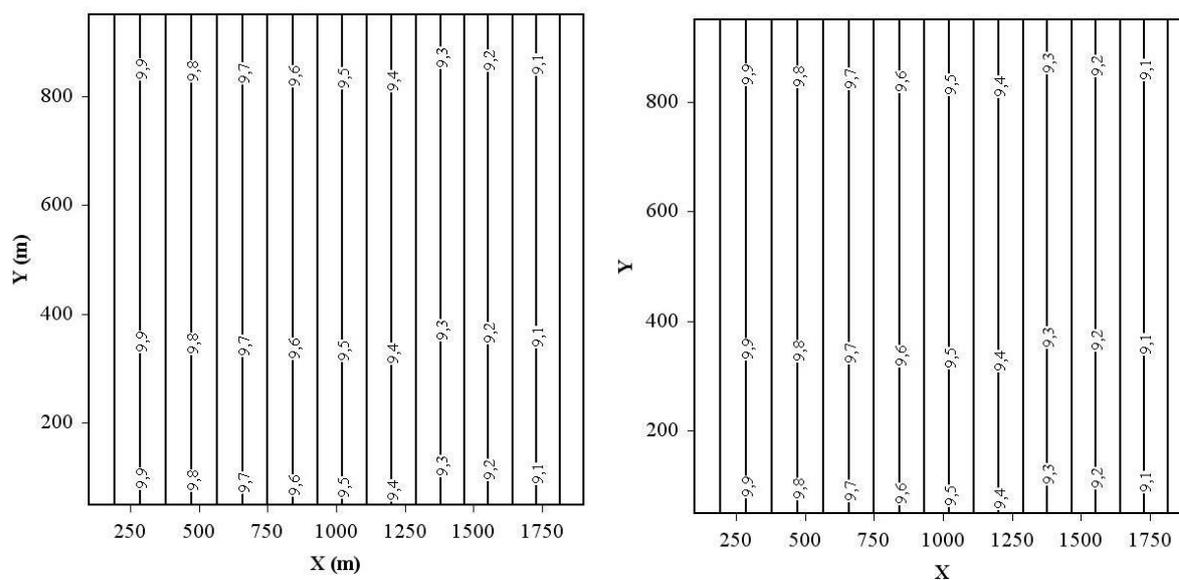


Figura 4.26 Comparação dos resultados 3D dos modelos FLUXSAT e *Groundwater Vistas* (Condições: geometria regular, aquífero homogêneo)

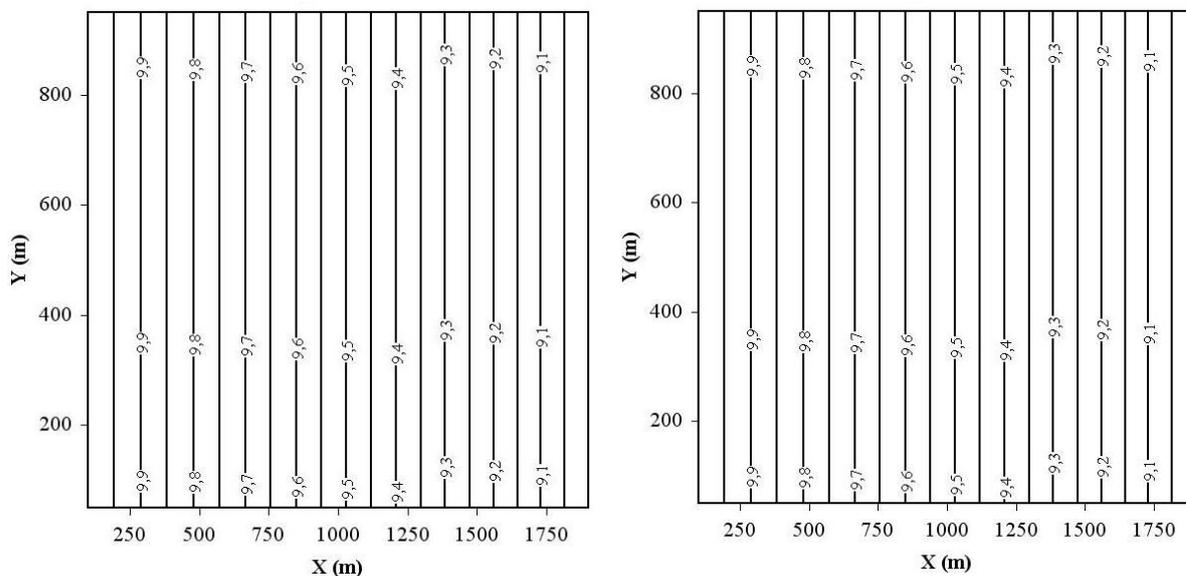


Figura 4.27 Comparação dos resultados 3D dos modelos FLUXSAT e *Groundwater Vistas*
(Condições: geometria regular, aquífero homogêneo por camadas)

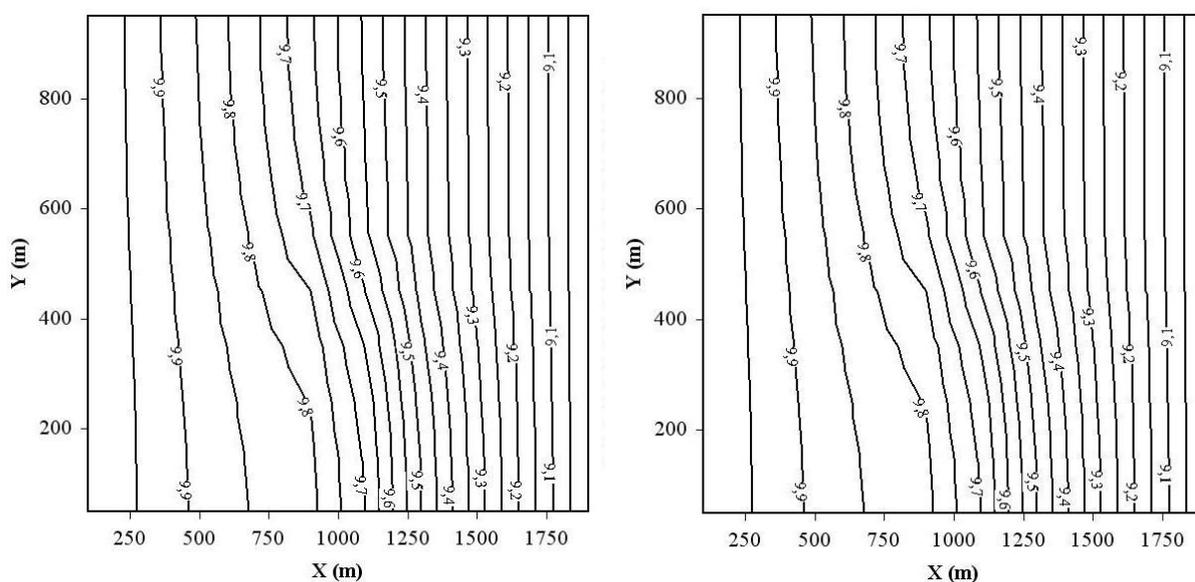


Figura 4.28 Comparação dos resultados 3D dos modelos FLUXSAT e *Groundwater Vistas*
(Condições: geometria regular, aquífero heterogêneo)

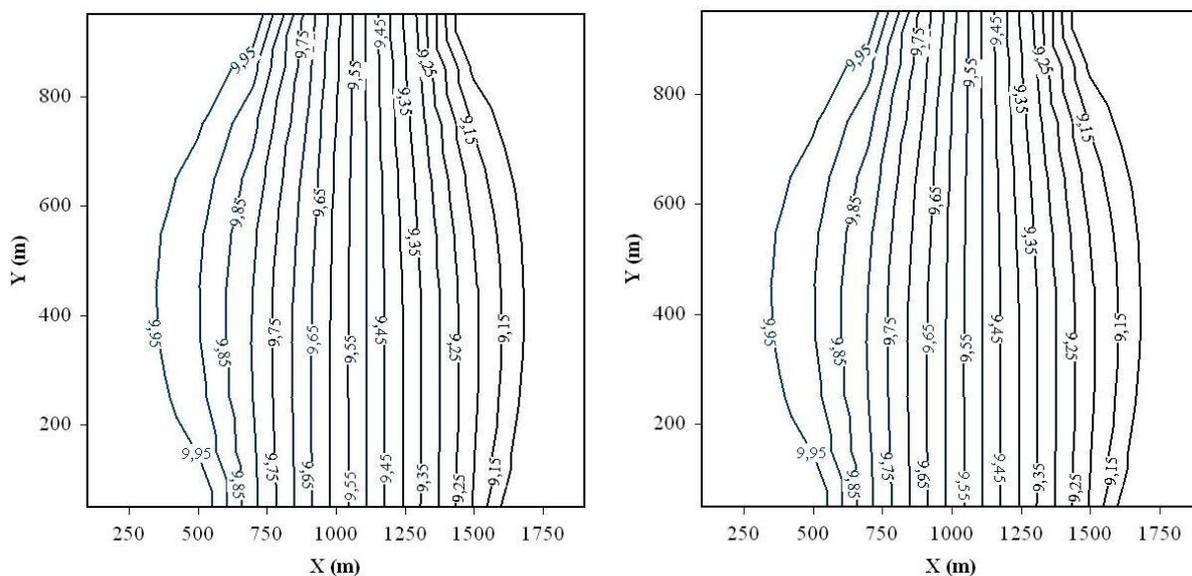


Figura 4.29 Comparação dos resultados 3D dos modelos FLUXSAT e *Groundwater Vistas*
(Condições: geometria irregular, aquífero homogêneo)

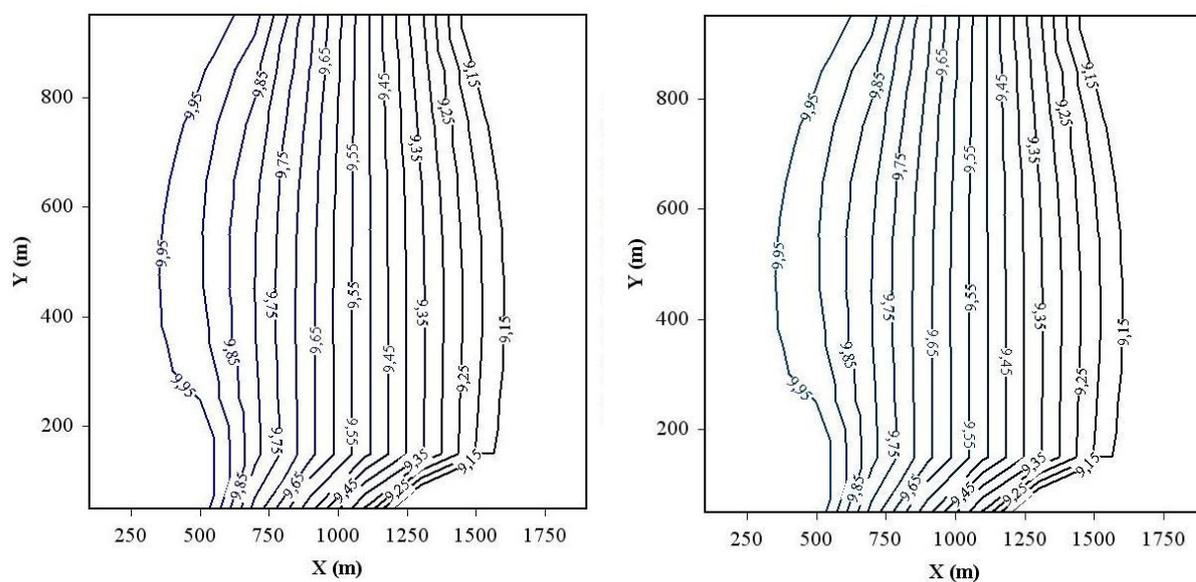


Figura 4.30 Comparação dos resultados 3D dos modelos FLUXSAT e *Groundwater Vistas*
(Condições: geometria irregular, aquífero homogêneo por camadas)

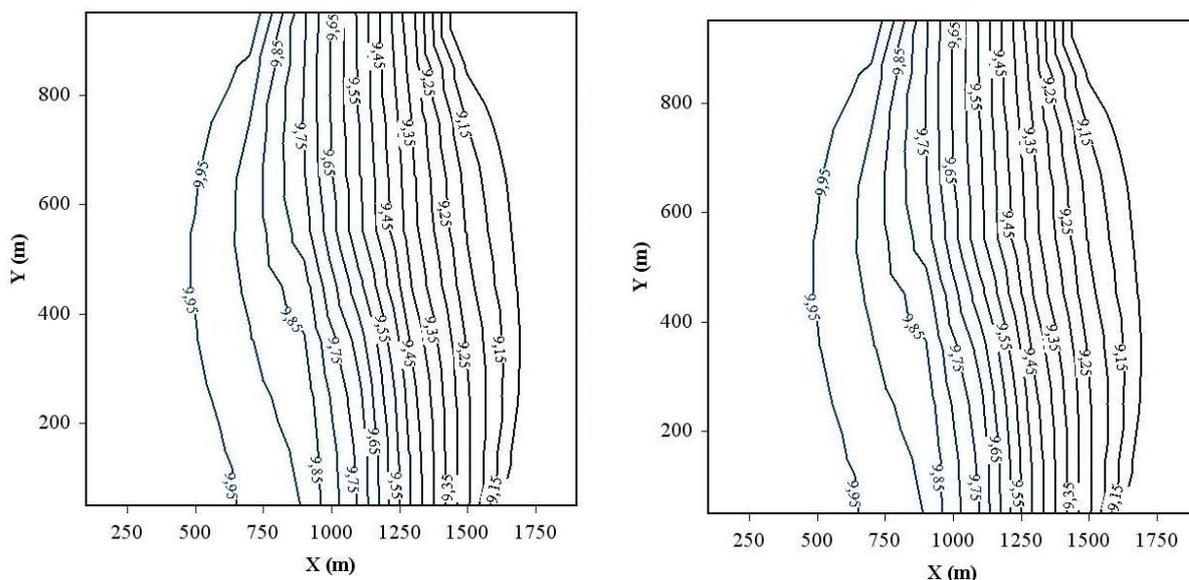


Figura 4.31 Comparação dos resultados 3D dos modelos FLUXSAT e *Groundwater Vistas* (Condições: geometria irregular, aquífero heterogêneo)

As diferenças (desvios) entre os valores de carga hidráulica obtidos pelos dois modelos foram inferiores a 1 mm para cargas hidráulicas da ordem de 10 m. Destaca-se que foi utilizado o mesmo método numérico, método SIP, para a solução do sistema de equações nos dois modelos, FLUXSAT e *Groundwater Vistas*. As diferenças observadas podem ser creditadas a adoção de diferentes aproximações iniciais para a carga hidráulica nas células, bem como, a adoção de diferentes parâmetros de iteração e de relaxação/aceleração de convergência.

Destaca-se também que os resultados apresentados para os problemas de natureza tridimensional foram melhores que os obtidos para os problemas de natureza bidimensional. Isto ocorreu porque se adotou um critério de parada na solução iterativa do sistema de equações mais restritivo no caso tridimensional. A saber, nos problemas uni e bidimensionais, o critério de parada adotado foi a máxima diferença entre cargas hidráulicas em duas iterações consecutivas inferior a 10^{-4} m, enquanto nos problemas tridimensionais, adotou-se 10^{-5} m, como critério de parada.

Os resultados obtidos mostraram a adequação do modelo FLUXSAT para a solução de problemas de natureza tridimensional, inclusive considerando-se condições de aquífero heterogêneo e de geometria irregular.

4.4 AVALIAÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL DE TRANSPORTE EM MEIO SATURADO

O problema de transporte em meio poroso saturado e sua solução numérica foram apresentados e discutidos no item 4.2. Com base no exposto no referido item, desenvolveu-se um modelo computacional em linguagem FORTRAN, denominado TRANSPSAT, para simular as condições de transporte tridimensional em meio poroso saturado sob regime permanente.

O modelo computacional TRANSPSAT também foi avaliado através de testes computacionais envolvendo alguns problemas de transporte em meio saturado de natureza unidimensional e bidimensional, considerando-se o regime de fluxo permanente. Os resultados do modelo TRANSPSAT para os problemas de natureza unidimensional foram comparados aos resultados obtidos a partir de solução analítica. No caso dos problemas de natureza bidimensional, os resultados do modelo TRANSPSAT foram comparados aos resultados obtidos a partir do modelo computacional *Groundwater Vistas* (Rumbaugh e Rumbaugh, 2001).

4.4.1 Caso 01 – Problema Unidimensional

Os resultados do modelo TRANSPSAT para os problemas de transporte em meio saturado de natureza unidimensional e sob regime de fluxo permanente, como mencionado anteriormente, foram comparados aos resultados obtidos a partir de solução analítica. Os testes foram realizados principalmente com o objetivo de analisar a sensibilidade do modelo TRANSPSAT às discretizações espacial (Δx) e temporal (Δt).

O problema básico analisado foi o problema de transporte unidimensional em um aquífero livre sob regime de fluxo permanente, sem consideração de recarga e com um valor de concentração constante em um dos extremos do aquífero. A adoção desse problema relativamente simples permitiu também avaliar o desempenho do método das características modificado (MMOC) na solução numérica do problema de transporte em meio poroso saturado.

Existem, na literatura técnica, textos clássicos que tratam da solução analítica de problemas particulares de transporte unidimensional de contaminantes na fase dissolvida em meio poroso saturado, como, por exemplo, Javandel *et al.* (1984), Marsily (1986), Bear e Verruijt (1987), Charbeneau (2000) e Zheng e Bennett (2002).

A solução analítica de um problema de transporte unidimensional de contaminantes em fase dissolvida em meio poroso saturado sob regime de fluxo permanente, tendo, por condição de contorno, uma concentração constante ao longo do tempo em uma das extremidades do aquífero, pode ser obtida a partir de Charbeneau (2000), sendo expressa por:

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - v^* t}{2\sqrt{D^* t}} \right) + \exp \left(\frac{xv^*}{D^*} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x + v^* t}{2\sqrt{D^* t}} \right) \right] \quad (4.70)$$

onde: C = concentração do contaminante na fase dissolvida [ML^{-3}];

C_0 = concentração na fonte do contaminante na fase dissolvida [ML^{-3}];

x = distância da fonte ao longo do eixo coordenado x [L];

t = tempo [T];

$v^* = v/R$ [LT^{-1}];

v = velocidade média na escala do poro na direção do eixo coordenado x [LT^{-1}];

R = coeficiente de retardo [adimensional];

$D^* = D/R$ [L^2T^{-1}];

D = coeficiente de dispersão hidrodinâmica [L^2T^{-1}];

$\operatorname{erfc}(\cdot)$ = função erro complementar e $\exp(\cdot)$ = função exponencial.

Os valores de C , obtidos a partir da Equação 4.70, foram calculados utilizando-se o algoritmo apresentado em Javandel *et al.* (1984), que prevê dificuldades numéricas no cálculo da função $\operatorname{erfc}(\cdot)$ e no cálculo do produto das funções $\operatorname{erfc}(\cdot)$ e $\exp(\cdot)$. A solução analítica, definida pela Equação 4.70, foi utilizada para a análise do desempenho do método das características modificado (MMOC), implementado no modelo computacional TRANSPSAT, na solução de problemas de natureza unidimensional, como apresentado a seguir.

4.4.1.1 Análise de sensibilidade à discretização espacial (Δx)

Os testes para a análise de sensibilidade à discretização espacial (Δx) foram estabelecidos a partir de soluções analíticas encontradas em Javandel *et al.* (1984). No referido trabalho são apresentadas tabelas contendo valores de concentração obtidos a partir da solução analítica para diferentes combinações de parâmetros, tais como: comprimento do aquífero (L), velocidade do fluxo (v), coeficiente de dispersão (D) e coeficiente de retardo (R).

Os testes foram então definidos a partir de algumas combinações de comprimento do aquífero (L), velocidade do fluxo (v), coeficiente de dispersividade longitudinal (α_L), coeficiente de retardo (R) e espaçamento (Δx), procurando representar diferentes situações de dominância em relação aos mecanismos de transporte do contaminante no meio saturado. O coeficiente de dispersão (D) foi obtido a partir dos valores de V e α_L e das Equações 4.59, particularizadas para o caso unidimensional e considerando-se desprezível o coeficiente de difusão molecular (D_m). A Tabela 4.1 apresenta os valores dos parâmetros relacionados acima e que foram utilizados nos testes de análise de sensibilidade à discretização espacial (Δx).

Tabela 4.1 Valores dos parâmetros usados nos testes de comparação entre o modelo TRANSPSAT e a solução analítica de problemas de transporte unidimensionais

Parâmetro	Símbolo	Unidade	Valores usados
Comprimento do aquífero	L	m	100; 500
Discretização espacial	Δx	m	2; 5; 10 10; 25; 50
Discretização temporal	Δt	dia	0,71; 2,85; 5,70 11,41; 45,63; 91,25
Velocidade	V	m/dia	0,01; 0,1; 1
Dispersividade longitudinal	α_L	m	1; 10; 50
Coeficiente de dispersão	D	m^2/dia	0,01; 0,1; 0,5 1; 5; 10; 50
Coeficiente de retardo	R	---	1; 2

A partir dos valores apresentados na Tabela 4.1, foram estabelecidas combinações de parâmetros que deram origem a um total de 18 testes para analisar a sensibilidade em relação à discretização espacial (Δx). Os valores de Δt , apresentados na Tabela 4.1, foram definidos de tal forma a permitir que houvesse convergência na solução numérica para os diferentes valores de Δx utilizados em um mesmo teste. Adicionalmente, foram considerados sempre submúltiplos do ano.

As Figuras 4.32 a 4.37 mostram alguns dos resultados dos testes realizados para a análise de sensibilidade à discretização espacial (Δx) do modelo TRANSPSAT na solução numérica de problemas de transporte unidimensional em meio saturado sob regime de fluxo permanente. As curvas de concentração apresentadas nas referidas figuras são sempre relativas aos pontos $x = L/2$ e $x = L$.

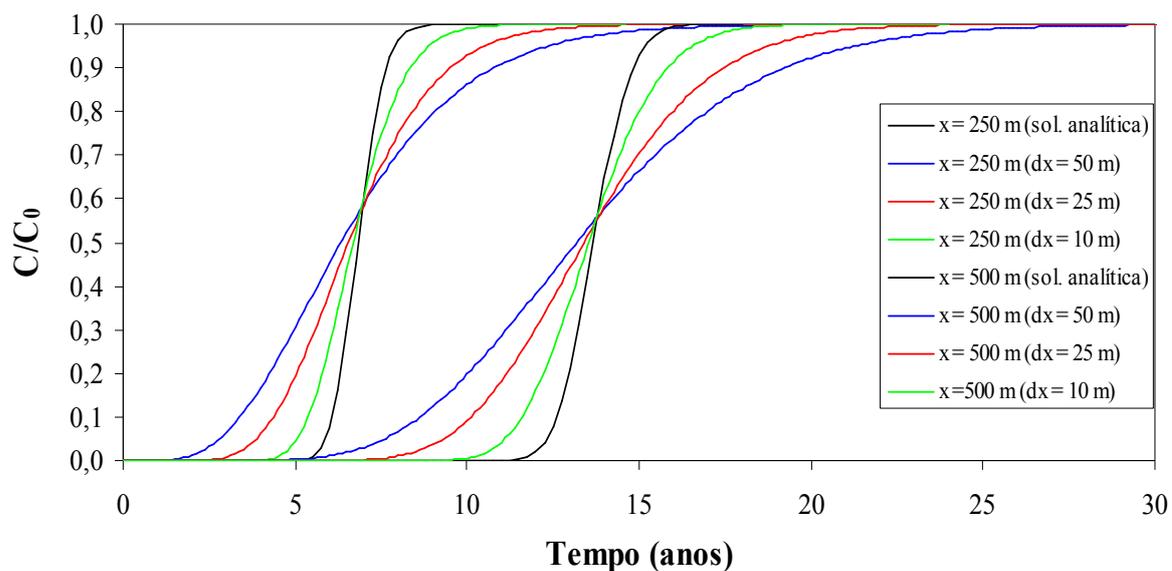


Figura 4.32 Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $v = 0,1$ m/dia; $\alpha_L = 1$ m; $D = 0,1$ m²/dia; $\Delta t = 45,63$ dias; $R = 1$)

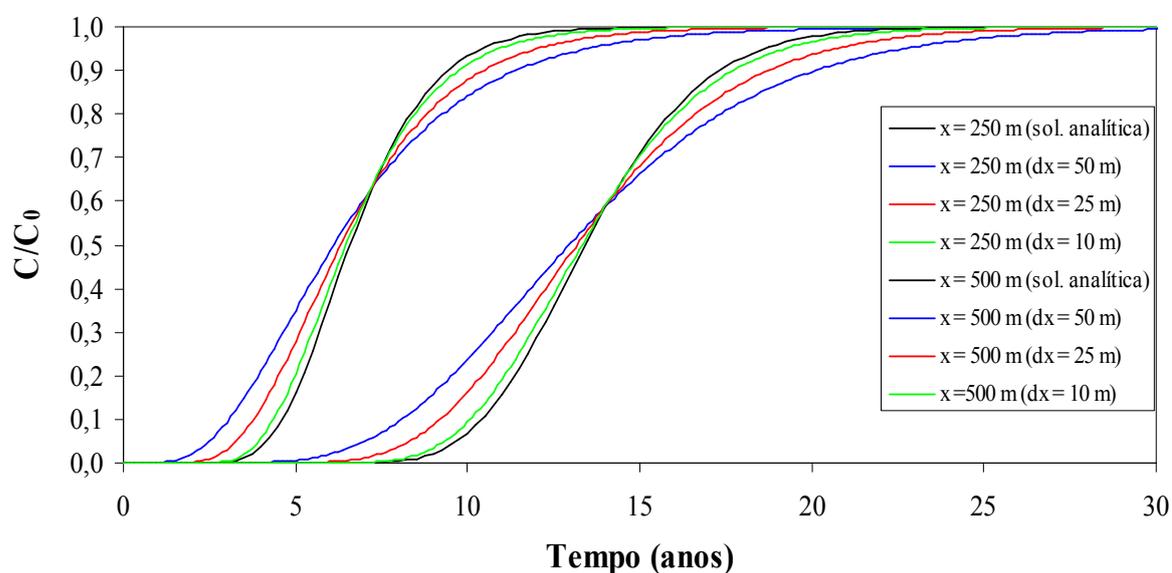


Figura 4.33 Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $v = 0,1$ m/dia; $\alpha_L = 10$ m; $D = 1,0$ m²/dia; $\Delta t = 45,63$ dias; $R = 1$)

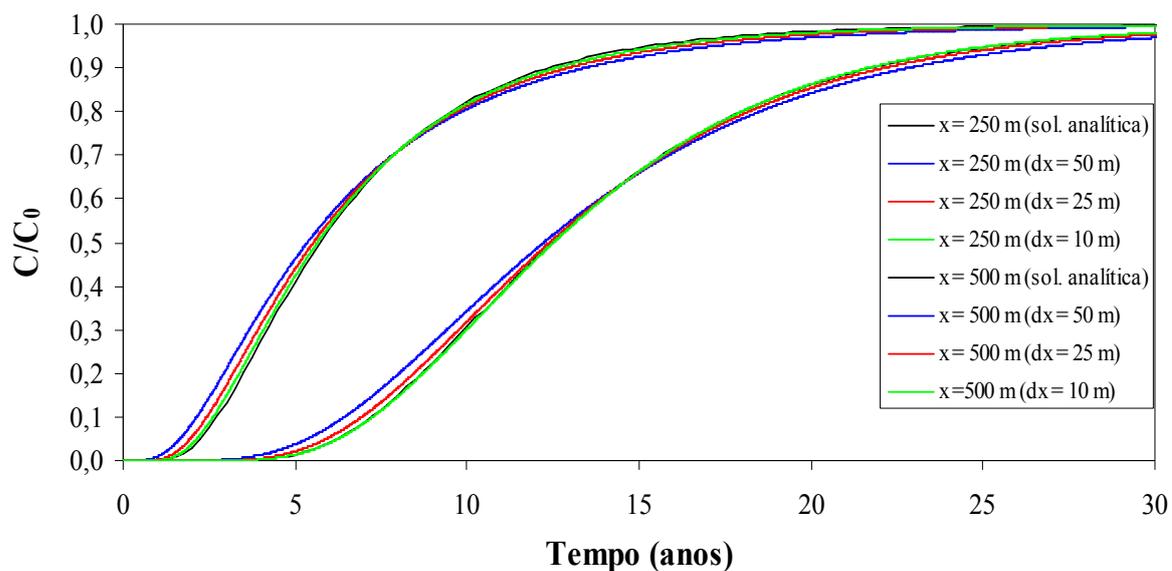


Figura 4.34 Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $v = 0,1$ m/dia; $\alpha_L = 50$ m; $D = 5,0$ m²/dia; $\Delta t = 5,70$ dias; $R = 1$)

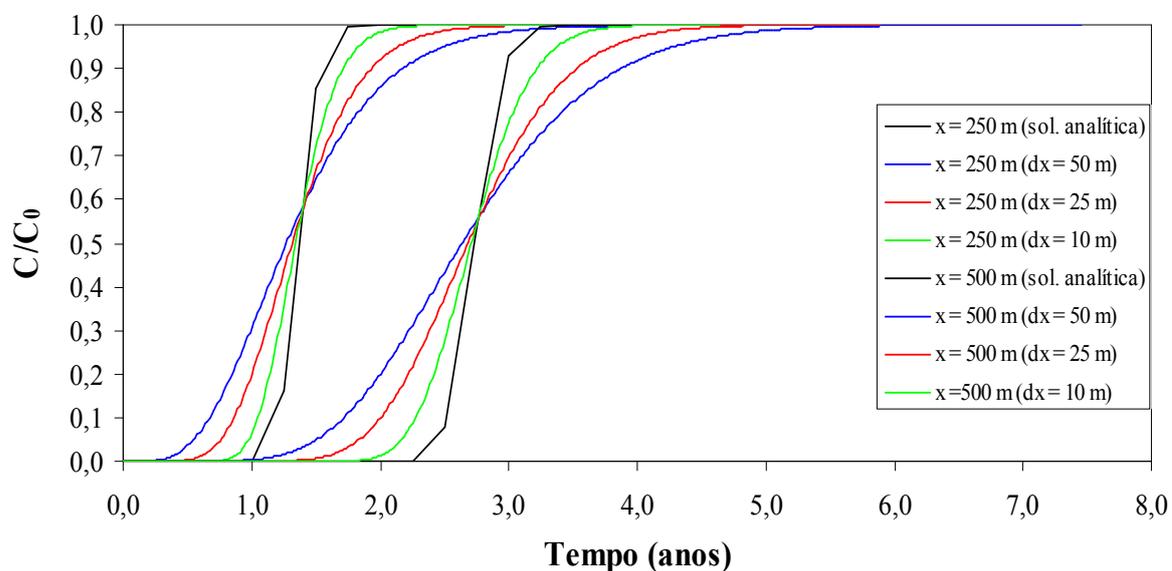


Figura 4.35 Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $v = 1,0$ m/dia; $\alpha_L = 1$ m; $D = 1,0$ m²/dia; $\Delta t = 5,70$ dias; $R = 2$)

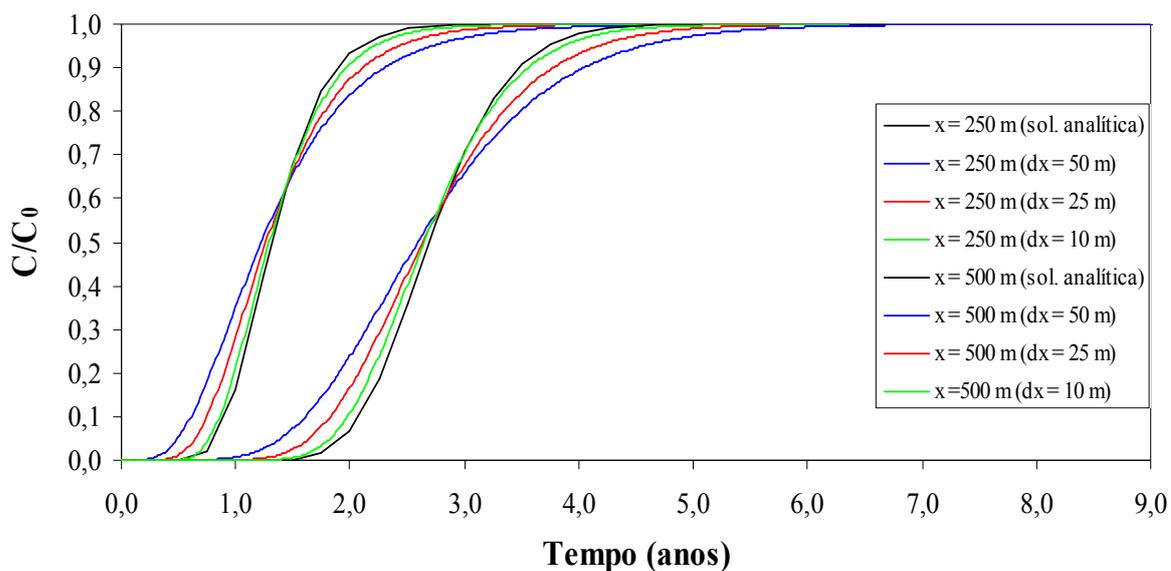


Figura 4.36 Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $v = 1,0$ m/dia; $\alpha_L = 10$ m; $D = 10,0$ m²/dia; $\Delta t = 5,70$ dias; $R = 2$)

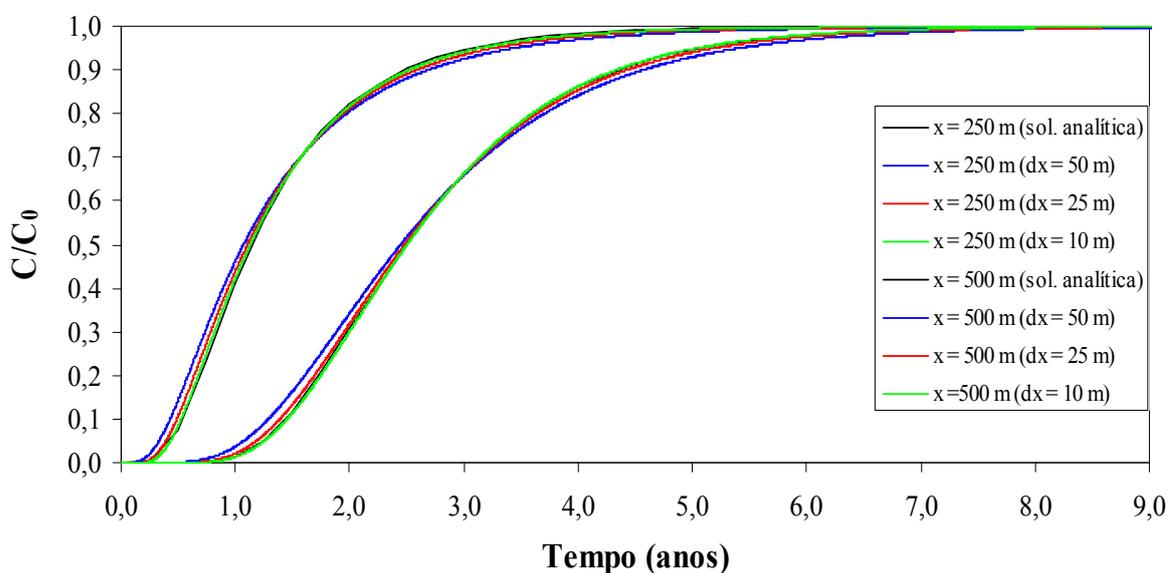


Figura 4.37 Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $v = 1,0$ m/dia; $\alpha_L = 50$ m; $D = 50,0$ m²/dia; $\Delta t = 1,43$ dias; $R = 2$)

Inicialmente, para a análise dos resultados, procurou-se estabelecer os números de Peclet (Pe) e Courant (Cr), bem como, o produto entre eles para cada um dos testes realizados. Os números de Peclet (Pe) e Courant (Cr) foram introduzidos no item 3.4.1, quando foram discutidos critérios de estabilidade numérica na solução numérica de problemas de transporte em meio poroso não saturado e são definidos, respectivamente, pelas Equações 3.44 e 3.45. Explicação teórica sobre o significado dos números de Peclet (Pe) e de Courant (Cr) pode ser encontrada em Marsilly (1986) e Perrochet e Berod (1993).

De modo sucinto, pode-se afirmar que o número de Peclet (Pe), a partir da sua definição pela Equação 3.44, expressa a dominância do processo responsável pelo transporte do contaminante no meio saturado. Valores altos de Pe indicam a dominância do processo de advecção, enquanto valores baixos de Pe indicam dominância do processo de dispersão.

Em relação ao número de Courant (Cr), pode-se afirmar, a partir da sua definição pela Equação 3.45 e segundo Perrochet e Bérod (1993), que o mesmo expressa a razão entre a distância percorrida por uma partícula em um intervalo de tempo (Δt), devido somente ao processo de advecção, e a discretização espacial (Δx) adotada na definição do esquema numérico.

Crítérios de convergência discutidos em Noorishad *et al.* (1992) e Perrochet e Bérod (1993) sugerem, para os números de Peclet (Pe) e Courant (Cr) e para o produto entre eles (PeCr), as seguintes restrições: $Pe \leq 2$; $Cr \leq 1$; $PeCr \leq 2$.

Nos testes realizados para a análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx), o número de Peclet (Pe) variou entre 0,04 e 50; o número de Courant (Cr) variou entre $2,85 \times 10^{-3}$ e $4,56 \times 10^{-1}$; e o produto entre eles (PeCr) variou entre $5,70 \times 10^{-4}$ e 4,56. Verificou-se, portanto, que as restrições para Pe, Cr e PeCr não foram respeitadas em alguns dos testes realizados, principalmente em relação ao número de Peclet (Pe). Este fato ajuda a explicar, por exemplo, os resultados apresentados nas Figuras 4.32 e 4.35, onde os números de Peclet (Pe) são superiores aos limites sugeridos e onde se observam frentes abruptas de contaminação.

Zheng e Bennett (2002) discutem as vantagens e desvantagens relativas às técnicas mais utilizadas na solução de problemas de transporte em meio poroso saturado. Os referidos autores destacam que o método das características modificado (MMOC) não é o mais indicado para problemas envolvendo frentes abruptas de contaminação, ou seja, problemas dominados pelo processo de advecção e com números de Peclet (Pe) altos. Em razão da discussão anterior sobre a restrição sugerida ao número de Peclet (Pe), pode-se inferir que o método MMOC não deveria mesmo representar adequadamente os testes realizados com valores de Pe relativamente altos, como os apresentados nas Figuras 4.32 e 4.35.

Avaliando os testes realizados para a análise da sensibilidade à discretização espacial (Δx), verificou-se que os resultados do modelo TRANSPSAT em comparação aos resultados da solução analítica confirmam a discussão apresentada quanto às restrições aos valores de Pe e Cr , ou seja, os testes com valores de Pe relativamente altos, onde o processo de advecção é dominante, foram aqueles que apresentaram os piores resultados. Observou-se também que o refinamento da malha com a adoção de valores de Δx cada vez menores faz com que a solução numérica se aproxime da solução analítica. Isto se deve ao fato de que a adoção de um valor menor para Δx acarreta em diminuição do valor de Pe .

4.4.1.2 Análise da sensibilidade à discretização temporal (Δt)

Os testes para a análise de sensibilidade à discretização temporal (Δt) utilizaram basicamente o mesmo conjunto de parâmetros usados na análise de sensibilidade à discretização espacial (Δx), apresentados na Tabela 4.1. Novamente, definiu-se um total de 18 testes para analisar a sensibilidade em relação à discretização temporal (Δt).

A diferença básica entre os dois tipos de análise refere-se à sistemática dos testes. Na análise de sensibilidade à Δx , o valor de Δt foi mantido constante para um mesmo teste e variou-se o valor de Δx . Já para a análise de sensibilidade à Δt , considerou-se um valor de Δx constante para um mesmo teste e procurou-se variar o valor de Δt . Como regras gerais, estabeleceu-se:

- adotar como discretização espacial (Δx) um valor sempre igual a 10% do comprimento (L), ou seja, $\Delta x = L/10$;
- analisar três valores de Δt . O maior Δt foi definido com sendo aproximadamente o máximo valor que possibilita a convergência numérica da solução, considerando-se o algoritmo implementado no modelo TRANSPSAT. Os outros dois valores foram obtidos dividindo o maior valor de Δt pelos fatores 2 e 5.

As Figuras 4.38 a 4.43 mostram alguns dos resultados dos testes realizados para a análise de sensibilidade à discretização temporal (Δt) do modelo TRANSPSAT na solução numérica de problemas de transporte unidimensional em meio saturado sob regime de fluxo permanente. As curvas de concentração apresentadas novamente referem-se sempre aos pontos $x = L/2$ e $x = L$.

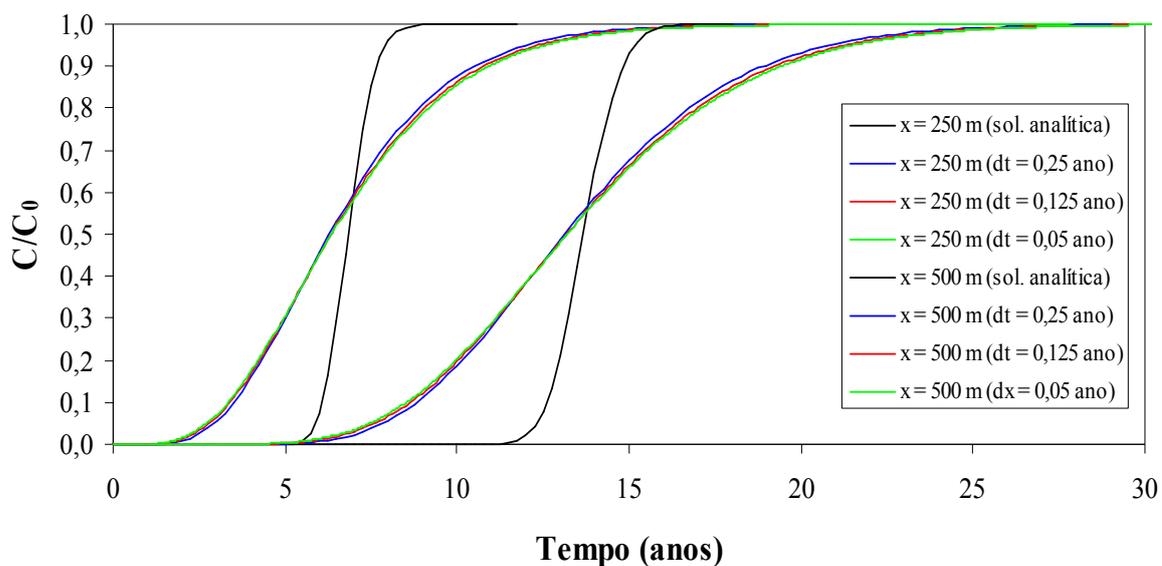


Figura 4.38 Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $\Delta x = 50$ m; $v = 0,1$ m/dia; $\alpha_L = 1$ m; $D = 0,1$ m²/dia; $R = 1$)

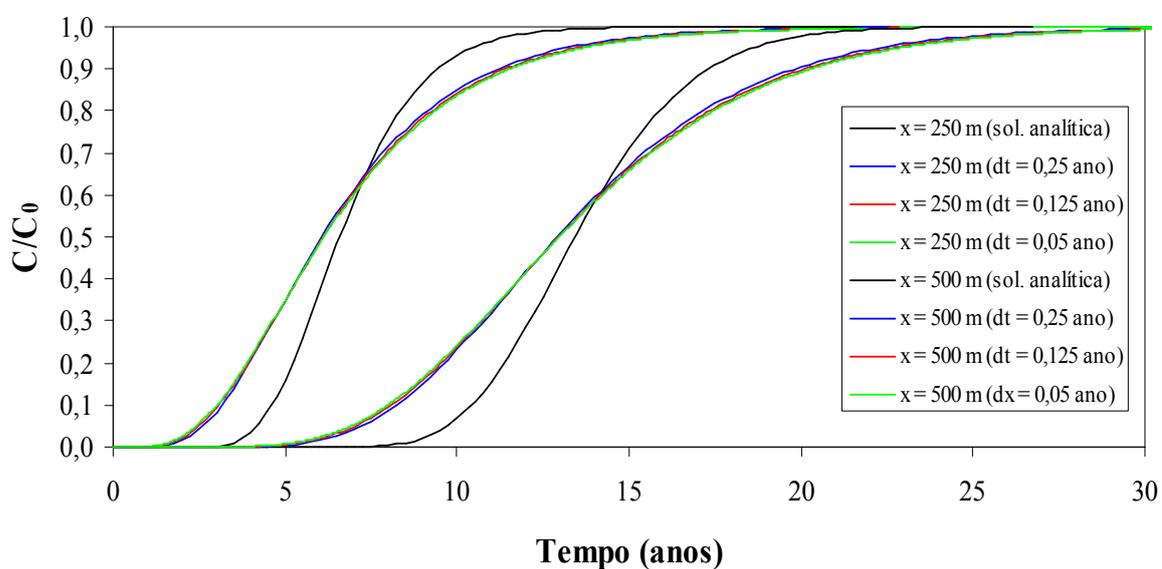


Figura 4.39 Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $\Delta x = 50$ m; $v = 0,1$ m/dia; $\alpha_L = 10$ m; $D = 1,0$ m²/dia; $R = 1$)

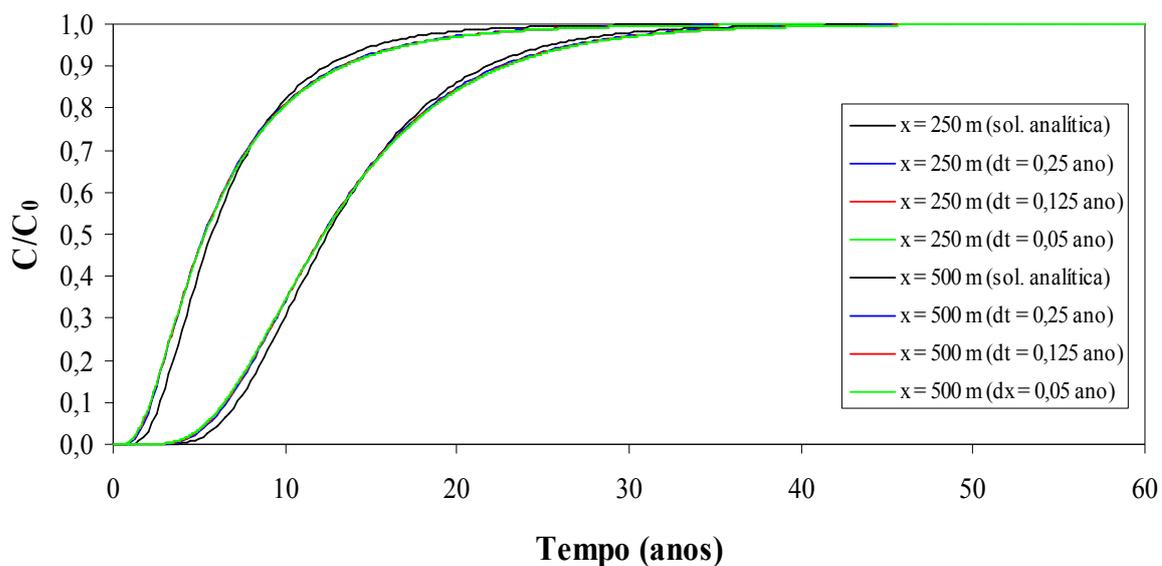


Figura 4.40 Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $\Delta x = 50$ m; $v = 0,1$ m/dia; $\alpha_L = 50$ m; $D = 5,0$ m²/dia; $R = 1$)

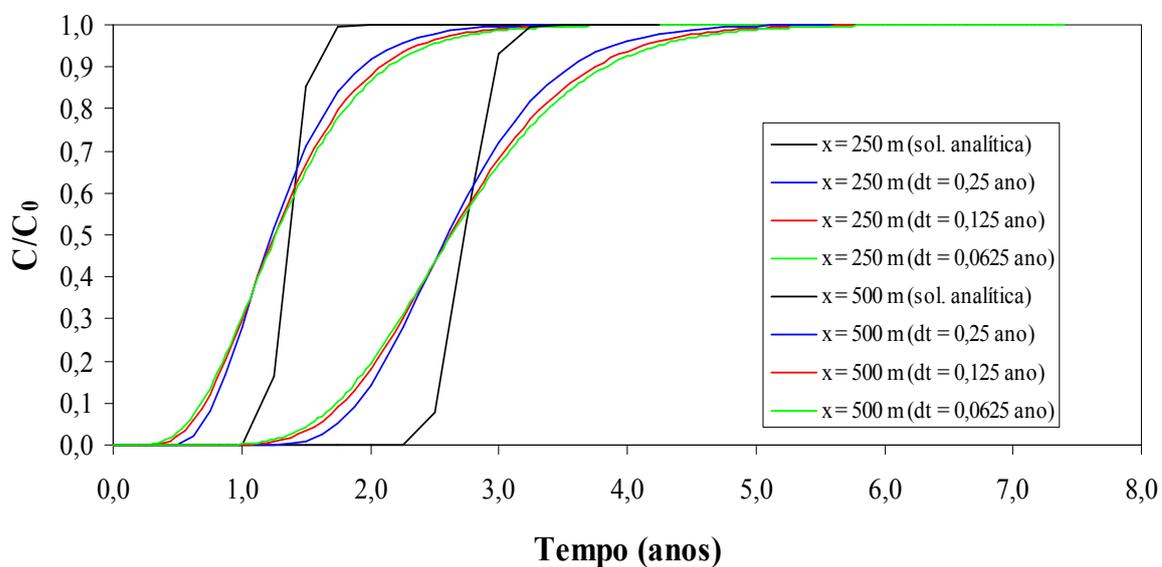


Figura 4.41 Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $\Delta x = 50$ m; $v = 1,0$ m/dia; $\alpha_L = 1$ m; $D = 1,0$ m²/dia; $R = 2$)

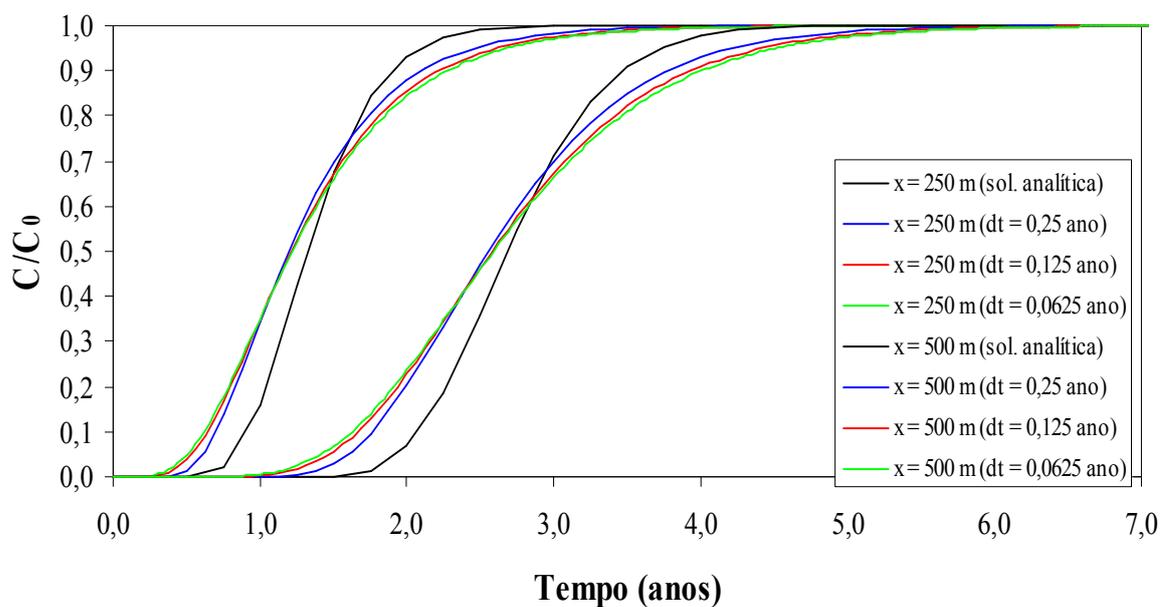


Figura 4.42 Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $\Delta x = 50$ m; $v = 1,0$ m/dia; $\alpha_L = 10$ m; $D = 10,0$ m²/dia; $R = 2$)

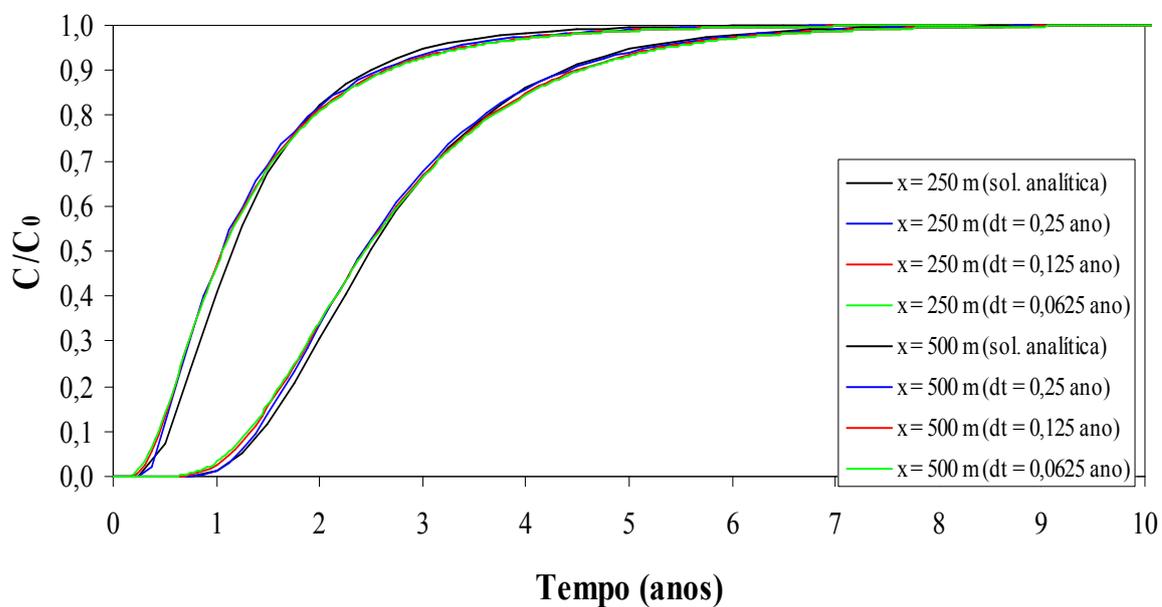


Figura 4.43 Análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt) para o problema de transporte unidimensional em meio poroso saturado (Condições: $L = 500$ m; $\Delta x = 50$ m; $v = 1,0$ m/dia; $\alpha_L = 50$ m; $D = 50,0$ m²/dia; $R = 2$)

Novamente, para a análise dos resultados, calculou-se inicialmente os números de Peclet (Pe) e Courant (Cr), bem como, o produto entre eles para cada um dos testes realizados. Conforme já mencionado no item anterior, os números de Peclet (Pe) e Courant (Cr) foram introduzidos no item 3.4.1, quando foram discutidos critérios de estabilidade numérica na solução numérica de problemas de transporte em meio poroso não saturado e são definidos, respectivamente, pelas Equações 3.44 e 3.45.

Critérios de convergência discutidos em Noorishad *et al.* (1992) e Perrochet e Bérod (1993) sugerem, para os números de Peclet (Pe) e de Courant (Cr) e para o produto entre eles (PeCr), as seguintes restrições: $Pe \leq 2$; $Cr \leq 1$; $PeCr \leq 2$.

Nos testes realizados para a análise de sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt), o número de Peclet (Pe) variou entre 0,2 e 50; o número de Courant (Cr) variou entre $1,14 \times 10^{-2}$ e $4,56 \times 10^{-1}$; e o produto entre eles (PeCr) variou entre $3,65 \times 10^{-3}$ e 22,8. Verifica-se, portanto, que estes limites não foram respeitados em alguns dos testes realizados, principalmente em relação ao número de Peclet (Pe). Este fato ajuda a explicar, por exemplo, os resultados apresentados nas Figuras 4.38 e 4.41, onde os números de Peclet (Pe) são superiores aos limites sugeridos.

De modo geral, analisando-se os testes referentes à análise da sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização temporal (Δt), verificou-se novamente que os resultados do modelo em comparação aos resultados da solução analítica confirmam a discussão apresentada quanto às restrições aos valores de Pe e Cr, ou seja, os testes com valores de Pe relativamente altos, onde o processo de advecção é dominante, foram aqueles que apresentaram os piores resultados. Verificou-se também que adoção de valores de Δt cada vez menores não implica necessariamente em melhores resultados. Isto se deve ao fato de que a adoção de valores menores para Δt pode provocar um maior amortecimento numérico.

4.4.2 Caso 02 – Problema Bidimensional

Os resultados do modelo TRANSPSAT para problemas de transporte bidimensional, conforme mencionado anteriormente, foram comparados aos resultados obtidos a partir do modelo computacional *Groundwater Vistas* (Rumbaugh e Rumbaugh, 2001).

Inicialmente foram estabelecidos alguns critérios em relação ao fluxo para a obtenção das velocidades de Darcy e dos níveis do lençol freático. Adotou-se uma grade de dimensões 2 km (sentido x) e 1 km (sentido y). Foram utilizadas 10 células em ambas as direções, o que implica em Δx e Δy iguais a 200 m e 100 m, respectivamente.

As condições de contorno usadas foram níveis constantes nos extremos do aquífero. Os níveis adotados foram $h(x = 0 \text{ m}) = 10 \text{ m}$ e $h(x = 2000 \text{ m}) = 9 \text{ m}$. Além disso, considerou-se o aquífero como homogêneo e isotrópico e foram testados dois valores de condutividade hidráulica, $9,22 \times 10^{-5} \text{ m/s}$ e $2,70 \times 10^{-6} \text{ m/s}$. Finalmente, considerou-se a recarga nula.

A partir das definições quanto ao fluxo, utilizou-se o modelo FLUXSAT para calcular as velocidades de Darcy e os níveis do lençol freático para serem usados pelo modelo TRANSPSAT na solução do problema de transporte. Já no caso do modelo *Groundwater Vistas* (Rumbaugh e Rumbaugh, 2001), que constitui um ambiente integrado com diferentes modelos de fluxo e transporte, adotou-se a versão original do modelo MODFLOW (McDonald e Harbaugh, 1988) para o fluxo e o modelo MT3D (Zheng, 1990) para o transporte.

A Tabela 4.2 apresenta resumidamente os valores dos parâmetros utilizados nos testes para a comparação entre os resultados do modelo FLUXSAT e do modelo *Groundwater Vistas* na solução de problemas bidimensionais de transporte.

Tabela 4.2 Valores dos parâmetros utilizados nos problemas de transporte bidimensionais

Parâmetro	Símbolo	Unidade	Valor adotado
Porosidade	ϕ	---	0,4
Densidade dos grãos do solo	ρ_s	kg/m ³	2.650
Coefficiente de partição do contaminante em relação ao carbono orgânico	K_{oc}	m ³ /kg	0,1
Fração de carbono orgânico na matriz do solo	f_{oc}	%	0; 0,252 e 1,006
Coefficiente de difusão molecular do contaminante na fase aquosa	D_m	m ² /dia	$1,44 \times 10^{-6}$
Coefficiente de dispersividade longitudinal	α_L	m	5 e 50

Os valores de f_{oc} foram escolhidos de modo a resultar em valores de coeficiente de retardo (R) iguais a 1, 2 e 5. Além dos valores apresentados na Tabela 4.2, adotou-se um valor de coeficiente de dispersividade transversal (α_T) da ordem de um décimo do valor adotado para o coeficiente de dispersividade longitudinal (α_L). Finalmente, considerou-se um horizonte de simulação de 30 anos e uma discretização temporal de 1 dia.

Considerando-se os diferentes valores de K , α_L e f_{oc} adotados, foram definidos 12 testes para a comparação entre os resultados do modelo TRANSPSAT e do modelo *Groundwater Vistas* na solução de problemas bidimensionais de transporte.

A fonte de contaminação foi considerada como constante e apresentando um valor unitário, sendo localizada espacialmente como representado na Figura 4.44.

As Figuras 4.45 a 4.48 mostram alguns resultados dos testes de comparação dos modelos TRANSPSAT e *Groundwater Vistas* na solução de problemas de transporte bidimensional.

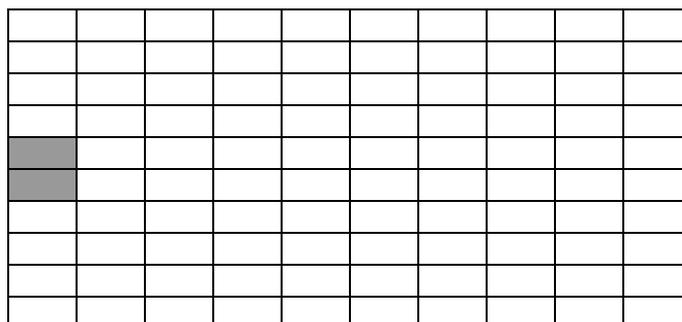


Figura 4.44 Localização da fonte de contaminação nos testes de transporte bidimensional

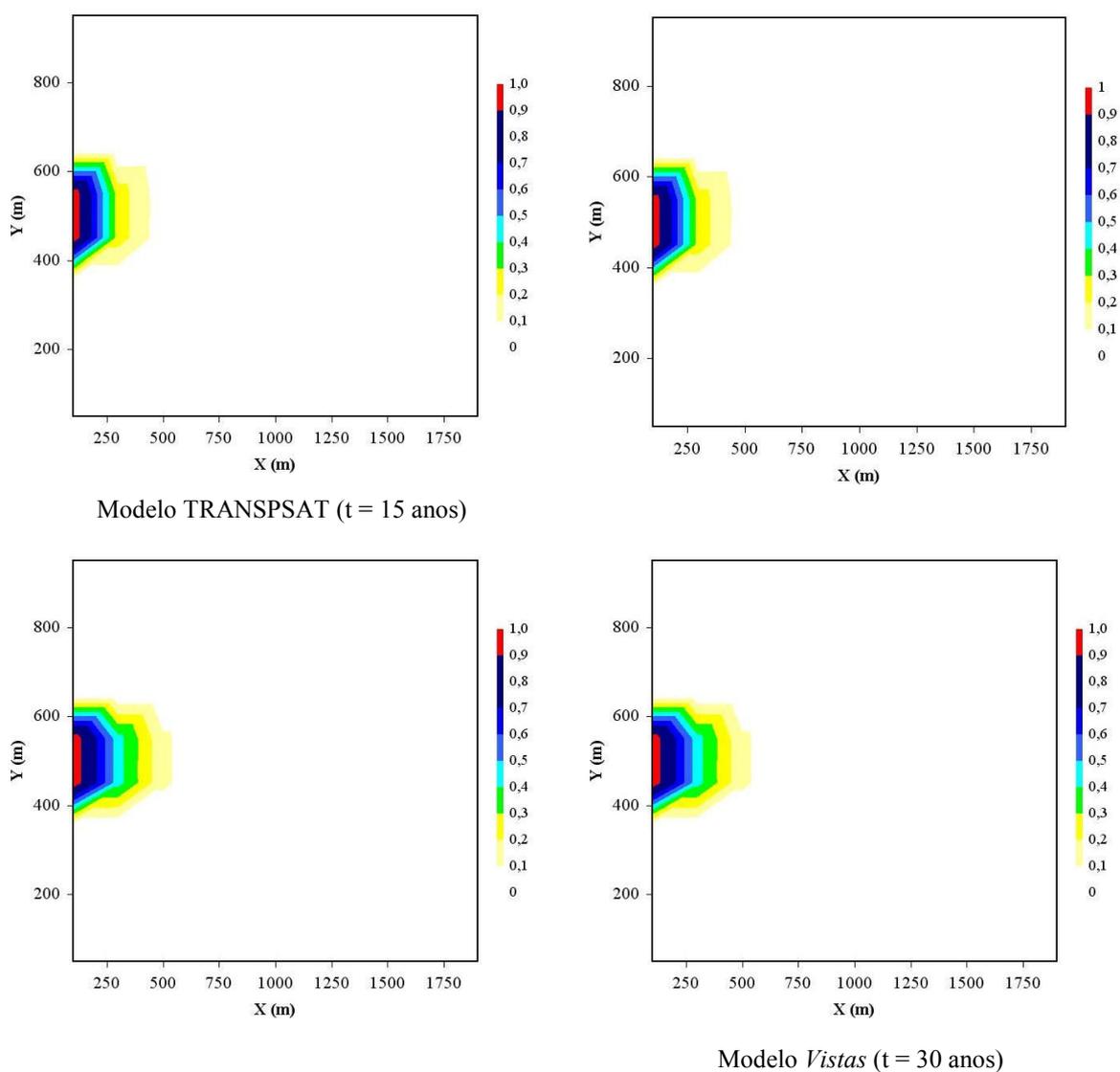


Figura 4.45 Comparação dos resultados dos modelos TRANSPSAT e *Groundwater Vistas* na solução de problemas bidimensionais de transporte (Condições: $K = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $\alpha_L = 5$ m; $f_{oc} = 0$ %)

Verifica-se, a partir das plumas apresentadas na Figura 4.45, que os resultados obtidos pelo uso dos modelos TRANSPSAT e *Groundwater Vistas* foram, do ponto de vista qualitativo, próximos entre si para o caso em análise. Considerando-se o conjunto dos 12 testes efetuados, o teste cujos resultados são apresentados na Figura 4.45 é o que representa a situação em que o processo de advecção é mais significativo em relação à dispersão, já que adotou-se o maior valor de condutividade hidráulica ($9,22 \times 10^{-5}$ m/s) e o menor valor de dispersividade longitudinal (5 m). Além disso, o coeficiente de retardo, em função do valor de f_{oc} , é igual a unidade.

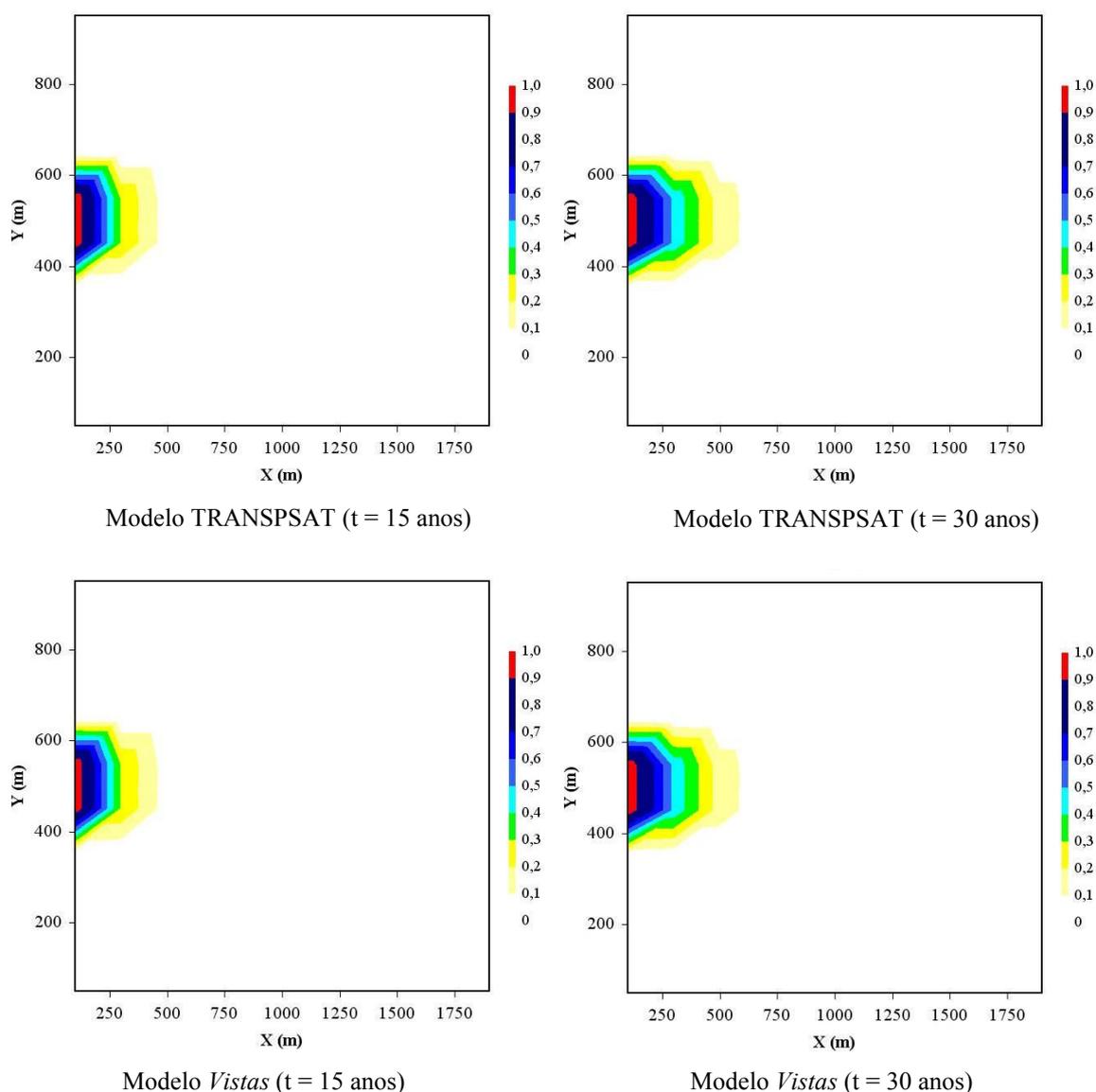


Figura 4.46 Comparação dos resultados dos modelos TRANSPSAT e *Groundwater Vistas* na solução de problemas bidimensionais de transporte (Condições: $K = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $\alpha_L = 50$ m; $f_{oc} = 0\%$)

Considerando-se os resultados apresentados na Figura 4.46, tem-se novamente que os resultados obtidos pelo uso dos modelos TRANSPSAT e *Groundwater Vistas* foram, do ponto de vista qualitativo, próximos entre si para o caso em análise. Uma comparação entre as Figuras 4.45 e 4.46 permite uma avaliação da sensibilidade dos resultados ao coeficiente de dispersividade longitudinal (α_L), uma vez que é o único parâmetro distinto entre os dois testes. Como o valor de α_L é superior para o teste cujos resultados são apresentados na Figura 4.46, tem-se a pluma um pouco mais desenvolvida para o referido teste.

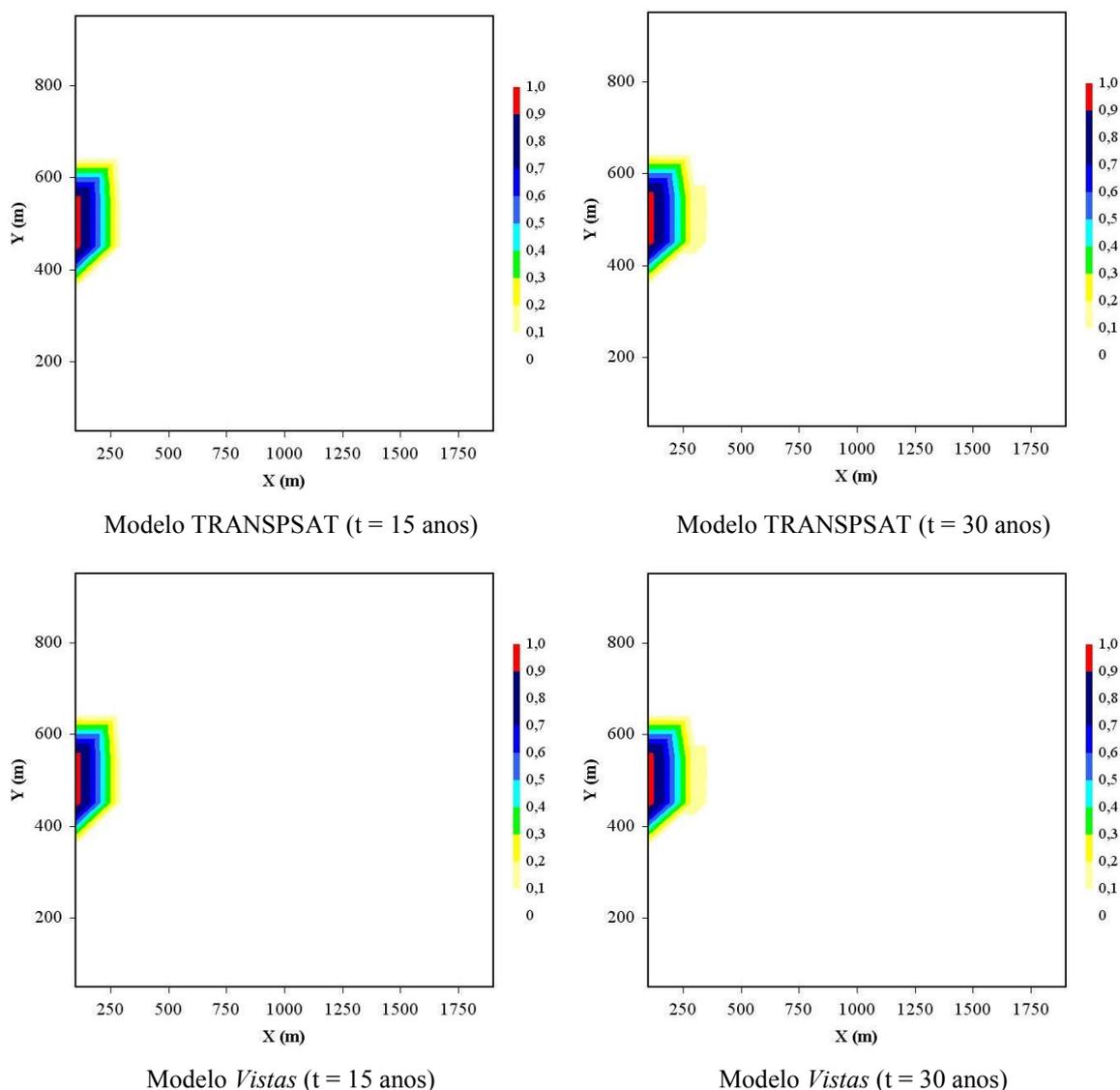


Figura 4.47 Comparação dos resultados dos modelos TRANSPSAT e *Groundwater Vistas* na solução de problemas bidimensionais de transporte (Condições: $K = 9,22 \times 10^{-5}$ m/s; $\alpha_L = 50$ m; $f_{oc} = 1,006$ %)

Novamente os resultados obtidos pelo uso dos modelos TRANSPSAT e *Groundwater Vistas* foram, do ponto de vista qualitativo, próximos entre si para o caso em análise, como se observa a partir da Figura 4.47. Uma comparação entre as Figuras 4.46 e 4.47 permite uma avaliação da sensibilidade dos resultados ao valor do coeficiente de retardo (R), uma vez que a fração de carbono orgânico na matriz do solo (f_{oc}) é o único parâmetro distinto entre os dois testes. Como o valor de R resulta superior para o teste cujos resultados são apresentados na Figura 4.47, tem-se a pluma menos desenvolvida para o referido teste.

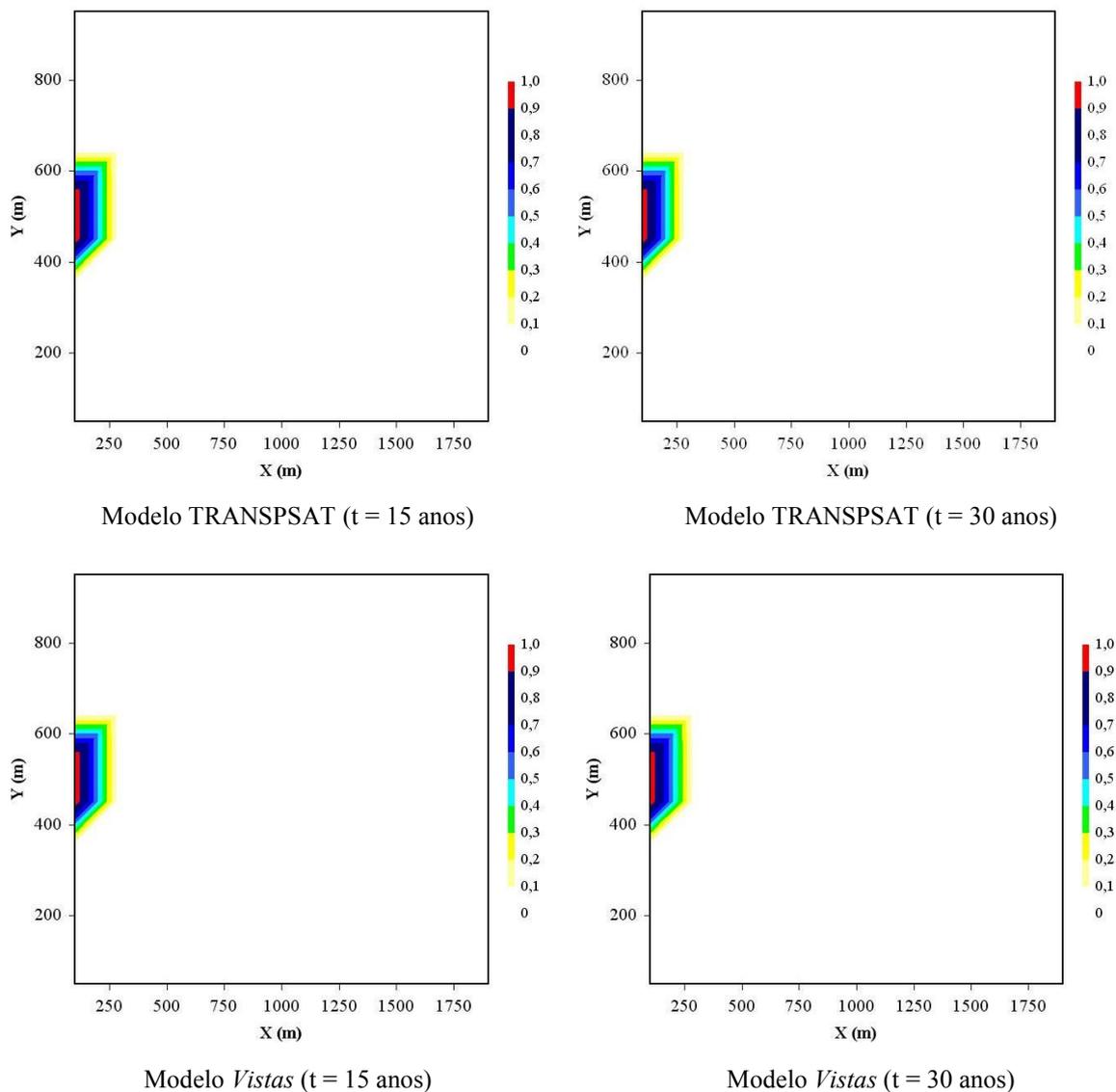


Figura 4.48 Comparação dos resultados dos modelos TRANSPSAT e *Groundwater Vistas* na solução de problemas bidimensionais de transporte (Condições: $K = 2,70 \times 10^{-6}$ m/s; $\alpha_L = 5$ m; $f_{oc} = 0$ %)

Verifica-se, a partir da Figura 4.48, que uma vez mais os resultados obtidos pelo uso dos modelos TRANSPSAT e *Groundwater Vistas* foram próximos entre si para o caso em análise. Uma comparação entre as Figuras 4.45 e 4.48 permite uma avaliação da sensibilidade dos resultados ao valor da condutividade hidráulica (K). Como o valor adotado para K é inferior para o teste cujos resultados são apresentados na Figura 4.48, tem-se a pluma menos desenvolvida para o referido teste.

Do ponto de vista quantitativo, foram comparadas as somas das concentrações das células, excluindo-se a fonte de contaminação, e as concentrações máximas, considerando-se os tempos de 15 anos (metade do horizonte de simulação) e de 30 anos (horizonte de simulação). Em relação à soma das concentrações das células, as diferenças relativas situaram-se todas abaixo dos 5%, com exceção de um único teste que apresentou uma diferença de 6,8 %. Já em relação às concentrações máximas, as diferenças relativas entre os resultados dos modelos TRANSPSAT e *Groundwater Vistas* resultaram todas inferiores a 1%, com exceção de dois testes que apresentaram diferenças relativas da ordem de 4 %.

4.5 CONCLUSÕES DO CAPÍTULO 4

Como mencionado anteriormente, o presente capítulo buscou discutir o problema do fluxo e transporte em meio poroso saturado, buscando fornecer subsídios para o desenvolvimento de um modelo computacional que resolva o problema de fluxo permanente tridimensional em meio saturado e o problema de transporte tridimensional em meio saturado sob regime de fluxo permanente.

Como resultado direto do desenvolvimento deste capítulo, foram implementados os modelos computacionais FLUXSAT e TRANSPSAT, que tratam respectivamente do problema de fluxo e transporte em meio saturado.

O modelo FLUXSAT foi avaliado quanto à solução de problemas de fluxo permanente de natureza unidimensional, bidimensional e tridimensional.

No caso unidimensional, os resultados do modelo FLUXSAT foram comparados aos resultados fornecidos por solução analítica e pelo modelo ASMWIN (Chiang, Kinzelbach e Rausch, 1998). As comparações com a solução analítica tiveram por objetivo verificar o comportamento do modelo na solução numérica de problemas de fluxo relativamente simples. Os testes mostraram uma boa concordância entre os resultados do modelo e a solução analítica, mesmo para discretizações grosseiras, por exemplo, da ordem de 200 m.

Já a comparação entre o modelo FLUXSAT e o modelo ASMWIN para problemas de fluxo unidimensional teve por objetivo testar a rotina de interação entre o aquífero e uma lagoa. Os testes realizados mostraram uma boa concordância entre os resultados dos dois modelos com diferenças máximas entre os valores de carga hidráulica estimada pelos dois modelos em torno de 1 mm.

No caso bidimensional, os resultados do modelo FLUXSAT foram novamente comparados aos resultados fornecidos pelo modelo ASMWIN (Chiang, Kinzelbach e Rausch, 1998). Os testes usados nos problemas bidimensionais procuraram avaliar novamente a interação entre a lagoa e o aquífero e também a questão da anisotropia pela análise de simulações onde a relação entre K_x e K_y era diferente da unidade. Procurou-se também avaliar a propagação de erros numéricos na solução do problema de fluxo, bem como, o tempo de processamento para a solução de sistemas de equações relativamente grandes, da ordem de 50 x 50 equações. Os testes novamente mostraram uma boa concordância entre os dois modelos. As diferenças máximas entre as cargas hidráulicas foram de cerca de 2 mm, podendo ser creditadas aos diferentes métodos numéricos de solução do sistema de equações e à adoção de diferentes critérios de parada. Não foram verificados problemas de propagação de erros numéricos e de tempo excessivo de processamento.

No caso tridimensional, os resultados do modelo FLUXSAT foram comparados aos resultados fornecidos pelo modelo *Groundwater Vistas* (Rumbaugh e Rumbaugh, 2001) com o objetivo de verificar o desempenho do modelo FLUXSAT na solução de problemas tridimensionais, envolvendo meio não homogêneo e aquífero de geometria irregular. As diferenças entre os valores de carga hidráulica obtidos pelos dois modelos foram inferiores a 1 mm e podem ser explicadas pela adoção de diferentes aproximações iniciais para a carga hidráulica nas células, bem como, a adoção de diferentes parâmetros de iteração e de relaxação/aceleração de convergência.

O modelo TRANSPSAT foi avaliado quanto à solução de problemas de transporte de natureza unidimensional e bidimensional.

No caso unidimensional, os resultados do modelo TRANSPSAT foram comparados a resultados obtidos a partir de solução analítica. Os testes realizados tiveram por finalidade analisar a sensibilidade do modelo TRANSPSAT à discretização espacial (Δx) e à discretização temporal (Δt). De modo geral, os piores resultados foram obtidos nos testes com valores de número de Peclet (Pe) relativamente altos, onde o processo de advecção é dominante e onde há formação de frentes abruptas de contaminação. Esse tipo de comportamento era esperado, uma vez que o método das características modificado (MMOC), método implantado no modelo TRANSPSAT, apresenta essa característica.

A comparação entre os resultados das análises de sensibilidade à discretização espacial (Δx) e à discretização temporal (Δt) para problemas unidimensionais mostrou ainda que o modelo TRANSPSAT foi mais sensível a variações de Δx , considerando-se os testes efetuados.

No caso bidimensional, os resultados do modelo TRANSPSAT foram comparados aos resultados fornecidos pelo modelo *Groundwater Vistas* (Rumbaugh e Rumbaugh, 2001) e tiveram por objetivo avaliar o comportamento geral do modelo TRANSPSAT. Os resultados dos dois modelos foram comparados em termos da soma das concentrações estimadas para as células e das concentrações máximas estimadas. Para a soma das concentrações, as diferenças obtidas para um horizonte de simulação de 30 anos foram inferiores a 5 %, com exceção de um único teste que apresentou uma diferença de 6,8 %. Já em relação às concentrações máximas, as diferenças obtidas para um horizonte de simulação de 30 anos resultaram todas inferiores a 1%, com exceção de dois testes que apresentaram diferenças da ordem de 4 %.

As diferenças observadas entre os resultados dos modelos TRANSPSAT e *Groundwater Vistas* são também função das diferenças entre as velocidades de Darcy e os níveis do lençol freático usados pelos dois modelos nas simulações de transporte, uma vez que o modelo TRANSPSAT utiliza os valores calculados pelo modelo FLUXSAT, enquanto no modelo *Groundwater Vistas* existe uma integração entre os modelos de fluxo e transporte.

Além disso, os modelos TRANSPSAT e *Groundwater Vistas* utilizam técnicas diferentes para o rastreamento da partícula (*particle tracking*). O modelo TRANSPSAT utiliza uma abordagem semi-analítica, apresentada em Pollock (1988), enquanto o modelo *Groundwater Vistas* adota uma abordagem numérica, utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem (Zheng, 1990).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BEAR, J.; VERRUIJT, A. *Modeling groundwater flow and pollution*. Dordrecht: D. Reidel Publishing Company, 1987. 414 p.
- CHARBENEAU, R. J. *Groundwater hydraulics and pollutant transport*. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2000. 593 p.
- CHENG, R. T.; CASULLI, V.; MILFORD, S. N. Eulerian-lagrangian solution of the convection-dispersion equation in natural coordinates. *Water Resources Research*, v. 20, n. 07, p. 944-952, 1984.

- CHENG, X.; ANDERSON, M. P. Numerical simulation of ground-water interaction with lakes allowing for fluctuating lake levels. *Ground Water*, v. 31, n. 06, p. 929-933, 1993.
- CHIANG, W.-H.; KINZELBACH, W.; RAUSCH, R. *Aquifer simulation model for Windows*. Stuttgart : Berlin : Borntraeger, 1998. 137 p.
- COTA, S. D. S. *Modelagem da contaminação de aquíferos livres por NAPLs residuais na zona não saturada*. Porto Alegre : UFRGS : IPH, 2000. 167 p. Tese de doutoramento submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- FENSKE, J. P.; LEAKE, S. A.; PRUDIC, D. E. *Documentation of a computer program (RES1) to simulate leakage from reservoirs using the modular finite-difference ground-water flow model (MODFLOW)*. Tucson: U. S. Geological Survey, 1996. 51 p. (Open File Report 96-364).
- FETTER, C. W. *Contaminant hydrogeology*. 2. ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1999. 500 p.
- FREEZE, R. A.; CHERRY, J. A. *Groundwater*. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1979. 604 p.
- GROVE, D. B.; STOLLENWERK, K. G. *Computer model of one-dimensional equilibrium-controlled sorption processes*. Denver: U. S. Geological Survey, 1984. 58 p. (Water Resources Investigation Report 84-4059).
- HUYAKORN, P. S.; PINDER, G. F. *Computational methods in subsurface flow*. San Diego : Academic, 1983.
- JAVANDEL, I.; DOUGHTY, C.; TSANG, C. F. *Groundwater transport : handbook of mathematical models*. Washington : America Geophysical Union, 1984. 228 p. (Water Resources Monograph Series; 10).
- KIPP, K. L.; KONIKOW, L. F.; HORNBERGER, G. Z. *An implicit dispersive transport algorithm for the U. S. Geological Survey MOC3D solute-transport model*. Reston: United States Geological Survey, 1998. 54 p. (Water-Resources Investigations Report 98-4234).
- KONIKOW, L. F.; BREDEHOEFT, J. D. *Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in ground water*. Washington: U. S. Government Printing Office, 1978. 90 p. (Techniques of Water-Resources Investigations of the United States Geological Survey. Book 7 – Automated Data Processing and Computations. Chapter C2).
- KONIKOW, L. F.; GOODE, J. D.; HORNBERGER, G. Z. *A three-dimensional method-of-characteristics solute-transport model (MOC3D)*. Reston: United States Geological Survey, 1996. 87 p. (Water-Resources Investigations Report 96-4267).

- MARSILY, G. de *Quantitative hydrogeology: groundwater hydrology for engineers*. San Diego: Academic Press Corporation, 1986. 440 p.
- McDONALD, M. G.; HARBAUGH, A. W. *A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model*. Washington: U. S. Government Printing Office, 1988. paginação irregular. (Techniques of Water-Resources Investigations of the United States Geological Survey. Book 6 - Modeling Techniques. Chapter A1).
- McDONALD, M. G.; HARBAUGH, A. W. The history of MODFLOW. *Ground Water*, v. 41, n. 02, p. 280-283, 2003.
- McWHORTER D. B.; SUNADA, D. K. *Ground-Water Hydrology and Hydraulics*. Ann Arbor : Water Resources Publication, 1981. 290 p.
- MERRITT, M. L.; KONIKOW, L. F. *Documentation of a computer program to simulate lake-aquifer interaction using MODFLOW ground-water flow model and the MOC3D solute-transport model*. Tallahassee: U. S. Geological Survey, 2000. 146 p. (Water Resources Investigations Report 00-4167).
- NEUMAN, S. P. Adaptive Eulerian-Lagrangian finite element method for advection-dispersion. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 20, n. 2, p. 321-337, 1984.
- NIELSEN, D. R.; VAN GENUCHTEN, M. T.; BIGGAR, J. W. Water flow and solute transport processes in the unsaturated zone. *Water Resources Research*. v. 22, n. 9, p. 89S-108S, 1986.
- POLLOCK, D. W. Semi analytical computation of path lines for finite-difference models. *Ground Water*, v. 26, n. 06, p. 743-750, 1988.
- REMSON, I.; HORNBERGER, G. M.; MOLZ, F. J. *Numerical methods in subsurface hydrology: with an introduction to the finite element method*. New York : John Wiley & Sons, 1971. 389 p.
- RUMBAUGH, J. O.; RUMBAUGH, D. B. *Guide to using Groundwater Vistas : version 3*. Herndon: Environmental Simulations Inc., 2001. 266 p.
- RUSSEL, T. F.; WHEELER, M. F. Finite element and finite difference methods for continuous flow in porous media. In: EWING, R. E. (ed.) *SIAM The Mathematics of Reservoir Simulation*. Philadelphia: Society for Industrial Mathematics, 1983. 186 p.
- SMEDT, F. de. Two and three-dimensional flow of groundwater. In: DELLEUR, J. W. (ed.) *The handbook of groundwater engineering*. Boca Raton : CRC Press LLC, 1998. Chapter 3. p. 3.1 – 3.27.
- SPITZ, K.; MORENO, J. *A practical guide to groundwater and solute transport modeling*. New York: John Wiley & Sons, 1996. 461 p.

- STONE, H. L. Iterative solution of implicit approximations of multidimensional partial differential equations. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, v. 5, n. 3, p. 530-558, 1968.
- STRACK, O. D. L. *Groundwater mechanics*. Englewood Cliffs : Prentice Hall, 1989. 688 p.
- WEINSTEIN, H. G.; STONE, H. L.; KWAN, T. V. Iterative procedures for solution of systems of parabolic and elliptic equations in three dimensions. *Industrial Engineering Chemistry Fundamentals*, v. 8, n. 2, pp. 281-287, 1969.
- ZHENG, C. *MT3D : a modular three-dimensional transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems*. Rockville : S.S. Papadoulos & Associates, 1990. Páginación Irregular.
- ZHENG, C.; BENNETT, G. D. *Applied contaminant transport modeling*. 2. ed. New York : John Wiley & Sons, 2002. 621 p.
- ZHENG, C.; WANG, P. P. *MT3DMS : a modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems : documentation and user's guide*. Washington : U. S. Corps of Engineers, 1999. 169 p. + anexos.

5. GERAÇÃO DE CAMPOS ALEATÓRIOS DE CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA

Este capítulo tem por objetivo apresentar uma breve revisão sobre conceitos básicos relacionados à variabilidade espacial da condutividade hidráulica e à sua influência sobre o fluxo e transporte de contaminantes em meio poroso. De modo sucinto, são apresentadas também algumas das técnicas utilizadas na geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica e que permitem associar o conceito de incerteza aos resultados de modelos computacionais de fluxo e transporte concebidos, em geral, dentro de uma abordagem determinística.

5.1 VARIABILIDADE ESPACIAL DA CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA

Os materiais porosos subsuperficiais tipicamente exibem um alto grau de variabilidade natural em termos do seu tipo e distribuição espacial. Formações geológicas, que agem como condutos para o fluxo, são freqüentemente caracterizadas por estruturas tridimensionais variáveis, constituídas de camadas, lentes e fraturas, compostas de diferentes materiais, desde areias e cascalhos até argilas ou rochas (Tompson e Gelhar, 1990). Wen e Kung (1993) também destacam que as formações geológicas naturais são heterogêneas em termos de suas propriedades hidráulicas, especialmente a condutividade hidráulica (ou transmissividade). A importância da representação da variabilidade espacial das propriedades do solo em avaliações de risco é destacada em Gutjahr e Bras (1993).

O fluxo e o transporte de contaminantes dissolvidos em formações naturais apresentam distribuições irregulares no espaço e no tempo, controladas pela heterogeneidade espacial das propriedades hidráulicas. Portanto, é essencial levar em consideração esta heterogeneidade a fim de prever o fluxo e transporte em escala de campo (Wen e Kung, 1993).

Smith e Schwartz (1981a) destacam que o transporte em meio poroso é influenciado de modo complexo por: camadas geológicas; heterogeneidade intra-camada da condutividade hidráulica e da porosidade; interações entre o fluido e o meio poroso; localização da fonte de contaminação e taxa de lançamento do contaminante. Os resultados do referido trabalho mostraram que características como disposição em camadas e anisotropia hidráulica podem limitar o tamanho da área que a massa de contaminante provavelmente atingirá, enquanto grandes diferenças de condutividade hidráulica entre unidades geológicas podem restringir o transporte a trajetórias particulares. De modo geral, os resultados mostraram que as incertezas

no transporte de contaminantes em meio poroso são altamente sensíveis a características particulares da estrutura espacial do meio poroso.

Smith e Schwartz (1980, 1981a e 1981b) identificaram a condutividade hidráulica como o parâmetro mais importante no controle do fluxo e do transporte em meio poroso e mostraram que o transporte de contaminantes é altamente sensível à heterogeneidade do meio poroso. Rehfeldt, Boggs e Gelhar (1992) destacam ser do conhecimento geral que a heterogeneidade do campo de condutividade hidráulica de um aquífero controla o movimento e a dispersão de contaminantes dissolvidos nas águas subterrâneas.

Dagan (1984) destaca que as diferenças entre os resultados de testes realizados em laboratório e em campo lançaram dúvidas sobre a validade da equação de dispersão, Equação 4.36, para a representação do transporte em meios porosos e que é necessário considerar a variabilidade espacial de propriedades relevantes da formação (condutividade hidráulica e porosidade).

Variações espaciais da condutividade hidráulica desempenham um papel crítico no controle do transporte de contaminantes nos aquíferos. Estas variações dão origem à dispersão macroscópica e representam um grande contribuinte para a incerteza na previsão das trajetórias de migração dos contaminantes (Smith e Schwartz, 1981b).

Neste ponto, é importante perceber que a heterogeneidade espacial dos atributos físicos do solo, como, por exemplo, a condutividade hidráulica, influencia a modelagem matemática do problema de fluxo e transporte de contaminantes sob dois aspectos distintos, mas altamente relacionados entre si.

O primeiro aspecto refere-se ao reconhecimento de que o meio poroso é heterogêneo, em oposição à prática comum de considerá-lo homogêneo e cujos valores de condutividade hidráulica são obtidos a partir de um processo de calibração, não representando a realidade física, mas a conveniência de um processo de ajuste. O segundo aspecto refere-se ao reconhecimento de que não é possível representar, de modo exato, a heterogeneidade espacial do meio poroso, uma vez que as informações disponíveis nunca permitem a sua real representação.

O primeiro aspecto destacado se refere, portanto, à questão da variabilidade espacial. Já o segundo aspecto se refere à incerteza gerada pelo desconhecimento desta variabilidade. Novamente, salienta-se a diferença existente entre os conceitos de variabilidade e incerteza, contudo sem esquecer que estes dois conceitos estão intimamente relacionados.

5.2 CONCEITOS BÁSICOS SOBRE FUNÇÕES ALEATÓRIAS E GEOSTATÍSTICA

Este item apresenta alguns conceitos básicos relacionados a funções aleatórias e à geostatística, tendo como objetivo principal fornecer uma base de conhecimento para um melhor entendimento do item 5.3 a seguir, que trata das técnicas de geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica.

Uma definição formal de campo aleatório, obtida a partir de Chilès e Delfiner (1999), é apresentada a seguir. Uma referência mais específica sobre a teoria dos campos aleatórios é encontrada em Christakos (1992).

Dados um domínio $D \subset \mathfrak{R}^n$, com volume positivo, e um espaço de probabilidades (Ω, A, P) , uma função aleatória é uma função de duas variáveis $Z(\mathbf{x}, u)$, tal que, para cada $\mathbf{x} \in D$, a seção $Z(\mathbf{x}, \bullet)$ é uma variável aleatória em (Ω, A, P) . Além disso, cada função $Z(\bullet, u)$, definida em D como seção da função aleatória em $u \in \Omega$, é uma realização da função aleatória $Z(\mathbf{x}, u)$. Na literatura técnica, uma função aleatória é chamada de *processo estocástico* quando \mathbf{x} varia em um espaço unidimensional e de *campo aleatório* quando \mathbf{x} varia em um espaço com mais de uma dimensão (Chilès e Delfiner, 1999).

De modo simples, a variável aleatória $Z(\mathbf{x}, \bullet)$ representa o conjunto das realizações da função aleatória $Z(\mathbf{x}, u)$ em um determinado ponto do domínio D e a função aleatória $Z(\bullet, u)$ representa uma realização da função aleatória $Z(\mathbf{x}, u)$ sobre todo o domínio D .

Nesta definição, o espaço de probabilidades é definido pelo espaço amostral (Ω) , pelo conjunto (A) de subconjuntos de Ω e por uma medida da probabilidade (P) no espaço mensurável (Ω, A) e que satisfaz os axiomas de Kolmogorov (Christakos, 1992):

- (i) $P(\Omega) = 1$;
- (ii) $0 \leq P(A_i) \leq 1$ para todos os subconjuntos $A_i \in A$;
- (iii) Se $A_i \cap A_j = \emptyset$ para $i \neq j$, então $P\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i)$

Uma função aleatória $Z(\mathbf{x}, u)$, ou simplesmente $Z(\mathbf{x})$, é caracterizada pelo conjunto de todas as distribuições de probabilidade acumulada das suas K variáveis aleatórias para qualquer número K e qualquer escolha de K localizações \mathbf{x}_k , $k = 1, \dots, K$, como (Deutsch e Journel, 1998):

$$F(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k; z_1, \dots, z_k) = P \{Z(\mathbf{x}_1) \leq z_1, \dots, Z(\mathbf{x}_k) \leq z_k\} \quad (5.1)$$

As várias grandezas que são importantes em hidrogeologia (por exemplo, cargas hidráulicas, transmissividade, permeabilidade, espessura de uma camada, coeficiente de armazenamento, chuva, recarga efetiva, entre outras) são todas funções do espaço e muito freqüentemente altamente variáveis. Contudo, esta variabilidade, em geral, não é puramente aleatória. Se duas observações são feitas em dois locais distintos, quanto mais próximos estão os pontos de medição, mais próximos serão os valores observados (Marsily, 1986).

Esta propriedade que as grandezas hidrogeológicas apresentam de variarem no espaço, mas não de uma forma puramente aleatória, é estudada por um campo do conhecimento denominado de geostatística.

O termo geostatística foi criado no início dos anos 60 por Matheron (1963). Segundo Delhomme (1979), o referido termo era usado inicialmente para caracterizar a solução de problemas práticos de estimativa em campos bi ou tridimensionais, usando ferramentas estatísticas, e, no fim da década de 1970, passou a ser usado mais genericamente para descrever todas as aplicações de estatística em geologia.

As primeiras aplicações de geostatística em hidrogeologia surgiram no fim da década de 1970 e início da década de 1980, com trabalhos como os de Delhomme (1979) e Mantoglou e Wilson (1982). Segundo Deutsch e Journel (1998), a geostatística fornece uma coleção de ferramentas determinísticas e estatísticas voltadas ao entendimento e à modelagem da variabilidade espacial.

ASCE (1990a) e ASCE (1990b) apresentam uma interessante revisão sobre conceitos e utilização da geostatística na hidrogeologia. Textos básicos sobre o mesmo tema podem ser encontrados em Marsily (1986) e Kitanidis (1997).

Deutsch e Journel (1998) apresentam uma biblioteca de programas computacionais (GSLIB – *Geostatistical Software Library*) para uso em problemas envolvendo grandezas espacialmente variáveis e destacam que as três maiores áreas de aplicações de geostatística são: quantificação da variabilidade espacial, utilização de técnicas de regressão linear generalizada e simulação estocástica. Chilès e Delfiner (1999) apresentam um trabalho extenso sobre o uso da geostatística na modelagem da variabilidade espacial de fenômenos em Ciências da Terra.

Uma medida da variabilidade espacial de uma determinada grandeza é essencial para qualquer estudo geostatístico (Deutsch e Journel, 1998). Seja um campo aleatório $Z(\mathbf{x}, u)$, por questão de simplicidade, representado apenas por $Z(\mathbf{x})$, onde \mathbf{x} representa o vetor posição em um espaço n -dimensional, uma medida da dispersão do campo aleatório $Z(\mathbf{x})$ sobre a sua média é a variância dada por (ASCE, 1990a):

$$\text{Var}[\mathbf{x}] = E[Z(\mathbf{x}) - m(\mathbf{x})]^2 \quad (5.2)$$

onde E é o operador esperança matemática e $m(\mathbf{x})$ representa o valor esperado de $Z(\mathbf{x})$.

Outra medida importante da variabilidade espacial que caracteriza $Z(\mathbf{x})$ é a covariância entre $Z(\mathbf{x})$ e $Z(\mathbf{x} + \mathbf{h})$, onde \mathbf{h} representa a distância euclidiana entre \mathbf{x} e $\mathbf{x} + \mathbf{h}$. Por definição, a covariância é dada por (ASCE, 1990a):

$$\text{CoV}[\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{h}] = E\{[Z(\mathbf{x}) - m(\mathbf{x})].[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - m(\mathbf{x} + \mathbf{h})]\} \quad (5.3)$$

Um conceito importante associado à variabilidade espacial de uma grandeza é o conceito de estacionariedade. A hipótese de estacionariedade estrita estabelece que o conjunto de todas as distribuições de probabilidade acumulada das K variáveis aleatórias que caracterizam a função aleatória $Z(\mathbf{x})$ são invariantes em relação a uma translação arbitrária de pontos por um vetor \mathbf{h} , ou seja (Chilès e Delfiner, 1999):

$$P\{Z(x_1) \leq z_1, \dots, Z(x_k) \leq z_k\} = P\{Z(x_1 + h) \leq z_1, \dots, Z(x_k + h) \leq z_k\} \quad (5.4)$$

A função aleatória $Z(\mathbf{x})$ que satisfaz a Equação 5.4 é dita estacionária. Fisicamente, isto significa que o fenômeno é homogêneo no espaço e, por assim dizer, se repete em todo o espaço (Chilès e Delfiner, 1999). A hipótese de estacionariedade estrita, representada pela Equação 5.4, é muito restritiva para ser utilizada em problemas práticos. Para contornar esse inconveniente, duas hipóteses menos restritivas relacionadas à estacionariedade da função aleatória $Z(\mathbf{x})$ são usualmente utilizadas: estacionariedade de segunda ordem e estacionariedade intrínseca.

A hipótese de estacionariedade de segunda ordem considera a função aleatória $Z(\mathbf{x})$ estacionária somente em relação aos dois primeiros momentos da distribuição de probabilidades. Desta forma, tem-se:

$$E[Z(\mathbf{x})] = m \quad (5.5)$$

$$E\{[Z(\mathbf{x}) - m].[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - m]\} = \text{CoV}(\mathbf{h}) \quad (5.6)$$

Verifica-se, a partir das Equações 5.5 e 5.6, que a adoção da hipótese de estacionariedade de segunda ordem implica em se ter a média (valor esperado de $Z(\mathbf{x})$)

constante e que a covariância é função apenas do espaçamento (\mathbf{h}) entre dois pontos. Por definição, as funções aleatórias que satisfazem estas condições são chamadas de fracamente estacionárias (Chilès e Delfiner, 1999).

A hipótese de estacionariedade intrínseca é menos restritiva em relação à hipótese de estacionariedade de segunda ordem e assume que o incremento $Y_{\mathbf{h}}(\mathbf{x}) = Z(\mathbf{x}+\mathbf{h}) - Z(\mathbf{x})$ é uma função aleatória estacionária em \mathbf{x} para todo vetor \mathbf{h} (Chilès e Delfiner, 1999). Em outras palavras, a hipótese intrínseca assume que, mesmo que a variância de $Z(\mathbf{x})$ não seja finita, a variância dos incrementos de primeira ordem de $Z(\mathbf{x})$ é finita e que esses incrementos são eles próprios estacionários de segunda ordem, ou seja, $[Z(\mathbf{x}+\mathbf{h}) - Z(\mathbf{x})]$ satisfazem a (Marsily, 1986):

$$E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{x})] = m(\mathbf{h}) \quad (5.7)$$

$$\text{Var}[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{x})] = 2\gamma(\mathbf{h}) \quad (5.8)$$

onde $m(\mathbf{h})$ representa uma tendência linear (*linear drift*) de variação do valor esperado de $Z(\mathbf{x})$ e $\gamma(\mathbf{h})$ é denominada de função semivariograma ou simplesmente, semivariograma. As funções $m(\mathbf{h})$ e $\gamma(\mathbf{h})$, presentes nas Equações 5.7 e 5.8, são funções que dependem somente do espaçamento \mathbf{h} e não da posição \mathbf{x} . Isto é uma consequência da adoção da hipótese de estacionariedade intrínseca. Se a tendência linear é igual a zero, ou seja, se a média é constante, tem-se a forma usual do modelo intrínseco dada por (Chilès e Delfiner, 1999):

$$E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{x})] = 0 \quad (5.9)$$

$$E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{x})]^2 = 2\gamma(\mathbf{h}) \quad (5.10)$$

Deste ponto em diante, a função $\gamma(\mathbf{h})$, definida como semivariograma, será citada simplesmente como variograma como é prática corrente na literatura pertinente ao assunto. A partir da Equação 5.8, pode-se definir o variograma como sendo:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \frac{1}{2} \text{Var}[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{x})] \quad (5.11)$$

Na adoção da hipótese de estacionariedade intrínseca, considerando-se a Equação 5.10, o variograma fica definido por:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \frac{1}{2} E\{[Z(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{x})]^2\} \quad (5.12)$$

Analisando-se a Equação 5.11, verifica-se que o variograma é definido a partir da variância do incremento $Z(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{x})$. Com a adoção da hipótese de estacionariedade intrínseca, o variograma, definido pela Equação 5.12, passa a ser entendido como o incremento quadrático médio de $Z(\mathbf{x})$ entre dois pontos separados por uma distância \mathbf{h} .

Independentemente da hipótese adotada, o variograma representa também uma medida da variabilidade espacial, assim como a covariância. Quando ambos existem, e sob a hipótese de estacionariedade, pode-se estabelecer que (Marsily, 1986):

$$\gamma(\mathbf{h}) = \text{CoV}(0) - \text{CoV}(\mathbf{h}) \quad (5.13)$$

A partir da Equação 5.13 e conhecida a covariância, tem-se que o variograma é simplesmente a reflexão em relação ao eixo horizontal somado a um deslocamento vertical (Marsily, 1986), como ilustrado pela Figura 5.1.

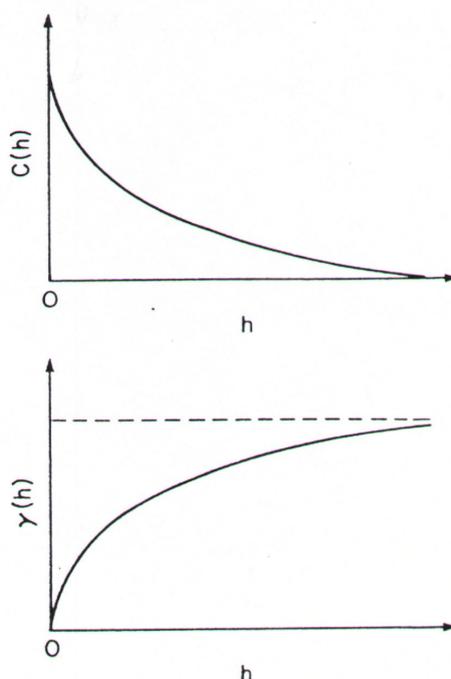


Figura 5.1 Relação entre a Covariância ($C(\mathbf{h})$) e o Variograma ($\gamma(\mathbf{h})$) (adaptado de Marsily, 1986)

Uma interpretação interessante da relação entre a covariância e o variograma é a de que o primeiro apresenta o grau de similaridade de uma grandeza observada em dois pontos, enquanto o último representa o grau de não similaridade (diferença). Chilès e Delfiner (1999) apresentam uma breve discussão das razões que fazem do variograma uma ferramenta mais utilizada do que a covariância para representar a variabilidade espacial.

Supondo-se conhecidas n observações $z(\mathbf{x}_1), z(\mathbf{x}_2), \dots, z(\mathbf{x}_n)$ da função aleatória $Z(\mathbf{x})$, o variograma amostral pode ser calculado a partir de (Kitanidis, 1997):

$$\hat{\gamma}(h_k) = \frac{1}{2N_k} \sum_{i=1}^{N_k} [z(\mathbf{x}_i) - z(\mathbf{x}_i')]^2 \quad (5.14)$$

onde o índice i refere-se a cada par de observações $z(\mathbf{x}_i)$ e $z(\mathbf{x}_i')$ para os quais a norma euclidiana $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i'\|$ está contida no intervalo $[h_k^i, h_k^s]$ e N_k representa o número de observações nas quais $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i'\|$ está contida no intervalo $[h_k^i, h_k^s]$. Este intervalo é representado por um único ponto definido por (Kitanidis, 1997):

$$h_k = \frac{1}{N_k} \sum_{i=1}^{N_k} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i'\| \quad (5.15)$$

Existem, na literatura técnica, alguns modelos teóricos utilizados para a representação do variograma amostral. Alguns dos modelos teóricos mais usuais são (Deutsch e Journel, 1998):

Modelo Gaussiano

$$\gamma(h) = c. \left[1 - \exp\left(-\frac{(3h)^2}{a^2}\right) \right] \quad (5.16)$$

Modelo Exponencial

$$\gamma(h) = c. \left[1 - \exp\left(-\frac{3h}{a}\right) \right] \quad (5.17)$$

Modelo Esférico

$$\gamma(h) = \begin{cases} c \left[1,5 \frac{h}{a} - 0,5 \left(\frac{h}{a} \right)^3 \right], & \text{se } h \leq a \\ c, & \text{se } h > a \end{cases} \quad (5.18)$$

Modelo de Potência

$$\gamma(h) = c \cdot h^w \quad (5.19)$$

onde h define o espaçamento entre dois pontos e os parâmetros c e a são denominados de patamar (*sill*) e amplitude (*range*) e representam, respectivamente, o valor para o qual o variograma se estabiliza e a distância a partir da qual as observações passam a ser independentes. A Figura 5.2 apresenta uma comparação da forma dos modelos teóricos de variograma, representados pelas Equações 5.16 a 5.19.

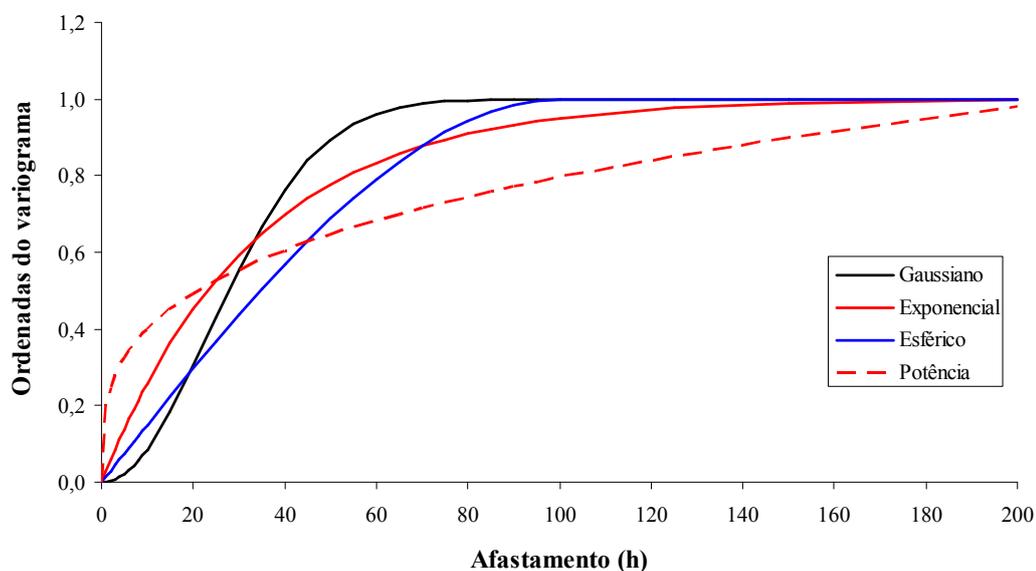


Figura 5.2 Comparação entre modelos teóricos de variograma

É interessante observar, a partir da Figura 5.2, que se pode identificar claramente um valor de patamar para os modelos Gaussianos, Exponencial e Esférico, característica dos modelos estacionários. Já para o modelo de Potência, o variograma teórico não atinge um patamar, caracterizando o caso de não estacionariedade.

Outro aspecto a ser destacado, a partir da Figura 5.2, quando são comparados os modelos estacionários, é o fato de que o modelo gaussiano tende a suavizar a variabilidade em pequena escala, uma vez que é o modelo que apresenta as menores ordenadas para o variograma, considerando-se pequenos valores de afastamento (h) entre pontos. Já o modelo exponencial tende a suavizar a variabilidade em grande escala, uma vez que é o modelo que tende a se aproximar mais lentamente do patamar. O modelo esférico representaria um comportamento intermediário entre os modelos gaussiano e exponencial.

As Equações 5.16 a 5.19 representam ainda modelos cujo efeito-pepita (*nugget effect*) é nulo. Por efeito-pepita, entende-se uma descontinuidade na origem do variograma. Segundo Chilès e Delfiner (1999), esta descontinuidade significa que a variável regionalizada não é, em geral, contínua e, portanto, apresenta-se bastante irregular. Em palavras simples, a existência do efeito-pepita indica que ocorrem grandes variações no atributo $Z(\mathbf{x})$ para pequenas variações da localização \mathbf{x} . No caso da existência do efeito-pepita, uma constante c_0 deve ser adicionada a cada uma das Equações 5.16 a 5.19.

Conforme destacado no início deste item, o objetivo aqui não é o de realizar uma discussão exaustiva sobre os conceitos de geostatística, mas sim apresentar alguns conceitos que servirão de embasamento para o entendimento do item seqüente. Deste modo, neste item não são discutidos aspectos importantes relacionados, por exemplo, ao cálculo do variograma amostral, ajuste de um modelo teórico de variograma e processos espaciais não estacionários. Discussões mais extensivas sobre conceitos relacionados à quantificação da variabilidade espacial podem ser encontradas, por exemplo, em Marsily (1986), Kitanidis (1997), Deutsch e Journel (1998), Chilès e Delfiner (1999) e Wackernagel (2003).

Uma segunda grande área de aplicações em geostatística, conforme em Deutsch e Journel (1998), é a área relacionada a técnicas de regressão linear generalizada. Um problema central em geostatística, segundo Chilès e Delfiner (1999), é a reconstrução de um fenômeno sobre um domínio com base em um número limitado de pontos. O problema de estimativa pontual de uma grandeza Z no espaço pode ser definido de modo simples como a seguir.

Sejam $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$, as localizações de n pontos de medição, sendo \mathbf{x}_i a representação da localização do ponto i em um espaço uni, bi ou tridimensional, e seja $z_i = Z(\mathbf{x}_i)$, o valor medido no ponto i , o problema de estimativa pontual resulta em determinar a quantidade z_0 para qualquer ponto \mathbf{x}_0 para o qual não existe medição (Marsily, 1986), como representado de modo esquemático na Figura 5.3.

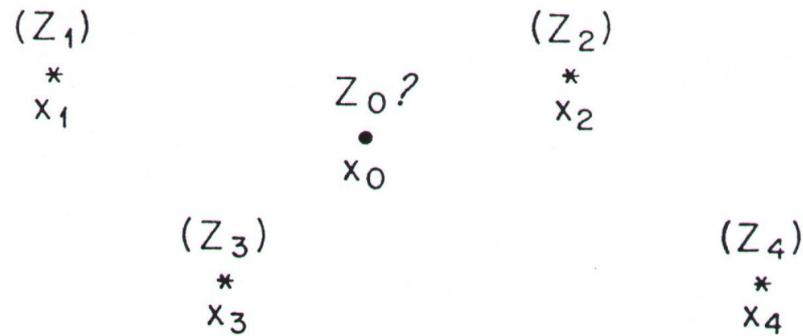


Figura 5.3 O problema de estimativa pontual (adaptado de Marsily, 1986)

Matematicamente, o problema de estimativa pontual pode ser entendido como um problema de interpolação, no qual a abordagem clássica é aproximar a função desconhecida por uma função paramétrica, onde os parâmetros são definidos a partir da otimização de algum critério de melhor ajuste em relação aos dados observados.

Chilès e Delfiner (1999) destacam o método de *Kriging* como uma abordagem distinta da abordagem clássica e cuja principal diferença é a adoção de um modelo estatístico da Natureza e não de um modelo de função interpoladora. O termo *Kriging* é usado para representar um método de otimização da estimativa de uma grandeza que é distribuída no espaço e é medida em uma rede de pontos (Marsily, 1986).

Um estimador é simplesmente um procedimento ou fórmula que utiliza dados observados para encontrar um valor representativo ou uma estimativa de uma quantidade não conhecida (Kitanidis, 1997). Um estimador linear é aquele no qual a quantidade desconhecida é estimada por uma combinação linear dos dados observados, como por exemplo:

$$\hat{z}_0 = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i) \quad (5.20)$$

onde $Z(x_i)$ representa o conjunto de valores conhecidos nos pontos x_i , $i = 1, \dots, n$, e os coeficientes λ_i , $i = 1, \dots, n$, representam os ponderadores da combinação linear. O problema da estimativa pontual passa a ser agora como estabelecer uma escolha adequada para os pesos λ_i .

O erro de estimativa associado ao estimador \hat{z}_0 é dado por $\hat{z}_0 - Z(x_0)$, onde $Z(x_0)$ representa o valor real (e desconhecido) da função aleatória $Z(x)$ no ponto x_0 . Duas condições, em geral, são impostas ao estimador \hat{z}_0 . A primeira delas requer que \hat{z}_0 seja um estimador não tendencioso, o que implica em que o valor esperado do erro de estimativa seja nulo (ASCE, 1990a):

$$E[\hat{Z}_0 - Z(x_0)] = 0 \quad (5.21)$$

A segunda condição requer que \hat{Z}_0 seja um estimador de mínima variância. Pode-se demonstrar que a variância do erro de estimativa é dada por (ASCE, 1990a):

$$\text{Var}[\hat{Z}_0 - Z(x_0)] = 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma_{i0} - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \lambda_j \gamma_{ij} \quad (5.22)$$

onde $\gamma_{ij} = \gamma(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|)$ representa o valor do variograma para o afastamento $h = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|$.

Colocado desta forma, o problema da determinação do conjunto de ponderadores λ_i pode ser entendido como um problema de minimização, onde a função objetivo é dada pela Equação 5.22.

A adoção de um estimador linear, representado pela Equação 5.20, define uma subdivisão da geostatística, a chamada geostatística linear que trata, como destacado em ASCE (1990a), da minimização da variância do erro de estimativa, sujeito a restrições de não tendenciosidade. O método de *Kriging* aplicado dentro da geostatística linear é chamado em Chilès e Delfiner (1999) de *Kriging* linear, cujas principais formas são apresentadas no Quadro 5.1.

Quadro 5.1 Principais formas do método de *Kriging* linear

Tipo	Valor esperado de Z(x)	Pré-requisito mínimo	Nome do modelo
Kriging simples (SK)	Constante Conhecido	Covariância	Estacionário
Kriging ordinário (OK)	Constante Desconhecido	Variograma	Intrínseco
Kriging universal (UK)	Variável Desconhecido	Variograma	Modelo UK

Fonte: adaptado de Chilès e Delfiner (1999)

As equações utilizadas para definir o conjunto de ponderadores λ_i , referentes a cada uma das principais formas do método de *Kriging* linear, podem ser obtidas em diversos textos relativos ao tema, como, por exemplo, Marsily (1986), ASCE (1990a), Kitanidis (1997) e Chilès e Delfiner (1999). Conceitos relativos a formas do método de *Kriging* não linear podem ser encontrados em ASCE (1990a) e Chilès e Delfiner (1999).

A discussão apresentada neste item concentrou-se principalmente em duas das três maiores áreas de aplicações de geostatística, segunda a visão de Deutsch e Journel (1998): quantificação da variabilidade espacial e uso de técnicas de regressão linear generalizada. Na seqüência, a discussão é centrada na simulação estocástica, que seria a terceira área de aplicações de geostatística, segundo Deutsch e Journel (1998), sendo particularmente aplicada à geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica.

5.3 TÉCNICAS DE SIMULAÇÃO ESTOCÁSTICA UTILIZADAS PARA A GERAÇÃO DE CAMPOS ALEATÓRIOS DE CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA

O conceito de simulação estocástica é apresentado a seguir, de modo formal, baseado no trabalho de Deutsch e Journel (1998).

Considere a distribuição de um (ou mais) atributo(s) $Z(\mathbf{x})$ sobre um campo A qualquer com $\mathbf{x} \in A$. Por simulação estocástica, entende-se o processo de construir modelos alternativos igualmente prováveis de alta resolução da distribuição espacial de $Z(\mathbf{x})$. Cada realização de $Z(\mathbf{x})$ é representada pelo sobrescrito l da seguinte forma: $\{z^{(l)}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in A\}$.

A simulação é dita condicional (ou condicionada) se as realizações resultantes representarem valores observados em diferentes localizações, ou seja (Deutsch e Journel, 1998):

$$z^{(l)}(x_\alpha) = Z(x_\alpha), \quad \text{para qualquer } l \quad (5.23)$$

onde $Z(x_\alpha)$ representa o valor do atributo $Z(\mathbf{x})$ observado na localização x_α .

Do ponto de vista de aplicação, três categorias abrangentes de quantidades podem ser simuladas (Chilès e Delfiner, 1999): variáveis contínuas, variáveis categóricas e objetos. Por variáveis categóricas, entendem-se variáveis discretas representando elementos de uma classificação.

Mantoglou e Wilson (1982) destacam que técnicas de simulação de campos aleatórios multidimensionais têm muitas aplicações importantes em hidrologia e que uma das razões para a geração destes campos é fornecer campos de dados de entrada ou de parâmetros para a simulação Monte Carlo de processos físicos. Os campos simulados são usados em modelos determinísticos de simulação hidrológica para se obter múltiplas realizações de resultados. A partir destas realizações, estatísticas dos resultados podem ser calculadas e relacionadas às estatísticas dos dados de entrada ou dos parâmetros (Mantoglou e Wilson, 1982).

Tompson, Ababou e Gelhar (1989) destacam que técnicas numéricas para gerar realizações de campos aleatórios espacialmente correlacionados são freqüentemente utilizadas para definir conjuntos de quantidades físicas altamente variáveis em modelos estocásticos de sistemas naturalmente heterogêneos. Gutjahr e Brás (1993) apresentam uma breve revisão sobre as abordagens geostatísticas usadas pelos modelos estocásticos de variação espacial aplicados a problemas de fluxo e transporte nos meio saturado e não saturado.

Wen e Kung (1993) classificam os métodos de geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica espacialmente correlacionados, de acordo com dois tipos genéricos de abordagens geostatísticas: métodos paramétricos e não paramétricos. São citados como exemplos de métodos paramétricos: método espectral, método da matriz de covariância, método do vizinho mais próximo, método das bandas rotativas e, o mais recente, método de simulação gaussiana seqüencial (SGS). Como exemplo de método não paramétrico, Wen e Kung (1993) citam o método de simulação de indicadores seqüencial (SIS).

Wen e Gómez-Hernández (1998) classificam os métodos de geração de campos aleatórios em métodos multigaussianos e não multigaussianos. Em comparação ao trabalho de Wen e Kung (1993), os métodos multigaussianos e não multigaussianos corresponderiam respectivamente aos métodos paramétricos e não paramétricos.

A diferença básica entre os dois tipos de abordagem refere-se ao fato de que a abordagem paramétrica (multigaussiana) procura reproduzir a média e a variância da distribuição teórica usada para representar a variabilidade espacial de um determinado atributo do solo. Já a abordagem não paramétrica (não multigaussiana) procura reproduzir indicadores, aqui entendidos simplesmente como percentis da distribuição teórica usada na representação de um determinado atributo do solo.

Vários estudos procuram comparar o desempenho das técnicas paramétricas e não paramétricas na representação da variabilidade espacial da condutividade hidráulica, citando-se os trabalhos de Wen e Kung (1993), Gómez-Hernández e Wen (1998), Wen e Gómez-Hernández (1998) e Zinn e Harvey (2003). Lee *et al.* (2007) apresentam uma extensa relação de estudos realizados e que procuram comparar o desempenho das técnicas paramétricas (multigaussianas) e não paramétricas (não multigaussianas).

A maior vantagem dos modelos paramétricos (multigaussianos) é a sua relativa simplicidade quando comparados aos modelos não paramétricos (não multigaussianos). De modo geral, a maior crítica aos modelos multigaussianos é a de que eles não conseguem reproduzir estruturas de solo, onde são encontradas regiões bem definidas de baixa ou alta condutividade hidráulica, uma vez que a correlação espacial de valores extremos de condutividade hidráulica para este tipo de modelo é relativamente pequena.

Wen e Gómez-Hernández (1998) destacam que os modelos multigaussianos não são capazes de modelar a conectividade espacial de valores extremos de condutividade hidráulica. Estruturas conexas de valores extremos de condutividade hidráulica podem ser criticamente importantes para previsões de transporte de massa (Gómez-Hernández e Wen, 1998).

Zinn e Harvey (2003) destacam que, em campos de condutividade hidráulica gerados por técnicas multigaussianas, os valores de condutividade próximos à média tendem a formar grandes estruturas, enquanto que os valores extremos tendem a se agrupar em regiões isoladas, não formando canais ou estruturas que se estendam sobre todo o comprimento do campo. A conectividade pode ser uma característica fundamental em muitos campos de condutividade hidráulica e, portanto, um controle importante, se não dominante, no transporte de solutos (Zinn e Harvey, 2003).

A Figura 5.4 mostra uma comparação entre duas realizações de campos aleatórios de condutividade hidráulica, gerados por um modelo multigaussiano e por um modelo não multigaussiano, a partir do trabalho de Wen e Gómez-Hernández (1998). No referido trabalho, o modelo não multigaussiano foi definido especificamente para representar a conectividade das regiões que apresentam um alto valor de condutividade hidráulica, que são representadas pelas áreas mais claras na Figura 5.4.

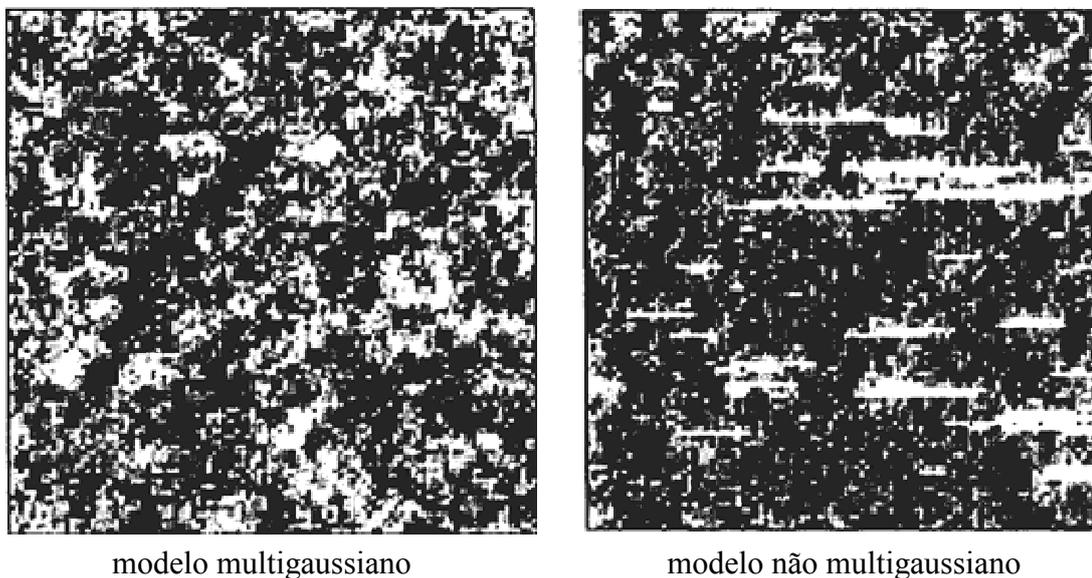


Figura 5.4 Comparação entre técnicas de geração de campos aleatórios (adaptado de Wen e Gómez-Hernández (1998))

Observa-se, a partir da Figura 5.4, que o modelo não multigaussiano é capaz de gerar uma realização de campo aleatório de condutividade hidráulica que apresenta estruturas conexas de alta condutividade (regiões mais claras), definindo caminhos preferenciais de fluxo. O mesmo não se observa na realização gerada pelo modelo multigaussiano.

Marsily *et al.* (1998) apresentam uma breve revisão sobre métodos para representar a heterogeneidade do meio natural em hidrogeologia, incluindo exemplos de aplicação. Na referida revisão, os métodos multigaussianos e não multigaussianos são classificados como métodos geoestatísticos.

Os métodos geoestatísticos, segundo Teles *et al.* (2004), consideram os sistemas naturais como realizações matemáticas de processos aleatórios e tentam reproduzir as suas propriedades estatísticas, obtidas por inferência e caracterizadas pelos seus primeiro e segundo momentos (média e variância) e pela sua distribuição de probabilidades. Vale destacar que, além dos métodos geoestatísticos, Teles *et al.* (2004) apresentam mais duas categorias de métodos para a representação da heterogeneidade do meio natural, os chamados método booleano e o método de gênese.

Os métodos booleanos representam uma classe de modelos obtidos por combinações de objetos colocados em pontos (posições) aleatórios e constituem uma família de modelos muito flexíveis e são usados, algumas vezes, com base em uma interpretação física ou de gênese do meio que define os objetos de um modelo em particular a ser usado. Eles também são usados sem referência a qualquer interpretação física plausível quando produzem um ajuste aceitável em relação a dados observados (Chilès e Delfiner, 1999).

Deutsch e Journel (1998) apresentam uma breve introdução sobre algoritmos booleanos e seu uso nas Ciências da Terra. Uma discussão mais completa sobre modelos booleanos é encontrada em Chilès e Delfiner (1999). Deutsch e Wang (1996) constituem um exemplo de aplicação de modelos booleanos, onde são simulados reservatórios de hidrocarbonetos de origem fluvial que possuem como característica canais preenchidos com areia no interior de uma camada de xisto.

O método de gênese, proposto por Teles *et al.* (2004), constitui outra abordagem utilizada para representar a heterogeneidade de domínios naturais, cujo nome é oriundo da tentativa de simular a geração do meio pela reprodução do seu processo de formação. O termo gênese é utilizado no lugar de genético para evitar a confusão com algoritmos genéticos, que é uma abordagem estocástica completamente diferente para a geração de realizações que mimetizam processos biológicos reconhecidos nos genes (Teles *et al.*, 2004). Enquanto os métodos geoestatísticos geram estruturas com uma distribuição estatística espacial inferida a partir dos dados disponíveis, os modelos de gênese se concentram nos mecanismos responsáveis pela criação do meio no sentido que eles tentam reproduzir a gênese da formação geológica (Teles *et al.*, 2004).

Koltermann e Gorelick (1996) apresentam uma revisão relativamente extensa sobre métodos para geração de mapas de propriedades hidráulicas espacialmente variáveis.

Na seqüência são apresentados exemplos de técnicas multigaussianas para a geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica. A escolha dos métodos multigaussianos (paramétricos), em detrimento dos métodos não multigaussianos (não paramétricos), se deveu ao fato do número de observações em campo da condutividade hidráulica, considerando-se o estudo de caso analisado na presente tese, ser relativamente pequeno para uma estimativa precisa dos percentis (histograma) de alguma distribuição teórica de probabilidade apropriada para a representação espacial da condutividade hidráulica, o que é desejável no caso da utilização de modelos não paramétricos.

Adicionalmente, em estudos anteriores, referentes á área a ser modelada no estudo de caso, não existe menção sobre a existência de regiões conexas de alta condutividade hidráulica em qualquer uma das seqüências litológicas da referida área. Outro aspecto a ser destacado é a relativa simplicidade dos métodos multigaussianos em comparação aos métodos não multigaussianos.

5.3.1 Exemplos de Técnicas Multigaussianas para a Geração de Campos Aleatórios de Condutividade Hidráulica

Este item apresenta algumas das técnicas multigaussianas (paramétricas) utilizadas para a geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica. São abordados de modo resumido os métodos das bandas rotativas, da decomposição espectral, da fatoração LU e da simulação gaussiana seqüencial (SGS).

Método das bandas rotativas (*turning bands method*)

O método das bandas rotativas de simulação multidimensional, segundo Mantoglou e Wilson (1982), também é baseado na teoria de campos aleatórios e seu conceito básico é transformar uma simulação multidimensional em uma soma de uma série de simulações unidimensionais equivalentes. De acordo com Tompson, Ababou e Gelhar (1989), o método das bandas rotativas constitui um algoritmo que gera campos aleatórios bi e tridimensionais, usando combinações de valores obtidos para uma série de simulações unidimensionais ao longo de linhas que irradiam a partir da origem de um sistema de coordenadas.

O método das bandas rotativas foi proposto inicialmente por Matheron no início da década de 70 (Journel, 1974). Os trabalhos de Mantoglou e Wilson (1982), Mantoglou (1987),

Tompson, Ababou e Gelhar (1989) e Tompson e Gelhar (1990) são referências clássicas no uso do método das bandas rotativas para a geração de campos aleatórios nas áreas de fluxo e transporte em meio poroso.

Em Mantoglou e Wilson (1982), a geração de campos aleatórios bidimensionais, usando o método das bandas rotativas, é amplamente discutida. Já Mantoglou (1987) apresenta, além da geração de campos bidimensionais, uma extensão do método para seu uso na geração de campos aleatórios tridimensionais. Tompson, Ababou e Gelhar (1989) apresentam recomendações para um desempenho mais preciso e eficiente de um algoritmo para a geração de campos tridimensionais. Tompson e Gelhar (1990) utilizam o método das bandas rotativas para a geração de campos aleatórios tridimensionais de velocidade em um meio saturado heterogêneo para examinar efeitos temporais e espaciais de um campo variável de velocidades no desenvolvimento de plumas de contaminantes.

Uma avaliação crítica do método é apresentada por Dowd (1992), onde se destacam: o fato do método ser usado apenas para algumas formas particulares de funções de covariância; as limitações relacionadas ao uso de distribuições de probabilidade multigaussianas para a representação da variabilidade espacial; e a dificuldade em simular domínios anisotrópicos. Outro problema do método, destacado por Dowd (1992), é a necessidade de se efetuar o condicionamento das simulações separadamente do processo de simulação, ou seja, o método produz apenas simulações não condicionais (ou não condicionadas).

Método de decomposição espectral (*spectral decomposition method*)

O método (ou métodos) de decomposição espectral é baseado na propriedade de que uma função aleatória estacionária de segunda ordem admite uma representação espectral. A análise espectral (ou harmônica) está relacionada à representação de funções em séries ou integrais de Fourier (Chilès e Delfiner, 1999). De modo simples, o método espectral utiliza a representação da função aleatória no domínio da frequência e não no domínio do espaço.

O trabalho de Mejia e Rodriguez-Iturbe (1974) constitui uma das primeiras aplicações de métodos ou técnicas espectrais para a geração de campos aleatórios com o objetivo de representar a variação das estruturas espaciais de fenômenos geofísicos. No caso do referido trabalho, descreve-se um procedimento para a geração de um campo aleatório isotrópico que pode ser utilizado para representar a variação espacial de fenômenos como a precipitação e a temperatura.

Pode-se inferir, a partir de Dowd (1992), que o desenvolvimento dos métodos

espectrais ocorreu como uma consequência dos problemas relacionados ao fato do método das bandas rotativas ser capaz de trabalhar apenas com algumas formas particulares de funções de covariância.

Uma das principais limitações do método espectral, segundo Chilès e Delfiner (1999), é a de que ele não é capaz de produzir diretamente simulações condicionais (ou condicionadas). Discussões relativas à teoria e aplicações do método (ou métodos) de decomposição espectral podem ser encontradas em Christakos (1987), Christakos (1992) e Chilès-Delfiner (1999).

Método da decomposição LU

O método da decomposição LU, proposto por Davis (1987), constitui uma técnica simples para a geração de campos aleatórios, baseada na decomposição da matriz de covariância de uma função aleatória qualquer em duas matrizes, uma matriz triangular inferior e uma matriz triangular superior (decomposição LU). No trabalho original, a técnica é usada para gerar simulações condicionais (ou condicionadas) de grades de tamanho moderado (até 700 pontos).

Alabert (1987) descreve o método de decomposição LU e discute alguns problemas teóricos e práticos na implantação do método, principalmente em relação às limitações quanto às dimensões das matrizes envolvidas, sugerindo algumas alternativas para possibilitar o uso do método para gerar simulações para grades superiores a 700 x 700 pontos. Deutsch e Journel (1998) também descrevem o método da decomposição LU e destacam que o referido método é particularmente apropriado quando existe a necessidade de um grande número de realizações sobre uma área relativamente pequena. Dowd (1992) destaca, como vantagens do método de decomposição LU, que o mesmo é de fácil implantação, não é limitado a formas particulares das funções de covariância e trata automaticamente o problema da anisotropia.

Método da simulação gaussiana seqüencial (*sequential gaussian simulation method*)

O método de simulação gaussiana seqüencial (SGS), apresentado por Isaaks (1990), é segundo Koltermann e Gorelick (1996), o mais poderoso dos algoritmos gaussianos de geração de campos aleatórios. Os referidos autores destacam o fato de que o SGS e o método da decomposição LU, por definição, geram simulações condicionais (ou condicionadas).

Marsily *et al.* (1998) destacam o SGS como sendo provavelmente o método mais simples de ser utilizado. Zhang e Pinder (2003) definem o SGS como um algoritmo de simulação estocástica usado na obtenção de campos aleatórios (multi)gaussianos.

O SGS é baseado no princípio de simulação seqüencial, proposto por Johnson (1987), que parte da idéia básica de que n eventos dependentes A_i , $i = 1, \dots, n$, podem ser simulados seqüencialmente, usando a seguinte expressão (Dowd, 1992):

$$P(A_1, A_2, \dots, A_n) = P(A_n | A_1, A_2, \dots, A_{n-1}) \cdot P(A_{n-1} | A_1, A_2, \dots, A_{n-2}) \dots P(A_2 | A_1) \cdot P(A_1) \quad (5.24)$$

O princípio de simulação seqüencial, representado pela Equação 5.24, quando aplicado sobre um conjunto de dados distribuídos, segundo uma distribuição normal padronizada, dá origem ao chamado método da simulação gaussiana seqüencial (SGS).

Existem na literatura técnica, inúmeros trabalhos que utilizam ou comparam o SGS a outros métodos para a geração de campos aleatórios. Como exemplos, podem ser citados os trabalhos de Dowd (1992), Wen e Kung (1993), Koltermann e Gorelick (1996), Gómez-Hernández (1998), Wen e Gómez-Hernández (1998), Goovaerts (2001), Zhang e Pinder (2003), Zinn e Harvey (2003), Ballio e Guadagnini (2004) e Lee *et al.* (2007).

O método de simulação gaussiana seqüencial (SGS) foi adotado, na presente tese, para a geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica, por isso uma breve descrição do método e dos procedimentos relacionados ao seu uso são apresentados no item 5.3.3. A escolha do referido método se deveu: à sua capacidade de gerar simulações condicionadas; à sua relativa simplicidade; e à disponibilidade de uma biblioteca de programas computacionais de livre acesso (GSLIB – *Geostatistical Software Library*), disponibilizada por Deutsch e Journel (1998).

5.3.2 Técnicas de Simulação Seqüencial para a Geração de Campos Aleatórios de Condutividade Hidráulica

As técnicas de simulação seqüencial são utilizadas na simulação estocástica para produzir simulações condicionais (ou condicionadas) de campos aleatórios de grandezas (ou atributos) relacionados aos problemas de fluxo e transporte em meio poroso.

De modo simples, a simulação seqüencial consiste em condicionar a estimativa de uma grandeza em uma posição x a toda informação disponível na vizinhança de x , incluindo

valores observados e também valores previamente simulados. A abordagem seqüencial é apresentada formalmente a seguir, a partir do trabalho de Deutsch e Journal (1998).

Considere a distribuição conjunta de N variáveis aleatórias Z_i com N possivelmente muito grande e o condicionamento destas N variáveis aleatórias por um conjunto de n dados de qualquer tipo, simbolizado pela notação $| (n)$. A correspondente distribuição de probabilidade condicional acumulada das N variáveis aleatórias é representada por (Deutsch e Journal, 1998):

$$F_{(N)}(z_1, \dots, z_N | (n)) = P(Z_i \leq z_i, i = 1, \dots, N | (n)) \quad (5.25)$$

Segundo Deutsch e Journal (1998), aplicações sucessivas do conceito de probabilidade condicional mostram que uma realização das N variáveis aleatórias Z_i pode ser obtida da distribuição de probabilidade condicional acumulada, dada pela Equação 5.25, em N passos sucessivos, cada qual envolvendo uma distribuição de probabilidade condicional acumulada univariada com um nível crescente de condicionamento, usando-se o seguinte procedimento:

Passo 1 - Determine uma realização $z_1^{(l)}$ da distribuição de probabilidade condicional acumulada univariada de Z_1 dado o conjunto de dados originais (n) . O valor de $z_1^{(l)}$ assim obtido é então considerado um dado condicionante para as realizações subseqüentes. Deste modo, o conjunto de informações (n) é atualizado para um novo conjunto $(n+1) = (n) \cup \{Z_1 = z_1^{(l)}\}$;

Passo 2 - Determine uma realização $z_2^{(l)}$ da distribuição de probabilidade condicional acumulada univariada de Z_2 dado o conjunto de dados $(n+1)$ e atualize o conjunto de informações para $(n+2) = (n+1) \cup \{Z_2 = z_2^{(l)}\}$;

Passo 3 - Seqüencialmente considere todas as N variáveis aleatórias Z_i .

O procedimento de simulação seqüencial descrito exige a determinação de N distribuições de probabilidade condicional acumulada univariadas, dadas por (Deutsch e Journal, 1998):

$$\begin{aligned} & P(Z_1 \leq z_1 | (n)) \\ & P(Z_2 \leq z_2 | (n+1)) \\ & P(Z_3 \leq z_3 | (n+2)) \\ & \quad \vdots \\ & P(Z_N \leq z_N | (n+N-1)) \end{aligned} \quad (5.26)$$

O princípio de simulação seqüencial independe do algoritmo ou modelo utilizado para obter a série de distribuições de probabilidade definidas pelas Equações 5.26 (Deutsch e Journal, 1998). Goovaerts (2001) destaca que duas grandes classes de algoritmos de simulação seqüencial podem ser estabelecidas: uma classe definida pelo uso do método de simulação gaussiana seqüencial (SGS) e outra classe definida pela utilização do método de simulação de indicadores seqüencial (SIS).

Goovaerts (2001) destaca ainda que uma questão comum relacionada à simulação estocástica é a escolha entre uma abordagem paramétrica (multigaussiana) ou não paramétrica (não multigaussiana). O referido autor ressalta que não existe uma resposta direta para esta questão e que os usuários devem ter em mente que o modelo multigaussiano não permite uma correlação espacial significativa de valores extremos (altos ou baixos), o que pode ser não desejável (não conservador) para a aplicação de interesse.

5.3.3 Método de Simulação Gaussiana Seqüencial (SGS)

A implantação do princípio de simulação seqüencial, representado pelas Equações 5.26, sob a hipótese de uma função aleatória multigaussiana, define a chamada simulação gaussiana seqüencial (Goovaerts, 1997).

Segundo Deutsch e Journal (1998), se um fenômeno espacial contínuo, definido por $\{z(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in A\}$, onde A representa um campo qualquer, é gerado pela soma de um número (não muito grande) de fontes independentes $\{y_k(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in A\}$, $k = 1, \dots, K$, com distribuições espaciais similares, então esse fenômeno espacial pode ser descrito por um modelo de função aleatória gaussiana multivariada (Deutsch e Journal, 1998):

$$Z(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K Y_k(\mathbf{x}) \approx \text{Gaussiano} \quad (5.27)$$

A principal restrição relacionada à definição apresentada não é o número K de fontes y_k e nem o fato das componentes $Y_k(\mathbf{x})$ terem distribuições similares, mas a hipótese de independência das componentes $Y_k(\mathbf{x})$. No entanto, Deutsch e Journal (1998) destacam que o histórico de utilização e de resultados deste tipo de modelo tem sido considerado suficiente para justificar o seu uso.

A definição formal usual de uma distribuição gaussiana multivariada pode ser encontrada em livros-texto sobre estatística multivariada, como, por exemplo, em Johnson e

Wichern (2002). Ainda segundo Deutsch e Journel (1998), a definição teórica da distribuição normal multivariada é de pouco uso prático e que ela é melhor definida através das suas propriedades características, discutidas a seguir.

Uma função aleatória gaussiana multivariada $Z(\mathbf{x})$ possui como propriedades características (Johnson e Wichern, 2002):

- combinações lineares de componentes de $Z(\mathbf{x})$ são normalmente distribuídas;
- todos os subconjuntos de componentes de $Z(\mathbf{x})$ têm uma distribuição gaussiana multivariada;
- covariância zero entre duas componentes de $Z(\mathbf{x})$ implica que estas componentes são distribuídas independentemente;
- as distribuições condicionais (ou condicionadas) das componentes de $Z(\mathbf{x})$ são distribuições gaussianas multivariadas.

A grande vantagem dos modelos multigaussianos está na sua relativa simplicidade. Gómez-Hernández e Wen (1998) destacam que os modelos multigaussianos são atraentes porque são inteiramente caracterizados por um valor esperado e por uma matriz (ou função) de covariância, resultando em simplicidade matemática e fácil inferência. Dowd (1992) destaca como principais vantagens do método de simulação gaussiana seqüencial (SGS):

- o condicionamento é parte integrante da simulação e não precisa ser feita separadamente. Em outras palavras, não existe a necessidade da realização de uma série de simulações não condicionais (ou não condicionadas) e, a partir destas, o estabelecimento das simulações condicionais (ou condicionadas);
- anisotropias são tratadas automaticamente;
- pode ser aplicado para qualquer função de covariância;
- a implementação requer apenas um eficiente algoritmo de krigagem (usando um algoritmo de busca móvel na vizinhança).

Uma descrição do método de simulação gaussiana seqüencial (SGS) pode ser encontrada em, por exemplo, Goovaerts (1997) e Deutsch e Journel (1998). O procedimento básico para a geração de campos aleatórios pelo método SGS para uma grade espacial não necessariamente regular é apresentado a seguir.

Considerando-se o problema da simulação de um atributo contínuo Z em N nós \mathbf{x}_j' de uma grade (não necessariamente regular), condicionada a um conjunto de n dados, representados por $\{z(\mathbf{x}_\alpha), \alpha = 1, \dots, n\}$, o método SGS é constituído pelos seguintes passos (adaptado de Goovaerts, 1997):

Passo 1 - Verificar a adequação do modelo de função aleatória multigaussiana, o que requer uma transformação *a priori* do conjunto de dados observados z em um conjunto y que segue uma distribuição normal padrão;

Passo 2 - Se a hipótese de adequação do modelo de função aleatória multigaussiana é aceita, então aplicar o SGS sobre o conjunto y de dados, do seguinte modo:

- a. Definir uma trajetória aleatória, visitando cada nó da grade uma única vez;
- b. Para um dado nó \mathbf{x}_j' , determinar os parâmetros (média e variância) da função de probabilidade acumulada condicional (ou condicionada) gaussiana $G(\mathbf{x}'; y | (n'))$ usando *kriging* simples com o variograma dos escores padronizados $\gamma_\gamma(\mathbf{h})$. A informação condicionante (n') consiste de um número específico $n(\mathbf{x}')$ dos valores de escore padronizado $y(\mathbf{x}_\alpha)$ e dos valores $y^{(l)}(\mathbf{x}_j')$ simulados para os nós da grade previamente visitados;
- c. Obter um valor simulado $y^{(l)}(\mathbf{x}_j')$ a partir da distribuição de probabilidade $G(\mathbf{x}'; y | (n'))$ e adicioná-lo ao conjunto de dados;
- d. Prosseguir para o próximo nó ao longo da trajetória aleatória definida previamente e repetir os dois passos anteriores (passos **b** e **c**);
- e. Repetir os passos **b**, **c** e **d** anteriores até que todos os nós sejam simulados;

Passo 3 - Fazer a transformação-inversa dos escores padronizados simulados, representados por $\{y(\mathbf{x}_j'), j = 1, \dots, N\}$, em valores da variável original z .

Deutsch e Journel (1998) apresentam uma série de programas computacionais aplicados à simulação estocástica, entre eles, o programa *sgsim* que usa o método de simulação gaussiana seqüencial (SGS) para a geração de campos aleatórios bidimensionais ou tridimensionais para grades regulares e que foi utilizado na presente tese para a geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica.

5.3.4 Uso do Método de Monte Carlo na Simulação de Campos Aleatórios de Condutividade Hidráulica

A técnica de Monte Carlo é freqüentemente usada para simular numericamente o fluxo e transporte de massa em meio poroso quando a condutividade hidráulica é descrita como um campo aleatório (Zhang e Pinder, 2003).

O uso do método de Monte Carlo em problemas de fluxo em meio poroso envolvendo a representação espacial e as incertezas associadas à condutividade hidráulica consiste basicamente de três passos (Revelli e Ridolfi, 2000):

- Geração de N realizações do meio poroso heterogêneo, tomadas aleatoriamente da mesma população da variável aleatória espacial $K = K(\mathbf{x})$;
- Solução determinística do problema de fluxo para cada uma das N realizações;
- Após a obtenção das N soluções do problema de fluxo, análise das principais características estatísticas relativas às distribuições espaciais das cargas hidráulicas e do fluxo.

Este procedimento pode ser estendido ao problema de transporte de contaminantes, no qual a variabilidade espacial e as incertezas associadas à condutividade hidráulica são consideradas. Esta extensão é representada pelos diferentes campos de velocidade, resultantes da solução do problema de fluxo, e que são usados no problema de transporte, seguindo a prática mais usual de resolver os problemas de fluxo e transporte de modo desacoplado.

Kupfersberger e Deutsch (1999) citam como “abordagem Monte Carlo”, o procedimento iniciado pela geração de um número de distribuições equiprováveis de condutividade hidráulica, todas respeitando os dados disponíveis e sua estrutura espacial, utilizando-se métodos geoestatísticos. Na seqüência, todas as realizações de condutividade hidráulica são processadas através de um simulador de fluxo e transporte em águas subterrâneas. Finalmente, a análise da distribuição dos resultados das simulações fornece uma medida da incerteza devida à amostragem incompleta das condutividades hidráulicas.

A principal restrição ao uso do método Monte Carlo para a solução de problemas nos mais variados campos do conhecimento é o número de realizações necessárias para que o método produza resultados aceitáveis. Discussões específicas sobre técnicas de amostragem envolvendo o método Monte Carlo e aplicações em fluxo e transporte sobre escoamento em meios porosos podem ser encontradas em Kupfersberger e Deutsch (1999) e Pebesma e Heuvelink (1999).

Deste modo, no contexto da presente tese, o método de Monte Carlo é associado ao método de simulação gaussiana seqüencial (SGS) para a produção de diversas realizações de campos de condutividade hidráulica para caracterizar a incerteza associada aos problemas de fluxo e transporte em meio poroso em função da variabilidade espacial e da amostragem fragmentada da condutividade hidráulica.

A associação entre o método de Monte Carlo e a geração de campos aleatórios pelo método SGS constitui a base do desenvolvimento do programa *sgsim*, descrito em Deutsch e Journel (1998), e que foi utilizado na presente tese para a geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica, conforme mencionado anteriormente.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABABOU, R. *Three-dimensional flow in random porous media*. Cambridge : Parsons Laboratory :MIT, 1988. 833 p. Tese de doutorado apresentada ao Departamento de Engenharia Civil do Instituto de Tecnologia de Massachussetts (Massachussetts Institute of Technology – MIT).
- ALABERT, F. The practice of fast conditional simulations through the LU decomposition of the covariance matrix. *Mathematical Geology*, v. 19, n. 5, p. 369-386, 1987.
- ASCE. American Society of Civil Engineering. Review of Geostatistics in geohydrology : I. basic concepts. *Journal of Hydraulic Engineering*, v. 116, n. 5, p. 612-632, 1990a.
- ASCE. American Society of Civil Engineering. Review of Geostatistics in geohydrology : II. applications. *Journal of Hydraulic Engineering*, v. 116, n. 5, p. 633-658, 1990b.
- BAGLIO, F.; GUADAGNINI, A. Convergence assessment of numerical monte carlo simulations in groundwater hydrology. *Water Resources Research*. v. 40, W04603, 2004. (doi: 10.1029/2003wr002876).
- BECK, M. B. Water quality modeling : a review of the analysis of uncertainty. *Water Resources Research*, v. 23, n. 8, p. 1393-1442, 1987.
- CHILÈS, J. P.; DELFINER, P. *Geostatistics: modeling spatial uncertainty*. New York : John Wiley & Sons, 1999. 695 p.
- CHRISTAKOS, G. Stochastic simulation of spatially correlated geo-processes. *Mathematical Geology*, v. 19, n. 8, p. 807-831, 1987.
- CHRISTAKOS, G. *Random field models in earth sciences*. San Diego : Academic Press, 1992. 474 p.

- COPTY, N. K.; FINDIKAKIS, A. N. Quantitative estimates of uncertainty in evaluation of ground water remediation schemes. *Ground Water*, v. 38, n. 1, p. 29-37, 2000.
- DAGAN, G. Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities : 1. conditional simulation and the direct problem. *Water Resources Research*, v. 18, n. 4, p. 813-833, 1982a.
- DAGAN, G. Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities : 1. the solute transport. *Water Resources Research*, v. 18, n. 4, p. 835-848, 1982b.
- DAGAN, G. Solute transport in heterogeneous porous formations. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 145, p. 151-177, 1984.
- DAVIS, M. W. Production of conditional simulations via the LU triangular decomposition of the covariance matrix. *Mathematical Geology*, v. 19, n. 2, p. 91-98, 1987.
- DELHOMME, J. P. Spatial variability and uncertainty in groundwater flow parameters : a geostatistical approach. *Water Resources Research*, v. 15, n. 2, p. 269-280, 1979.
- DETTINGER, M. D.; WILSON, J. L. First order analysis of uncertainty in numerical models of groundwater flow : part 1 : mathematical development. *Water Resources Research*, v. 17, n. 1, p. 149-161, 1981.
- DEUTSCH, C. V.; JOURNEL, A. G. *Gslib: geostatistical software library and user's guide*. 2. ed. New York: Oxford University Press, 1998. 369 p. Coleção Applied Geostatistics Series.
- DEUTSCH, C. V.; WANG, L. Hierarchical object-based modeling of fluvial reservoirs. *Mathematical Geology*, v. 28, n. 7, p. 857-880, 1996.
- DOWD, P. A. A review of recent developments in geostatistics. *Computers & Geosciences*, v. 17, n. 10, p. 1481-1500, 1992.
- FREEZE, R.A. et al. Hydrogeological decision analysis : 1. framework. *Ground Water*, v. 28, n. 5, p. 738-766, 1990.
- GELHAR, L. W. Stochastic subsurface hydrology from theory to applications. *Water Resources Research*, v. 22, n. 9, p. 135S-145S, 1986.
- GÓMEZ-HERNÁNDEZ, J. J.; WEN, X. H. To be or not to be multi-gaussian?: a reflection on stochastic hydrogeology. *Advances in Water Resources*, v. 21, n. 1, p. 47-61, 1998.
- GOOVAERTS, P. Geostatistical modelling of uncertainty in soil science. *Geoderma*, v. 103, p. 3-26, 2001.
- GOOVAERTS, P. *Geostatistics for natural resources evaluation*. New York : Oxford University Press, 1997. 483 p. Coleção Applied Geostatistics Series.
- GUTJAHR, A. L.; BRAS, R. L. Spatial variability in subsurface flow and transport: a review. *Reliability Engineering and System Safety*, v. 42, p. 293-316, 1993.

- ISAAKS, E. H. *The application of Monte Carlo methods to the analysis of spatially correlated data*. Stanford : Stanford University, 1990. 213 p. PhD Thesis submitted to the Department of Applied Earth Sciences, Stanford University, USA.
- JOHNSON, M. E. *Multivariate statistical simulation*. New York : John Wiley & Sons, 1987. 230 p.
- JOHNSON, R. A.; WICHERN, D. W. *Applied multivariate statistical analysis*. 5. ed. Delhi, Pearson Education, 2002. 767 p.
- JOURNEL, A. G. Geostatistics for conditional simulation of ore bodies. *Economic Geology*. v. 69, p. 673-687, p. 673-687, 1974.
- KITANIDIS, P. K. *Introduction to geostatistics : applications to hydrogeology*. Cambridge : University Press, 1997. 249 p.
- KOLTERMANN, C. E.; GORELICK, S. M. Heterogeneity in sedimentary deposits: a review of structure-imitating, process-imitating, and descriptive approaches. *Water Resources Research*, v. 32, n. 9, p. 2617-2658, 1996.
- KUPFERSBERGER, H.; DEUTSCH, C. V. Ranking stochastic realizations for improved aquifer response uncertainty assessment. *Journal of Hydrology*, v. 223, p. 54-65, 1999.
- LEE, S. Y.; CARLE, S. F.; FOGG, G. E. Geological heterogeneity and a comparison of two geostatistical models: sequential gaussian and transition probability-based geostatistical simulation. *Advances in Water Resources*. v. 30, p. 1914-1932, 2007. (doi: 10.1016/j.advwatres.2007.03.005).
- MARSILY, G. de. *Quantitative hydrogeology*. London: Academic Press, 1986. 440 p.
- MARSILY, G. de. et al. Some current methods to represent the heterogeneity of natural media in hydrogeology. *Hydrogeology Journal*, v. 6, p. 115-130, 1998.
- MANTOGLIOU, A.; WILSON, J. L. The turning bands method for simulation of random fields using line generation by a spectral method. *Water Resources Research*, v. 18, n. 5, p. 1379-1394, 1982.
- MANTOGLIOU, A. Digital simulation of multivariate two- and three-dimensional stochastic process with a spectral turning bands method. *Mathematical Geology*, v. 19, n. 2, p. 129-149, 1987.
- MATHERON, G. Principles of geostatistics. *Economic Geology*, v. 58, p. 1246-1266, 1963.
- MEJÍA, J.M.; RODRÍGUEZ-ITURBE, I. On the synthesis of random field sampling from the spectrum: an application to the generation of hydrological spatial processes. *Water Resources Research*, v. 10, n. 4, p. 705-711, 1974.
- PEBESMA, E. J.; HEUVELINK, G. B. M. Latin hypercube sampling of gaussian random fields. *Technometrics*, v. 41, n. 4, p. 303-312, 1999.

- REHFELDT, K. R.; BOGGS, J. M.; GELHAR, L. W. Field study of dispersion in a heterogeneous aquifer: 3. geostatistical analysis of hydraulic conductivity. *Water Resources Research*, v. 28, n. 12, p. 3309-3324, 1992.
- REVELLI, R.; RIDOLFI, L. Influence of heterogeneity on the flow in unconfined aquifers. *Journal of Hydrology*, v. 288, p. 150-159, 2000.
- SMITH, L.; SCHWARTZ, F. W. Mass transport: 1. A stochastic analysis of macrodispersion. *Water Resources Research*, v. 16, n. 2, p. 303-313, 1980.
- SMITH, L.; SCHWARTZ, F. W. Mass transport: 2. Analysis of uncertainty in prediction. *Water Resources Research*, v. 17, n. 2, p. 351-369, 1981a.
- SMITH, L.; SCHWARTZ, F. W. Mass transport: 3. Role of hydraulic conductivity data in prediction. *Water Resources Research*, v. 17, n. 5, p. 1463-1479, 1981b.
- TELES, V. et al. Comparison of genesis and geostatistical methods for characterizing the heterogeneity of alluvial media: groundwater flow and transport simulation. *Journal of Hydrology*, v. 294, 103-121, 2004. (doi: 10.1016/j.jhydrol.2003.11.041).
- TOMPSON, A. F. B.; ABABOU, R.; GELHAR, L. W. Implementation of the three-dimensional turning bands random field generator. *Water Resources Research*, v. 25, n. 10, p. 2227-2243, 1989.
- TOMPSON, A. F. B.; GELHAR, L. W. Numerical simulation of solute transport in three-dimensional, randomly heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, v. 26, n. 10, p. 2541-2562, 1990.
- WACKERNAGEL, H. *Multivariate geostatistics: an introduction with applications*. 3. ed. Berlin: Springer-Verlag, 2003. 387 p.
- WEN, X. H.; GÓMEZ-HERNÁNDEZ, J. J. Numerical modeling of macrodispersion in heterogeneous media: a comparison of multi-gaussian and non-multi-gaussian models. *Journal of Contaminant Hydrology*, v. 30, 129-156, 1998.
- WEN, X. H.; KUNG, C. S. Stochastic simulation of solute transport in heterogeneous formation: a comparison of parametric and nonparametric geostatistical approaches. *Ground Water*, v. 31, n. 6, p. 953-965, 1993.
- ZHANG, Y.; PINDER, G. Latin hypercube lattice sample selection strategy for correlated random hydraulic conductivity fields. *Water Resources Research*, v. 39, n. 8, 1226, 2003 (doi: 10.1029/2002wr001822, SBH 11.1-11.11).
- ZINN, B.; HARVEY, C. F. When good statistical models of aquifer heterogeneity go bad: a comparison of flow, dispersion, and mass transfer in connected and multivariate Gaussian hydraulic conductivity fields. *Water Resources Research*, v. 39, n. 3, 1051, 2003 (doi: 10.1029/2001wr001146, SBH 4.1-4.15).

6. AVALIAÇÃO DO RISCO À SAÚDE HUMANA - ESTUDO DE CASO

Este capítulo tem por objetivo apresentar o estudo de caso que constitui o roteiro sobre o qual a presente tese foi construída e que se caracteriza pela avaliação do risco à saúde humana devido à exposição de um receptor humano a um contaminante presente em fase dissolvida na água subterrânea. Por hipótese, o contato com o contaminante é feito via ingestão oral.

Um aspecto importante a ser destacado é o de que o fluxo e o transporte de contaminantes no meio poroso são tratados de forma a considerar a incerteza e a variabilidade espacial da condutividade hidráulica, através de uma abordagem geoestatística que consiste na geração de diferentes realizações de um campo aleatório de condutividade hidráulica.

Como consequência da abordagem adotada, não se estabelece um determinado valor de concentração do contaminante a qual o receptor humano estará sujeito, mas sim uma distribuição de frequências de concentração. Esta característica estende-se também à avaliação de risco, uma vez que não se procura definir um valor único para o risco, mas sim uma distribuição de frequências.

Outro aspecto importante é o de que o fluxo nos meios saturado e não saturado é considerado em regime permanente. Esta hipótese foi adotada com o objetivo de simplificar o problema de simulação do fluxo e do transporte nos referidos meios, considerando-se os trabalhos de Wierenga (1977), Beese e Wierenga (1980) e Marshall *et al.* (2000), que investigaram o problema do efeito da variabilidade temporal de curto-termo no transporte de longo-termo e cujos resultados mostraram que a frente de contaminação média, originada a partir de uma longa seqüência de chuvas gerada aleatoriamente, tende à frente de contaminação obtida a partir da consideração de uma taxa constante de infiltração. Deste modo, o uso de taxas de infiltração constantes no tempo não resulta em erros significativos na estimativa do transporte, proporcionando economia em esforço computacional e coleta de dados. Como justificativa, destaca-se que a simulação do transporte associado a avaliações de risco constitui um problema de transporte de longo-termo, uma vez que os horizontes de simulação podem atingir várias décadas.

Inicialmente, são apresentadas algumas informações básicas referentes à área de estudo. Na seqüência, apresenta-se uma análise preliminar dos valores de condutividade hidráulica, procurando identificar, de modo qualitativo, se os referidos valores são mais bem representados por uma distribuição de probabilidades normal ou log-normal. A próxima etapa consistiu na análise da estrutura espacial da condutividade hidráulica, procurando definir qual o melhor modelo teórico de variograma para uso na geração dos campos aleatórios de

condutividade. A próxima etapa apresentada consistiu no uso do método de simulação gaussiana seqüencial (SGS) para a geração dos campos aleatórios de condutividade, método este apresentado e discutido no capítulo anterior.

A etapa de avaliação do risco à saúde humana propriamente dita é composta pela solução dos problemas de fluxo e transporte para dois cenários distintos (estação chuvosa e estação seca) e pelo cálculo do risco incremental de câncer. Os resultados em termos de avaliação de risco dos referidos cenários são comparados entre si.

Finalmente, para verificar a importância da representação da variabilidade espacial da condutividade hidráulica nos problemas de fluxo e transporte para fins da avaliação de risco, os resultados obtidos para o cenário de estação chuvosa são comparados aos resultados obtidos através do uso de uma abordagem estocástica alternativa, onde o meio poroso é representado também por uma distribuição de probabilidades, porém o valor de condutividade hidráulica é considerado constante para cada campo aleatório gerado, ou seja, não existe a representação da variabilidade espacial da condutividade.

6.1 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA E DADOS BÁSICOS

As informações aqui apresentadas, por questões éticas e de sigilo contratual, limitam-se àquelas informações estritamente necessárias para o entendimento e a caracterização do problema que constitui o estudo de caso. Destaca-se que são informações fidedignas sob a responsabilidade do Professor Orientador da presente tese.

Do ponto de vista ambiental, o problema se caracteriza pela existência de uma lagoa, utilizada no passado como destinação final de efluentes líquidos provenientes de uma indústria. O uso da lagoa como área de descarte dos efluentes implicou em sedimentação de finos e resíduos do processo produtivo no fundo da lagoa.

Do ponto de vista da avaliação de risco, quando considerada a água subterrânea como caminho de exposição, podem ser estabelecidos dois cenários: cenário 01 (estação chuvosa) e cenário 02 (estação seca). No caso do cenário 01 (estação chuvosa), a contaminação da água subterrânea se dá através da contribuição da lagoa para o aquífero em razão da diferença de carga hidráulica entre os dois. No caso do cenário 02 (estação seca), continua existindo a contribuição da lagoa para aquífero, mas em uma área menor, em função da retração da lagoa na estação seca. A área correspondente ao solo exposto com a retração da lagoa continua contribuindo como fonte de contaminação, mas agora devido à recarga do aquífero.

O clima da área de estudo, segundo classificação apresentada em Mendonça e Danni-Oliveira (2007), seria do tipo 3b, clima tropical litorâneo do nordeste oriental. O clima de tipo 3 se caracteriza pela formação de um clima úmido e quente, litorâneo. A unidade climática apresenta temperaturas elevadas o ano todo, com pequena queda nos meses de inverno, e concentração de pluviosidade entre o final do verão e o inverno, com destaque no outono. A temperatura média varia entre 23° C e 26° C e a média das máximas pode atingir 30° C. A pluviosidade média anual pode variar entre 700 mm e 2500 mm, apresentando seis meses de expressiva redução pluviométrica (Mendonça e Danni-Oliveira, 2007).

O clima de tipo 3, ainda segundo Mendonça e Danni-Oliveira (2007), apresenta três sub-grupos distintos (a, b e c) em função da sazonalidade pluviométrica. O clima tipo 3b abrange localidades de climas quentes, com pequena queda de temperatura no inverno, e totais pluviométricos que atingem um máximo de 270 mm no mês de abril, um dos mais chuvosos da área. Observa-se uma expressiva redução das chuvas na primavera e no início do verão nessas localidades. O clima 3b se caracteriza ainda por apresentar de 3 a 5 meses secos. O clima da região equivaleria ao clima tipo A_s, segundo classificação de Köppen, definido como clima tropical com estação seca de verão (chuvas de inverno-outono).

Em relação à litologia, estudos anteriores mostraram seqüências litológicas bem definidas na camada superficial. Na área interna junto à lagoa, tem-se uma camada de areia amarela fina (profundidade de 0 m a 1,4 m) e areia argilosa mesclada (profundidade de 1,4 m a 2,0 m). Já na área externa à lagoa, tem-se uma camada de areia amarela fina (profundidade de 0 m a 1,0 m) e areia argilosa (profundidade de 1,0 m a 1,3 m).

Já para as seqüências litológicas mais profundas, estes estudos anteriores mostraram, para a área interna à lagoa, camadas de sedimento de fundo (profundidade de 0 m a 0,5 m); cobertura coluvionar (0,5 m a 4,0 m); arenito (4,0 m a 8,0 m) e calcário (8,0 m a 17,0 m). Já para a área externa à lagoa, observaram-se camadas de cobertura coluvionar (0 m a 4,0 m); arenito (4,0 m a 8,0 m) e calcário (8,0 m a 17,0 m). Portanto, existe a presença de uma camada de cobertura coluvionar sobre o arenito, mesmo na área interna da lagoa, que está situada sob a camada de sedimentos de fundo.

É importante destacar que estes estudos anteriores apontam para a importância da camada de cobertura coluvionar para o processo de fluxo e transporte de contaminantes, devido ao seu maior valor de condutividade hidráulica em comparação aos valores observados para as camadas de arenito e calcário. Contudo, esta camada não foi considerada na presente tese, em razão do pequeno número de dados de condutividade existentes para a referida camada, o que inviabilizou a análise de sua estrutura espacial.

Em relação ao relevo, na área em torno da lagoa, destaca-se uma serra a sudoeste com cotas superiores a 100 m, decaindo na direção N-NE até cotas de cerca de 5 m, em regiões de planície de inundação e salinas já próximas do oceano, onde predomina uma extensa faixa arenosa. Os elementos hidrográficos presentes na área são pequenos cursos de água intermitentes, que cortam toda a área no sentido SW – NE, via de regra, desaguando em pequenas lagoas intermitentes ou não.

As Tabelas 6.1 e 6.2 apresentam, respectivamente, propriedades físicas do solo à margem da lagoa e alguns parâmetros usados na simulação do fluxo e do transporte. Já a Tabela 6.3 apresenta a concentração média dos principais contaminantes identificados em estudos de avaliação de risco anteriores e que foram utilizados no problema de transporte.

Tabela 6.1 Propriedades físicas do solo natural à margem da lagoa

Característica	Unidade	Variação	Média	Desvio-padrão
Densidade das partículas	g/cm ³	2,60 – 3,85	3,40	0,43
Densidade do solo	g/cm ³	1,69 – 2,21	1,82	0,19
Porosidade	adim.	0,15 – 0,54	0,45	0,13
Porosidade efetiva	adim.	0,15 – 0,37	0,23	0,08
Fração de carbono orgânico	%	0,11 – 0,41	0,23	0,10

Fonte: não divulgada

Tabela 6.2 Parâmetros utilizados na simulação dos problemas de fluxo e transporte

Parâmetro	Unidade	Estação	
		Seca	Chuvosa
Espessura da camada de sedimento de fundo	cm	50	50
Área do espelho de água da lagoa	m ²	219.183	329.183
Área de solo contaminado exposto	m ²	110.000	---
Porosidade efetiva	---	0,23	0,23
Recarga do aquífero	mm/ano	190	315
Fração de carbono orgânico	%	0,23	0,23

Fonte: não divulgada

Tabela 6.3 Concentração média dos principais contaminantes

Contaminante	Concentração na fonte (mg/kg)
Criseno	0,25
Benzo(a)pireno	0,18
Dibenzo(a,h)antraceno	0,04
Benzeno	0,02
Arsênio	0,39

Fonte: não divulgada

6.2 GERAÇÃO DOS CAMPOS ALEATÓRIOS DE CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA

Este item apresenta os procedimentos realizados para a geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica. Inicialmente, apresenta-se uma análise preliminar dos dados, procurando definir a distribuição de probabilidades a ser utilizada na sua representação. Na seqüência, é apresentada a caracterização da estrutura espacial da condutividade hidráulica, procurando identificar o modelo teórico para a representação da sua variabilidade espacial. Finalmente, apresenta-se o uso do método de simulação gaussiana seqüencial (SGS) para a geração dos campos aleatórios e a análise dos resultados obtidos.

6.2.1 Análise Preliminar dos Dados

A análise preliminar dos dados, como mencionado anteriormente, teve por objetivo identificar a distribuição de probabilidades para a representação dos dados de condutividade hidráulica (K). Foram comparadas, sob o ponto de vista qualitativo, duas distribuições de probabilidades: normal e log-normal.

A Tabela 6.4 apresenta valores de condutividade hidráulica, obtidos a partir de ensaios de permeabilidade, e a Figura 6.1 apresenta a localização espacial dos pontos de amostragem e ordem de grandeza dos valores do logaritmo da condutividade hidráulica.

Tabela 6.4 Valores de condutividade hidráulica, obtidos a partir de ensaios de permeabilidade

Ponto de Amostragem	X (m)	Y (m)	K (m/s)	log K
PA01	7,82	294,16	$1,20 \times 10^{-6}$	-5,921
PA02	334,46	1252,58	$3,30 \times 10^{-7}$	-6,481
PA03	274,97	1112,39	$1,60 \times 10^{-6}$	-5,796
PA04	396,87	968,53	$8,01 \times 10^{-8}$	-7,096
PA05	761,16	1060,13	$1,30 \times 10^{-6}$	-5,886
PA06	515,41	579,89	$1,20 \times 10^{-6}$	-5,921
PA07	432,59	675,21	$5,92 \times 10^{-6}$	-5,228
PA08	402,79	561,13	$3,33 \times 10^{-6}$	-5,478
PA09	499,70	512,82	$7,60 \times 10^{-7}$	-6,119
PA10	721,31	1543,28	$1,75 \times 10^{-6}$	-5,757
PA11	824,78	1343,40	$3,35 \times 10^{-7}$	-6,475
PA12	717,52	861,59	$1,70 \times 10^{-8}$	-7,770
PA13	698,30	782,62	$5,75 \times 10^{-7}$	-6,240
PA14	606,82	372,57	$2,87 \times 10^{-7}$	-6,542
PA15	725,98	75,90	$1,06 \times 10^{-6}$	-5,975
PA16	381,96	8,59	$2,00 \times 10^{-6}$	-5,699

Fonte: não divulgada

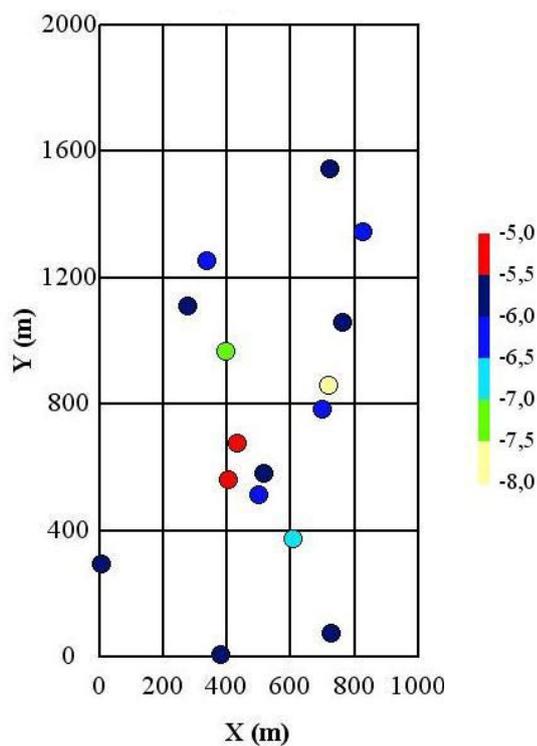


Figura 6.1 Pontos de amostragem e valores da condutividade hidráulica (em log K)
(eixo horizontal – direção Oeste-Leste; eixo vertical – direção Sul - Norte)

As Figuras 6.2 e 6.3 apresentam os valores de condutividade hidráulica, segundo as direções Oeste-Leste e Sul-Norte, respectivamente. A dispersão dos valores de condutividade não indica nenhuma tendência significativa de diminuição ou aumento em nenhuma das duas direções.

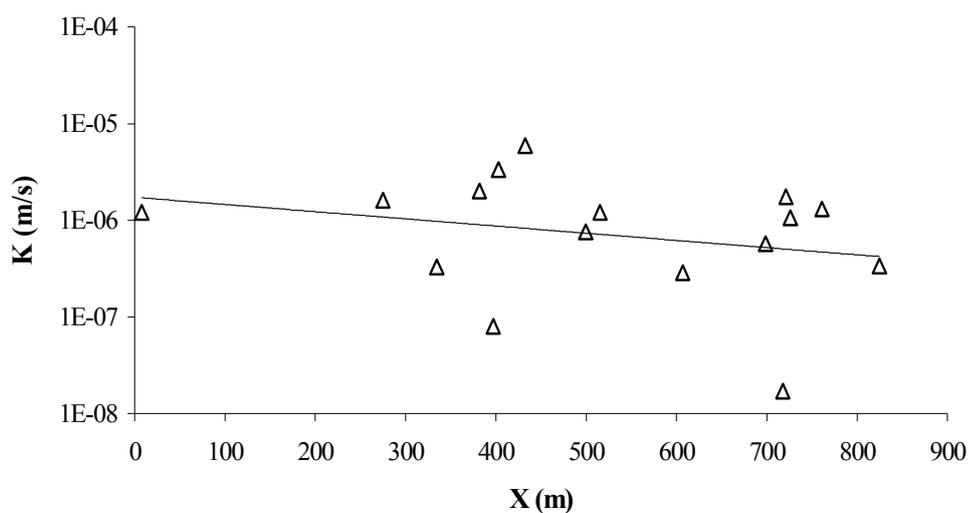


Figura 6.2 Variação da condutividade hidráulica em relação à direção Oeste – Leste

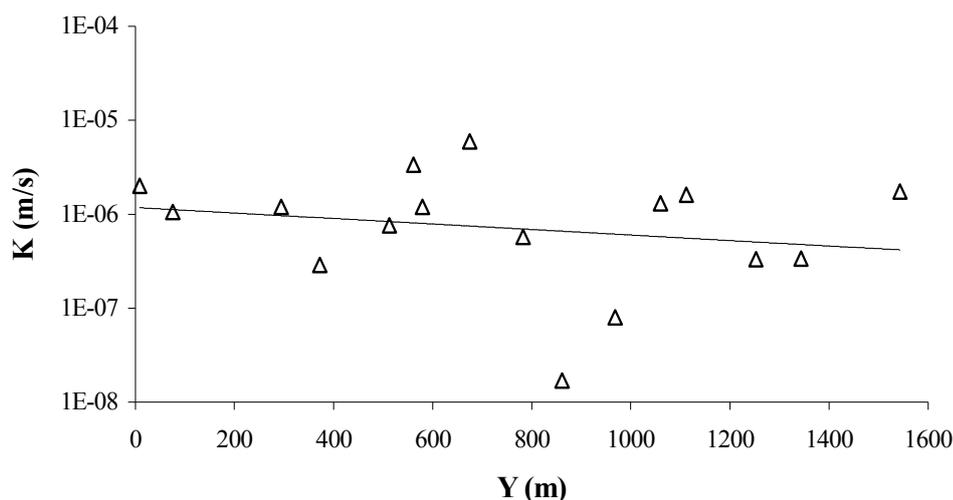


Figura 6.3 Variação da condutividade hidráulica em relação à direção Sul - Norte

A Tabela 6.5 apresenta um resumo das estatísticas dos valores observados de condutividade hidráulica e a Tabela 6.6 e a Figura 6.4 mostram o histograma de frequência relativa, considerando-se os dados apresentados na Tabela 6.4. Verifica-se, a partir da Figura 6.4, que o histograma de frequências relativas dos valores de condutividade hidráulica não representa o histograma esperado para uma distribuição normal.

Tabela 6.5 Resumo das estatísticas dos valores de condutividade hidráulica (em m/s)

Parâmetro estatístico	Valor	Parâmetro estatístico	Valor
Média	$1,36 \times 10^{-6}$	Valor máximo	$5,92 \times 10^{-6}$
Desvio-padrão	$1,49 \times 10^{-6}$	Quartil superior	$1,64 \times 10^{-6}$
Variância	$2,21 \times 10^{-12}$	Mediana	$1,13 \times 10^{-6}$
Coefficiente de variação	1,09	Quartil inferior	$3,34 \times 10^{-7}$
Coefficiente de assimetria	2,19	Valor mínimo	$1,70 \times 10^{-8}$

Tabela 6.6 Frequências de classe para os valores de condutividade hidráulica (em m/s)

Classe	Limite inferior	Limite superior	Dados da classe	Dados acumulados	Frequência relativa	Frequência acumulada
1	$1,500 \times 10^{-8}$	$8,700 \times 10^{-7}$	7	7	0,438	0,438
2	$8,700 \times 10^{-7}$	$1,725 \times 10^{-6}$	5	12	0,313	0,750
3	$1,725 \times 10^{-6}$	$2,580 \times 10^{-6}$	2	14	0,125	0,875
4	$2,580 \times 10^{-6}$	$3,435 \times 10^{-6}$	1	15	0,063	0,938
5	$3,435 \times 10^{-6}$	$4,290 \times 10^{-6}$	0	15	0,000	0,938
6	$4,290 \times 10^{-6}$	$5,145 \times 10^{-6}$	0	15	0,000	0,938
7	$5,145 \times 10^{-6}$	$6,000 \times 10^{-6}$	1	16	0,063	1,000

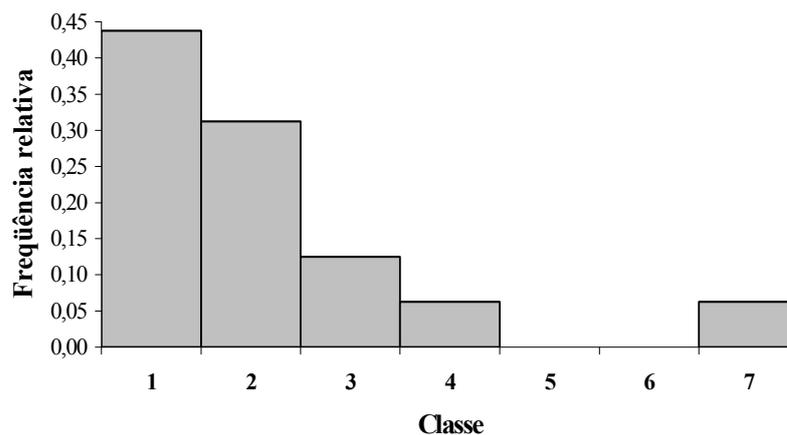


Figura 6.4 Histograma de frequências relativas dos valores de condutividade hidráulica

A Tabela 6.7 e as Figuras 6.5 e 6.6 apresentam uma comparação entre os valores de frequência amostral e de probabilidade teórica, procurando auxiliar na verificação da adequação do ajuste. Observa-se, a partir dos valores apresentados na Tabela 6.7, que o afastamento máximo (em módulo) entre a frequência amostral e a probabilidade teórica resultou em 0,163. Já a raiz quadrada do afastamento quadrático médio resultou em aproximadamente 0,100.

Tabela 6.7 Ajuste da distribuição normal aos valores de condutividade hidráulica

n.	Ponto de amostragem	K (m/s)	Frequência amostral	Probabilidade teórica	Afastamento
1	PA12	$1,70 \times 10^{-8}$	0,059	0,183	-0,124
2	PA04	$8,01 \times 10^{-8}$	0,118	0,195	-0,077
3	PA14	$2,87 \times 10^{-7}$	0,176	0,235	-0,059
4	PA02	$3,30 \times 10^{-7}$	0,235	0,244	-0,009
5	PA11	$3,35 \times 10^{-7}$	0,294	0,245	0,049
6	PA13	$5,75 \times 10^{-7}$	0,353	0,299	0,054
7	PA09	$7,60 \times 10^{-7}$	0,412	0,343	0,068
8	PA15	$1,06 \times 10^{-6}$	0,471	0,420	0,050
9	PA01	$1,20 \times 10^{-6}$	0,529	0,457	0,072
10	PA06	$1,20 \times 10^{-6}$	0,588	0,457	0,131
11	PA05	$1,30 \times 10^{-6}$	0,647	0,484	0,163
12	PA03	$1,60 \times 10^{-6}$	0,706	0,564	0,141
13	PA10	$1,75 \times 10^{-6}$	0,765	0,604	0,161
14	PA16	$2,00 \times 10^{-6}$	0,824	0,667	0,157
15	PA08	$3,33 \times 10^{-6}$	0,882	0,908	-0,025
16	PA07	$5,92 \times 10^{-6}$	0,941	0,999	-0,058

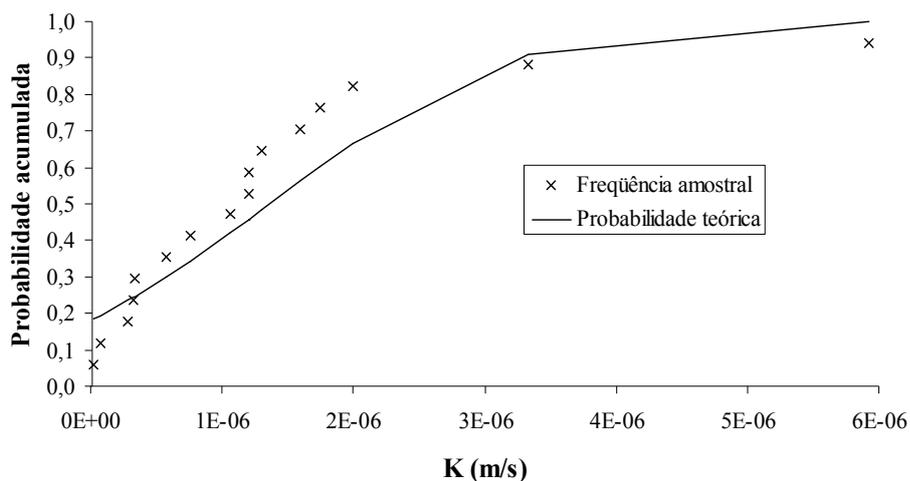


Figura 6.5 Comparação entre as frequências amostrais e as probabilidades teóricas para os valores de condutividade hidráulica

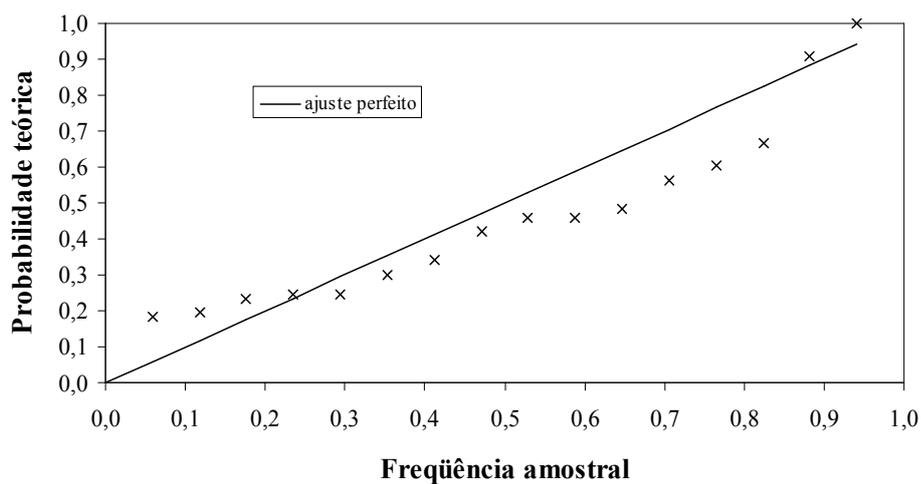


Figura 6.6 Afastamento do ajuste perfeito entre as frequências amostrais e as probabilidades teóricas para os valores de condutividade hidráulica

A Tabela 6.8 apresenta um resumo das estatísticas dos valores do logaritmo da condutividade hidráulica. A Tabela 6.9 e a Figura 6.7 definem o histograma de frequências relativas do logaritmo dos valores de condutividade, considerando-se os dados apresentados na Tabela 6.4.

Tabela 6.8 Resumo das estatísticas dos logaritmos da condutividade hidráulica

Parâmetro estatístico	Valor	Parâmetro estatístico	Valor
Média	-6,149	Valor máximo	-5,228
Desvio-padrão.	0,627	Quartil superior	-5,786
Variância	0,393	Mediana	-5,948
Coefficiente de variação	-0,102	Quartil inferior	-6,477
Coefficiente de assimetria	-1,212	Valor mínimo	-7,770

Tabela 6.9 Frequências de classe dos logaritmos da condutividade hidráulica

Classe	Limite inferior	Limite superior	Dados da classe	Dados acumulados	Frequência relativa	Frequência acumulada
1	-8,0	-7,571	1	1	0,063	0,063
2	-7,571	-7,143	0	1	0,000	0,063
3	-7,143	-6,714	1	2	0,063	0,125
4	-6,714	-6,286	3	5	0,188	0,313
5	-6,286	-5,857	6	11	0,375	0,688
6	-5,857	-5,429	4	15	0,250	0,938
7	-5,429	-5,0	1	16	0,063	1,000

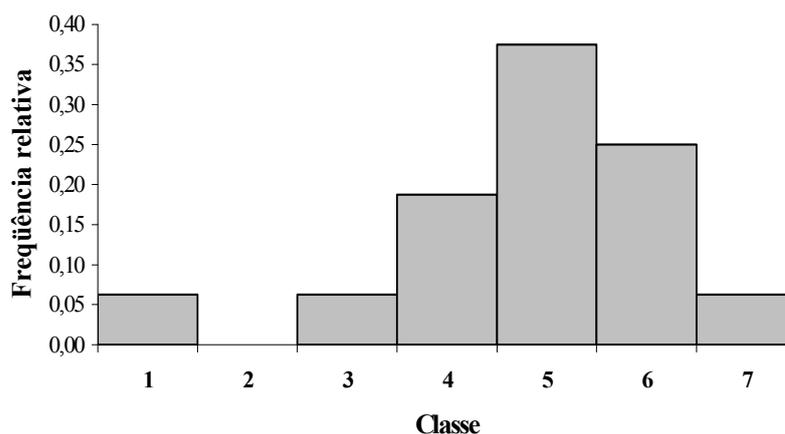


Figura 6.7 Histograma de frequências relativas dos logaritmos da condutividade hidráulica

Verifica-se, a partir da Figura 6.7, que o histograma de frequências relativas do logaritmo dos valores de condutividade hidráulica não representa exatamente o histograma esperado para uma distribuição normal. Contudo, esta característica é principalmente devido ao valor de condutividade hidráulica referente ao ponto de amostragem PA12 ($1,70 \times 10^{-8}$ m/s). Se o referido valor for considerado como um ponto fora do padrão (*outlier*) ou mesmo considerando-se um número de classes diferente do adotado inicialmente, o histograma de frequência relativa poderia representar aproximadamente o histograma esperado para uma distribuição normal. De qualquer forma, a análise preliminar dos dados tem como objetivo definir, do ponto de vista qualitativo, se a condição de normalidade deve ser adotada para os valores de condutividade hidráulica ou para o logaritmo dos referidos valores.

A Tabela 6.10 e as Figuras 6.8 e 6.9 mostram uma comparação entre a frequência amostral e a probabilidade teórica para o logaritmo da condutividade hidráulica, auxiliando na verificação da adequação do ajuste. Observa-se, a partir da Tabela 6.10, que o afastamento máximo (em módulo) entre a frequência amostral e a probabilidade teórica resultou em 0,139. Já a raiz quadrada do afastamento quadrático médio resultou em aproximadamente 0,070.

Tabela 6.10 Ajuste da distribuição normal aos logaritmos da condutividade hidráulica

n.	Ponto de amostragem	log K	Frequência amostral	Probabilidade teórica	Afastamento
1	PA12	-7,770	0,059	0,005	0,054
2	PA04	-7,096	0,118	0,065	0,052
3	PA14	-6,542	0,176	0,265	-0,089
4	PA02	-6,481	0,235	0,298	-0,063
5	PA11	-6,475	0,294	0,301	-0,007
6	PA13	-6,240	0,353	0,442	-0,089
7	PA09	-6,119	0,412	0,519	-0,107
8	PA15	-5,975	0,471	0,610	-0,139
9	PA01	-5,921	0,529	0,642	-0,113
10	PA06	-5,921	0,588	0,642	-0,054
11	PA05	-5,886	0,647	0,663	-0,016
12	PA03	-5,796	0,706	0,713	-0,008
13	PA10	-5,757	0,765	0,734	0,030
14	PA16	-5,699	0,824	0,764	0,060
15	PA08	-5,478	0,882	0,858	0,024
16	PA07	-5,228	0,941	0,929	0,012

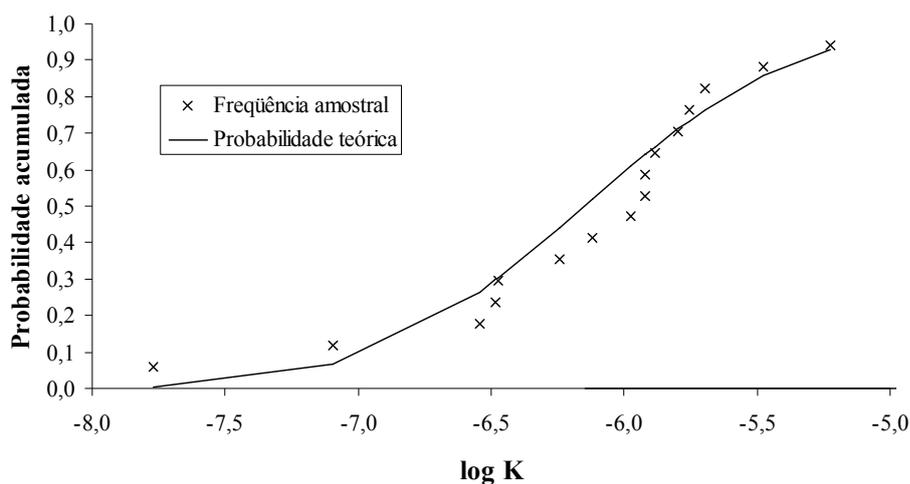


Figura 6.8 Comparação entre as frequências amostrais e as probabilidades teóricas para os logaritmos da condutividade hidráulica

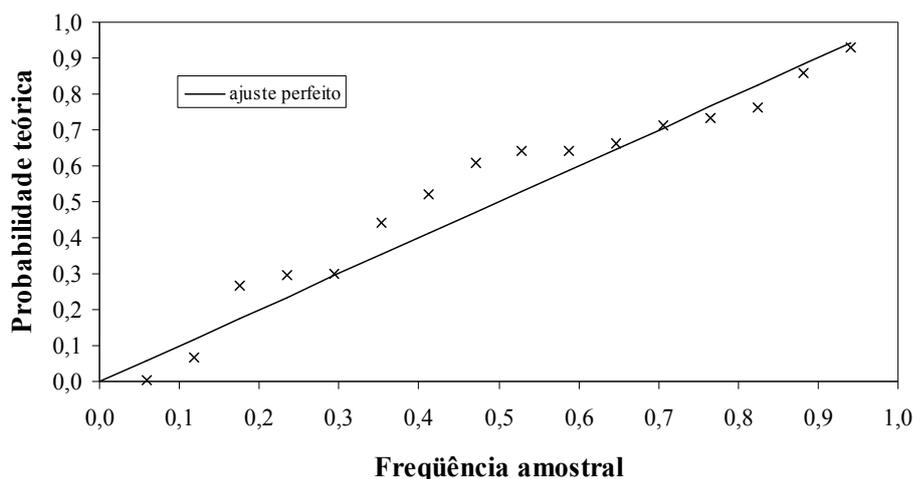


Figura 6.9 Afastamento do ajuste perfeito entre as frequências amostrais e as probabilidades teóricas para os logaritmos da condutividade hidráulica

Comparando-se os histogramas e os valores de afastamento entre as frequências amostrais e as probabilidades teóricas, verifica-se que a hipótese de normalidade é melhor aplicada ao logaritmo dos valores de condutividade hidráulica do que diretamente aos valores de condutividade. Como consequência, optou-se por desenvolver a análise da estrutura espacial da condutividade hidráulica e a geração dos campos aleatórios a partir dos valores de logaritmo da condutividade.

6.2.2 Geração dos Campos Aleatórios de Condutividade Hidráulica

O procedimento utilizado para a geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica segue o procedimento que caracteriza o método da simulação gaussiana seqüencial (SGS), conforme apresentado por Deutsch e Journel (1998) e descrito resumidamente no item 5.3.3

O primeiro passo consiste na obtenção dos escores padronizados (z), obtidos a partir dos logaritmos da condutividade hidráulica (y), apresentados na Tabela 6.4. A obtenção dos escores padronizados (z) seguiu o procedimento descrito por Deutsch e Journel (1998), que procura preservar os percentis (frequências relativas) associados a cada valor observado durante o processo de transformação da variável y na variável normal padrão z .

O próximo passo consiste na determinação do variograma amostral, considerando-se a localização das amostras e os escores padronizados (z), apresentados na Tabela 6.11. Utilizou-se o programa computacional GEOPACK (Yates e Yates, 1990) para o cálculo do variograma

amostral. Foram testados diferentes números de intervalos (*nlags*) e diversos espaçamentos (*lags*), procurando-se obter um variograma amostral relativamente estável. Destaca-se que, em razão do número relativamente pequeno de observações, não foi possível analisar, com algum grau de precisão, a existência ou não de anisotropia em relação à condutividade hidráulica. Adotou-se, portanto, a hipótese de que o meio é isotrópico para a geração dos campos de condutividade hidráulica.

Tabela 6.11 Escores padronizados (*z*) para os valores dos logaritmos da condutividade (*y*)

Ponto de Amostragem	X (m)	Y (m)	log K	Escores padronizados (<i>z</i>)
PA01	7,82	294,16	-5,921	0,0784
PA02	334,46	1252,58	-6,481	-0,7764
PA03	274,97	1112,39	-5,796	0,5791
PA04	396,87	968,53	-7,096	-1,3180
PA05	761,16	1060,13	-5,886	0,4023
PA06	515,41	579,89	-5,921	0,2372
PA07	432,59	675,21	-5,228	1,8627
PA08	402,79	561,13	-5,478	1,3180
PA09	499,70	512,82	-6,119	-0,2372
PA10	721,31	1543,28	-5,757	0,7764
PA11	824,78	1343,40	-6,475	-0,5791
PA12	717,52	861,59	-7,770	-1,8627
PA13	698,30	782,62	-6,240	-0,4023
PA14	606,82	372,57	-6,542	-1,0100
PA15	725,98	75,90	-5,975	-0,0784
PA16	381,96	8,59	-5,699	1,0100
		Média	-6,149	0,000
		Desvio-Padrão	0,627	0,993
		Variância	0,393	0,986

Em função do número de pontos amostrados, o número máximo de pares de pontos para o cálculo do variograma amostral é de 120 pares. A menor distância entre dois pontos de amostragem resultou em 68,9 m e a maior distância em 1571,8 m. A distância média entre pontos resultou em 624,2 m. Estas distâncias condicionam a obtenção do variograma amostral, uma vez que não é possível nenhuma análise para distâncias inferiores a 68,9 m e para distâncias superiores a 1571,8 m. Estas distâncias também auxiliam na definição das combinações de número de intervalos (*nlags*) e de espaçamentos (*lags*).

Após o cálculo do variograma amostral para várias combinações de números de intervalos (*nlags*) e de espaçamento (*lags*), foram definidos quatro alternativas de variograma amostral e que foram utilizadas na estimativa dos modelos teóricos do variograma, a saber:

Alternativa 01 – Variograma amostral definido com $nlag = 5$ e $lag = 240$ m;

Alternativa 02 – Variograma amostral definido com $nlag = 6$ e $lag = 200$ m;

Alternativa 03 – Variograma amostral definido com $nlag = 7$ e $lag = 160$ m;

Alternativa 04 – Variograma amostral definido com $nlag = 8$ e $lag = 140$ m.

O objetivo da definição das quatro alternativas foi o de propiciar uma análise de sensibilidade dos modelos teóricos aos diferentes variogramas amostrais. A Tabela 6.12 e a Figura 6.10 apresentam o variograma amostral para as quatro alternativas estabelecidas.

Tabela 6.12 Variograma amostral obtido a partir dos escores padronizados (z) dos logaritmos da condutividade hidráulica (y)

Alternativa	Intervalo (lag)	Número de pares considerados	Distância média (m)	Ordenada do variograma
01	1	5	98,1	0,624
	2	23	270,0	1,616
	3	40	506,0	0,896
	4	23	708,0	0,969
	5	17	953,0	0,802
02	1	2	75,1	0,590
	2	18	212,0	1,346
	3	27	418,0	1,355
	4	33	590,0	0,800
	5	15	799,0	0,809
	6	13	978,0	0,888
03	1	1	68,9	0,113
	2	12	158,0	1,151
	3	17	322,0	1,725
	4	27	485,0	0,932
	5	25	624,0	0,841
	6	11	799,0	0,840
	7	13	951,0	0,987
04	1	1	68,9	0,113
	2	10	144,0	1,212
	3	15	299,0	1,804
	4	18	431,0	1,214
	5	28	558,0	0,580
	6	13	694,0	0,993
	7	11	837,0	1,102
	8	10	967,0	0,909

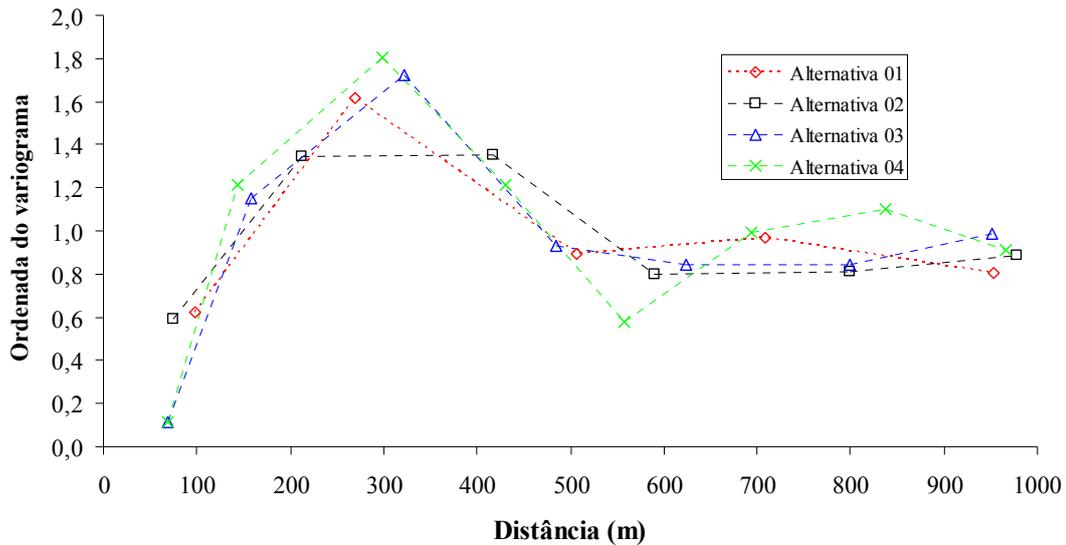


Figura 6.10 Variogramas amostrais obtidos a partir dos escores padronizados (z) dos logaritmos da condutividade hidráulica (y)

Verifica-se, a partir da Tabela 6.12 e da Figura 6.10, uma grande variabilidade do variograma no primeiro intervalo em função do número de pares usados para o cálculo da ordenada. Além disso, verifica-se também que as ordenadas estimadas para o variograma amostral, independente da alternativa, atingem valores superiores à 1 (um) para distâncias da ordem de 150 m a 200 m, sugerindo a inexistência de correlação já a partir da referida distância. Para os últimos intervalos dos variogramas amostrais, as ordenadas se estabilizam em valores próximos de 1 (um).

Após a obtenção dos variogramas amostrais, procurou-se definir o melhor modelo teórico para a representação do variograma. Foram analisados os quatro modelos teóricos apresentados no item 5.2: gaussiano, exponencial, esférico e potência, descritos pelas Equações 5.16 a 5.19.

Para cada um dos quatro modelos teóricos, foram estabelecidos quatro diferentes ajustes, um para cada alternativa de variograma amostral. A Tabela 6.13 e as Figuras 6.11 a 6.14 apresentam os ajustes obtidos para todos os modelos teóricos e alternativas considerados no presente estudo. Os ajustes apresentados se referem àqueles obtidos após a validação cruzada (*cross-validation*) dos modelos teóricos analisados.

A análise dos resultados dos ajustes foi restrita aos modelos estacionários, representados pelos modelos gaussiano, exponencial e esférico. Verifica-se, a partir dos resultados apresentados na Tabela 6.13 e nas Figuras 6.11 a 6.13, que as maiores diferenças em termos de ajuste dos modelos teóricos se referem ao valor estimado para a amplitude (*range*).

Tabela 6.13 Parâmetros resultantes dos ajustes dos modelos teóricos de variograma

Alternativa	Modelo gaussiano			Modelo exponencial		
	Efeito- pepita	Patamar	Amplitude	Efeito- pepita	Patamar	Amplitude
01	0,0	1,058	99,4	0,0	1,035	48,9
02	$5,931 \times 10^{-2}$	1,051	84,8	0,0	1,052	46,3
03	0,0	1,065	85,4	0,0	1,066	49,2
04	0,0	1,066	79,2	0,0	1,066	44,5
Alternativa	Modelo esférico			Modelo de potência		
	Efeito- pepita	Patamar	Amplitude	Efeito- pepita	Patamar	Amplitude
01	$2,074 \times 10^{-4}$	1,057	234,9	$4,106 \times 10^{-2}$	0,881	$1,798 \times 10^{-2}$
02	$1,096 \times 10^{-1}$	1,046	211,1	$5,250 \times 10^{-2}$	0,755	$3,183 \times 10^{-2}$
03	0,0	1,061	174,2	0,0	0,366	0,159
04	0,0	1,064	161,7	0,0	0,427	0,141

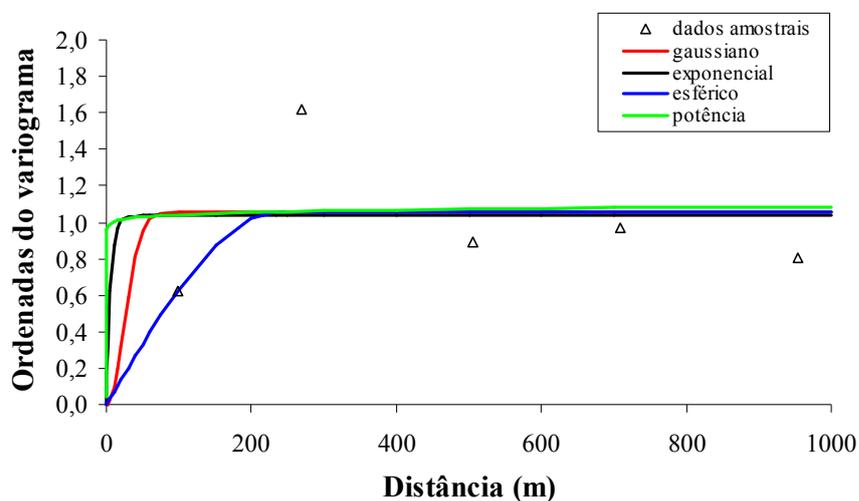


Figura 6.11 Ajustes dos modelos teóricos ao variograma amostral (alternativa 01)

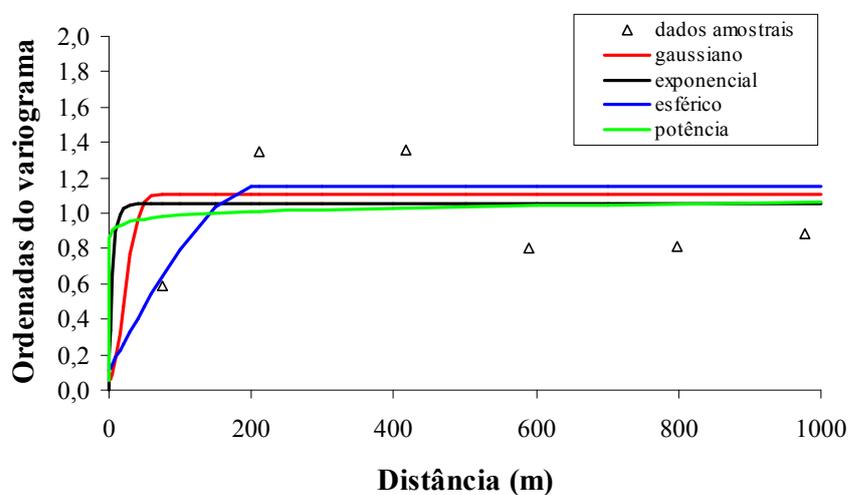


Figura 6.12 Ajustes dos modelos teóricos ao variograma amostral (alternativa 02)

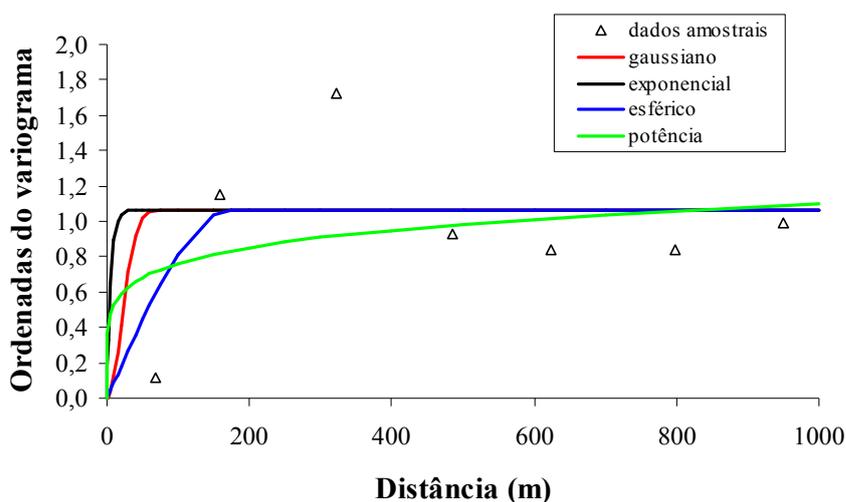


Figura 6.13 Ajustes dos modelos teóricos ao variograma amostral (alternativa 03)

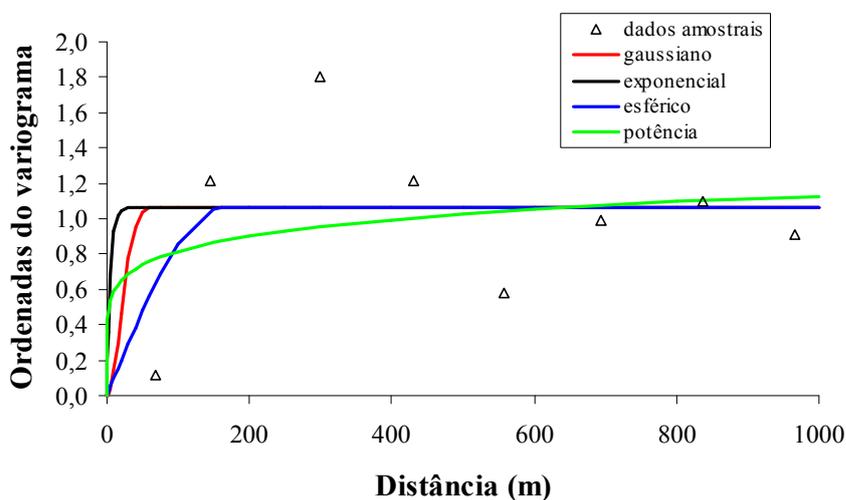


Figura 6.14 Ajustes dos modelos teóricos ao variograma amostral (alternativa 04)

Em relação aos valores de amplitude, verificou-se que o modelo exponencial apresentou os menores valores de amplitude, enquanto os maiores valores foram apresentados pelo modelo esférico. Considerando-se os diferentes variogramas amostrais (alternativas 01 a 04) utilizados para os ajustes dos modelos teóricos, verificou-se também que o modelo esférico apresentou maiores variações de amplitude quando comparado aos modelos gaussiano e exponencial.

Os valores de efeito-pepita resultaram zero ou próximo de zero para todos os modelos teóricos e todas as alternativas analisadas, com exceção do modelo esférico para a alternativa 02. Provavelmente, isto ocorreu em função do espaçamento relativamente grande observado entre os pontos de amostragem utilizados no estudo.

Em relação aos valores de patamar, os resultados mostraram que este parâmetro não foi muito sensível à mudança do modelo teórico e do variograma amostral. Destaca-se que os valores de patamar dos modelos estacionários (gaussiano, exponencial e esférico) resultaram todos superiores ao valor 1 (um), o que representa uma incoerência quando se trabalha com variáveis normais padronizadas. Este aspecto constitui também um inconveniente na geração dos campos aleatórios, uma vez que o programa computacional utilizado para gerar os campos requer que a soma dos valores de efeito-pepita e de patamar resulte igual a 1 (um).

De modo qualitativo, em função dos resultados obtidos nesta etapa de análise estrutural, optou-se por utilizar os modelos gaussiano e esférico para a geração dos campos aleatórios de z . Justifica-se a escolha pelo fato dos dois modelos representarem hipóteses significativamente distintas quanto ao comportamento espacial da variável z na área de estudo. Além disso, adotou-se valores dos parâmetros efeito-pepita, patamar e amplitude iguais a respectivamente 0,0, 1,0 e 100,0 para o modelo gaussiano. Já para o modelo esférico, adotou-se valores dos parâmetros efeito-pepita, patamar e amplitude iguais a respectivamente 0,0, 1,0 e 200,0. Estes valores foram definidos procurando-se respeitar tanto as exigências em relação à soma dos valores de efeito-pepita e patamar do programa computacional usado para a geração dos campos, como já mencionado, quanto à ordem de grandeza dos valores de amplitude, conforme obtida na análise da estrutura espacial. A Figura 6.15 apresenta uma comparação dos variogramas dos dois modelos teóricos escolhidos.

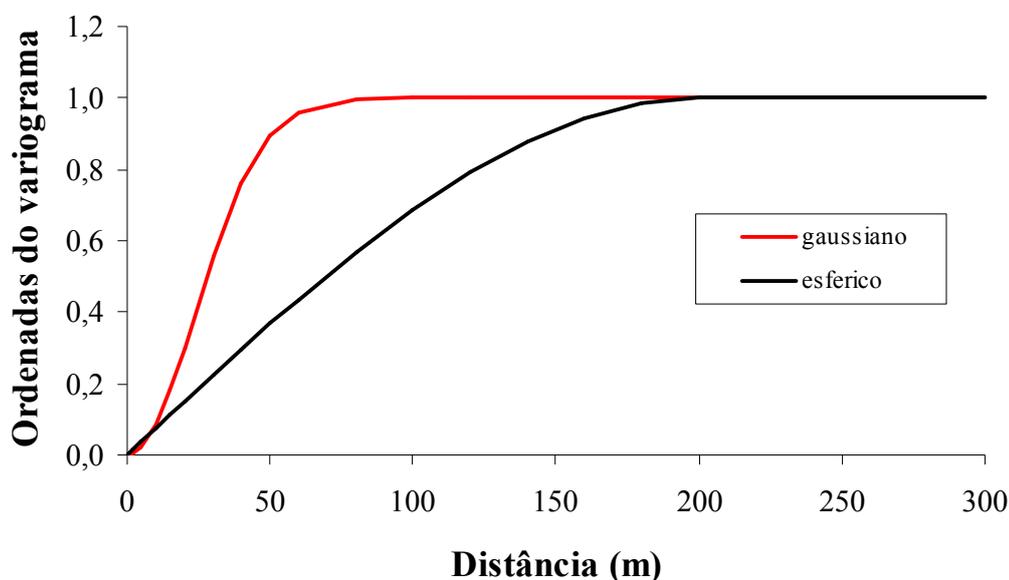


Figura 6.15 Comparação dos modelos teóricos usados na geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica

O próximo passo após a definição dos modelos teóricos de variograma foi a geração dos campos aleatórios da variável normal padronizada (z). O método usado foi o método da simulação gaussiana seqüencial (SGS), discutido principalmente no item 5.3.3. Deutsch e Journel (1998) apresentam o programa *sgsim*, capaz de gerar realizações equiprováveis de variáveis espaciais normais (padronizadas ou não), através do princípio de simulação seqüencial, segundo a hipótese de representação da variável espacial através de uma distribuição de probabilidade multigaussiana.

O programa *sgsim* foi utilizado para gerar realizações equiprováveis de campos aleatórios da variável normal padronizada z . Deste modo, o procedimento para a obtenção dos campos aleatórios de condutividade consistiu em realizar a transformação inversa da variável normal padronizada z para a variável normal y , que representa o logaritmo da condutividade hidráulica ($\log K$), para, na seqüência, serem calculados os valores de condutividade (K).

A definição e o formato dos dados de entrada do programa *sgsim* podem ser obtidos a partir de Deutsch e Journel (1998). Aqui são destacados, como dados de entrada, principalmente: o número de simulações, o conjunto de observações (coordenadas e valores de z), a definição da grade a ser simulada e o modelo teórico de variograma.

Os campos aleatórios de condutividade hidráulica foram gerados considerando-se uma área retangular de 2 km (sentido leste-oeste) x 5 km (sentido norte-sul) com espaçamentos de 40 m e 100 m, respectivamente, em cada uma das direções, resultando em uma grade de 50 x 50 células. O valor de condutividade hidráulica simulado para uma célula refere-se ao seu ponto central e foi considerado como sendo constante para toda a célula.

Os campos de condutividade hidráulica foram simulados como campos bi-dimensionais e isotrópicos, ou seja, para cada célula, adotou-se o mesmo valor para K_x e K_y . A justificativa para adoção de tal hipótese é o fato do número de pontos amostrados (16 pontos) ser relativamente pequeno para uma análise mais confiável quanto à anisotropia do meio poroso, como já destacado anteriormente.

Ainda em relação à geração dos campos de condutividade, foram adotados os modelos gaussiano e esférico para a representação da variabilidade espacial da condutividade hidráulica, conforme também já destacado anteriormente. Nesta fase, foram gerados 250 campos aleatórios de condutividade hidráulica para cada um dos dois modelos teóricos de variograma adotados.

As Figuras 6.16 e 6.17 apresentam alguns exemplos de realizações de campos aleatórios da variável y (logaritmo da condutividade hidráulica), segundo os modelos gaussiano e esférico, respectivamente.

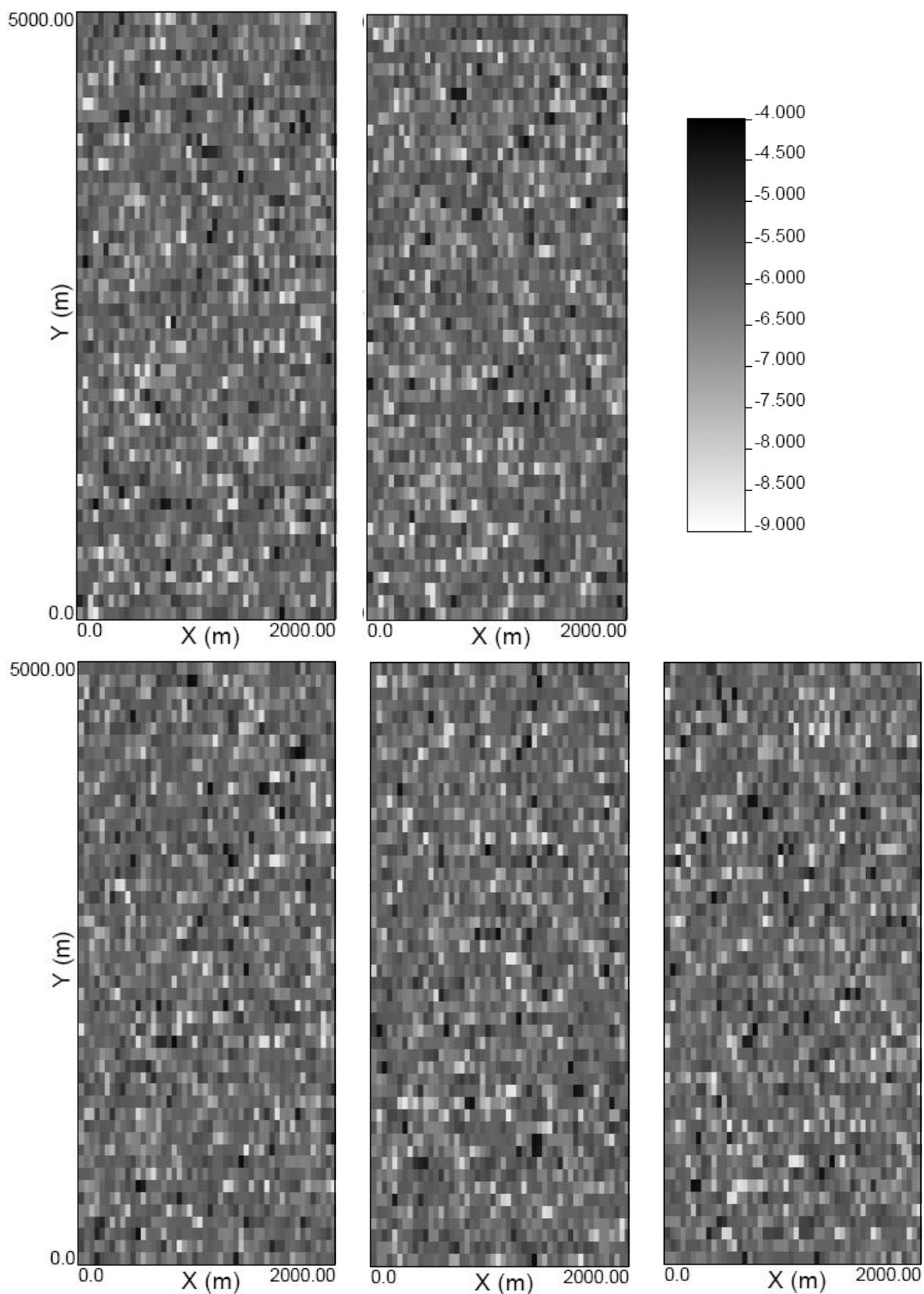


Figura 6.16 Realizações 001, 023, 077, 135 e 189 da variável y (logaritmo da condutividade hidráulica) obtidas a partir do modelo gaussiano do variograma teórico

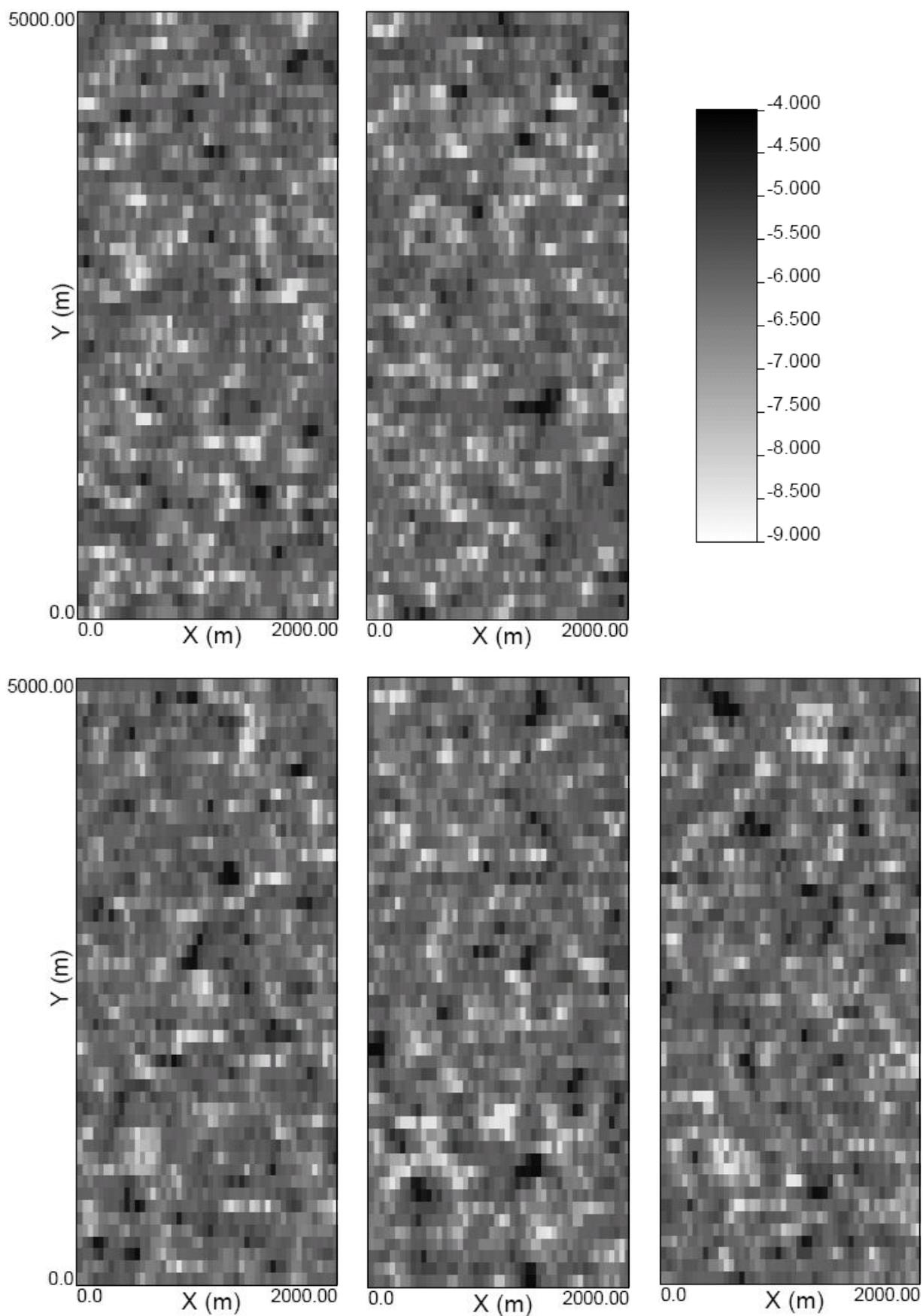


Figura 6.17 Realizações 001, 023, 077, 135 e 189 da variável y (logaritmo da condutividade hidráulica) obtidas a partir do modelo esférico do variograma teórico

Verifica-se, a partir das Figuras 6.16 e 6.17, que os campos gerados se apresentam, de modo geral, bastante descontínuos em termos de valores de y . Isto ocorre porque a discretização espacial adotada para a grade é relativamente grande em comparação às amplitudes dos dois modelos, gaussiano e esférico. Contudo, é importante destacar, comparando-se as Figuras 6.16 e 6.17, que as imagens (campos) na Figura 6.17 parecem menos nítidas do que as imagens na Figura 6.16. Esta característica se deve ao fato do modelo esférico apresentar um valor de amplitude (200,0 m) maior do que o modelo gaussiano (100,0 m) e, portanto, possuir a tendência de produzir superfícies mais contínuas. A impressão de menor nitidez da imagem da Figura 6.17 é devida a essa maior continuidade.

Na seqüência são analisados, do ponto de vista quantitativo, os campos aleatórios de condutividade hidráulica gerados pelo método de simulação gaussiana seqüencial (SGS), considerando-se os dois modelos teóricos de variograma, gaussiano e esférico, com o objetivo de definir qual deve ser usado nas simulações de fluxo e transporte de contaminantes.

6.2.3 Análise dos Resultados da Geração dos Campos Aleatórios de Condutividade Hidráulica

A análise dos resultados da geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica teve por finalidade verificar as propriedades estatísticas e a estrutura espacial do conjunto de campos aleatórios gerados pelo método de simulação gaussiana seqüencial (SGS), considerando-se os dois modelos teóricos de variograma, gaussiano e esférico.

O objetivo principal foi o de definir qual conjunto de campos aleatórios, o gerado pelo modelo gaussiano ou o gerado pelo modelo esférico, seria utilizado nas simulações de fluxo e transporte de contaminantes. Como mencionado anteriormente, nesta fase, o número de simulações para cada um dos dois modelos teóricos de variograma foi igual a 250 campos.

A análise dos resultados da geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica consistiu basicamente em avaliar o comportamento dos escores padronizados (z) e dos logaritmos da condutividade hidráulica (y). É importante destacar que o procedimento adotado para a geração dos campos foi usar o método de simulação gaussiana seqüencial (SGS) para gerar campos aleatórios dos escores padronizados (z). Os campos aleatórios do logaritmo da condutividade hidráulica (y) foram determinados a partir dos valores de z , utilizando-se a transformação inversa da distribuição normal.

Análise dos escores padronizados (z)

Esta primeira análise procurou avaliar o comportamento dos campos aleatórios da variável normal padronizada (z) em termos de valores estatísticos e de estrutura espacial. A Tabela 6.14 apresenta um resumo das estatísticas dos valores de média e variância dos escores padronizados (z) dos campos aleatórios gerados.

Tabela 6.14 Parâmetros estatísticos dos escores-padrão (z) dos campos aleatórios gerados

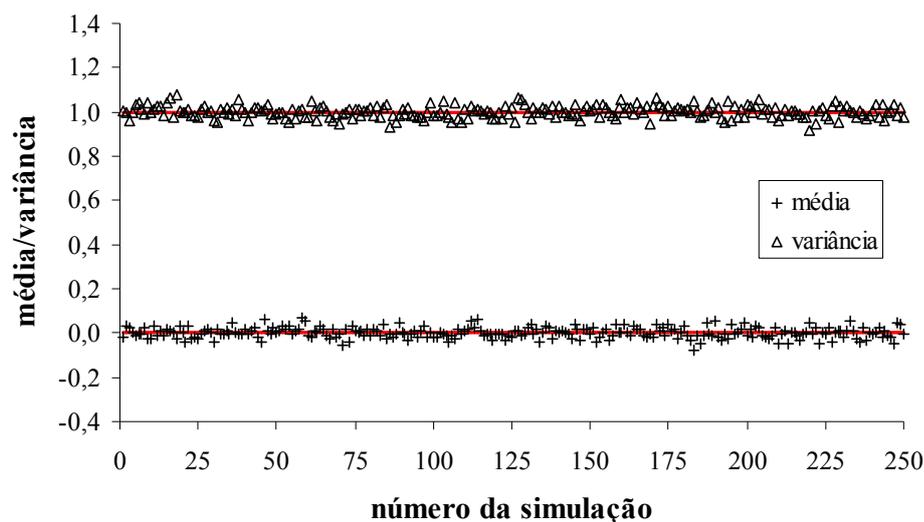
Parâmetro estatístico	Escore-padrão (z)			
	Modelo gaussiano		Modelo esférico	
	Média	Variância	Média	Variância
Média	0,001	1,001	0,000	0,999
Desvio-padrão	0,024	0,027	0,050	0,047
Valor mínimo	-0,081	0,917	-0,133	0,866
Valor máximo	0,070	1,081	0,171	1,137

Para um melhor entendimento da Tabela 6.14, destaca-se que, para cada campo aleatório gerado, tem-se 2500 valores de z sobre os quais se pode calcular uma média e uma variância. Este número de 2500 valores resulta da discretização espacial adotada para a geração dos campos aleatórios e que define para a área de estudo uma grade de 50 x 50 células. Deste modo, considerando-se o número total de simulações realizadas, pode-se definir 250 valores de média e de variância, um valor para cada campo gerado. A Tabela 6.14 apresenta uma estatística sobre este conjunto de 250 valores de média e de variância, através da definição de média, desvio-padrão, valor mínimo e valor máximo.

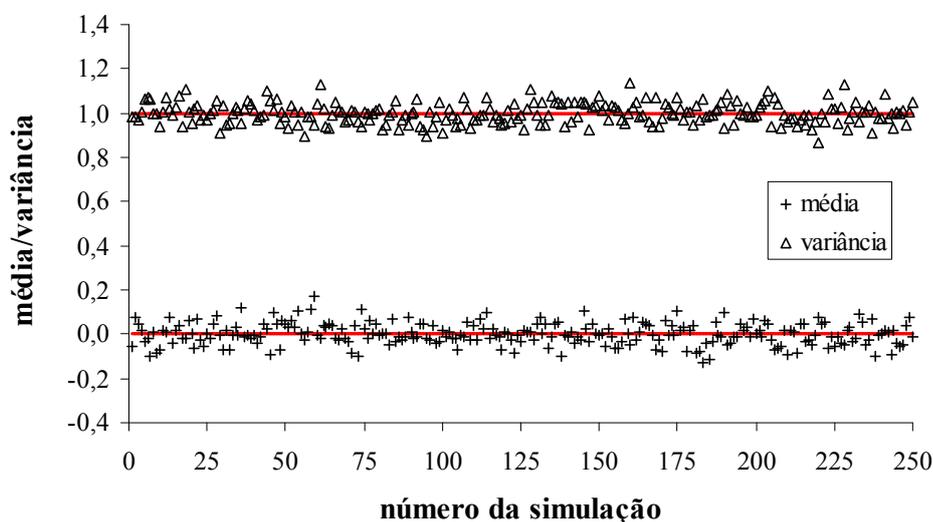
Os valores apresentados na Tabela 6.14 mostram que cada campo gerado, quando analisado separadamente, não reproduz a média e a variância de uma distribuição normal-padrão, que correspondem respectivamente a 0 (zero) e 1 (um). Contudo, observa-se que esses valores são reproduzidos em termos médios, quando os campos são analisados em conjunto.

A partir dos valores da Tabela 6.14, verifica-se que o modelo gaussiano apresentou uma menor dispersão dos valores de média e variância de z em comparação ao modelo esférico. Esta conclusão é obtida quando são comparados os desvios-padrão e os valores mínimos e máximos para a média e a variância dos campos gerados pelos dois modelos.

A Figura 6.18 mostra uma representação esquemática dos valores de média e variância de cada um dos 250 campos aleatórios de z gerados pelos modelos gaussiano e esférico. Como a Figura 6.18 foi construída adotando-se a mesma escala para os modelos gaussiano e esférico, é possível fazer uma comparação visual da dispersão dos valores de média e variância dos dois modelos e novamente destaca-se que o modelo gaussiano apresenta uma menor dispersão.



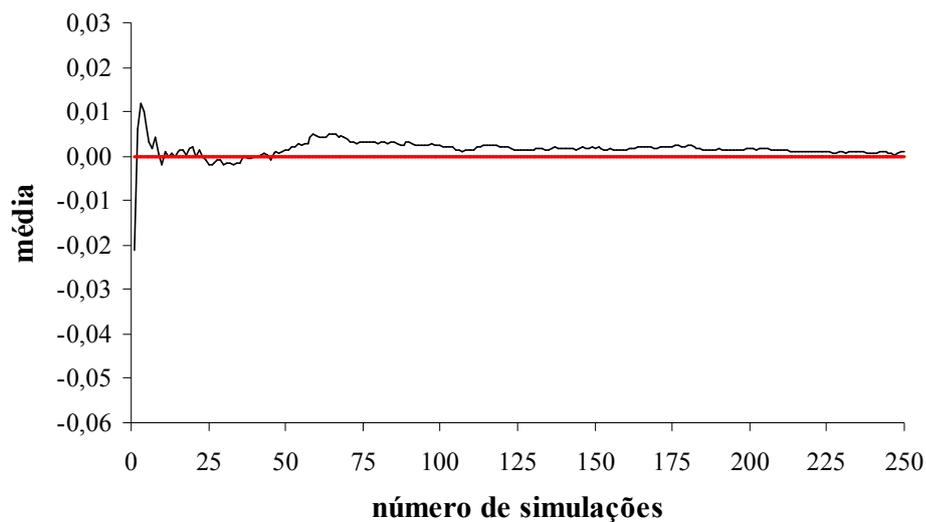
a) Modelo gaussiano



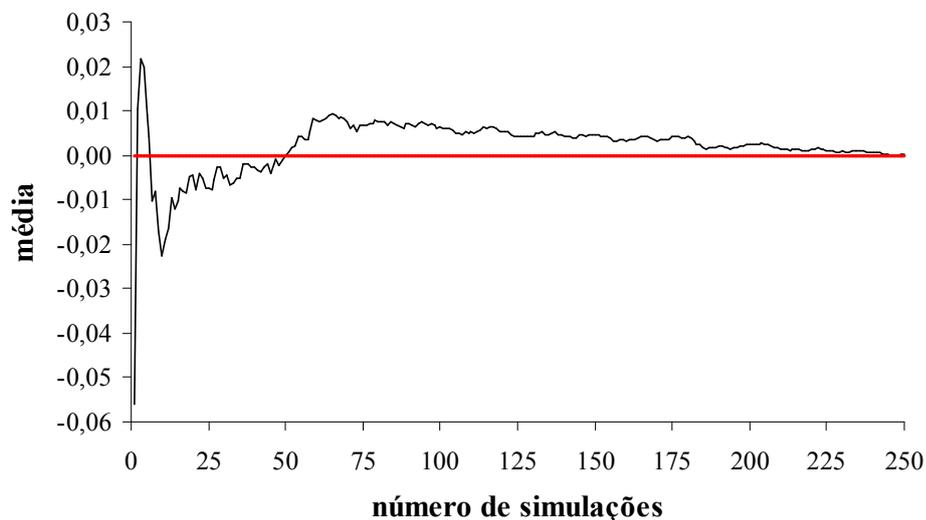
b) Modelo esférico

Figura 6.18 Representação esquemática dos valores de média e variância dos campos aleatórios de z gerados pelos modelos gaussiano e esférico

As Figuras 6.19 e 6.20 apresentam respectivamente a variação da média e da variância dos escores padronizados (z) dos campos aleatórios gerados pelos modelos gaussiano e esférico em função do número de simulações (número de campos aleatórios gerados). Os valores de média e variância, apresentados nas Figuras 6.19 e 6.20, foram calculados considerando-se todos os campos gerados como se fossem um único campo. Por exemplo, se o número de campos gerados é igual a 10, então a média e a variância são calculadas sobre um conjunto contendo 25.000 valores, que corresponde ao produto entre o número de campos (10) e o número de valores por campo (2500).



a) Modelo gaussiano

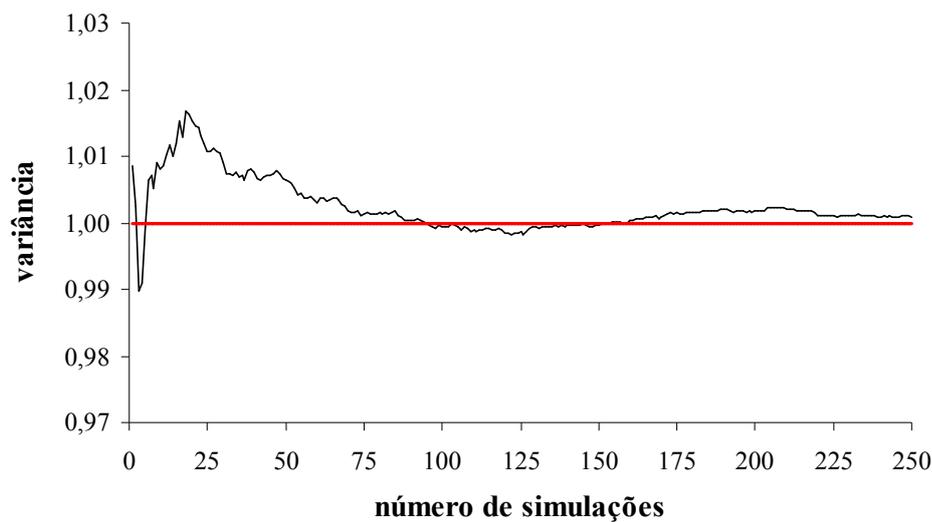


b) Modelo esférico

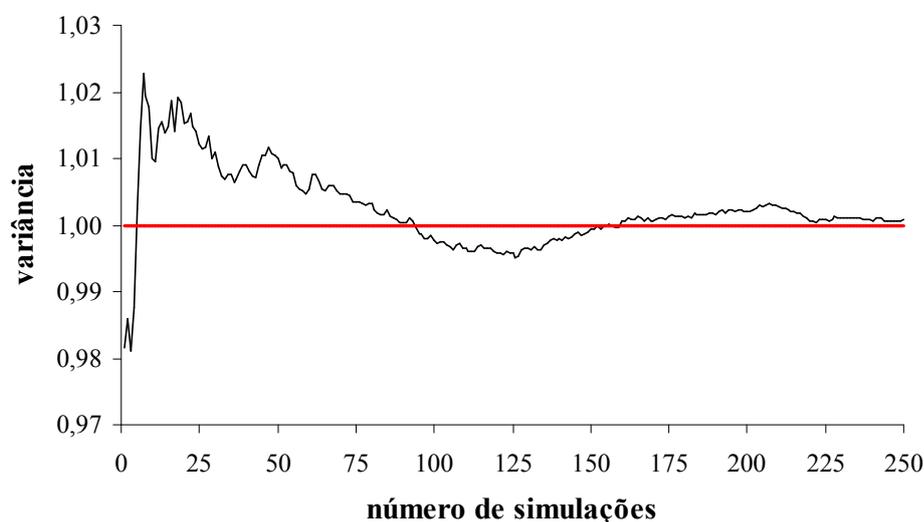
Figura 6.19 Variação da média de z em função do número de campos aleatórios gerados

Verifica-se, a partir das Figuras 6.19 e 6.20, que os valores de média e variância dos escores padronizados (z) dos campos aleatórios gerados tenderam para os valores teóricos de média e variância de uma distribuição normal padronizada à medida que o número de simulações (número de campos aleatórios gerados) aumentou.

Observa-se, ainda a partir das Figuras 6.19 e 6.20, que o modelo gaussiano convergiu mais rapidamente para os valores de média e variância de uma distribuição normal padrão do que o modelo esférico.



a) Modelo gaussiano

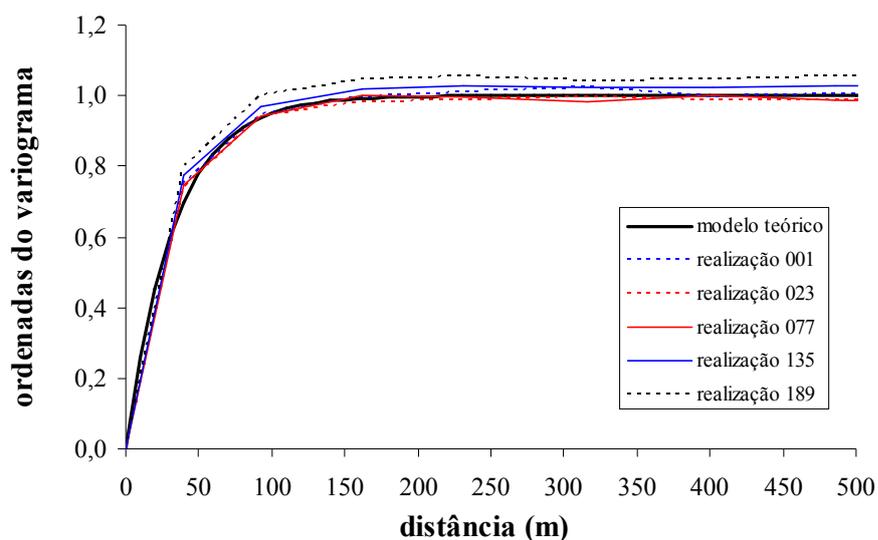


b) Modelo esférico

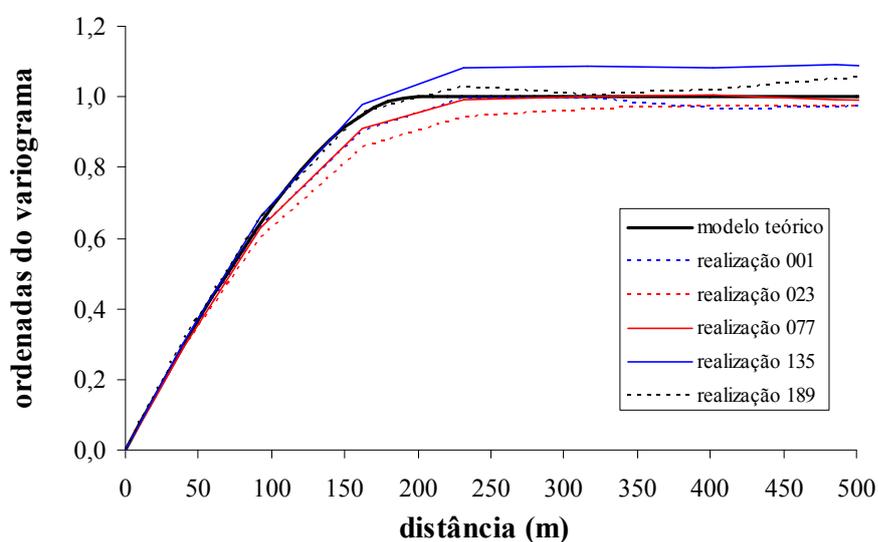
Figura 6.20 Variação da variância de z em função do número de campos aleatórios gerados

Em relação à análise da estrutura espacial dos campos aleatórios gerados, novamente destaca-se que o método de simulação gaussiana seqüencial (SGS) não reproduz exatamente o variograma teórico em cada uma das simulações. O importante é verificar se os variogramas associados a cada simulação (campo aleatório gerado) são semelhantes, do ponto de vista qualitativo, ao variograma teórico utilizado no processo de geração dos campos aleatórios.

A Figura 6.21 apresenta a comparação entre os modelos teóricos de variograma utilizados para a geração dos campos aleatórios e cinco variogramas obtidos a partir de campos aleatórios gerados pelo método SGS.



a) Modelo gaussiano



b) Modelo esférico

Figura 6.21 Comparação entre o modelo teórico do variograma e os variogramas relativos a alguns campos aleatórios gerados

Observa-se, a partir da Figura 6.21, que os variogramas obtidos a partir dos campos aleatórios gerados pelo método SGS “flutuam” em torno dos modelos teóricos de variograma utilizados na geração dos campos aleatórios, correspondendo a um comportamento esperado, considerando o procedimento e o método adotados para a geração dos campos. A principal razão das diferenças encontradas, do ponto de vista de comportamento dos variogramas dos campos aleatórios gerados, é função da discretização espacial adotada para a grade no processo de geração dos campos.

Análise dos valores dos logaritmos da condutividade hidráulica (y)

Esta segunda análise procurou avaliar o comportamento dos campos aleatórios do logaritmo da condutividade hidráulica (y) em termos de valores estatísticos. Os referidos campos foram obtidos a partir dos campos aleatórios da variável normal padronizada (z), utilizando-se a transformação inversa da distribuição normal, conforme procedimento sugerido por Deutsch e Journel (1998). Não se realizou a análise da estrutura espacial dos campos aleatórios de y porque o método SGS foi utilizado apenas na geração dos campos aleatórios de z e, portanto, a análise estrutural ficou restrita ao comportamento desta variável.

A Tabela 6.15 apresenta um resumo das estatísticas dos valores de média e variância de y para os campos aleatórios gerados. Para um melhor entendimento da Tabela 6.15, valem as mesmas observações feitas para a Tabela 6.14. Novamente, verifica-se que o modelo gaussiano apresentou menor dispersão para a média e variância em relação ao modelo esférico, considerando-se os campos aleatórios gerados.

Tabela 6.15 Parâmetros estatísticos dos valores de y dos campos aleatórios gerados

Parâmetro estatístico	Logaritmo da condutividade hidráulica (y)			
	Modelo gaussiano		Modelo esférico	
	Média	Variância	Média	Variância
Média	-6,143	0,436	-6,144	0,435
Desvio-padrão	0,016	0,018	0,033	0,032
Valor mínimo	-6,199	0,382	-6,238	0,342
Valor máximo	-6,103	0,493	-6,035	0,529

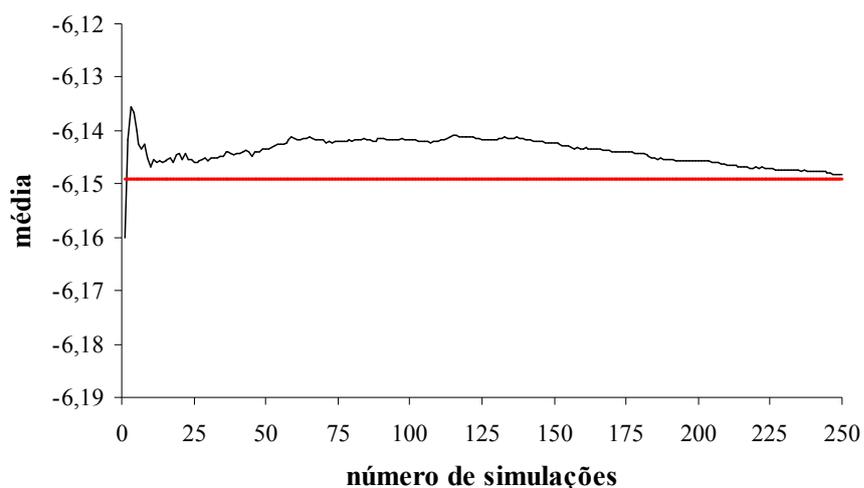
Destaca-se que, em termos médios, os valores de média e variância dos campos aleatórios de y , apresentados na Tabela 6.15, resultaram distintos dos valores de média e variância amostrais. Conforme apresentado na Tabela 6.11, os valores de média e variância amostrais de y são -6,149 e 0,393, respectivamente.

Em relação à média, pode-se dizer que a discretização espacial, o processo de transformação direta e inversa entre as variáveis z e y e as modificações introduzidas nos modelos teóricos dos variogramas são os fatores que colaboraram para a diferença entre os valores simulados e amostrais. Já para a variância, o principal fator colaborador para esta diferença é o próprio procedimento matemático de simplesmente calcular a variância média como a média das variâncias.

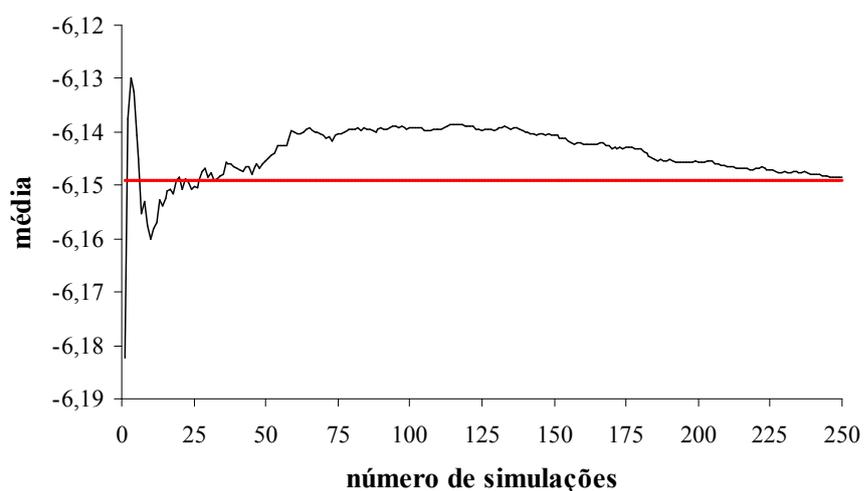
As Figuras 6.22 e 6.23 ilustram o comportamento da média e da variância dos logaritmos da condutividade hidráulica (y) em função do número de simulações (número de campos aleatórios gerados). Os valores de média e variância, apresentados nas Figuras 6.22 e 6.23, foram calculados considerando-se todos os campos gerados como se fossem um único

campo. Por exemplo, se o número de campos gerados é igual a 10, então a média e a variância são calculadas sobre um conjunto contendo 25.000 valores, que corresponde ao produto entre o número de campos (10) e o número de valores por campo (2500).

Verifica-se, a partir das Figuras 6.22 e 6.23, que a média e a variância dos valores simulados de y tenderam aproximadamente aos valores amostrais de média (-6,149) e variância (0,393) para um número de 250 simulações.

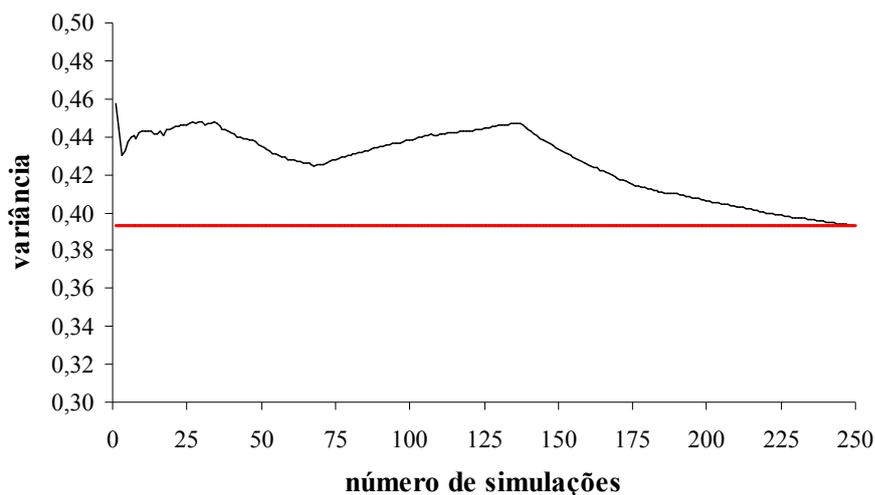


a) Modelo gaussiano

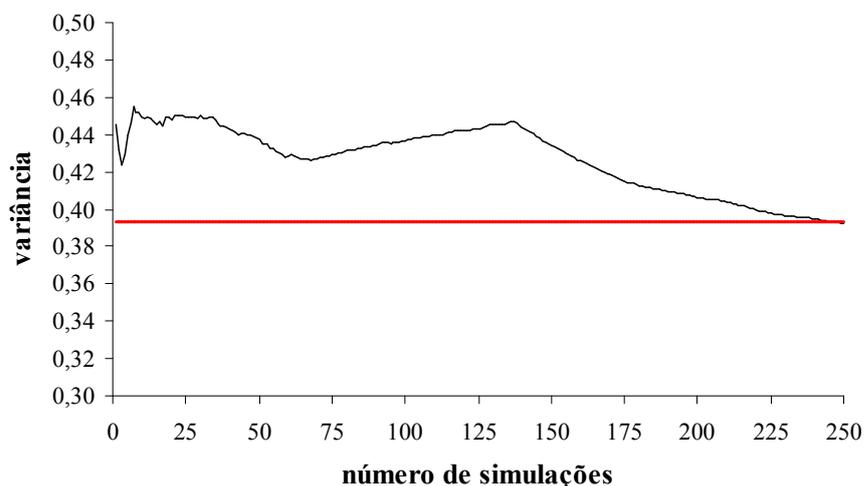


b) Modelo esférico

Figura 6.22 Variação da média de y em função do número de campos aleatórios gerados



a) Modelo gaussiano



b) Modelo esférico

Figura 6.23 Variação da variância de y em função do número de campos aleatórios gerados

A análise dos resultados da geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica permitiu identificar uma relativa superioridade do modelo gaussiano em relação ao modelo esférico, principalmente considerando-se a menor dispersão das médias e variâncias dos campos aleatórios gerados pelo modelo gaussiano em comparação ao modelo esférico.

Contudo, em razão do pequeno número de informações quanto à condutividade hidráulica, optou-se por adotar o conjunto de campos aleatórios gerados pelo modelo esférico nas simulações de fluxo e transporte em meio poroso e na avaliação de risco. Esta decisão deve representar uma hipótese conservadora em termos de avaliação de risco, uma vez que deve permitir a estimativa de uma distribuição de frequência de valores de risco com uma maior dispersão (variância).

6.3 CENÁRIO 01 – AVALIAÇÃO DE RISCO PARA A ESTAÇÃO CHUVOSA

Este item apresenta a avaliação de risco à saúde humana para o cenário 01 (estação chuvosa). São apresentadas as hipóteses relativas à definição do modelo conceitual para as simulações de fluxo e transporte em meio poroso saturado, bem como, os resultados obtidos. Na seqüência, apresenta-se a avaliação de risco propriamente dita a partir dos valores de concentração estimados pelas simulações de fluxo e transporte de contaminantes.

6.3.1 Análise do Problema de Fluxo na Estação Chuvosa

O modelo computacional utilizado para a análise do problema de fluxo foi o modelo FLUXSAT, que trata do fluxo permanente tridimensional em meio poroso saturado, cuja concepção foi discutida no capítulo 04 da presente tese. Destaca-se que foram necessárias algumas modificações no referido modelo computacional para possibilitar a execução de várias simulações consecutivas sem a interferência do usuário.

Para a análise do problema de fluxo na estação chuvosa foram realizadas 200 simulações de fluxo no meio saturado, utilizando-se os campos aleatórios de condutividade hidráulica gerados pelo método SGS, conforme descrito no item 6.2.

O problema de fluxo foi condicionado pelas hipóteses simplificadoras adotadas na geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica. Como mencionado anteriormente, os campos foram gerados considerando-se uma área retangular de 2 km (sentido leste-oeste) x 5 km (sentido norte-sul) com espaçamentos de 40 m e 100 m, respectivamente, em cada uma das direções, resultando em uma grade de 50 x 50 células.

Além disso, como foram gerados campos bidimensionais e isotrópicos, o problema de fluxo foi modelado como bidimensional (plano xy), sem a consideração de componentes verticais de fluxo. Adotou-se ainda um domínio vertical de 18 m e considerou-se uma recarga constante, equivalente a 315 mm/ano, para toda a área de estudo, excluindo-se a área da lagoa.

Em função da discretização espacial adotada, a área do espelho de água da lagoa foi considerada com aproximadamente 320.000 m², apresentando ainda profundidade média de 40 cm, camada de sedimento de fundo com espessura média de 50 cm e condutividade hidráulica vertical de 1×10^{-7} m/s, o que equivale a aproximadamente 0,864 cm/dia. Estas informações foram obtidas a partir de estudos realizados anteriormente.

Como condição de contorno, adotou-se o nível do lençol freático constante e igual a 12,30 m, junto à fronteira norte do aquífero. Já para a lagoa, adotou-se nível constante e igual

a 17,40 m. Estes níveis se referem a um mesmo plano de referência arbitrário, com uma cota de -12,30 m em relação ao nível do mar.

O modelo conceitual que procura representar a modelagem do problema de fluxo no cenário 01 (estação chuvosa) é mostrado, de modo simplificado, pelas Figuras 6.24 e 6.25. Em função da discretização espacial adotada, a lagoa é representada no cenário 01 por 80 células de um total de 2500 células que representam a área de estudo.

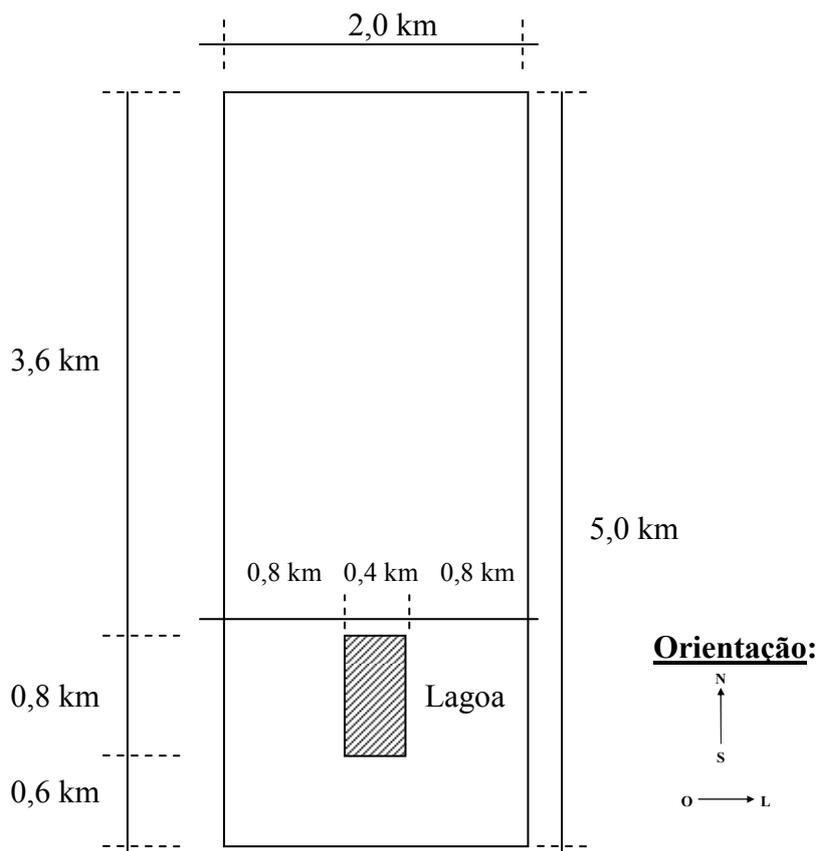


Figura 6.24 Modelo conceitual da área de estudo para a estação chuvosa – plano xy

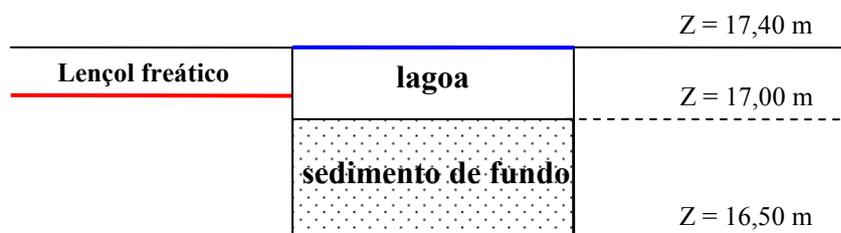


Figura 6.25 Modelo conceitual da área de estudo para a estação chuvosa (corte vertical na área da lagoa)

A Figura 6.26 apresenta os valores médios dos níveis do lençol freático, obtidos a partir das 200 simulações de fluxo no meio saturado para o cenário 01 (estação chuvosa), utilizando-se o modelo FLUXSAT.

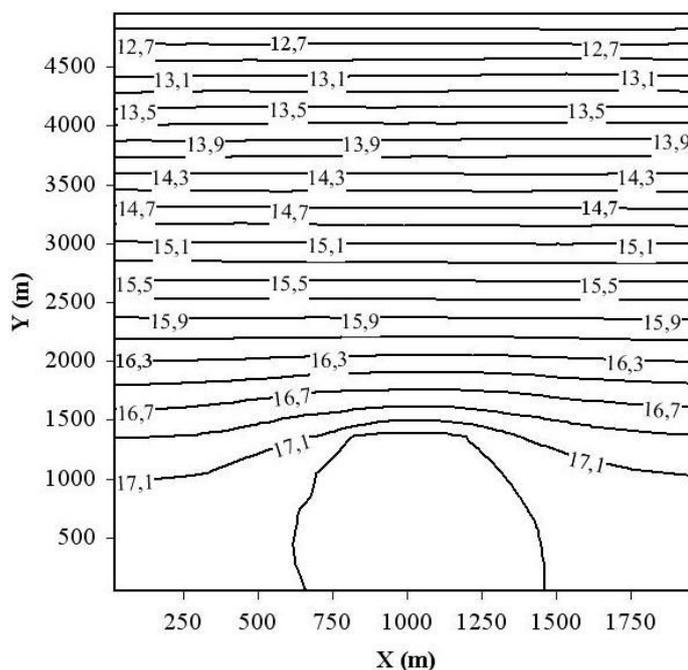


Figura 6.26 Valores médios de níveis (em m) do lençol freático para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a estação chuvosa

Observa-se, a partir da Figura 6.26, uma relativa simetria dos níveis médios do lençol freático na direção Sul-Norte. Um fator importante que contribui para essa simetria são as condições de contorno impostas ao modelo de fluxo. Contudo, essa simetria ocorre apenas em termos médios, já o mesmo não acontece quando as simulações são analisadas uma a uma. A Figura 6.27 apresenta os níveis do lençol freático para a realização 146, ilustrando o fato de que, para uma dada realização, não se verifica a mesma simetria observada para os níveis médios.

A Figura 6.28 apresenta os valores de desvio-padrão dos níveis do lençol freático, obtidos a partir das 200 simulações de fluxo no meio saturado para a estação chuvosa, utilizando-se o modelo FLUXSAT. Em relação à Figura 6.28, verifica-se que os menores desvios-padrão se concentram junto à área da lagoa e ao contorno norte e ocorrem principalmente devido às condições de contorno impostas ao modelo de fluxo. Observa-se também na Figura 6.28 que os maiores valores de desvio-padrão ocorrem nas regiões que sofrem menor influência das condições de contorno impostas ao modelo de fluxo.

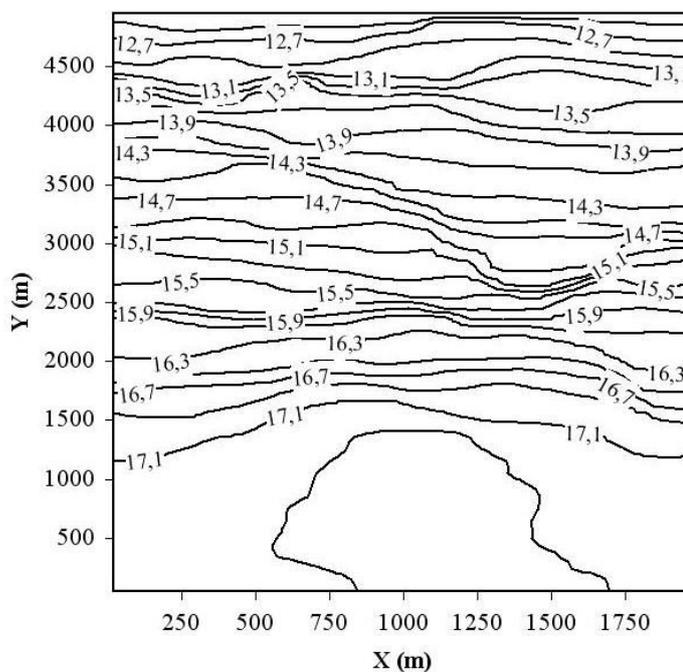


Figura 6.27 Valores de níveis (em m) do lençol freático para a realização 146 de fluxo em meio poroso saturado para a estação chuvosa

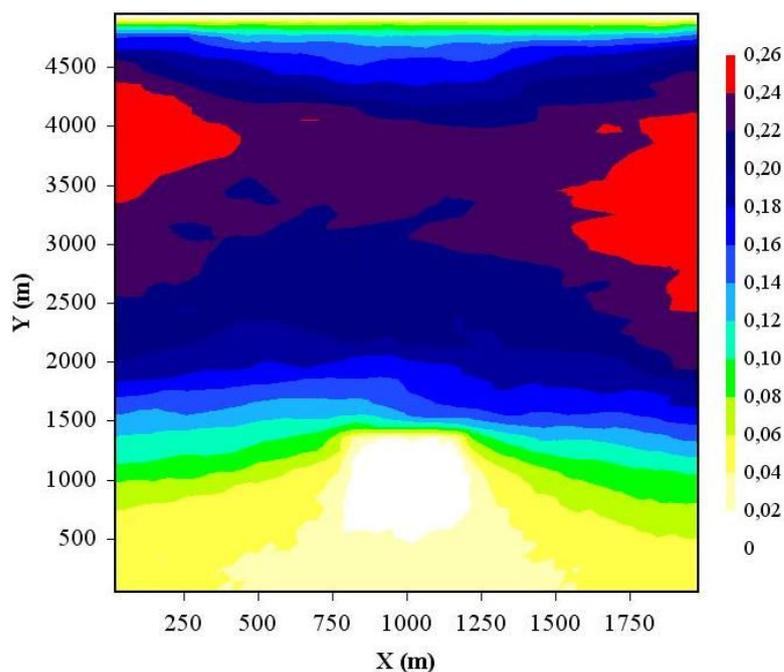


Figura 6.28 Desvio-padrão dos níveis (em m) do lençol freático para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a estação chuvosa

A Figura 6.29 apresenta os valores médios de velocidade de Darcy, considerando-se as 200 simulações realizadas, com o objetivo de fornecer uma ordem de grandeza do fluxo que se verifica na área de estudo. O comportamento do fluxo em termos de direção e sentido, em

termos médios, pode ser percebido a partir da Figura 6.26 que apresenta os níveis médios obtidos nas simulações.

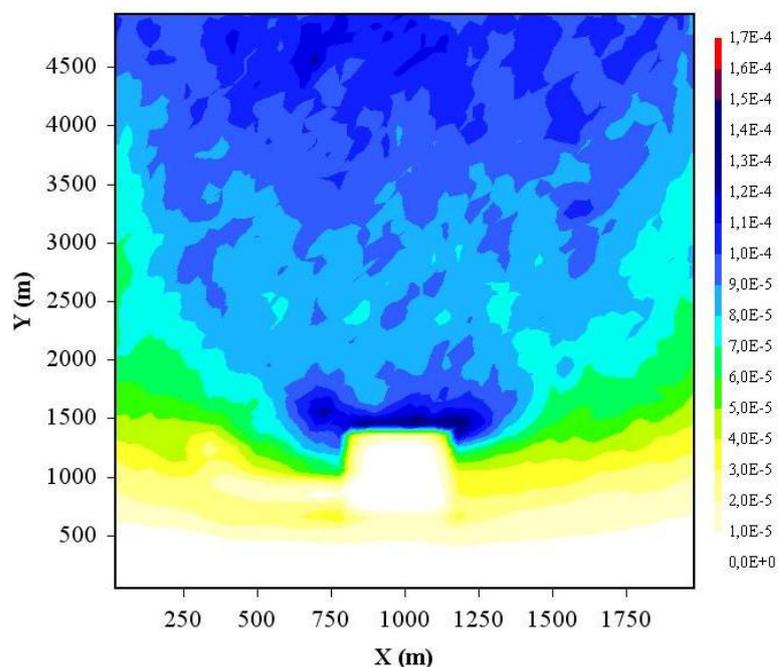


Figura 6.29 Valores médios de velocidade de Darcy (em m/dia) para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a estação chuvosa

Observa-se, a partir da Figura 6.29, que existe uma aceleração do fluxo, principalmente no sentido norte. Isso pode ser explicado pela simulação em regime permanente onde a diminuição do nível do lençol freático (espessura do fluxo) é compensada pelo aumento de velocidade. Verifica-se também uma região com velocidades de fluxo mais altas, junto ao contorno norte da lagoa, como resultado da influência da lagoa sobre os níveis locais. Destaca-se ainda, pelos resultados obtidos a partir do modelo FLUXSAT, que o fluxo da lagoa para o aquífero, como pode ser observado a partir da Figura 6.29, se concentra principalmente ao longo das bordas da lagoa.

6.3.2 Análise do Problema de Transporte na Estação Chuvosa

O modelo computacional utilizado para a análise do problema de transporte foi o modelo TRANSPSAT, que trata do transporte permanente tridimensional em meio poroso saturado sob regime de fluxo permanente, cuja concepção foi discutida no capítulo 04 da presente tese. Foram feitas algumas modificações no referido modelo computacional para possibilitar a execução de várias simulações consecutivas sem a interferência do usuário.

O modelo TRANSPSAT utilizou os valores dos níveis do lençol freático e das componentes da velocidade de Darcy nas direções x , y e z de cada uma das 200 simulações de fluxo realizadas pelo modelo FLUXSAT na análise do problema de fluxo na estação chuvosa (item 6.3.1). Além destes resultados, alguns dados de entrada são comuns aos modelos computacionais FLUXSAT e TRANSPSAT.

O modelo conceitual foi o mesmo utilizado na modelagem do problema de fluxo, sendo representado, de modo simplificado, pelas Figuras 6.24 e 6.25. Especificamente para a modelagem do problema de transporte, o domínio vertical de 18 m foi subdividido em três camadas de espessura igual a 6 m. Estabeleceu-se ainda um horizonte de simulação de 30 anos com discretização temporal (Δt) de 5 dias.

É importante destacar, a partir do modelo conceitual apresentado na Figura 6.25, que a entrada de contaminante no aquífero no cenário 01 (estação chuvosa) se dá somente através da conexão hidráulica entre a lagoa e o aquífero.

Preliminarmente foram avaliadas as concentrações resultantes para os contaminantes listados na Tabela 6.3, cujos dados básicos são apresentados na Tabela 6.16. Nesta fase inicial foram também analisadas as concentrações relativas a três receptores, localizados respectivamente a: 50 m ao norte da lagoa; 800 m a leste da lagoa; e 2700 m ao norte da lagoa. Os receptores localizados ao norte da lagoa foram considerados como localizados sobre um eixo de simetria na direção Sul-Norte da lagoa. Já o receptor localizado a leste da lagoa foi considerado como localizado sobre um eixo de simetria na direção Oeste-Leste da lagoa.

Tabela 6.16 Dados básicos relativos aos contaminantes analisados no problema de transporte

Contaminante	log K_{ow}	C_s (mg/kg)	C_a (mg/L)	D_m (m²/dia)
Criseno	5,6	0,25	$6,50 \times 10^{-4}$	$5,44 \times 10^{-5}$
Benzo(a)pireno	6,0	0,18	$1,74 \times 10^{-4}$	$4,32 \times 10^{-5}$
Dibenzo(a,h)antraceno	6,5	0,04	$1,341 \times 10^{-5}$	$3,97 \times 10^{-5}$
Benzeno	2,13	0,02	$1,57 \times 10^{-1}$	$9,42 \times 10^{-5}$
Arsênio*	Não disponível	0,39	0,0	0,0

Fonte: Montgomery e Welton (1991).

Obs: * Não solúvel em água

Nas simulações de transporte, adotou-se um valor de 270 m para o coeficiente de dispersão longitudinal (α_L), correspondente a um décimo da distância ao receptor mais afastado. O valor de α_L adotado representa certo grau de conservadorismo em relação aos receptores mais próximos. Já para o coeficiente de dispersão transversal (α_T), adotou-se o valor de 33,75 m, que corresponde a um oitavo do valor de α_L , conforme sugerido por Charbeneau (2000).

A concentração da fase dissolvida em água (C_a) foi obtida a partir da concentração medida no solo (C_s), considerada constante no tempo, adotando-se a hipótese de equilíbrio entre fases. A Equação 6.1 estabelece o coeficiente de partição entre as referidas fases (Mackay, 2001):

$$K_p = \frac{C_s}{C_a} \quad (6.1)$$

onde: K_p = coeficiente de partição [L/kg];

C_s = concentração no solo [mg/kg];

C_a = concentração na água [mg/L].

O valor de K_p pode ser estimado a partir da Equação 6.2 a seguir (Mackay, 2001):

$$K_p = 0,41 f_{oc} K_{ow} \quad (6.2)$$

onde: f_{oc} = conteúdo de carbono orgânico do solo [kg/kg];

K_{ow} = coeficiente de partição entre octanol e água [adimensional].

Para o cálculo de K_p , adotou-se um valor de f_{oc} igual a 0,23%, conforme estabelecido em estudos anteriores e apresentado na Tabela 6.1.

Em função dos resultados obtidos nesta fase preliminar, optou-se por restringir a avaliação de risco somente ao contaminante benzeno, uma vez que as concentrações relativas aos demais contaminantes resultaram muito baixas para representarem um risco significativo. Além disso, os resultados mostraram concentrações significativas para fins de avaliação de risco somente para o receptor mais próximo à lagoa, ou seja, aquele situado 50 m ao norte da lagoa, sobre seu eixo de simetria longitudinal, denominado simplesmente de receptor 01.

A Figura 6.30 apresenta a evolução da pluma média para o contaminante benzeno, obtida como a média das 200 simulações efetuadas.

Verifica-se, a partir da Figura 6.30, que a forma da pluma é bastante influenciada pelos resultados do modelo de fluxo que definem a contribuição da lagoa para o aquífero. Como foi destacado na Figura 6.29, o fluxo da lagoa para o aquífero se concentra ao longo do contorno da mesma, principalmente na sua parte norte, e este aspecto se reflete na forma da pluma apresentada na Figura 6.30.

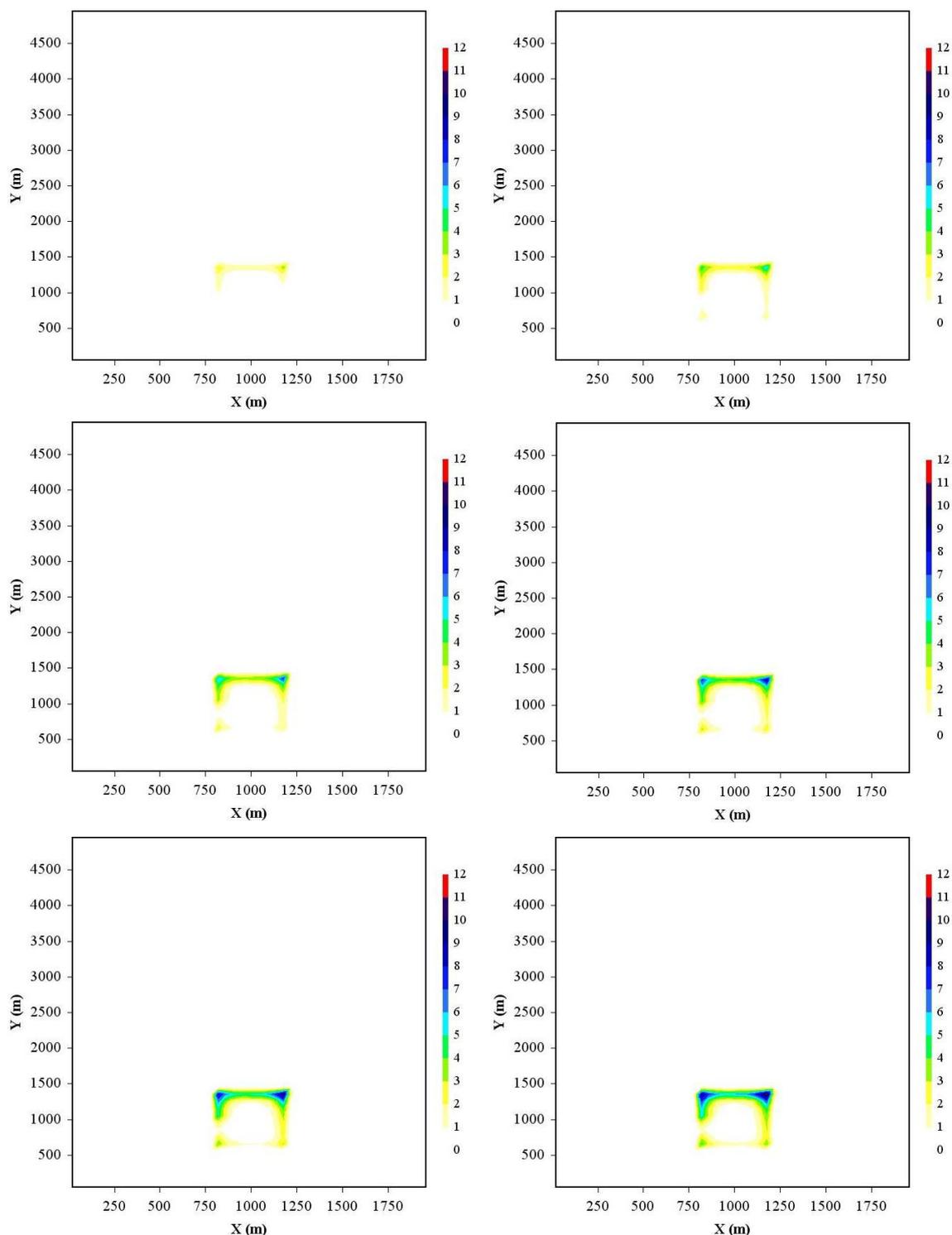


Figura 6.30 Evolução das concentrações médias de benzeno (em ppb) para os horizontes de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos no cenário 01 (estação chuvosa)

A Figura 6.31 apresenta a variação temporal da concentração média de benzeno para o receptor 01, considerando-se as 200 simulações de transporte para o cenário 01. Como a fonte de contaminação é considerada constante, é de se esperar que as concentrações no receptor 01 tendam a um valor constante, porém este valor não é alcançado no horizonte de 30 anos.

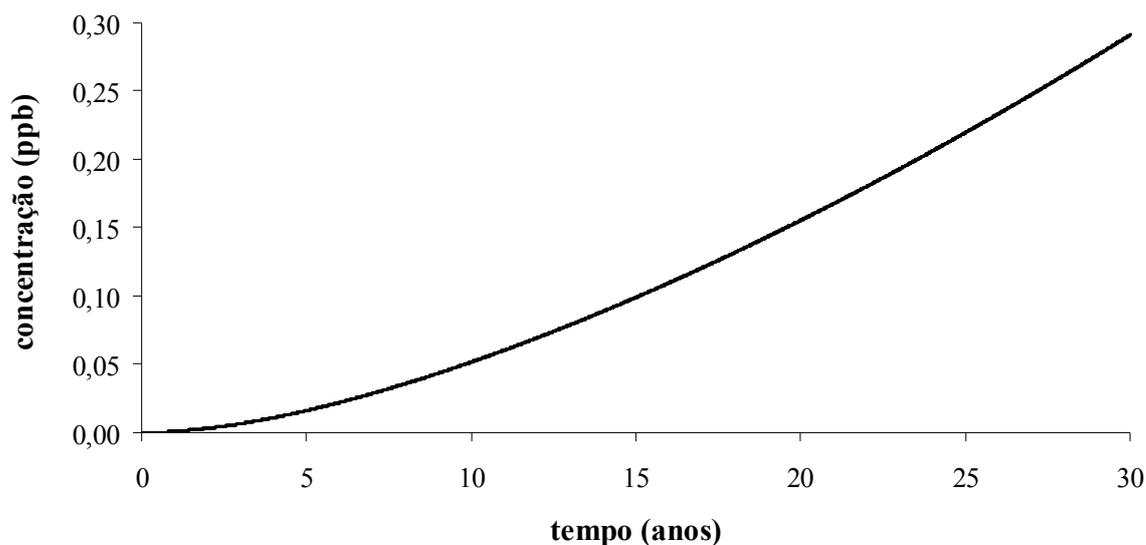


Figura 6.31 Variação da concentração média de benzeno para o receptor 01 no cenário 01 (estação chuvosa)

A Figura 6.32 apresenta as distribuições de freqüências de concentrações de benzeno junto ao receptor 01 para diferentes instantes de tempo, obtidas a partir das 200 simulações de transporte realizadas pelo modelo TRANSPSAT para o cenário 01 (estação chuvosa).

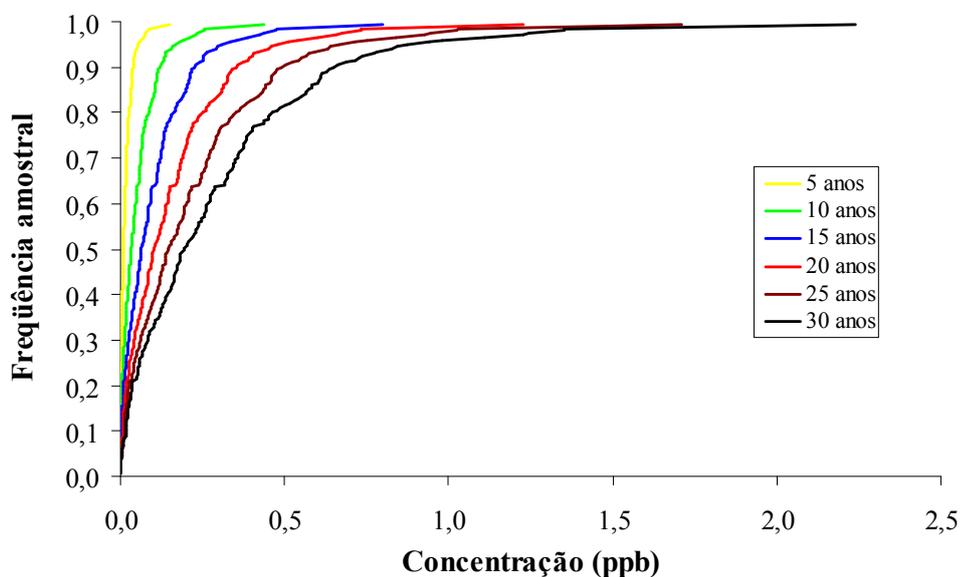


Figura 6.32 Distribuição de freqüências de concentração de benzeno para o receptor 01 (5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos) no cenário 01 (estação chuvosa)

6.3.3 Avaliação do Risco na Estação Chuvosa

A avaliação do risco à saúde humana propriamente dita seguiu metodologia descrita em USEPA (1989), ASTM (1995) e ASTM (2000). A avaliação limitou-se ao cálculo do risco incremental de câncer (RIC), relacionado à ingestão oral de água subterrânea contaminada com benzeno, considerando-se que este é um contaminante reconhecidamente carcinogênico. Não foram avaliados os efeitos tóxicos (não cancerígenos) associados à exposição ao benzeno.

As expressões para o cálculo da exposição diária média (DDM) e do risco incremental de câncer (RIC) são apresentadas a seguir (Kolluru, 1996):

$$DDM = \frac{CW \times IR \times EF \times ED}{BW \times AT} \quad (6.3)$$

onde: DDM = exposição (dose) diária média (mg/kg/dia);
 CW = concentração do contaminante na água (mg/L);
 IR = taxa de ingestão diária de água (L/dia);
 EF = frequência de exposição (dias/ano);
 ED = duração da exposição (anos);
 BW = peso corporal (kg);
 AT = tempo sobre o qual se considera a média (dias).

$$RIC = DDM \times SF \quad (6.4)$$

onde: RIC = risco incremental de câncer (casos adicionais de câncer por população exposta);
 SF = fator de declividade ou *slope-factor* ($[\text{mg}/\text{kg}/\text{dia}]^{-1}$).

Os valores de concentração (CW) usados para a estimativa da exposição (dose) diária média (DDM) referem-se às concentrações estimadas para o receptor 01 para tempo (t) igual a 30 anos, considerando-se as 200 simulações de transporte realizadas pelo modelo TRANSPSAT, discutidas no item anterior, e cuja distribuição de frequências é apresentada na Figura 6.33.

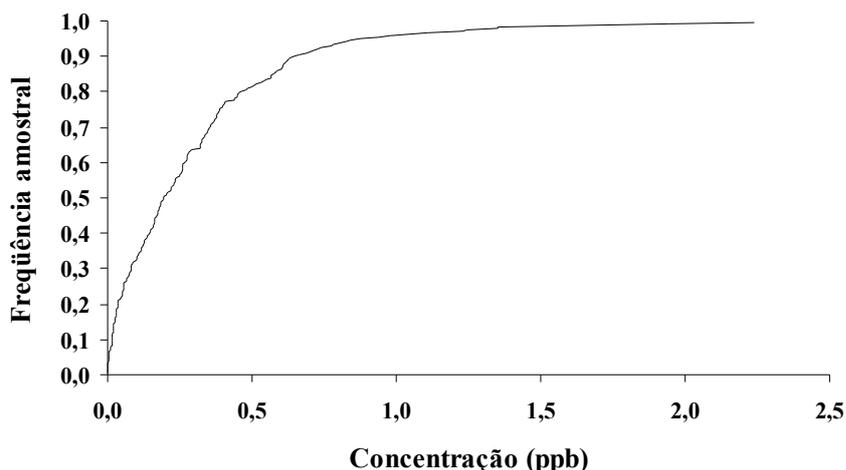


Figura 6.33 Distribuição de frequências de concentração de benzeno para o receptor 01 para o horizonte de tempo de 30 anos no cenário 01 (estação chuvosa)

O horizonte de tempo (30 anos) foi escolhido de acordo com a duração da exposição (ED) normalmente usada para a avaliação dos efeitos cancerígenos. A adoção da concentração estimada para tempo (t) igual a 30 anos para o cálculo da DDM representa uma hipótese conservadora, já que o receptor 01 é submetido a valores crescentes de concentração ao longo do período de exposição.

É interessante comparar os valores de concentração utilizados na avaliação de risco, apresentados na Figura 6.33, com valores limites de concentração para o contaminante benzeno, segundo encontrado em referências na literatura técnica, como destacado a seguir.

A Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (*U. S. Environmental Protection Agency* – USEPA) sugere concentrações de benzeno variando entre 1 ppb e 10 ppb para um nível de risco de 10^{-6} , que representa um caso adicional de câncer para uma população de um milhão de pessoas expostas (USEPA, 2000). O Ministério da Habitação, Planejamento Espacial e Meio Ambiente (*Ministry of Housing, Spatial Planning and Environment - VROM*) da Holanda adota 30 ppb como um valor de intervenção para o benzeno na água subterrânea (VROM, 2000). Como um exemplo no Brasil, a Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (CETESB) do estado de São Paulo sugere 5 ppb como um valor orientador para intervenção nas águas subterrâneas (Casarini *et al.*, 2001).

Verifica-se, portanto, quando se compara a distribuição de frequências de concentrações de benzeno apresentada na Figura 6.33 aos valores de intervenção sugeridos por alguns organismos de proteção ao meio ambiente e à saúde humana, que os valores de concentração estimados são, de modo geral, inferiores a estes valores de intervenção, exceção feita ao limite de 1 ppb, sugerido por USEPA (2000).

O valor de AT usualmente utilizado na Equação 6.3 para avaliação dos efeitos cancerígenos é de 70 anos (Kolluru, 1996). Segundo IBGE (2008), a expectativa de vida para o estado brasileiro onde se situa a área de estudo é de 70,4 anos. Portanto, a adoção do valor sugerido por Kolluru (1996) ou da expectativa de vida para AT conduz a resultados próximos entre si. No presente estudo, adotou-se o valor de 70 anos para a estimativa da DDM.

A Tabela 6.17 apresenta os demais parâmetros usados para a estimativa da DDM. Os valores apresentados na referida tabela são relativos a um padrão de exposição de uma pessoa adulta, residente no local e cuja via de exposição é a ingestão oral de água contaminada.

Tabela 6.17 Parâmetros utilizados para a estimativa da dose diária média (DDM)

Parâmetro	Unidade	Valor adotado
Taxa de ingestão diária de água	L/dia	3
Frequência de exposição ¹	dias/ano	365
Duração da exposição ²	ano	30
Peso corporal ¹	kg	60

Fonte: ¹ Casarini *et al.* (2001); ² Kolluru (1996)

A taxa de ingestão diária de água normalmente recomendada para avaliações de risco à saúde humana é 2 L/dia (USEPA, 1989; Kolluru, 1996; Casarini *et al.* 2001). Contudo, em função das condições climáticas da área de estudo, utilizou-se o valor de 3 L/dia, ou seja, um valor 50% superior ao valor recomendado. USEPA (1997) apresenta uma discussão sobre estudos realizados para a estimativa do consumo diário de água, inclusive sob diferentes condições de atividade física e de temperatura. Os resultados destes estudos justificam o valor aqui adotado.

Discussões a respeito do fator de declividade (SF), presente na Equação 6.4, e da sua obtenção podem ser encontradas em USEPA (1989) e Kolluru (1996). USEPA (2000) apresenta uma faixa de valores para o fator de declividade (SF) oral para o contaminante benzeno e que compreende o intervalo entre $1,5 \times 10^{-2}$ e $5,5 \times 10^{-2}$ (mg/kg/dia)⁻¹.

Os valores de SF recomendados por USEPA (2000) são referentes a uma população-padrão com um peso corporal de 70 kg. Para populações com peso diferente do peso da população-padrão, USEPA (1997) sugere um procedimento para o cálculo de um fator de correção (FC) para o fator de declividade (SF), utilizando-se a Equação 6.5 (USEPA, 1997):

$$FC = \left(\frac{BW}{70} \right)^{1/3} \quad (6.5)$$

A partir do valor de BW apresentado na Tabela 6.17 e da Equação 6.5, os limites do intervalo para o fator de declividade (SF) oral do contaminante benzeno, iguais a $1,5 \times 10^{-2}$ e $5,5 \times 10^{-2} \text{ (mg/kg/dia)}^{-1}$, foram corrigidos para $1,43 \times 10^{-2}$ e $5,23 \times 10^{-2} \text{ (mg/kg/dia)}^{-1}$. Este intervalo foi então utilizado para determinar, a partir da Equação 6.4, duas distribuições de frequências para o risco incremental de câncer (RIC), denominadas aqui de curva inferior e curva superior do risco e que são apresentadas na Figura 6.34.

A Figura 6.35 também apresenta a curva inferior e a curva superior do risco, mas agora expressas segundo a probabilidade de excedência. Destaca-se que as curvas apresentadas nas Figuras 6.34 e 6.35 foram obtidas a partir de 200 valores de RIC, relativos às 200 simulações de fluxo e transporte realizadas para o cenário 01.

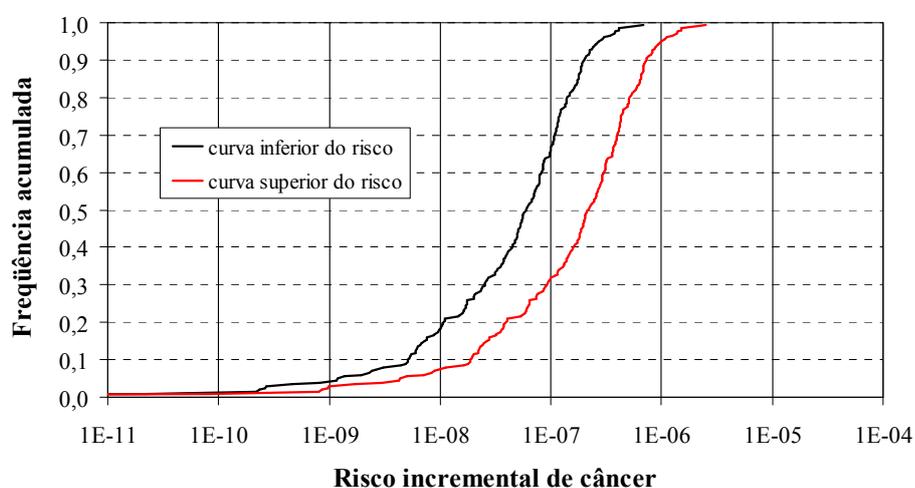


Figura 6.34 Distribuições de frequências dos valores de risco incremental de câncer para o receptor 01 no cenário 01 (estação chuvosa)

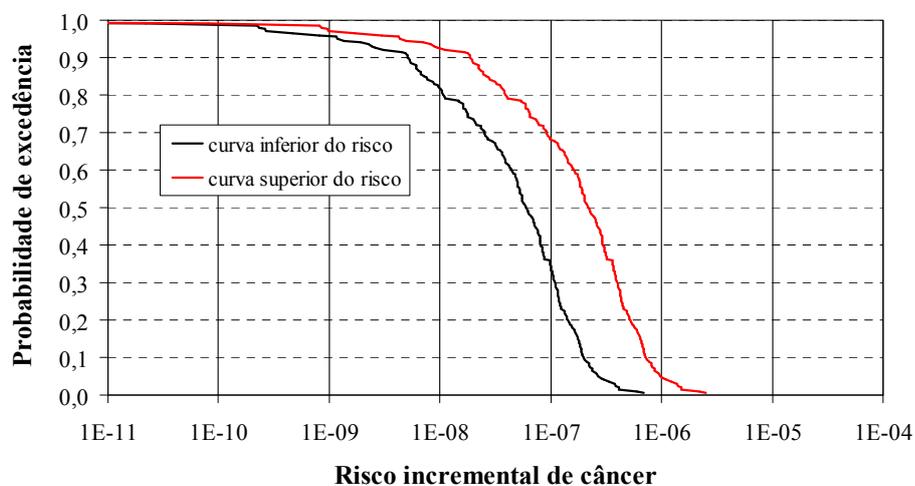


Figura 6.35 Probabilidade de excedência dos valores de risco incremental de câncer para o receptor 01 no cenário 01 (estação chuvosa)

A Tabela 6.18 apresenta estimativas da probabilidade do RIC ultrapassar os limites mais usuais utilizados em avaliações do risco à saúde humana. Os valores estimados de probabilidade foram obtidos por interpolação linear, a partir das curvas de probabilidade de excedência apresentadas na Figura 6.35.

Tabela 6.18 Estimativas da probabilidade do RIC exceder os limites usuais para o risco incremental de câncer para o receptor 01 (cenário 01 – estação chuvosa)

Limite para o risco	Probabilidade de exceder o limite de risco	
	curva inferior	curva superior
1×10^{-6}	< 0,5 %	4,9 %
1×10^{-5}	< 0,5 %	< 0,5 %
1×10^{-4}	< 0,5 %	< 0,5 %

Verifica-se, a partir dos valores apresentados na Tabela 6.18, que existe uma probabilidade de excedência estimada maior que 0,5 % para o receptor 01 apenas quando se consideram o limite para o risco de 1×10^{-6} (um caso adicional em uma população de um milhão de pessoas expostas) e a curva superior do risco. O valor de referência 0,5 % é resultante do número de simulações realizadas.

Os resultados apresentados neste item e condensados na Tabela 6.18 constituem o ponto central do desenvolvimento da presente tese. Há que se destacar que estes resultados conferem uma dimensão a mais ao risco estimado pela avaliação de risco.

As avaliações usuais expressam o risco apenas em termos das conseqüências, traduzidas pelo número de casos adicionais de câncer por população exposta. Por exemplo, o limite de 1×10^{-6} representa um caso adicional de câncer em uma população de um milhão de pessoas expostas.

No presente trabalho, uma estimativa de chance de ocorrência é associada à conseqüência da exposição. Por exemplo, para o mesmo limite de 1×10^{-6} , que expressa a conseqüência de um caso adicional para um milhão de pessoas expostas, tem-se também uma estimativa da chance desta conseqüência ser igualada ou superada. No cenário 01, essa chance é de 4,9% para a curva superior de risco, conforme apresentado na Tabela 6.18.

Esta informação adicional permite que o risco seja expresso de uma forma mais abrangente, onde o mesmo é definido pela sua conseqüência e pela sua chance de ocorrência, conforme discutido previamente no capítulo 02 da presente tese. Essa dimensão adicional pode ser muito valiosa para o tomador de decisão, em razão da gravidade das conseqüências e do custo elevado dos processos de remediação.

Em termos de resultados possíveis, destaca-se ainda que, embora a análise tenha se restringido ao receptor 01, é possível a construção de superfícies de risco para a área de

estudo para diferentes percentis de probabilidade de excedência, em razão dos resultados de concentração disponibilizados pelo modelo TRANSPSAT.

Como os valores de risco foram calculados a partir de 200 simulações de fluxo e transporte, seria possível construir superfícies de risco para percentis definidos de 0,5% em 0,5%. Inclusive poderiam ser definidas áreas para as quais o RIC foi superior a um determinado valor limite.

A Figura 6.36 mostra, apenas como um exemplo de possibilidade de apresentação dos resultados da avaliação de risco, superfícies do risco médio para os horizontes de tempo de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos, considerando-se o valor de SF igual a $5,23 \times 10^{-2} \text{ (mg/kg/dia)}^{-1}$, que define a chamada curva superior do risco. A escala adotada para representação das superfícies é construída a partir do logaritmo do risco incremental de câncer (log RIC).

Verifica-se, a partir da Figura 6.36, que existe um aumento da superfície de risco ao longo do tempo, bem como, um aumento dos valores de risco para um mesmo local.

Como já destacado, assim como foram construídas superfícies de risco médio, apresentadas na Figura 6.36, poderiam ser construídas superfícies de risco para probabilidades de excedência segundo diferentes percentis, discretizados de 0,5% em 0,5%, uma vez que foram realizadas 200 simulações de fluxo e transporte.

6.4 CENÁRIO 02 – AVALIAÇÃO DE RISCO PARA A ESTAÇÃO SECA

Este item apresenta a avaliação de risco à saúde humana, considerando-se o cenário 02 (estação seca). A principal diferença entre os cenários 01 (estação chuvosa) e 02 (estação seca) consiste na retração da lagoa no período seco. A Tabela 6.2 apresenta as áreas do espelho de água da lagoa e da camada de solo contaminado exposto. Em razão da discretização espacial adotada para o modelo conceitual, os valores das referidas áreas foram ligeiramente modificados para a avaliação do risco, conforme comentado a seguir.

A área do espelho de água da lagoa correspondeu a 320.000 m^2 nas simulações do cenário 01 e a 208.000 m^2 nas simulações do cenário 02. Como consequência, há uma mudança do mecanismo de fluxo e transporte para uma área de 112.000 m^2 , que representa a área correspondente à retração da lagoa. Basicamente, esta mudança consiste no fluxo e transporte serem relacionados à recarga natural do aquífero e não mais à conexão hidráulica entre a lagoa e o aquífero. Como consequência direta, deve ser considerada também a questão do fluxo e transporte em meio não saturado. No caso do cenário 01 (estação chuvosa), as simulações se limitaram ao fluxo e transporte em meio saturado.

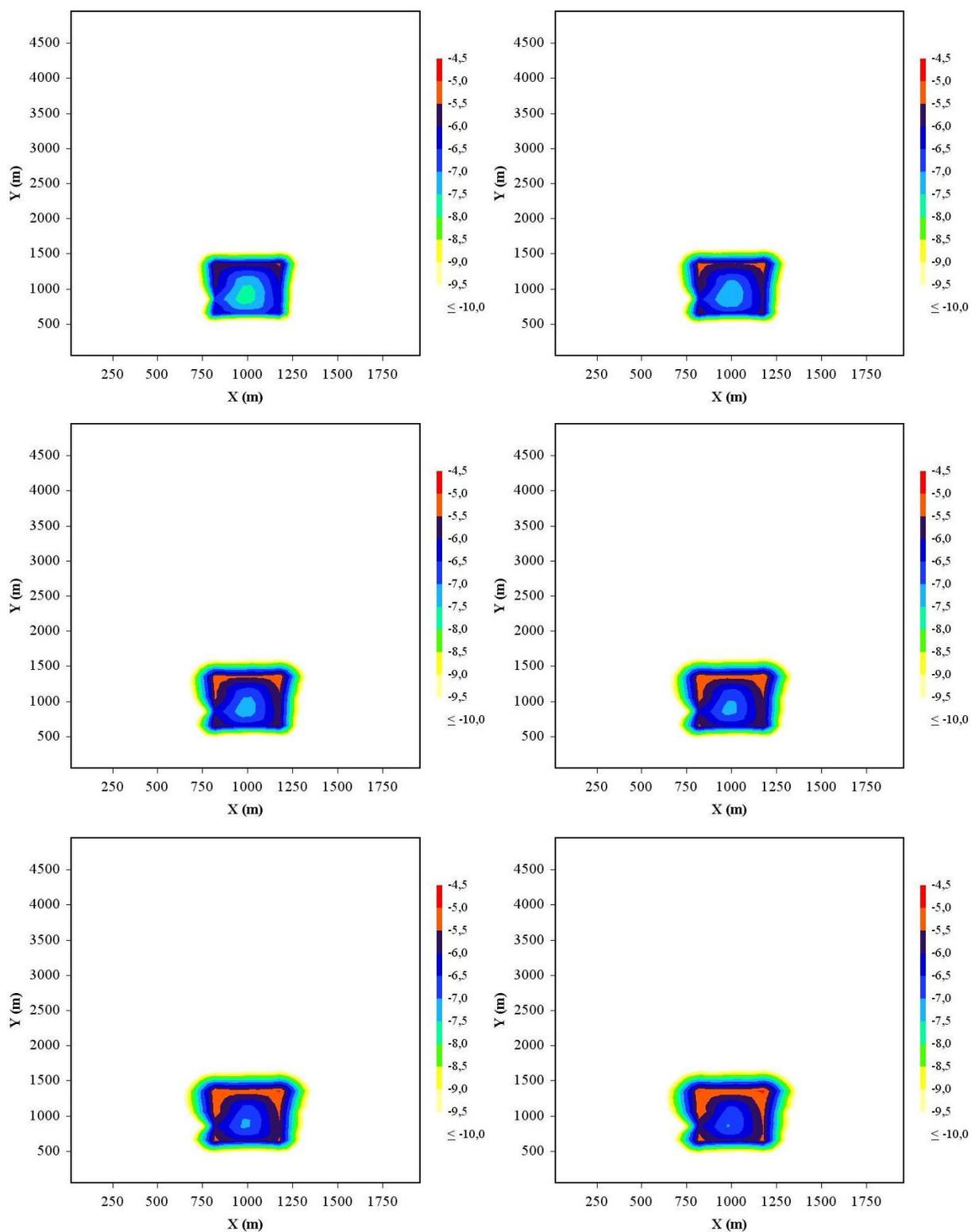


Figura 6.36 Superfícies de risco médio para os horizontes de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos, obtidas para o cenário 01 (estação chuvosa)

São apresentadas a seguir as hipóteses relativas à definição do modelo conceitual para as simulações de fluxo e transporte nos meios porosos saturado e não saturado, bem como, os resultados obtidos. Na seqüência, apresenta-se a avaliação de risco propriamente dita a partir dos valores de concentração estimados pelas simulações de fluxo e transporte de contaminantes. Finalmente é apresentada uma comparação entre os resultados das avaliações de risco para os cenários 01 (estação chuvosa) e 02 (estação seca).

6.4.1 Análise do Problema de Fluxo na Estação Seca

Os modelos computacionais utilizados para a análise do problema de fluxo foram o modelo FLUX, que trata do fluxo permanente unidimensional em meio poroso não saturado, cuja concepção foi discutida no capítulo 03 da presente tese, e o modelo FLUXSAT, que trata do fluxo permanente tridimensional em meio poroso saturado, cuja concepção foi discutida no capítulo 04 da presente tese. Destaca-se novamente que foram necessárias algumas modificações nos referidos modelos computacionais para possibilitar a execução de várias simulações consecutivas sem a interferência do usuário.

Neste momento, é fundamental destacar um aspecto bastante importante que envolve a análise do problema de fluxo e transporte no cenário 02 (estação seca), principalmente devido à existência de uma área de solo contaminado exposto devido à retração da lagoa.

Na solução do problema de fluxo, que envolve basicamente o cálculo dos níveis do lençol freático e das velocidades de Darcy, não existe a necessidade de simulação do fluxo no meio poroso não saturado, uma vez que o cálculo do mesmo é feito em regime permanente e, portanto, não é possível a representação do deslocamento de frentes de umedecimento. Já para o problema de transporte, existe sim a necessidade de representação do fluxo no meio não saturado, uma vez que o fluxo interfere na propagação do contaminante, mesmo sob a hipótese de fluxo em regime permanente.

O procedimento adotado para a análise do fluxo no cenário 02 (estação seca) consistiu basicamente em:

- 1) análise do fluxo no meio poroso saturado com a determinação dos níveis do lençol freático (modelo FLUXSAT);
- 2) análise do fluxo no meio poroso não saturado com a determinação das curvas de saturação e dos perfis das cargas hidráulicas (modelo FLUX).

Fluxo no meio poroso saturado

O problema de fluxo no meio saturado foi condicionado basicamente pelas mesmas hipóteses simplificadoras adotadas para o cenário 01 (estação chuvosa). No entanto, algumas diferenças fundamentais são destacadas a seguir.

A área da lagoa foi considerada como sendo de aproximadamente 208.000 m² e adotou-se uma recarga constante, equivalente a 190 mm/ano, para toda a área de estudo, excluindo-se a área da lagoa.

Como condição de contorno, adotou-se um nível do lençol freático constante e igual a 12,30 m, junto à fronteira norte do aquífero. Já para a lagoa, adotou-se um nível constante e igual a 17,20 m. Estes níveis se referem a um mesmo plano de referência arbitrário, com uma cota de -12,30 m em relação ao nível do mar.

O modelo conceitual que procura representar a modelagem do problema de fluxo na estação seca também é representado, de modo simplificado, pelas Figuras 6.24 e 6.25, ressalva feita à representação da área da lagoa, conforme esquematizada na Figura 6.37.

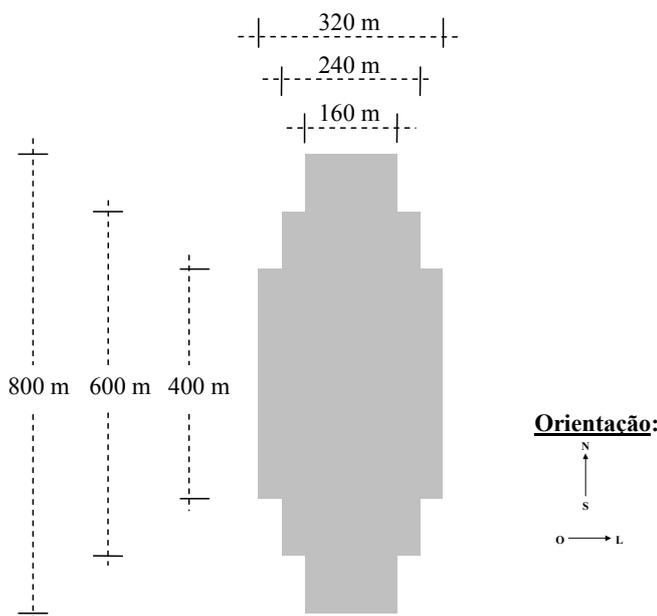


Figura 6.37 Representação esquemática da lagoa para o cenário 02 – estação seca

A Figura 6.37, como já mencionado, representa de modo esquemático a lagoa no cenário 02 (estação seca). Em comparação à representação da lagoa para o cenário 01 (estação chuvosa), Figura 6.24, verifica-se uma retração do espelho de água de 320.000 m² para 208.000 m². Além disso, destaca-se que as distâncias das bordas da lagoa às fronteiras Norte e

Sul da área de estudo foram mantidas e que as distâncias das bordas da lagoa às fronteiras Leste e Oeste da área de estudo foram acrescidas em 40 m.

Em relação ao número de células, em função da discretização espacial adotada, a área da lagoa foi representada por 80 células no cenário 01 (estação chuvosa). Já no cenário 02 (estação seca), devido à retração da lagoa, a sua área passa a ser representada por 52 células. Portanto, estabelece-se uma região de solo exposto, correspondente a um total de 28 células no modelo conceitual do cenário 02.

Em termos do problema de fluxo, existe uma mudança de mecanismo de alimentação do aquífero na área de solo exposto (112.000 m^2) quando comparados os cenários 01 e 02. No cenário 01 (estação chuvosa), esta alimentação se dava pela conexão hidráulica entre a lagoa e o aquífero. Portanto, as simulações de fluxo se limitavam ao meio saturado. Já no cenário 02 (estação seca), esta alimentação se dá pelo processo de recarga natural do aquífero. Nesta condição, deve ser considerado também o fluxo no meio não saturado, principalmente para permitir a simulação do transporte no referido meio.

A Figura 6.38 apresenta os valores médios dos níveis do lençol freático, obtidos a partir das 200 simulações de fluxo no meio saturado para a estação seca. Novamente, observa-se uma relativa simetria dos níveis médios do lençol freático na direção Sul-Norte. A Figura 6.39 apresenta os níveis do lençol freático para uma realização em particular, ilustrando novamente o fato de que, para uma dada realização, não se verifica a simetria observada para os valores médios.

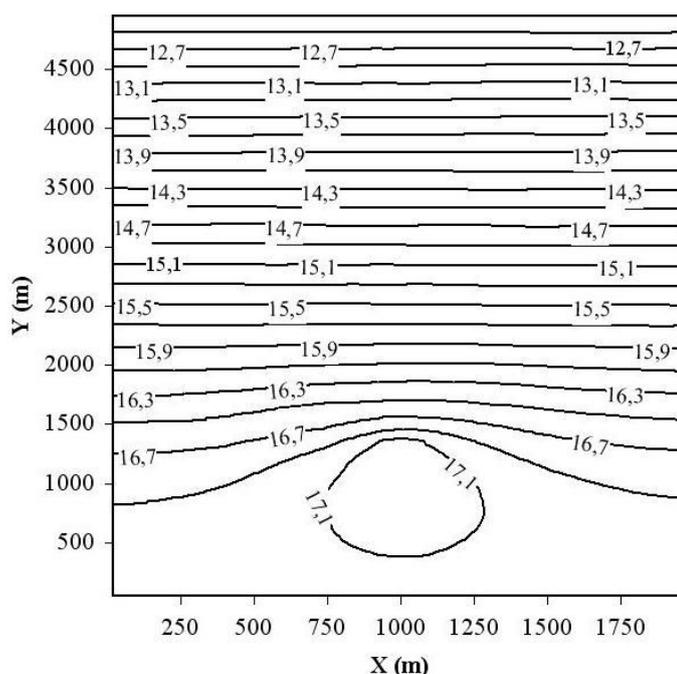


Figura 6.38 Valores médios de níveis (em m) do lençol freático para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a estação seca

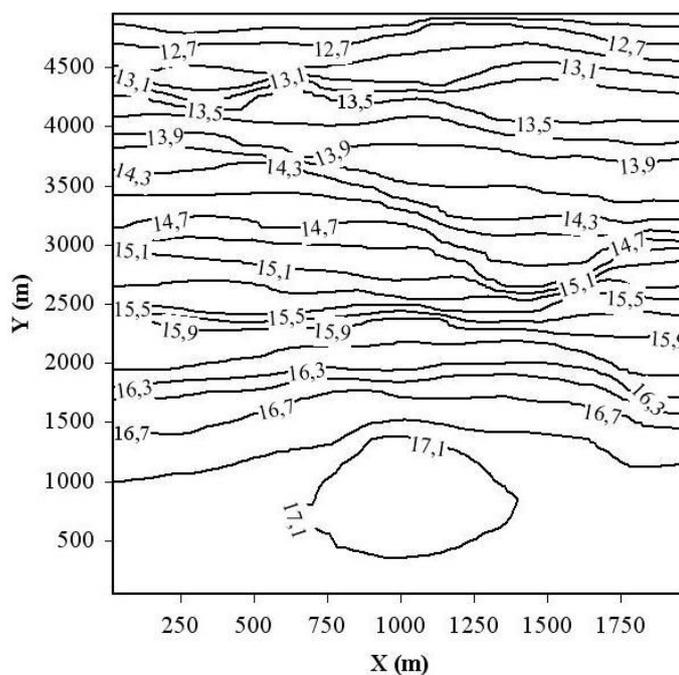


Figura 6.39 Valores de níveis (em m) do lençol freático para a realização 146 de fluxo em meio poroso saturado para a estação seca

A Figura 6.40 apresenta os valores de desvio-padrão dos níveis do lençol freático, obtidos a partir das 200 simulações de fluxo no meio saturado para a estação seca, utilizando-se o modelo FLUXSAT.

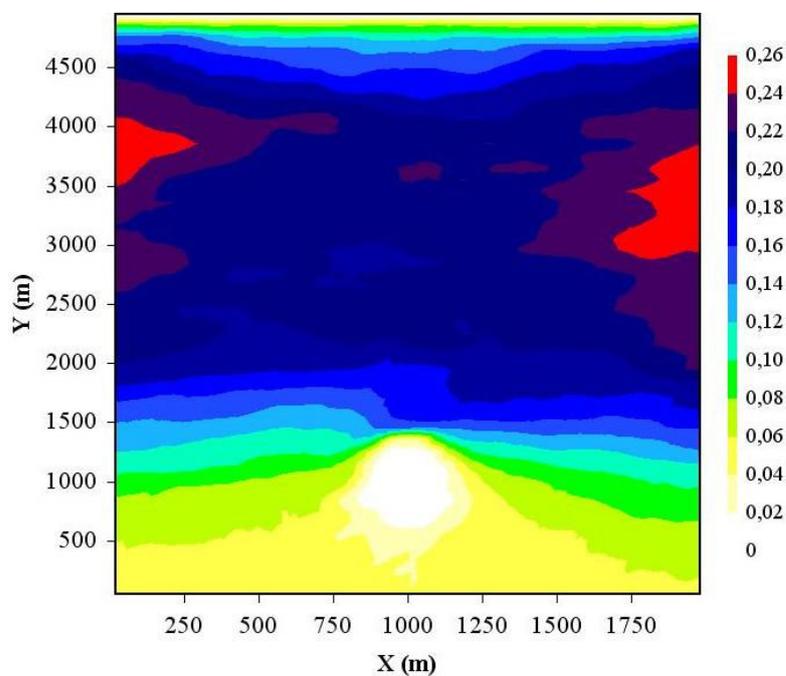


Figura 6.40 Desvio-padrão dos níveis (em m) do lençol freático para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a estação seca

Em relação à Figura 6.40, valem as mesmas conclusões obtidas para o cenário 01 (estação chuvosa), ou seja, os menores desvios-padrão se concentram junto à área da lagoa e ao contorno norte e ocorrem principalmente devido às condições de contorno impostas ao modelo de fluxo. Além disso, os maiores valores de desvio-padrão novamente ocorrem nas regiões que sofrem menor influência das condições de contorno impostas ao modelo de fluxo.

A Figura 6.41 apresenta os valores médios de velocidade de Darcy, considerando-se as 200 simulações realizadas, com o objetivo de fornecer uma ordem de grandeza do fluxo que se verifica na área de estudo para o cenário 02 (estação seca). O comportamento do fluxo em termos de direção e sentido, em termos médios, pode ser percebido a partir da Figura 6.38 que apresenta os níveis médios obtidos nas simulações.

Observa-se, a partir da Figura 6.41, que existe uma aceleração do fluxo, principalmente na direção norte. Assim como no cenário 01 (estação chuvosa), a explicação se deve à adoção da condição de regime permanente, onde a diminuição do nível do lençol freático (espessura do fluxo) é compensada pelo aumento de velocidade. Novamente, verifica-se uma região com velocidades de fluxo mais altas junto ao contorno norte da lagoa, como resultado da influência da lagoa sobre os níveis locais. Uma vez mais, destaca-se, pelos resultados obtidos a partir do modelo FLUXSAT, que o fluxo da lagoa para o aquífero, como pode ser observado a partir da Figura 6.41, se concentra principalmente ao longo das bordas da lagoa.

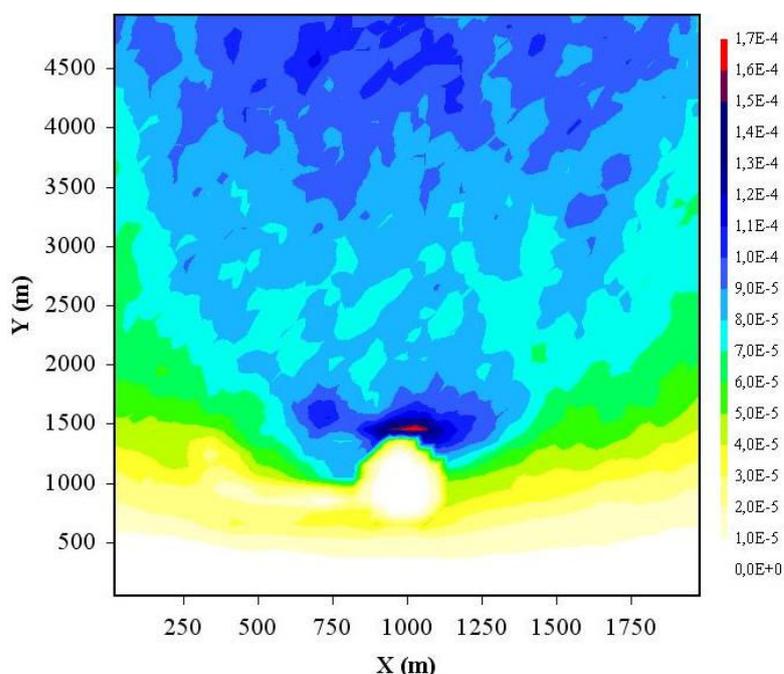


Figura 6.41 Valores médios de velocidade de Darcy (m/dia) para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a estação seca

Fluxo no meio não saturado

O modelo FLUX, como já mencionado, foi utilizado para a análise do fluxo no meio não saturado. Foram necessárias algumas modificações no referido modelo computacional para permitir a execução de várias simulações em seqüência sem a interferência do usuário. A versão modificada do modelo FLUX permite ainda a definição de diversas colunas de solo contaminado e leva em consideração as duas situações possíveis de fluxo, quando se comparam o fundo da coluna de solo e o nível do lençol freático, calculado pelo modelo FLUXSAT, como será explicado na seqüência.

Os dados básicos necessários para o modelo FLUX referem-se aos parâmetros que definem a curva de retenção do solo. O modelo teórico adotado para a representação da curva de retenção do solo corresponde ao modelo sugerido por van Genuchten (1980) e que pode ser representado por:

$$\frac{\theta - \theta_r}{\theta_m - \theta_r} = \left(\frac{1}{1 + (\alpha\psi)^N} \right)^M \quad (6.6)$$

onde: θ = conteúdo volumétrico [L^3/L^3];

θ_m = conteúdo volumétrico para a saturação máxima [L^3/L^3];

θ_r = conteúdo volumétrico para a saturação residual [L^3/L^3];

ψ = altura capilar [L];

α = parâmetro a determinar [L^{-1}];

M e N = parâmetros a determinar.

A Tabela 6.19 apresenta os resultados de ensaios realizados em estudos anteriores para a determinação da curva de retenção do solo. Estes ensaios são referentes a pontos distintos dentro da área de estudo.

Tabela 6.19 Resultados de ensaios para a determinação da curva de retenção do solo

Altura capilar (m)	Conteúdo volumétrico							
	01	02	03	04	05	06	07	08
0	0,298	0,323	0,260	0,296	0,334	0,427	0,273	0,291
3,10	0,220	0,149	0,136	0,158	0,102	0,159	0,118	0,133
5,17	0,180	0,115	0,100	0,122	0,077	0,132	0,088	0,097
10,33	0,169	0,109	0,086	0,108	0,069	0,119	0,077	0,079
20,66	0,157	0,099	0,073	0,095	0,056	0,108	0,070	0,074
30,99	0,146	0,092	0,065	0,152	0,050	0,053	0,074	0,070

Como pode ser observado, a partir da Tabela 6.19, existem variações significativas no valor do conteúdo volumétrico para um mesmo valor de altura capilar, inclusive com algumas amostras apresentando variações ao longo do perfil do solo que dificultam a obtenção dos parâmetros da curva de retenção do solo, especialmente as amostras 04 e 07.

O procedimento básico adotado para a determinação dos parâmetros da curva de retenção do solo foi o de ajustar o modelo teórico de curva de retenção, representado pela Equação 6.6, para cada uma das amostras apresentadas na Tabela 6.19 e verificar se os parâmetros ajustados apresentavam valores razoáveis em comparação aos valores observados na literatura técnica. Utilizou-se como referência a discussão apresentada por Charbeneau (2000).

Após este ajuste inicial, procurou-se definir um conjunto único de parâmetros que representasse razoavelmente bem a maior parte das amostras e cujos valores fossem aceitáveis perante os valores sugeridos pela literatura. A partir dos dados apresentados na Tabela 6.19 e utilizando-se o modelo computacional RETC (van Genuchten *et al.*, 1991), estabeleceu-se como conjunto de parâmetros que caracterizam a curva de retenção na região de solo exposto, os valores apresentados na Tabela 6.20.

Tabela 6.20 Ajuste dos parâmetros que caracterizam a curva de retenção do solo na área de solo exposto

Parâmetro	Valor ajustado
θ_m	0,275
θ_r	0,0
α	4,0
M	0,237
N	1,310

A região onde existe a necessidade de simulação do fluxo no meio não saturado corresponde à área de solo exposto, definida pela diferença entre as áreas da lagoa nos cenários 01 (estação chuvosa) e 02 (estação seca), e que são representadas pelas Figuras 6.24 e 6.37, respectivamente.

A Figura 6.42 apresenta um corte vertical da área da lagoa com o objetivo de mostrar o modelo conceitual adotado para representar o cenário 02 (estação seca), em termos do fluxo e transporte no meio não saturado e do mecanismo de entrada do contaminante no meio saturado, como será discutido no item 6.4.2. Novamente, destaca-se que a análise do fluxo no meio não saturado se restringe à região de solo exposto e se faz necessária para fornecer subsídios para a etapa de modelagem do transporte do contaminante.

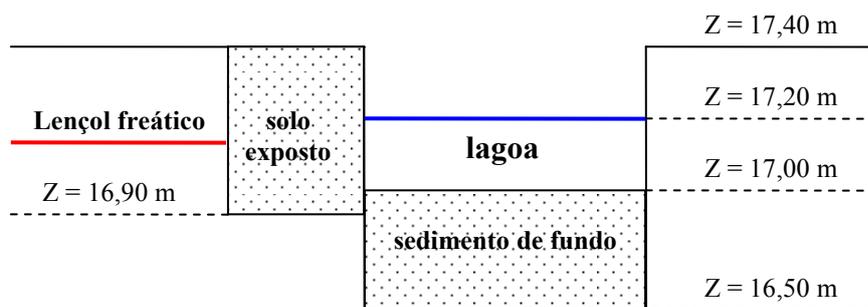


Figura 6.42 Modelo conceitual da área de estudo – corte vertical na área da lagoa
(cenário 02 – estação seca)

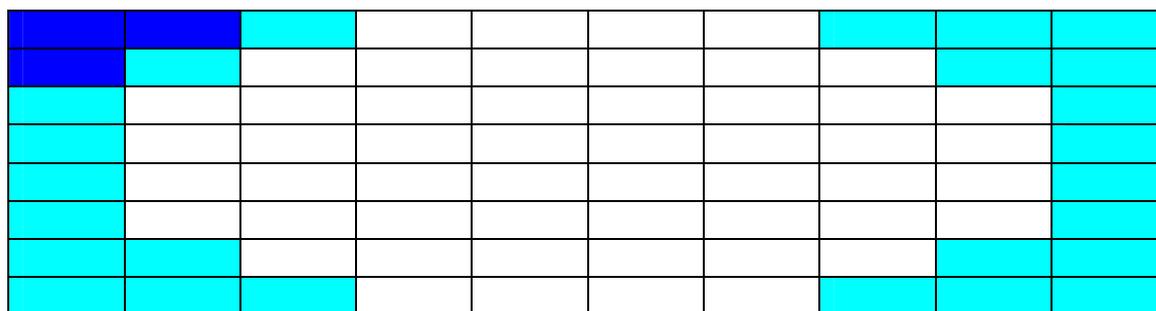
Assim como no cenário 01, adotou-se uma espessura de camada de sedimentos de fundo de 50 cm, que corresponde também à espessura da camada de solo exposto, conforme representado na Figura 6.42, e uma condutividade hidráulica vertical de 1×10^{-7} m/s, equivalente a 0,864 cm/dia. Adicionalmente, assumiu-se uma profundidade média da lagoa de 20 cm.

Como observado na Figura 6.42, a camada de solo contaminado exposto possui uma cota de base de 16,90 m. A comparação da referida cota com o nível do lençol freático, estimado pelo modelo FLUXSAT, permite definir duas situações distintas em termos de fluxo e transporte na área de solo exposto.

A primeira situação (situação 01) corresponde à condição na qual o nível do lençol freático encontra-se acima da cota 16,90 m. Para esta condição, não existe a necessidade de simulação do fluxo no meio não saturado porque a entrada do contaminante se faz diretamente no meio saturado. A segunda situação (situação 02) corresponde à condição na qual o nível do lençol freático encontra-se abaixo da cota 16,90 m. Para esta condição, existe a necessidade de simulação do fluxo no meio não saturado porque há uma distância entre a base da camada de solo exposto e o nível do lençol freático.

Esta classificação em situação 01 ou situação 02, em termos de fluxo e transporte no meio não saturado para a área de solo contaminado exposto, foi estabelecida para cada uma das 28 células que representam a referida área e para cada uma das 200 simulações de fluxo e transporte realizadas.

A Figura 6.43 procura ilustrar o modo como as 28 células que representam a área de solo contaminado exposto foram classificadas em situação 01 (sem fluxo e transporte no meio não saturado) e situação 02 (com fluxo e transporte no meio não saturado) para a realização (simulação) 194.



Convenção:

	Lagoa		solo exposto (situação 01)		solo exposto (situação 02)
--	-------	--	----------------------------	--	----------------------------

Figura 6.43 Representação esquemática das células junto à região da lagoa para o cenário 02 (estação seca), destacando a condição de fluxo no meio não saturado na área de solo contaminado exposto, obtida para a realização (simulação) 194

Destaca-se que a informação básica para a classificação apresentada na Figura 6.43 são os níveis do lençol freático, obtidos a partir dos resultados das simulações de fluxo em meio saturado, realizadas pelo modelo FLUXSAT. Isto justifica o procedimento adotado de se analisar inicialmente o fluxo no meio poroso saturado.

Para a simulação do fluxo no meio não saturado, associou-se uma coluna de solo contaminado a cada célula classificada como situação 02. O comprimento de cada coluna foi definido pela distância entre a base da camada de solo exposto (16,90 m) e o nível do lençol freático. Este comprimento corresponde à distância na qual se dá o fluxo e o transporte no meio não saturado. Por convenção, adotou-se um comprimento de coluna de solo nulo para as células classificadas como situação 01, onde não se tem o fluxo e o transporte no meio não saturado.

As 200 simulações realizadas se diferenciam entre si principalmente pela forma como as 28 células, que representam a área de solo contaminado exposto, foram classificadas em situação 01 ou situação 02 e pelo comprimento das colunas de solo associadas a cada célula classificada como situação 02.

De modo geral, pode-se ter uma configuração distinta para cada uma das 200 simulações realizadas. Destaca-se que pode haver uma simulação que apresente a mesma classificação da simulação 194, apresentada na Figura 6.43, porém provavelmente os comprimentos das colunas correspondentes às células classificadas como situação 02 serão distintos entre si, com exceção do caso onde todas as 28 células são classificadas como situação 01.

O fluxo nas colunas associadas às células classificadas como situação 02 foi então simulado, utilizando-se o modelo FLUX em uma versão modificada que permite identificar se para determinada célula ocorre a situação 01 ou a situação 02 pela comparação entre os níveis do lençol freático calculados pelo modelo FLUXSAT e a cota da base da camada de solo exposto (16,90 m).

O modelo FLUX, conforme discutido no capítulo 03, calcula os valores de grau de saturação e as cargas hidráulicas para uma coluna de solo não saturado, a partir da recarga e das características do solo, e que servem de entrada para o modelo TRANSP, que trata do transporte unidimensional em meio poroso não saturado. Portanto, foram definidos perfis de grau de saturação e de cargas hidráulicas para as colunas associadas às células classificadas como situação 02 para cada uma das 200 simulações realizadas.

Novamente, destaca-se que as simulações de fluxo no meio não saturado foram realizadas principalmente para subsidiar as simulações de transporte no referido meio para o cenário 02 (estação seca), como será abordado na seqüência.

6.4.2 Análise do Problema de Transporte na Estação Seca

A solução do problema de transporte no cenário 02 (estação seca), assim como no cenário 01 (estação chuvosa), foi obtida a partir dos resultados da solução do problema de fluxo. Contudo, novamente existem importantes diferenças entre os cenários 01 e 02.

A mais importante diferença entre os cenários refere-se à área correspondente à retração da lagoa (112.000 m²). Para a área em questão, existe uma mudança no mecanismo de entrada do contaminante no aquífero. No cenário 01 (estação chuvosa), a entrada do contaminante se dá pela conexão hidráulica entre a lagoa e o aquífero. Já para o cenário 02 (estação seca), a entrada do contaminante se dá pelo processo de recarga natural do aquífero.

Para o cenário 02, conforme já mencionado, a área da lagoa é representada por 52 células no modelo conceitual e a área do solo exposto por 28 células. Como no caso do fluxo, verificam-se duas situações distintas para a área de solo exposto, especificamente agora em termos de transporte.

A situação 01 representa novamente a condição em que o nível do lençol freático simulado resultou superior à cota da base da camada de solo contaminado exposto (16,90 m) e, portanto, não existe transporte no meio não saturado e a situação 02 representa novamente a condição em que o nível do lençol freático simulado resultou inferior à cota da base da

camada de solo contaminado exposto (16,90 m) e, portanto, existe transporte no meio não saturado.

O procedimento adotado para a análise do transporte no cenário 02 (estação seca) consistiu basicamente em:

- 1) análise do transporte no meio não saturado com a determinação dos perfis de concentração ao longo do tempo na interface entre as colunas de solo contaminado (área de solo exposto) e o aquífero (modelo TRANSP);
- 2) análise do transporte no meio saturado com a determinação da variação das concentrações ao longo do tempo na área de estudo (modelo TRANSPSAT).

Transporte no meio não saturado

O modelo FLUX, discutido no capítulo 03, calcula valores de grau de saturação e cargas hidráulicas para uma coluna de solo não saturado e que são usados como dados de entrada para o modelo TRANSP, também discutido no capítulo 03, que trata do transporte unidimensional em meio poroso não saturado.

Destaca-se que, para a análise do transporte no meio não saturado, o modelo TRANSP foi modificado para permitir várias simulações com diversas colunas de solo contaminado, inclusive identificando pelo comprimento da coluna, se para determinada coluna ocorre a situação 01 (sem transporte no meio não saturado) ou a situação 02 (com transporte no meio não saturado). Como mencionado anteriormente, por convenção, o modelo FLUX atribui um comprimento nulo às colunas relativas à situação 01.

Para um melhor entendimento, a Figura 6.44 ilustra um exemplo da variação da concentração de entrada do contaminante no aquífero para a situação 01 (sem transporte no meio não saturado) e para a situação 02 (com transporte no meio saturado). Na Figura 6.44, a curva que representa a situação 02 foi obtida para uma coluna de solo com comprimento de 5 cm e uma discretização espacial (Δz) igual a 1 cm, adotada para todas as simulações.

Verifica-se, a partir da Figura 6.44, que as concentrações de entrada do contaminante no aquífero não variam ao longo do tempo para a situação 01 (sem transporte no meio não saturado). Já para a situação 02 (com transporte no meio não saturado), existe a variação das concentrações de entrada ao longo do tempo, em função justamente da propagação pela coluna de solo não saturado, definida pela distância entre a base da camada de solo contaminado exposto (16,90 m) e o nível do lençol freático.

Verifica-se também, a partir da Figura 6.44, que as concentrações de entrada para a situação 02 tendem ao mesmo valor de concentração de entrada constante, observado para a situação 01. Esse resultado era esperado, uma vez que se adotou a hipótese de concentração constante na fonte (solo contaminado).

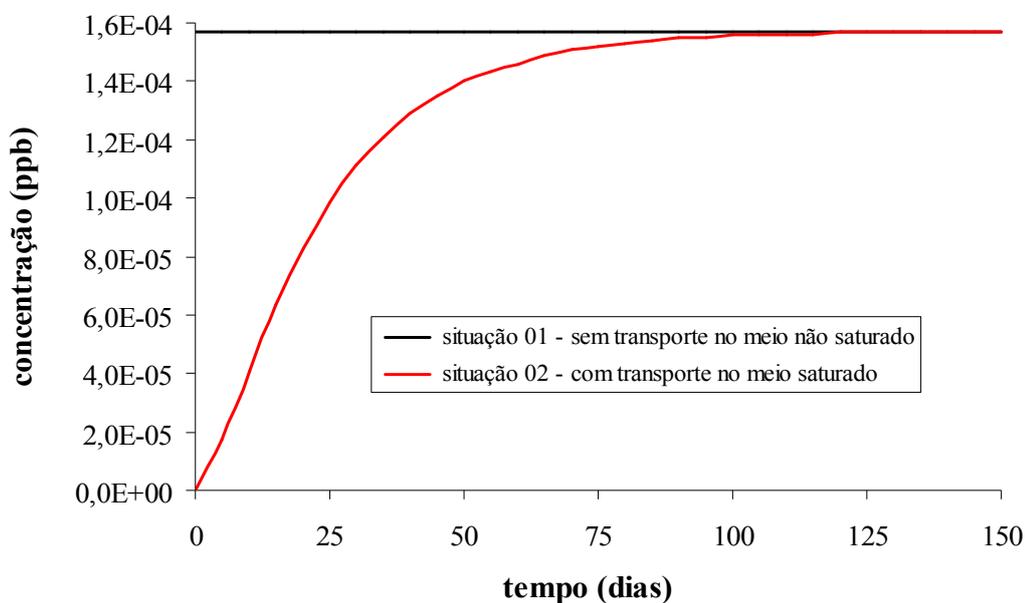


Figura 6.44 Variação da concentração de entrada do contaminante no aquífero para a região de solo exposto

A discussão anterior é relativa apenas à área de solo contaminado exposto, representada por 28 células no modelo conceitual. Para a área da lagoa, representada por 52 células no cenário 02, adotou-se um padrão de entrada do contaminante no aquífero similar à situação 01 na área de solo contaminado exposto, ou seja, concentração de entrada constante no tempo.

A variação da concentração de entrada do contaminante no aquífero ao longo do tempo foi estabelecida para todas as 28 colunas de solo contaminado em cada uma das 200 simulações realizadas pelo modelo TRANSP e foram utilizadas como condição de contorno para as simulações de transporte no meio saturado.

Transporte no meio saturado

O transporte no meio saturado no cenário 02 (estação seca) segue praticamente as mesmas hipóteses básicas e considerações adotadas para o cenário 01 (estação chuvosa). A

principal diferença são as condições de contorno junto à área da lagoa, devido à existência de uma área de solo contaminado exposto, originada pela retração da lagoa.

As células da área de solo exposto classificadas como de situação 02 apresentam concentrações de entrada de contaminante no aquífero variáveis no tempo, enquanto as células da área de solo exposto classificadas como de situação 01 e as células da área da lagoa apresentam concentrações de entrada constantes no tempo, conforme já exemplificado pela Figura 6.44.

As simulações de transporte no meio saturado, realizadas pelo modelo TRANSPSAT, utilizaram basicamente as velocidades de Darcy nas direções x , y e z e os níveis do lençol freático, obtidos pelo modelo FLUXSAT, e os perfis de concentração ao longo do tempo na interface entre a camada de solo contaminado e o aquífero, obtidos pelo modelo TRANSP.

A Figura 6.45 apresenta a evolução da pluma média para o cenário 02 (estação seca). A pluma média foi obtida como a média das 200 simulações efetuadas. Verifica-se novamente, a partir da Figura 6.45, a forte influência dos resultados do modelo de fluxo no meio poroso saturado sobre a forma da pluma média. Como foi observado na Figura 6.41, o fluxo da lagoa para o aquífero se concentra ao longo do contorno da mesma, principalmente na sua parte norte, e este aspecto se reflete na forma da pluma apresentada na Figura 6.45.

A Figura 6.46 apresenta a variação da concentração média de benzeno ao longo do tempo para o receptor 01, considerando-se as 200 simulações de transporte realizadas pelo modelo TRANPSAT para o cenário 02. É de se esperar, como a fonte de contaminação é considerada constante, que as concentrações no receptor 01 tendam a um valor constante. No entanto, verifica-se, pela análise da Figura 6.46, que este valor não é alcançado no horizonte de 30 anos.

A Figura 6.47 apresenta as distribuições de freqüências de concentrações de benzeno junto ao receptor 01 para diferentes instantes de tempo, considerando-se as concentrações também obtidas a partir das 200 simulações de transporte realizadas pelo modelo TRANSPSAT para o cenário 02 (estação seca).

Na seqüência, são apresentadas a avaliação do risco à saúde humana para o cenário 02 e uma comparação entre os resultados obtidos nas avaliações de risco realizadas para os cenários 01 (estação chuvosa) e 02 (estação seca), procurando identificar qual seria o cenário mais crítico em termos de risco incremental de câncer (RIC) para o receptor 01, considerando-se um padrão de exposição de uma pessoa adulta, residente no local e cuja via de exposição é a ingestão oral de água contaminada.

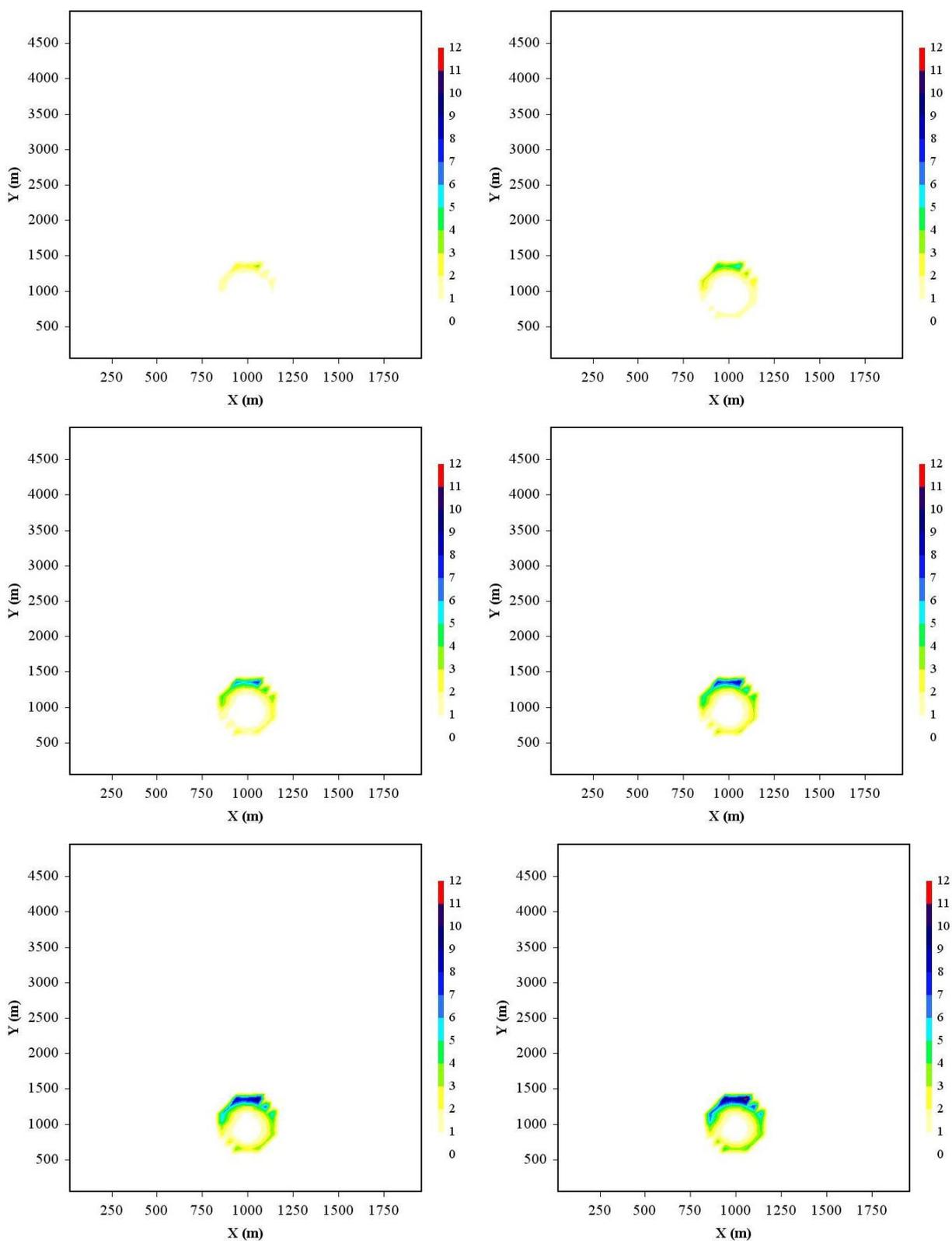


Figura 6.45 Evolução das concentrações médias de benzeno (em ppb) para os horizontes de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos no cenário 02 (estação seca)

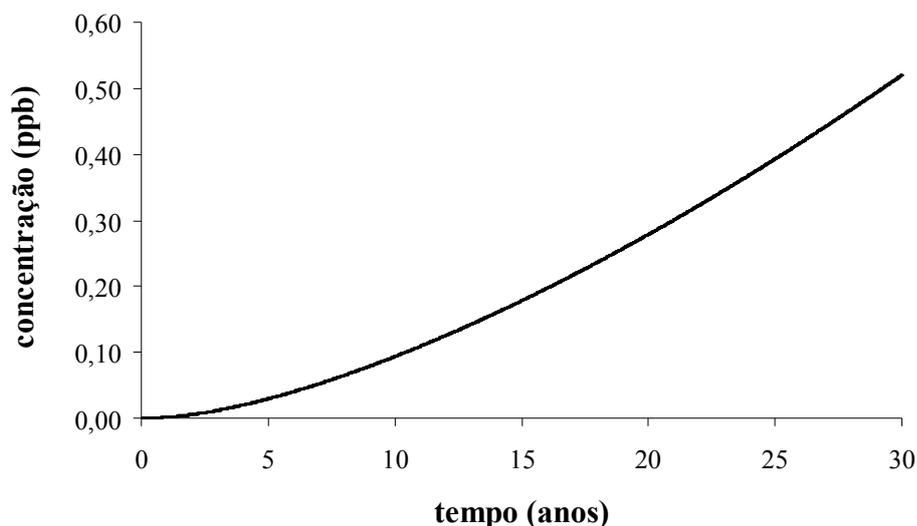


Figura 6.46 Variação da concentração média de benzeno para o receptor 01 no cenário 02 (estação seca)

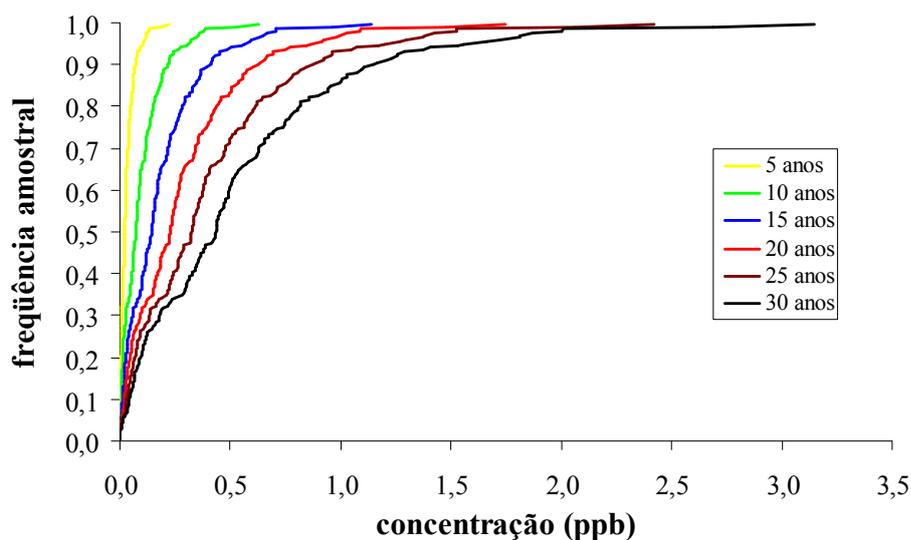


Figura 6.47 Distribuição de frequências de concentração de benzeno para o receptor 01 (5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos) no cenário 02 (estação seca)

6.4.3 Avaliação do Risco na Estação Seca

A avaliação do risco à saúde humana para o cenário 02 (estação seca) seguiu o mesmo procedimento adotado para o cenário 01 (estação chuvosa), descrito no item 6.3.3. Novamente, foram utilizados os valores de concentração relativos a um horizonte de 30 anos para a estimativa da exposição (dose) diária média (DDM), cuja distribuição de frequências é

apresentada na Figura 6.48. Os demais parâmetros usados para a estimativa da DDM são apresentados na Tabela 6.17.

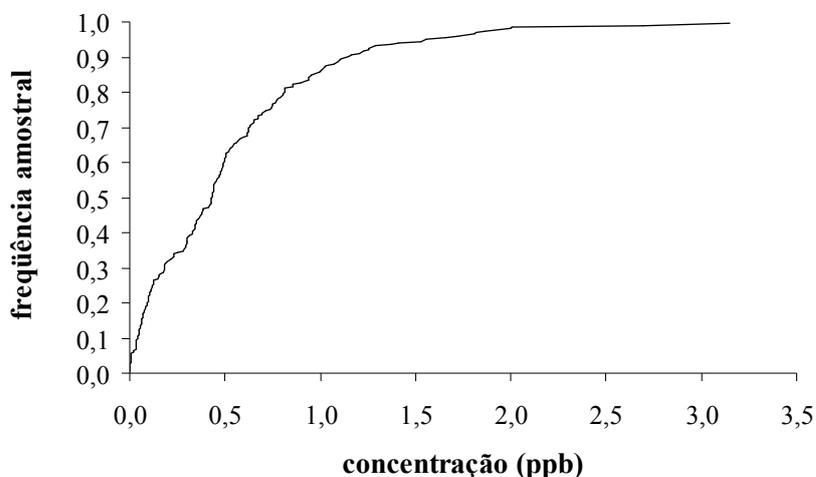


Figura 6.48 Distribuição de frequências de concentração de benzeno para o receptor 01 para o horizonte de tempo de 30 anos no cenário 02 (estação seca)

A Figura 6.49 mostra as distribuições de frequências (curvas inferior e superior) para o risco incremental de câncer (RIC) para o cenário 02 (estação seca). A Figura 6.50 também apresenta as curvas inferior e superior do risco, expressas segundo a probabilidade de excedência. As curvas apresentadas nas Figuras 6.49 e 6.50 foram obtidas a partir de 200 valores de RIC, relativos às 200 simulações de fluxo e transporte realizadas para o cenário 02.

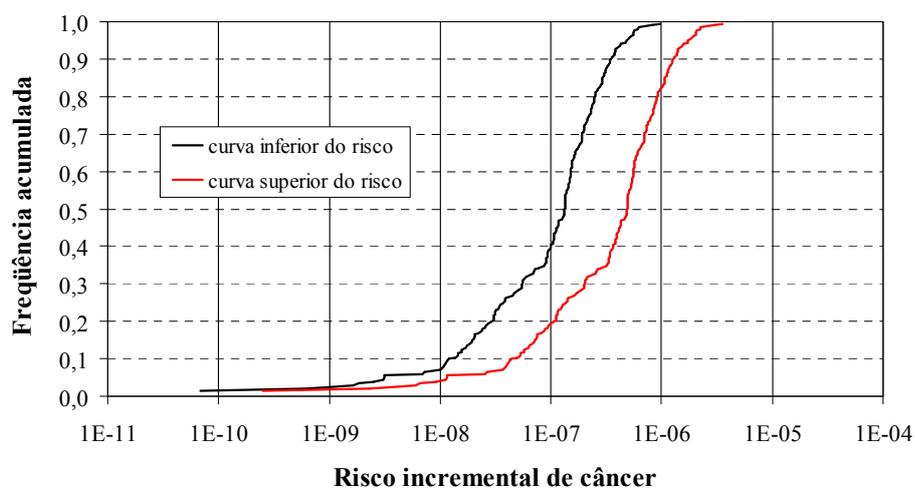


Figura 6.49 Distribuição de frequências dos valores de risco incremental de câncer para o receptor 01 no cenário 02 (estação seca)

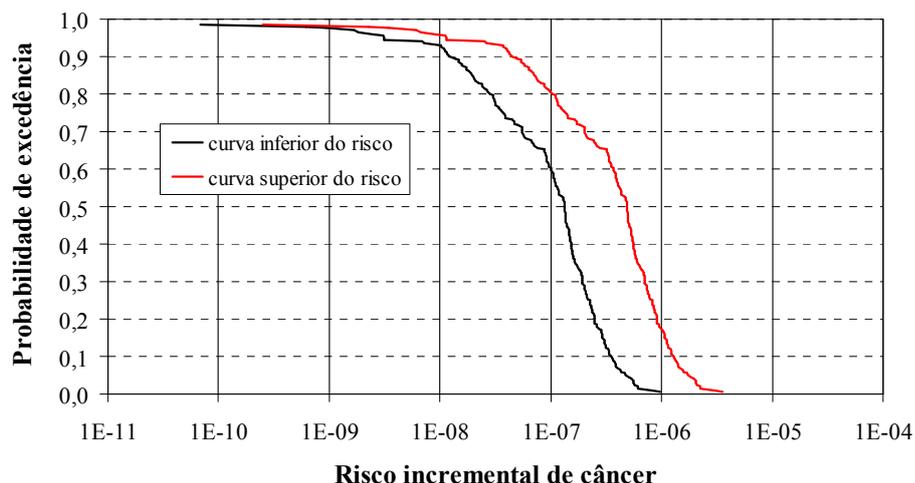


Figura 6.50 Probabilidade de excedência dos valores de risco incremental de câncer para o receptor 01 no cenário 02 (estação seca)

A Tabela 6.21 apresenta estimativas da probabilidade do RIC ultrapassar os limites mais usuais utilizados em avaliações do risco à saúde humana, considerando-se o cenário 02 (estação seca). Os valores estimados de probabilidade foram obtidos por interpolação linear, a partir das curvas de probabilidade de excedência apresentadas na Figura 6.50.

Tabela 6.21 Estimativas da probabilidade do RIC exceder os limites usuais para o risco incremental de câncer para o receptor 01 (cenário 02 – estação seca)

Limite para o risco	Probabilidade de exceder o limite de risco	
	Curva inferior	Curva superior
1×10^{-6}	< 0,5 %	17,4 %
1×10^{-5}	< 0,5 %	< 0,5 %
1×10^{-4}	< 0,5 %	< 0,5 %

Verifica-se novamente, a partir dos valores apresentados na Tabela 6.21, que existe uma probabilidade de excedência estimada maior que 0,5 % para o receptor 01 apenas quando se consideram o limite para o risco de 1×10^{-6} (um caso adicional em uma população exposta de um milhão de pessoas) e a curva superior do risco.

Embora já destacado no item 6.3.3, uma vez mais é preciso ressaltar que os resultados apresentados neste item e condensados na Tabela 6.21 constituem o ponto central do desenvolvimento da presente tese pelo fato de conferirem uma dimensão a mais ao risco estimado e de representarem uma informação adicional para o tomador de decisão.

A Figura 6.51 mostra, apenas como um exemplo de forma de apresentação dos resultados da avaliação de risco, superfícies do risco médio para os horizontes de tempo de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos para o cenário 02, considerando-se o valor de SF igual a $5,23 \times 10^{-2}$

$(\text{mg/kg/dia})^{-1}$, que define a chamada curva superior do risco. A escala adotada para representação das superfícies refere-se ao logaritmo do risco incremental de câncer (log RIC).

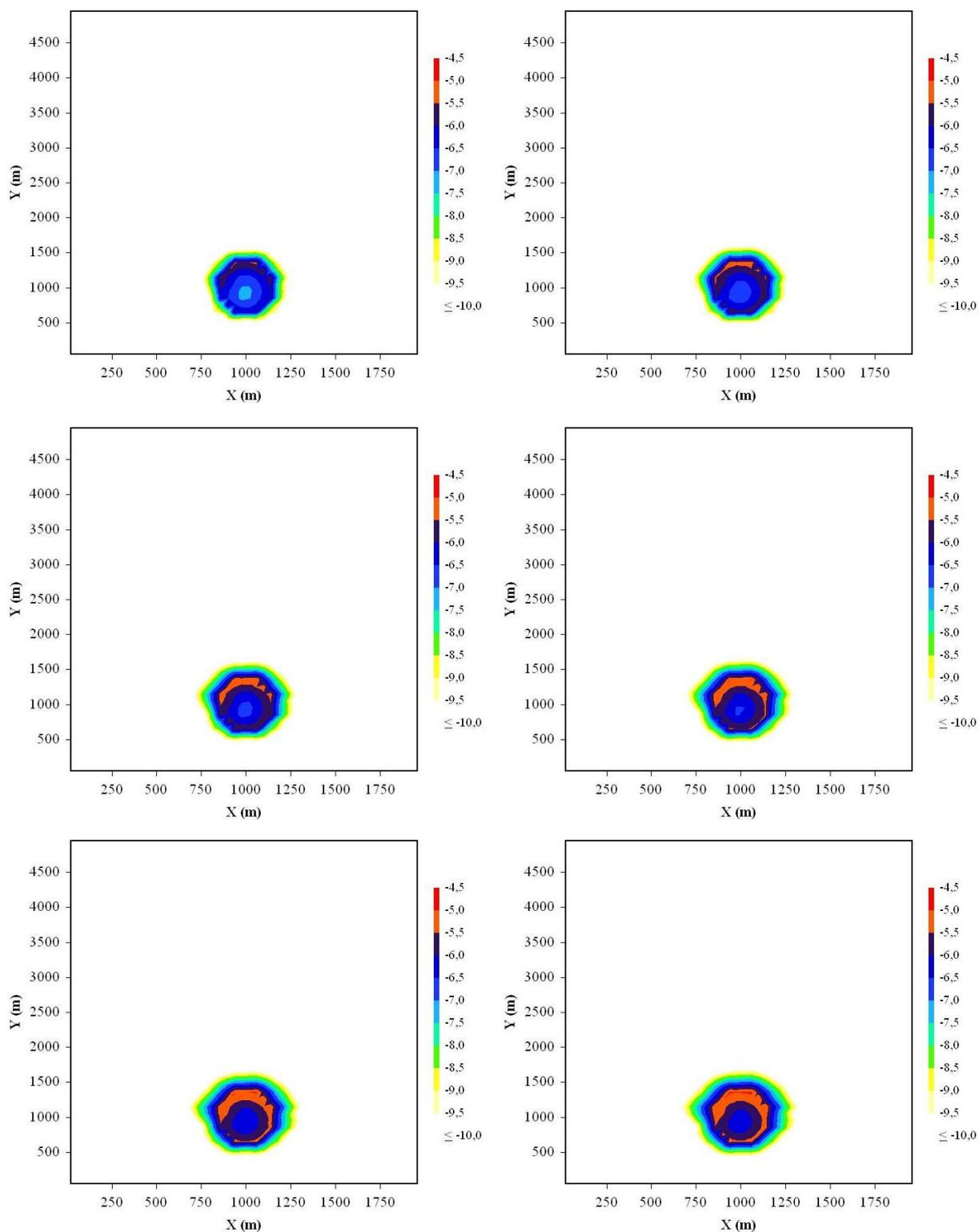


Figura 6.51 Superfícies de risco médio para os horizontes de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos, obtidas para o cenário 02 (estação seca)

6.4.4 Comparação entre os Resultados dos Cenários 01 e 02

Este item apresenta uma comparação entre os resultados obtidos para os cenários 01 e 02, procurando investigar as possíveis causas das diferenças encontradas. As Figuras 6.52 e 6.53 apresentam respectivamente uma comparação entre as curvas inferior e superior de RIC para o cenário 01 (estação chuvosa) e para o cenário 02 (estação seca), considerando-se a probabilidade de excedência do risco incremental de câncer para o receptor 01.

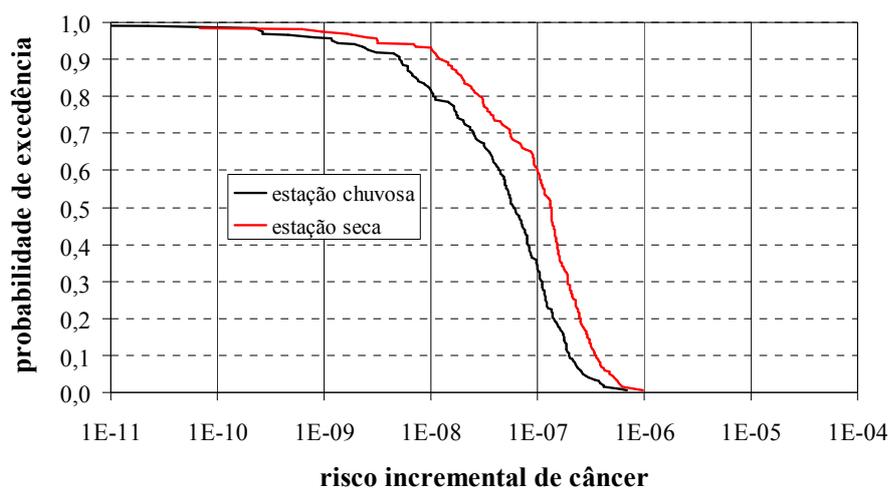


Figura 6.52 Comparação da curva inferior de RIC para o receptor 01 nos cenários 01 e 02

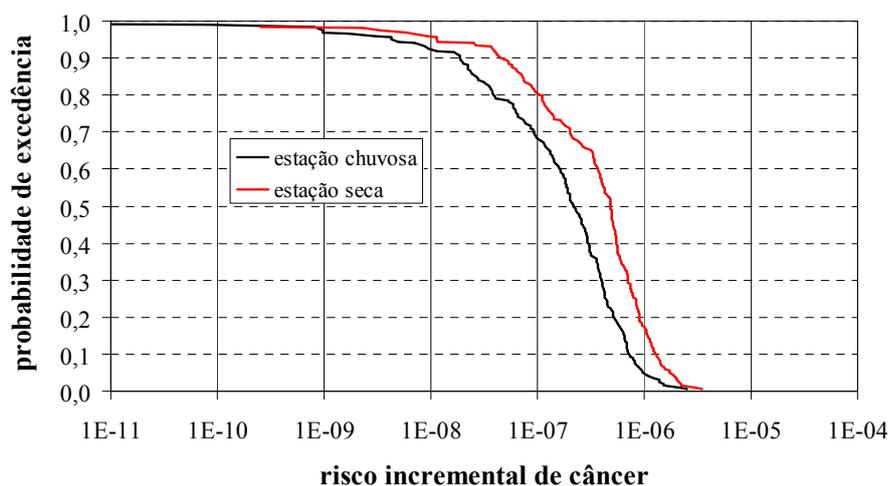


Figura 6.53 Comparação da curva superior de RIC para o receptor 01 nos cenários 01 e 02

Verifica-se, a partir das Figuras 6.52 e 6.53, que o cenário 02 representa uma condição mais crítica em termos do risco para o receptor 01 do que o cenário 01. Esta mesma conclusão pode ser obtida quando se comparam os valores apresentados nas Tabelas 6.18 e 6.21 que

mostram estimativas da probabilidade dos limites usuais de RIC serem excedidos. É importante investigar as possíveis causas para estes resultados, uma vez que poderia se esperar uma condição de risco mais crítica para o cenário 01 (estação chuvosa).

A causa direta para o resultado obtido na comparação do RIC calculado para os cenários 01 e 02 são as distribuições de frequências de concentrações estimadas para o receptor 01 nos referidos cenários e que foram utilizadas para o cálculo do RIC. A Figura 6.54 apresenta esta comparação, destacando o fato de que foram estimados valores de concentração maiores para o cenário 02 (estação seca) em relação ao cenário 01 (estação chuvosa).

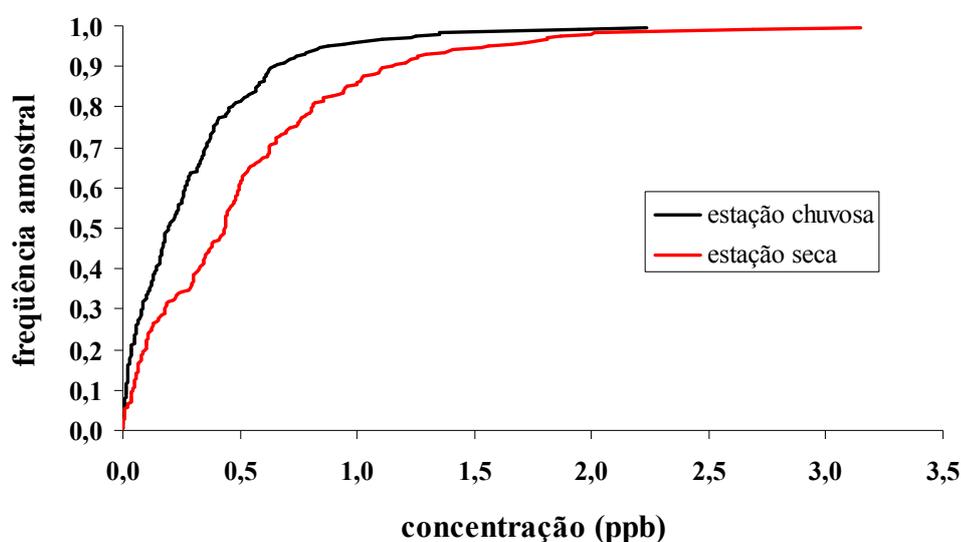


Figura 6.54 Comparação das distribuições de frequências de concentração de benzeno (receptor 01) para 30 anos nos cenários 01 e 02

Uma primeira causa investigada que poderia explicar o fato das concentrações no cenário 02 resultarem maiores do que no cenário 01 seria a transferência de massa de contaminante da lagoa para o aquífero. Uma possibilidade seria a de que, mesmo com a retração da área da lagoa, existisse uma contribuição em termos de fluxo da lagoa para o aquífero maior no cenário 02 do que no cenário 01 e essa condição se refletiria na massa de contaminante entrando no aquífero.

A Figura 6.55 apresenta as distribuições de frequências das contribuições diárias da lagoa para o aquífero em termos de fluxo para os cenários 01 e 02. Verifica-se, a partir da Figura 6.55, que a contribuição da lagoa para o aquífero é maior no cenário 01 (estação chuvosa) do que no cenário 02 (estação seca), refutando, portanto, a hipótese de que o fluxo da lagoa para o aquífero seria maior no cenário 02 para justificar os resultados obtidos.

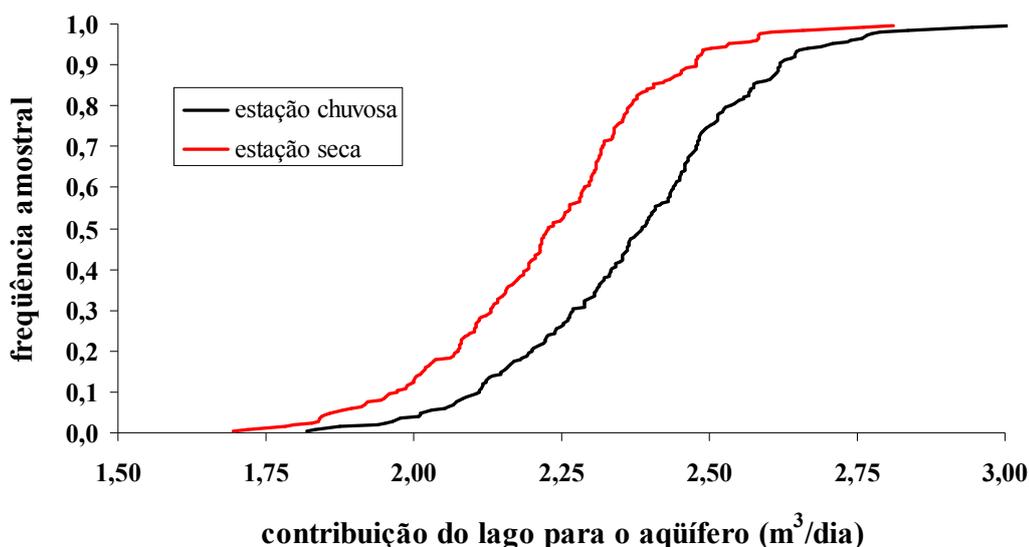


Figura 6.55 Comparação das distribuições de frequências da contribuição da lagoa para o aquífero em termos de fluxo nos cenários 01 e 02

Os resultados apresentados na Figura 6.55 referem-se apenas à contribuição da lagoa para o aquífero. Adicionando-se a recarga natural relativa à área de solo exposto aos valores de contribuição da lagoa no cenário 02, obtém-se uma contribuição, em termos de fluxo da área total contaminada (320.000 m^2), maior para o cenário 02 do que para o cenário 01. Este resultado ajudaria a explicar o fato do cenário 02 ter apresentado os maiores valores de concentração para o receptor 01 e, por consequência, de risco incremental de câncer (RIC).

Para o entendimento da razão da contribuição da área total contaminada em termos de fluxo ser maior para o cenário 02 (estação seca) do que para o cenário 01 (estação chuvosa) é importante resgatar a própria formulação matemática do modelo de fluxo no meio saturado e a sua implementação computacional.

O modelo computacional FLUXSAT que trata do fluxo permanente tridimensional no meio saturado, discutido no capítulo 04, considera a conexão hidráulica entre a lagoa e o aquífero como uma condição de contorno que depende dos níveis existentes no lençol freático. Como consequência, tem-se a possibilidade da contribuição da lagoa não ser ao longo de toda a área da lagoa, conforme já destacado nas Figuras 6.29 e 6.41.

Já em relação à recarga natural, o modelo FLUXSAT a considera como sendo uma condição de contorno que independe dos níveis existentes no lençol freático. Esta diferença é particularmente importante para a área de retração da lagoa, que representa a principal diferença entre os cenários 01 e 02, tanto no fluxo, quanto no transporte de contaminantes. Como consequência, no cenário 02, a totalidade da área de solo exposto (112.000 m^2) contribui para o aquífero através da recarga natural.

Como uma segunda causa a ser investigada, procurou-se analisar também o fluxo na região próxima ao receptor 01 que está localizado 50 m ao norte da lagoa, sobre o seu eixo de simetria longitudinal. Esta análise começa pela comparação entre as Figuras 6.29 e 6.41 que mostram as velocidades médias de Darcy para os cenários 01 e 02. Verifica-se que o cenário 02 apresenta as maiores velocidades médias de Darcy na vizinhança do receptor 01.

A Tabela 6.22 mostra algumas grandezas relativas ao fluxo na região próxima ao receptor 01, junto à fronteira norte da lagoa, e que auxiliam na interpretação dos resultados obtidos.

Tabela 6.22 Grandezas relacionadas ao fluxo na região próxima ao receptor 01 (fronteira norte da lagoa)

Grandeza	Cenário 01 (estação chuvosa)	Cenário 02 (estação seca)
Contribuição máxima da lagoa (m ³ /dia)	0,44	0,60
Velocidade de Darcy média (m/dia)	$1,41 \times 10^{-4}$	$1,73 \times 10^{-4}$
Velocidade de Darcy máxima (m/dia)	$5,85 \times 10^{-4}$	$6,71 \times 10^{-4}$
Nível médio do lençol freático (m)	17,18	16,90
Gradiente hidráulico médio (%)	0,20	0,25

Como pode-se observar, a partir dos dados apresentados na Tabela 6.22, as grandezas relacionadas ao fluxo na região próxima ao receptor 01, fronteira norte da lagoa, apresentam maiores valores para o cenário 02, com a exceção do nível médio do lençol freático, como era de se esperar. A principal justificativa para este fato são os gradientes hidráulicos verificados na região em análise e que se apresentam maiores para o cenário 02.

Em razão dos resultados apresentados na Tabela 6.22, a existência da lagoa parece representar uma perturbação mais significativa para o escoamento na região próxima ao receptor 01 no cenário 02 (estação seca) do que no cenário 01 (estação chuvosa), considerando-se as condições de contorno impostas ao modelo de fluxo. Este fato também ajuda a explicar os resultados obtidos.

Uma terceira causa investigada que colabora para os resultados obtidos é o modo como a retração da lagoa foi considerada. Comparando-se as Figuras 6.24 e 6.37, verifica-se que a diminuição da área da lagoa do cenário 01 para o cenário 02 se deu principalmente no sentido Leste-Oeste e não no sentido Norte-Sul. Deste modo, a distância do receptor 01 até a fronteira norte da lagoa foi a mesma para os dois cenários.

Uma última causa destacada é a própria forma da pluma média de contaminação nos cenários 01 e 02, apresentadas pelas Figuras 6.30 e 6.45. Para o cenário 01 (estação chuvosa), as maiores concentrações tendem a acontecer junto aos vértices do retângulo que define a área

da lagoa. Já para o cenário 02 (estação seca), as maiores concentrações ocorrem ao longo do eixo de simetria da lagoa na direção Sul-Norte, que coincide justamente com a localização do receptor 01. Como já destacado, a forma da pluma de contaminação é fortemente influenciada pelas condições de contorno impostas ao modelo de fluxo no meio saturado.

6.5 ABORDAGEM ESTOCÁSTICA ALTERNATIVA

Este item apresenta a comparação entre os resultados obtidos para o cenário 01 (estação chuvosa), apresentados no item 6.3, e os resultados obtidos para uma abordagem estocástica alternativa.

Na referida abordagem alternativa, os valores de condutividade hidráulica são também considerados aleatórios, mas não existe a representação da variação espacial da condutividade hidráulica, ou seja, cada campo aleatório gerado possui um único valor de condutividade hidráulica para todas as células. Em outras palavras, o meio poroso é considerado homogêneo.

A justificativa para a comparação entre estas duas abordagens distintas, uma que leva em consideração a heterogeneidade do meio (item 6.3) e outra que considera o meio homogêneo, é a de que a abordagem alternativa pode ser encontrada em alguns modelos computacionais disponíveis comercialmente, como, por exemplo, o modelo ASMWIN (Chiang, Kinzelbach e Rausch, 1998). Portanto, é interessante verificar para o estudo de caso, qual seria o resultado caso se tivesse optado por adotar a abordagem alternativa.

6.5.1 Análise do Problema de Fluxo na Abordagem Estocástica Alternativa

A modelagem do problema de fluxo seguiu exatamente as mesmas considerações feitas na modelagem do cenário 01 (estação chuvosa), conforme descrito no item 6.3.1. A diferença básica entre o cenário 01 e a abordagem alternativa foi a de que os campos aleatórios de condutividade hidráulica foram gerados sem considerar a estrutura espacial da mesma. Com isso, os campos resultaram homogêneos, ou seja, todas as células de um determinado campo apresentam o mesmo valor de condutividade hidráulica.

O procedimento usado para gerar os campos de condutividade hidráulica foi simplesmente o de adotar o método de Monte Carlo para gerar números aleatórios distribuídos segundo uma distribuição log-normal. Procurou-se preservar os percentis associados aos valores observados de condutividade, seguindo o sugerido no item 6.2.2.

A Figura 6.56 apresenta os níveis médios do lençol freático, obtidos a partir de 200 simulações de fluxo em meio saturado para a abordagem alternativa (estação chuvosa), com o uso do modelo FLUXSAT. Já a Figura 6.57 apresenta os valores médios de velocidade de Darcy para as simulações de fluxo em meio saturado, segundo a abordagem alternativa.

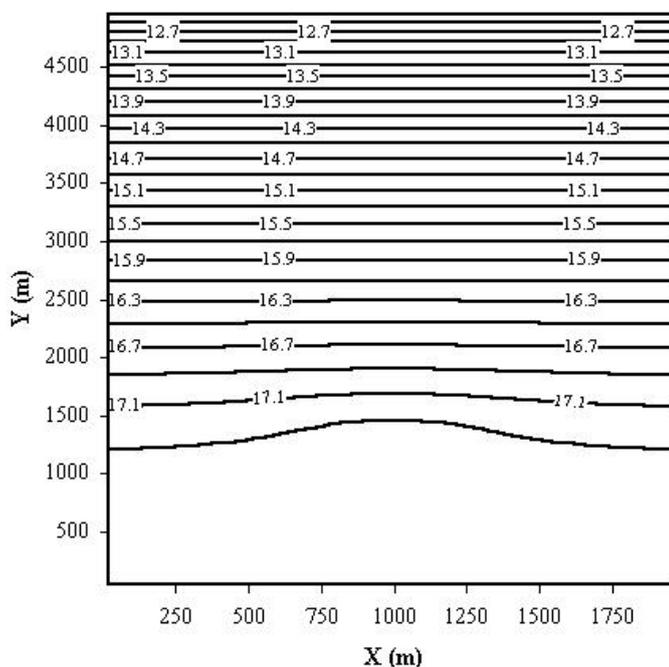


Figura 6.56 Valores médios de níveis (em m) do lençol freático para as simulações de fluxo em meio poroso saturado para a abordagem alternativa (estação chuvosa)

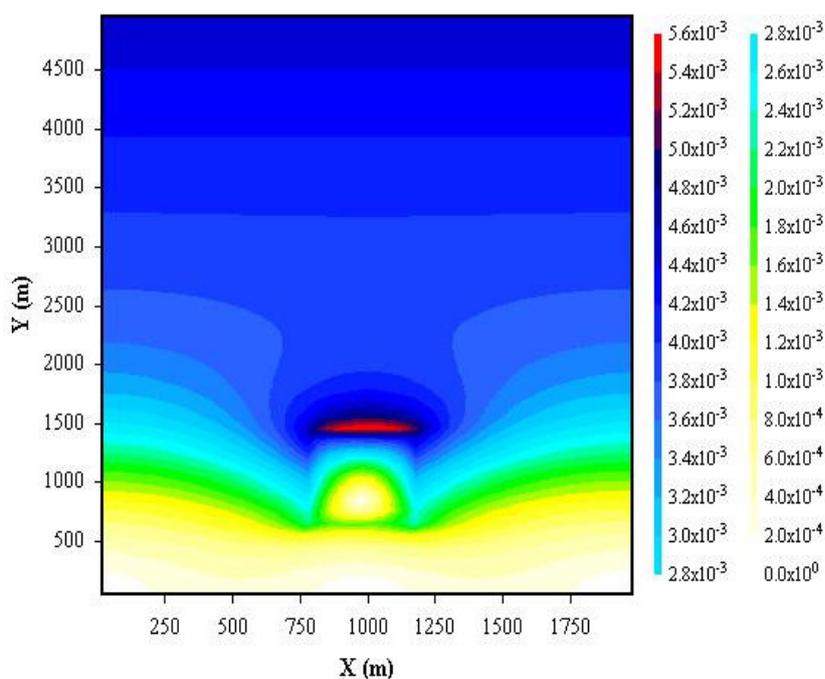


Figura 6.57 Valores médios de velocidade de Darcy (em m/dia) para as simulações de fluxo em meio poroso saturado, segundo a abordagem alternativa (estação chuvosa)

Em relação à Figura 6.56, verifica-se uma simetria em termos médios dos níveis do lençol freático. No caso da abordagem alternativa, o comportamento simétrico dos níveis se verifica também para cada uma das 200 simulações realizadas, em razão da hipótese de homogeneidade do meio poroso e das condições de contorno impostas ao modelo de fluxo.

Em relação à Figura 6.57, é possível perceber que a simetria dos níveis se reflete nos valores de velocidade de Darcy. Novamente, verificam-se uma aceleração do fluxo no sentido Sul-Norte e uma região de velocidades de Darcy relativamente altas junto ao contorno norte da lagoa, destacando a interferência da mesma sobre os níveis do lençol freático e, por consequência, sobre as velocidades de Darcy.

6.5.2 Análise do Problema de Transporte na Abordagem Estocástica Alternativa

A modelagem do problema de transporte seguiu exatamente as mesmas considerações feitas na modelagem do cenário 01 (estação chuvosa), conforme descrito no item 6.3.2. As diferenças em relação ao cenário 01 são uma consequência direta dos resultados das simulações de fluxo no meio poroso saturado.

A Figura 6.58 apresenta a evolução da pluma média, obtida como a média das 200 simulações de transporte efetuadas para a abordagem alternativa. A partir dos resultados apresentados na Figura 6.58, verifica-se novamente que a forma da pluma é bastante influenciada pelos resultados do modelo de fluxo que definem as áreas de contribuição da lagoa para o aquífero.

A Figura 6.59 mostra a variação da concentração média de benzeno no tempo para o receptor 01, considerando-se as 200 simulações realizadas na abordagem alternativa. Conforme já mencionado anteriormente, como a fonte de contaminação é considerada constante, é de se esperar que as concentrações no receptor 01 tendam a um valor constante. Contudo, verifica-se, a partir da Figura 6.59, que este valor constante não é alcançado no horizonte de 30 anos para a abordagem estocástica alternativa.

A Figura 6.60 apresenta as distribuições de frequências de concentrações de benzeno junto ao receptor 01 para diferentes instantes de tempo, obtidas a partir das 200 simulações realizadas para a abordagem estocástica alternativa (estação chuvosa).

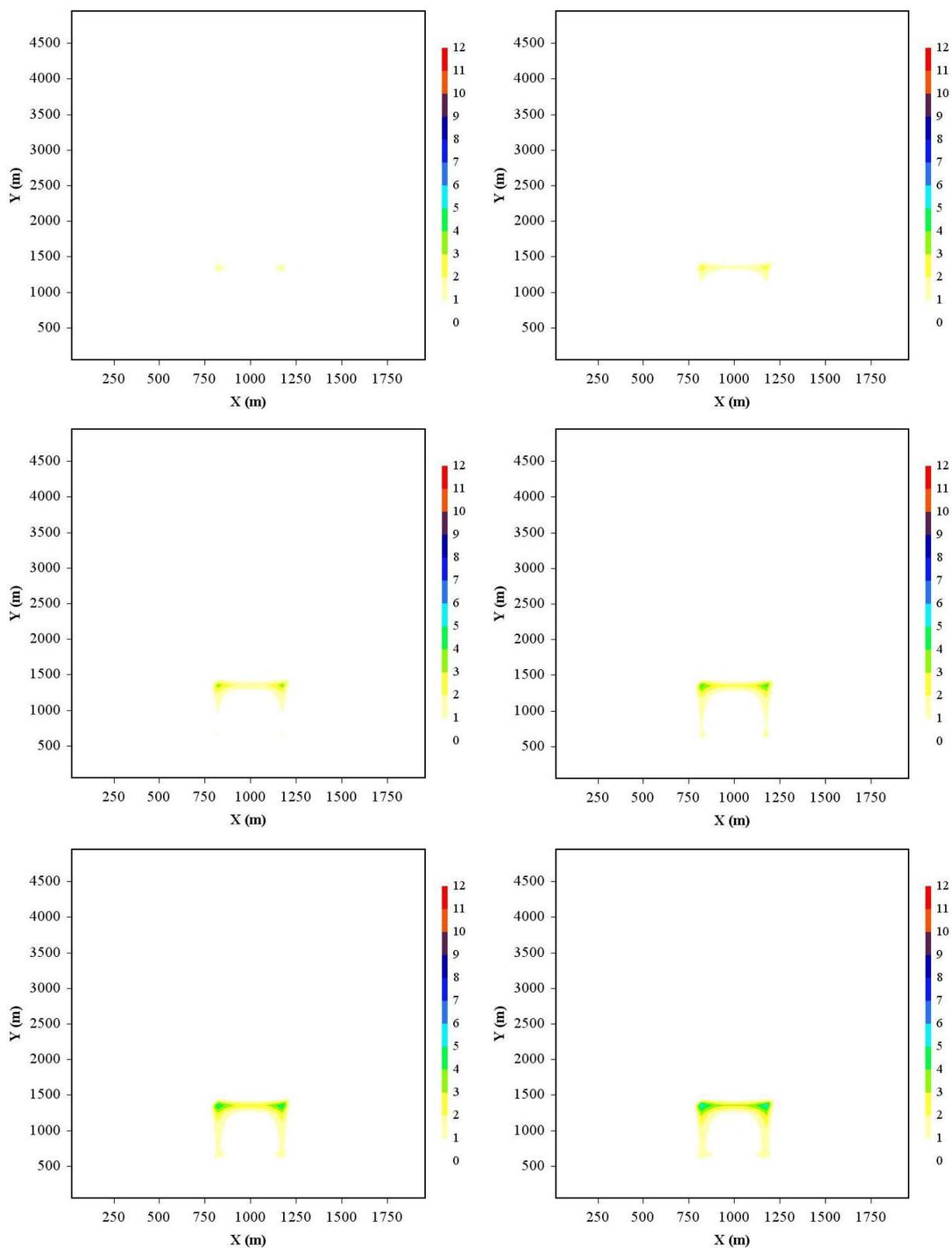


Figura 6.58 Evolução das concentrações médias de benzeno (em ppb) para os horizontes de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos na abordagem alternativa (estação chuvosa)

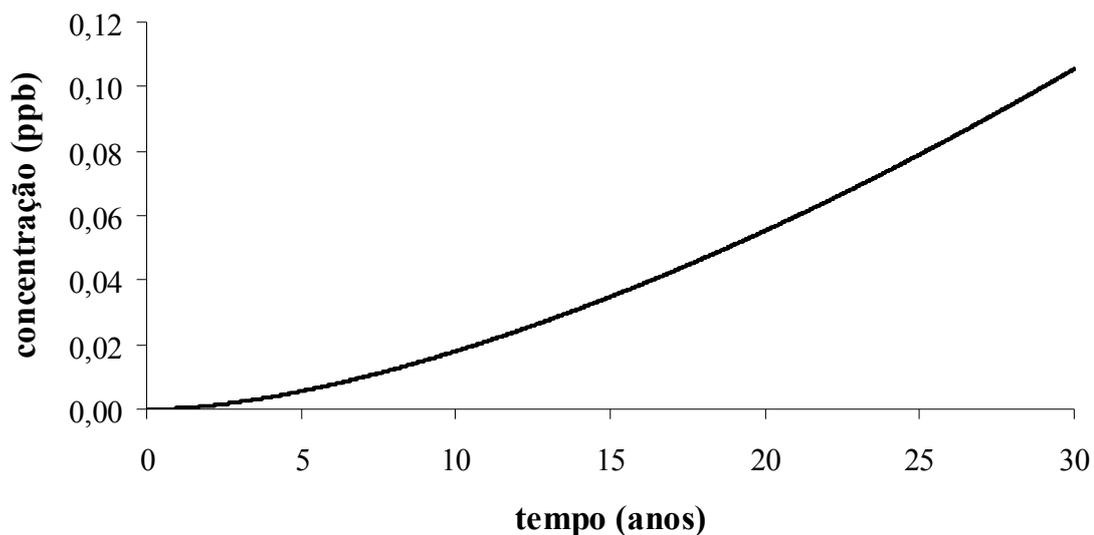


Figura 6.59 Variação da concentração média de benzeno para o receptor 01 na abordagem alternativa (estação chuvosa)

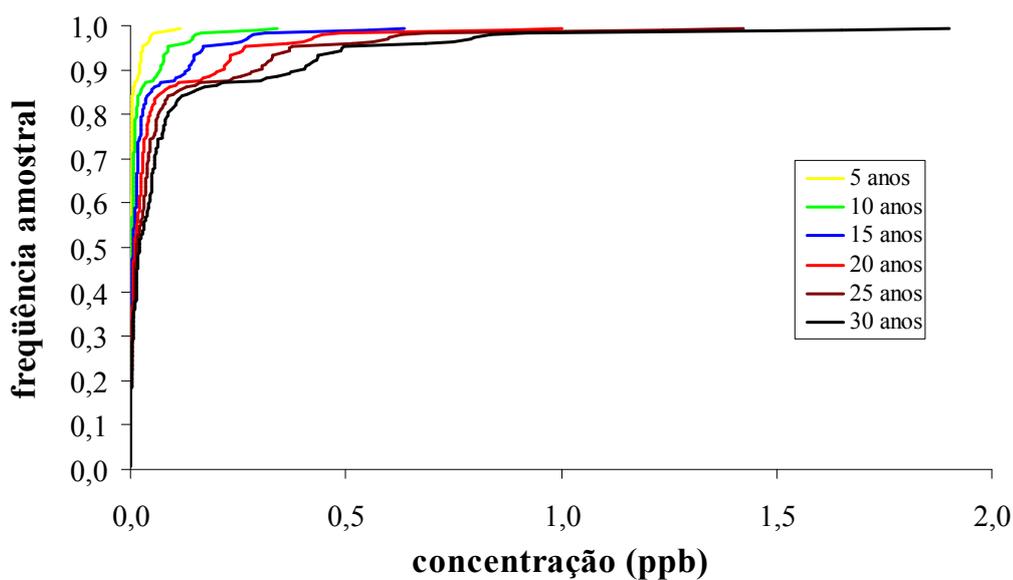


Figura 6.60 Distribuição de frequências de concentração de benzeno para o receptor 01 (5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos) na abordagem alternativa (estação chuvosa)

6.5.3 Avaliação do Risco na Abordagem Estocástica Alternativa

A avaliação do risco seguiu exatamente as mesmas considerações feitas na avaliação do risco para o cenário 01 (estação chuvosa), conforme descrito no item 6.3.3. A distribuição

de freqüências dos valores de concentração para um horizonte de 30 anos utilizada para a estimativa da exposição (dose) diária média (DDM) é apresentada na Figura 6.61.

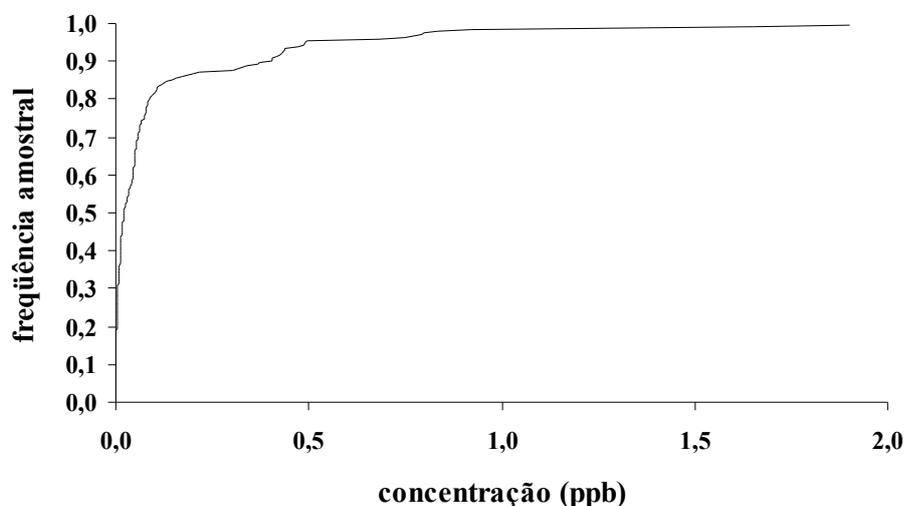


Figura 6.61 Distribuição de freqüências de concentração de benzeno para o receptor 01 para o horizonte de tempo de 30 anos na abordagem alternativa (estação chuvosa)

A Figura 6.62 apresenta as curvas inferior e superior do risco incremental de câncer (RIC) para a abordagem alternativa, expressas em termos de freqüência acumulada. Já a Figura 6.63 apresenta as curvas inferior e superior do RIC para a abordagem alternativa, expressas segundo a probabilidade de excedência.

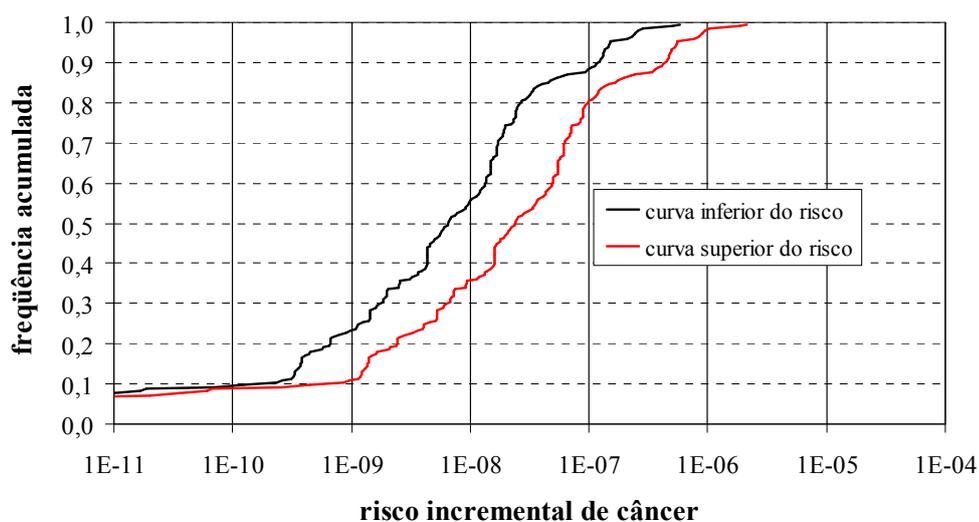


Figura 6.62 Distribuições de freqüências dos valores de risco incremental de câncer para o receptor 01 na abordagem alternativa (estação chuvosa)

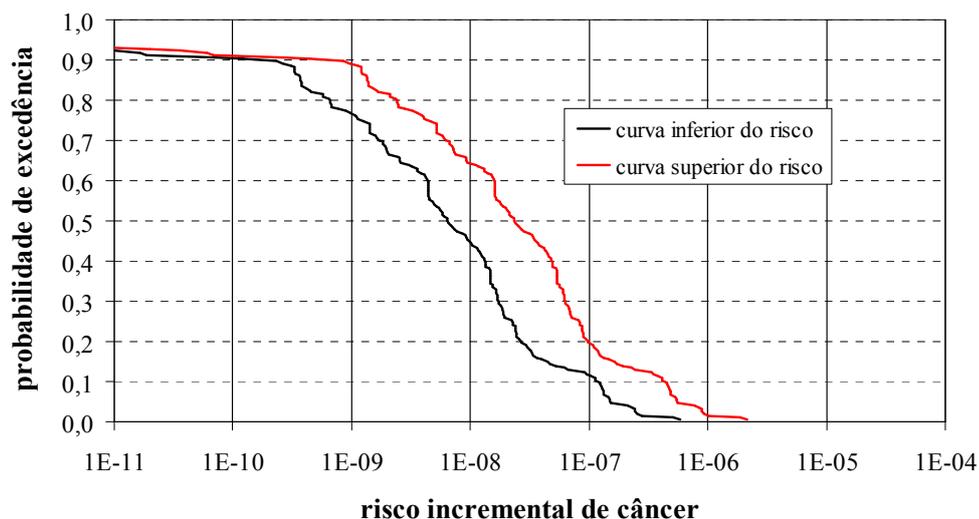


Figura 6.63 Probabilidade de excedência dos valores de risco incremental de câncer para o receptor 01 na abordagem alternativa (estação chuvosa)

A Tabela 6.23 apresenta estimativas da probabilidade do RIC ultrapassar os limites mais usuais utilizados em avaliações do risco à saúde humana. Os valores estimados de probabilidade foram obtidos por interpolação linear, a partir das curvas de probabilidade de excedência apresentadas na Figura 6.63.

Tabela 6.23 Estimativas da probabilidade do RIC exceder os limites usuais para o risco incremental de câncer para o receptor 01 (Abordagem alternativa – estação chuvosa)

Limite para o risco	Probabilidade de exceder o limite de risco	
	Curva inferior	curva superior
1×10^{-6}	< 0,5 %	1,7 %
1×10^{-5}	< 0,5 %	< 0,5 %
1×10^{-4}	< 0,5 %	< 0,5 %

Verifica-se, a partir dos valores apresentados na Tabela 6.23, que existe uma probabilidade de excedência estimada maior que 0,5 % para o receptor 01 apenas quando se consideram o limite para o risco de 1×10^{-6} (um caso adicional em uma população exposta de um milhão de pessoas) e a curva superior do risco.

A Figura 6.64 mostra superfícies do risco médio para os horizontes de tempo de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos, considerando o valor de SF ($5,23 \times 10^{-2} \text{ (mg/kg/dia)}^{-1}$) que define a chamada curva superior do risco. A escala adotada para representação refere-se ao logaritmo do risco incremental de câncer (log RIC).

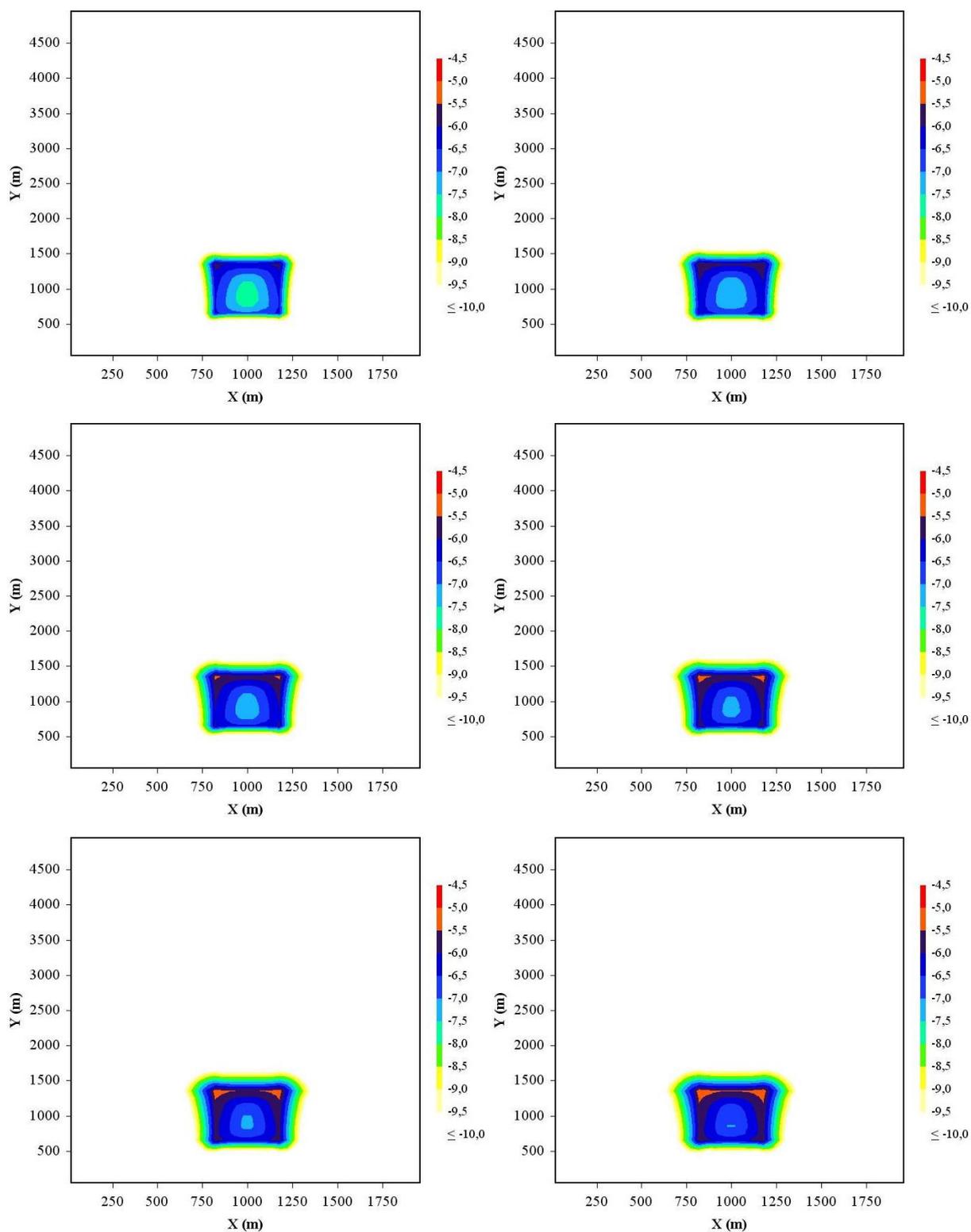


Figura 6.64 Superfícies de risco médio para os horizontes de 5, 10, 15, 20, 25 e 30 anos, obtidas na abordagem alternativa (estação chuvosa)

6.5.4 Comparação entre os Resultados do Cenário 01 e da Abordagem Alternativa

Este item apresenta uma comparação entre os resultados obtidos para o cenário 01 e os resultados obtidos para a abordagem estocástica alternativa, ambos relativos à estação chuvosa. Como já mencionado anteriormente, a diferença básica entre as duas abordagens é que a condutividade hidráulica, embora também seja tratada como uma variável aleatória na abordagem alternativa, não tem a sua variação espacial representada na referida abordagem. Em outras palavras, o meio poroso é tratado como sendo homogêneo.

Em relação aos resultados da análise de fluxo no meio saturado nas duas abordagens, verifica-se, comparando-se as Figuras 6.26 e 6.56, que a lagoa não representa uma perturbação tão significativa para os níveis do lençol freático na abordagem alternativa em relação aos resultados do cenário 01. No entanto, verifica-se, comparando-se as Figuras 6.29 e 6.57, que as velocidades médias de Darcy resultaram bem superiores para a abordagem alternativa.

Uma possível explicação para estes resultados é que a condutância “entre células” deve resultar superior para o meio homogêneo em relação ao meio heterogêneo. Isto se deve ao fato da condutância “entre células” ser calculada por média harmônica e dos campos de condutividade hidráulica utilizados para as simulações no cenário 01 (estação chuvosa) terem resultado relativamente descontínuos, como exemplificado pela Figura 6.17.

A Figura 6.65 mostra uma comparação entre as distribuições de frequências das concentrações para o receptor 01, obtidas para o cenário 01 e para a abordagem alternativa.

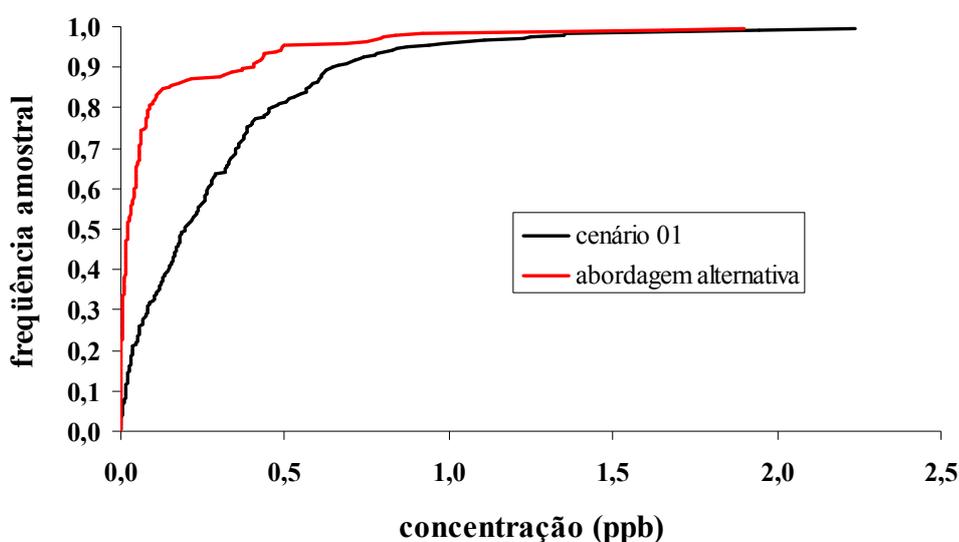


Figura 6.65 Comparação das distribuições de frequências de concentração de benzeno (receptor 01) para 30 anos no cenário 01 e na abordagem alternativa

Verifica-se, a partir da Figura 6.65, que a abordagem alternativa apresenta menores concentrações de benzeno para o receptor 01 do que os resultados obtidos no cenário 01.

Em uma primeira análise, os resultados obtidos parecem contrariar o que seria de se esperar, já que as velocidades médias de Darcy resultaram superiores para a abordagem alternativa, o que favoreceria a propagação do contaminante. Contudo, é importante lembrar que a propagação do contaminante no meio saturado, como representada na presente tese, é resultado da contribuição de três processos: advecção, dispersão hidrodinâmica e sorção.

Analisando-se a ordem de grandeza da velocidade de Darcy e os valores de Δx (40 m), Δy (100 m), Δz (8m) e α_L (270 m), utilizados nas simulações de transporte, e considerando-se ainda as definições dos números de Peclet (Pe) e Courant (Cr), pode-se afirmar que o mecanismo dominante no processo de propagação do contaminante no caso em análise é a dispersão hidrodinâmica.

Esta característica de dominância da dispersão hidrodinâmica permite explicar os resultados obtidos, uma vez que o campo de velocidades para o cenário 01, no qual se considera a variação espacial da condutividade hidráulica, tende a resultar menos uniforme do que o campo de velocidades para a abordagem alternativa, onde se considera o meio homogêneo. Deste modo, é razoável afirmar que a dispersão hidrodinâmica resulta maior para o cenário 01 do que na abordagem alternativa, justificando os resultados obtidos.

As Figuras 6.66 e 6.67 apresentam uma comparação entre as curvas inferior e superior de RIC para o cenário 01 e para a abordagem alternativa, considerando-se a probabilidade de excedência do risco incremental de câncer (RIC) para o receptor 01.

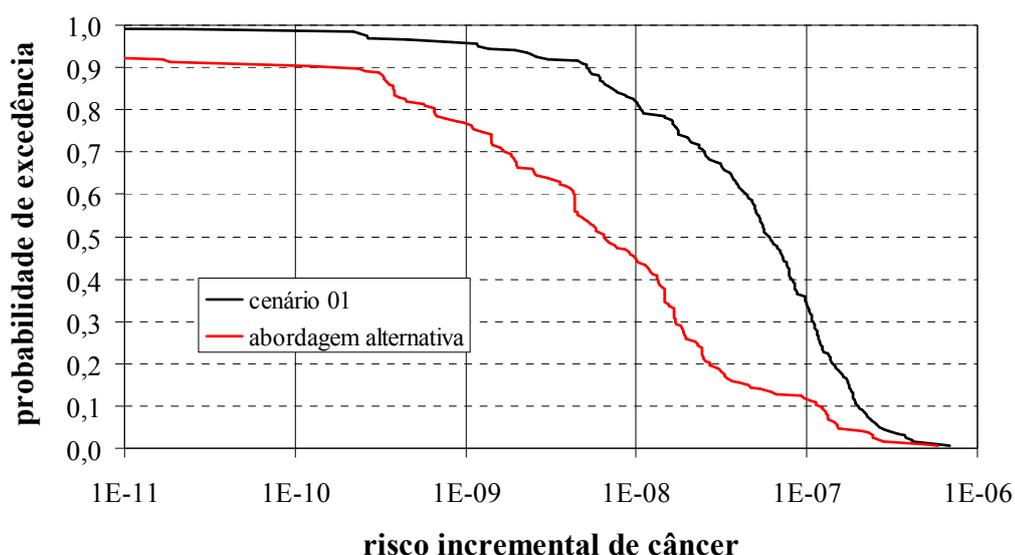


Figura 6.66 Comparação da curva inferior de RIC para o receptor 01 no cenário 01 e na abordagem alternativa

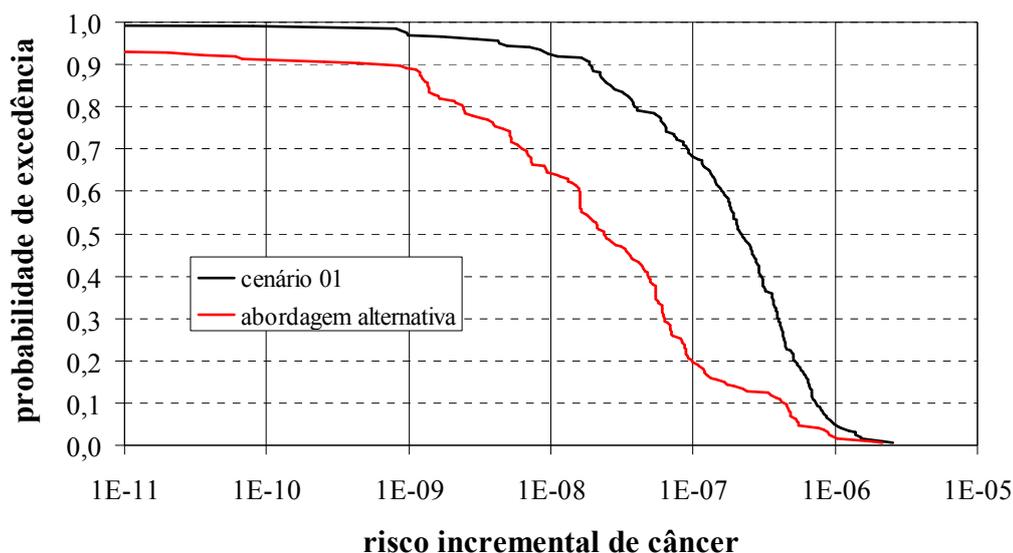


Figura 6.67 Comparação da curva superior de RIC para o receptor 01 no cenário 01 e na abordagem alternativa

Verifica-se, a partir das Figuras 6.66 e 6.67, que o cenário 01 apresenta maiores valores de risco para o receptor 01 do que a abordagem alternativa, o que era esperado em função dos valores de concentração estimados nas duas abordagens. Especificamente em relação ao estudo de caso da presente tese, a adoção da hipótese de meio homogêneo resultaria em uma subestimativa do risco quando comparada à hipótese de meio heterogêneo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ASTM. American Society for Testing and Materials. *Risk-based corrective action applied at petroleum release sites*. ASTM, 1995. (ASTM E 1739-95)
- ASTM. American Society for Testing and Materials. *Standard guide for risk-based corrective action*. ASTM, 2000. (ASTM E 2081-00)
- BEESE, F.; WIERENGA, P. J. Solute transport through soil with adsorption and root water uptake computed with a transient and a constant-flux model. *Soil Science*, v. 129, p. 245-253, 1980
- CASARINI, D. C. P. et al. *Relatório de estabelecimento de valores orientadores para solos e águas subterrâneas para o estado de São Paulo*. São Paulo : CETESB, 2001. 73 p. + apêndices. (Série Relatórios Ambientais).
- CHARBENEAU, R. J. *Groundwater hydraulics and pollutant transport*. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2000. 593 p.

- CHIANG, W.-H.; KINZELBACH, W.; RAUSCH, R. *Aquifer simulation model for Windows*. Stuttgart : Berlin : Borntraeger, 1998. 137 p.
- DEUTSCH, C. V.; JOURNAL, A. G. *Gslib: geostatistical software library and user's guide*. 2. ed. New York: Oxford University Press, 1998. 369 p. (Applied Geostatistics Series).
- IBGE. Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística. *Síntese de indicadores sociais: uma análise das condições de vida da população brasileira 2008*. Rio de Janeiro : IBGE, 2008. Estudos e Pesquisas. Informação Demográfica e Socioeconômica n. 23.
- KOLLURU, R. V. Health risk assessment: principles and practices. In: KOLLURU, R. V. *et al.*, edits. *Risk assessment and management handbook for environmental, health and safety professionals*. New York : Mc-Graw Hill, 1996. p.4.3-4.68.
- MACKAY, D. *Multimedia environmental models : the fugacity approach*. 2. ed. Boca Raton: Lewis Publishers, 2001. 261 p.
- MARSHALL, J. D.; SHIMADA, B. W.; JAFFE, P. R. Effect of temporal variability in infiltration on contaminant transport in the unsaturated zone. *Journal of Contaminant Hydrology*, v. 46, pp. 151-161, 2000.
- MENDONÇA, F; DANNI-OLIVEIRA, I. M. *Climatologia : noções básicas e climas do Brasil*. São Paulo : Oficina de Textos, 2007. 206 p.
- MONTGOMERY, J. H.; WELTON, L. M. *Groundwater chemical desk reference*. Chelsea: Lewis, 1991. 2 volumes.
- USEPA. U. S. Environmental Protection Agency. *Risk assessment guidance for superfund (RAGS)*. Washington : USEPA, 1989. Vol. 1, Human Health Evaluation Manual (part A), 1989. (EPA/540/1-89/002).
- USEPA. U. S. Environmental Protection Agency. *Exposure factors handbook*. Washington : USEPA, 1997. Vol. 1, General Factors, 1997. (EPA/600/P-95/002Fa).
- USEPA. U. S. Environmental Protection Agency. Integrated risk information system (IRIS). *Benzene (CASRN 71-43-2) : IRIS summaries : carcinogenicity assessment for lifetime exposure*. USEPA, 2000. Disponível em: <http://www.epa.gov/ncea/iris/subst/0276.htm>. Última consulta em: 05/09/2008.
- VAN GENUCHTEN, M. T. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society America Journal*, 1980. vol. 44. p 892-898, 1980.
- VAN GENUCHTEN, M. T.; LEIJ, F. J.; YATES, S. R. *The RETC code for quantifying the hydraulic functions of unsaturated soils*. Ada: USEPA, 1991. 92 p. (EPA/600/2-91/065).

- VROM. Netherlands Ministry of Housing, Spatial Planning and Environment. *Circular on target values and intervention values for soil remediation*. The Hague: VROM, 2000. 11 p. + anexos. (DBO/1999226863)
- WIERENGA, P. J. Solute distribution profiles computed with steady-state and transient water movement models. *Soil Science Society American Journal*, v. 41, p. 1050-1055, 1977.
- YATES, S. R.; YATES, M. V. Geostatistics for waste management : user's manual for the GEOPACK (version 1.0). Ada: USEPA, 1990. 72 p. (EPA/600/8-90/004).

7. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O presente capítulo tem por objetivo apresentar as principais conclusões e destacar algumas recomendações para a continuidade e aprofundamento dos estudos relacionados ao desenvolvimento da presente tese.

É importante iniciar este capítulo mencionando novamente o objetivo principal do trabalho aqui apresentado, que foi o de investigar o uso e a adequação de uma abordagem estocástica para o processo de avaliação de risco à saúde humana devido à ingestão de água subterrânea contaminada. A referida abordagem estocástica se caracterizou pela representação da variabilidade espacial e das incertezas associadas à condutividade hidráulica do meio poroso. A metodologia proposta é ilustrada através de um estudo de caso (problema).

Do ponto de vista ambiental, o problema se caracteriza pela existência de uma lagoa, utilizada no passado como destinação final de efluentes líquidos provenientes de uma indústria, resultando na sedimentação de finos e resíduos do processo produtivo no fundo da lagoa e, conseqüentemente, gerando uma contaminação residual que atinge o aquífero através da conexão hidráulica entre o aquífero e a lagoa, bem como, através da recarga que atravessa regiões de solo contaminado e acaba atingindo o aquífero.

Em razão do problema analisado e do objetivo proposto, a metodologia adotada exigiu a conjugação de diferentes assuntos, notadamente: o fluxo e transporte no meio poroso não saturado; o fluxo e transporte no meio poroso saturado; a representação da variabilidade espacial da condutividade hidráulica por meio da geração de campos aleatórios; e a avaliação do risco à saúde humana.

Esta característica de diversidade de assuntos confere à presente tese, na opinião do autor, uma dimensão horizontal (abrangência), maior do que a dimensão vertical (profundidade), o que pode ser, para alguns leitores, um ponto passível de crítica. Esta característica também se reflete nas recomendações do trabalho, onde são relacionadas indistintamente recomendações específicas, considerando-se cada assunto abordado, e recomendações mais genéricas, que abrangem o trabalho como um todo.

Como conseqüência da estrutura adotada para o texto, as conclusões referentes aos testes realizados para avaliar o desempenho dos modelos desenvolvidos para o fluxo e transporte unidimensionais no meio poroso não saturado, modelos FLUX e TRANSP, já foram apresentadas no capítulo 03 e não são aqui reproduzidas. O mesmo vale para o capítulo 04, onde se encontram as conclusões sobre os testes realizados para avaliar o desempenho dos modelos desenvolvidos para o fluxo e transporte tridimensionais no meio poroso saturado, modelos FLUXSAT e TRANSPSAT. Portanto, as conclusões apresentadas neste item são

relativas exclusivamente ao capítulo 06, que trata do estudo de caso que constitui o roteiro sobre o qual foi desenvolvida a presente tese.

As primeiras conclusões são relativas à análise da distribuição espacial da condutividade hidráulica e à geração dos campos aleatórios de condutividade que foram utilizados nas simulações de fluxo e transporte do contaminante benzeno para a área de estudo.

O número de informações de condutividade hidráulica, obtidas em campo, era relativamente pequeno para a representação da área de estudo, principalmente no que se refere à seqüência litológica da referida área.

Foram utilizados apenas 16 valores de condutividade hidráulica, obtidos a partir de ensaios em campo, para a análise e representação da variabilidade espacial da mesma em uma área de 2 km x 5 km. Além disso, os ensaios avaliaram a condutividade hidráulica para uma mesma profundidade, dificultando assim a análise da sua variação na direção vertical, restringindo a geração dos campos aleatórios a campos bidimensionais, segundo o plano horizontal xy .

A análise qualitativa dos dados de condutividade hidráulica não sugere tendência de diminuição ou aumento da condutividade segundo as direções x (Oeste-Leste) e y (Sul-Norte). Uma análise mais criteriosa quanto à anisotropia não foi possível, novamente em função do pequeno número de informações de condutividade. Por esta razão, os campos aleatórios foram gerados sob a hipótese de isotropia em relação às direções x e y .

A análise dos dados observados em campo permitiu verificar que a condição de normalidade é melhor aplicada ao logaritmo da condutividade hidráulica. Portanto, utilizou-se uma distribuição log-normal para a representação dos dados.

Em relação à análise da estrutura espacial da condutividade hidráulica, a comparação entre o variograma amostral e os modelos teóricos ajustados possibilitou identificar o modelo gaussiano e modelo esférico como os modelos de melhor ajuste, e que foram utilizados para a geração dos campos de condutividade hidráulica.

A avaliação dos campos aleatórios de z (variável normal padrão) gerados mostrou que cada campo, quando analisado separadamente, não reproduz a média e a variância de uma distribuição normal padrão. Contudo, observa-se que esses valores são reproduzidos em termos médios, quando os campos são analisados em conjunto.

Verificou-se ainda que o desempenho do modelo gaussiano foi melhor do que o do modelo esférico, já que se observou uma menor dispersão para os valores de média e variância no modelo gaussiano. Além disso, o modelo gaussiano convergiu mais rapidamente

para os valores de média e variância de uma distribuição normal padrão do que o modelo esférico.

Em relação à análise da estrutura espacial dos campos aleatórios gerados, destaca-se que o método de simulação gaussiana seqüencial (SGS) não reproduz exatamente o variograma teórico em cada uma das simulações. O importante é verificar se os variogramas associados a cada simulação (campo aleatório gerado) são semelhantes, do ponto de vista qualitativo, ao variograma teórico utilizado no processo de geração dos campos, característica que foi observada na análise de alguns dos variogramas obtidos a partir dos campos aleatórios gerados pelo método SGS. As diferenças encontradas, do ponto de vista de comportamento dos variogramas dos campos aleatórios gerados, foram principalmente em função da discretização espacial adotada para a grade no processo de geração dos campos.

Destaca-se que, em termos médios, os valores de média e variância dos campos aleatórios de y , que corresponde ao logaritmo da condutividade, resultaram próximos dos valores de média e variância amostrais. A discretização espacial, o processo de transformação direta e inversa entre as variáveis z e y e pequenas modificações introduzidas nos modelos teóricos dos variogramas representam alguns dos fatores que colaboraram para a diferença entre os valores simulados e amostrais.

Resumindo, a análise dos campos aleatórios de condutividade hidráulica gerados permitiu identificar uma relativa superioridade do modelo gaussiano em relação ao modelo esférico. Contudo, em razão do pequeno número de informações quanto à condutividade, optou-se por adotar o conjunto de campos aleatórios gerados pelo modelo esférico nas simulações de fluxo e transporte. Considerou-se esta opção como uma hipótese conservadora em termos de avaliação de risco, uma vez que teoricamente deve permitir a estimativa de uma distribuição de freqüência de valores de risco com uma maior dispersão (variância). A validade da referida hipótese não foi testada.

A avaliação de risco à saúde humana foi realizada considerando-se dois cenários principais: cenário 01 (estação chuvosa) e cenário 02 (estação seca). No cenário 01, a lagoa existente na área de estudo é representada por uma área de 320.000 m² no modelo conceitual. No cenário 02, em virtude da retração da lagoa, a área da mesma passa a ser representada por 208.000 m². Portanto, existe uma área de solo contaminado exposto no cenário 02, equivalente a 112.000 m².

A mais importante diferença entre os cenários refere-se justamente à área correspondente à retração da lagoa (solo contaminado exposto), onde se verifica uma mudança no mecanismo de entrada do contaminante no aquífero. Para a referida área, no cenário 01 (estação chuvosa), a entrada do contaminante no aquífero se dá pela conexão

hidráulica entre a lagoa e o aquífero. Já para o cenário 02 (estação seca), a entrada do contaminante se dá pelo processo de recarga natural do aquífero.

Em função do mecanismo de entrada do contaminante no aquífero, para o cenário 01, houve a necessidade de simulação de fluxo e transporte apenas no meio saturado. Já para o cenário 02, houve a necessidade também de simular o fluxo e o transporte no meio não saturado. Para cada um dos cenários, foram feitas 200 simulações de fluxo e de transporte. A concentração da contaminação residual representada pela camada de fundo da lagoa foi considerada como constante no tempo.

Especificamente em relação ao cenário 02 (estação seca) e para a área de solo contaminado exposto (112.000 m^2), verificou-se ainda que existem regiões com comportamento distinto em termos de fluxo e transporte. Nas regiões onde a base da camada de solo contaminado exposto é inferior ao nível do lençol freático, também não existe a necessidade de simulação do fluxo e transporte no meio não saturado. Esta necessidade é restrita às regiões onde a base da referida camada é superior ao nível do lençol freático.

De modo geral, verificou-se, para os dois cenários, uma relativa simetria dos níveis médios do lençol freático na direção Sul-Norte. Um fator importante que contribuiu para essa relativa simetria são as condições de contorno impostas ao modelo de fluxo. Contudo, isto ocorre apenas em termos médios, já o mesmo não acontece quando as simulações são analisadas individualmente.

Outro aspecto comum aos dois cenários refere-se ao desvio-padrão dos níveis do lençol freático, onde se verificou que os menores desvios-padrão se concentram junto à área da lagoa e à fronteira norte da área de estudo e ocorrem principalmente devido às condições de contorno impostas ao modelo de fluxo. Já os maiores valores de desvio-padrão ocorrem nas regiões que sofrem menor influência das condições de contorno impostas ao modelo de fluxo.

Observou-se, também para os dois cenários, uma aceleração do fluxo, principalmente no sentido norte. Isso pode ser explicado pela simulação em regime permanente onde a diminuição do nível do lençol freático (espessura do fluxo) é compensada pelo aumento de velocidade do fluxo. No entanto, verificou-se uma região com velocidades de fluxo mais altas, junto ao contorno norte da lagoa, como resultado da influência da lagoa sobre os níveis locais. Destaca-se ainda, pelos resultados obtidos a partir do modelo FLUXSAT, que o fluxo da lagoa para o aquífero ao longo se concentrou principalmente ao longo das bordas da lagoa.

Uma constatação importante é que a forma da pluma de contaminação é bastante influenciada pelos resultados do modelo de fluxo que definem as áreas de contribuição da lagoa para o aquífero. O fato da transferência de água da lagoa para o aquífero se concentrar

ao longo do contorno da mesma, principalmente na sua parte norte, refletiu na forma da pluma, obtida a partir das simulações de transporte.

Uma avaliação preliminar permitiu restringir a avaliação de risco à saúde humana somente ao contaminante benzeno, uma vez que as concentrações relativas aos demais contaminantes avaliados resultaram muito baixas para representarem um risco significativo. Além disso, os resultados mostraram concentrações significativas para fins de avaliação de risco somente para o receptor mais próximo à lagoa, situado 50 m ao norte da lagoa, sobre seu eixo de simetria longitudinal (direção Sul - Norte), denominado simplesmente de receptor 01.

A avaliação de risco à saúde humana foi realizada para um padrão de exposição de uma pessoa adulta, residente no local e cuja via de exposição é a ingestão oral de água contaminada. Em razão do objetivo da presente tese, os resultados obtidos não se referem a um valor único de risco, mas sim a uma distribuição de frequências de risco, obtida para cada cenário, e construída a partir das 200 simulações de fluxo e transporte. Na realidade, para cada cenário, foram estabelecidas duas distribuições de frequência (curvas inferior e superior) de risco, em função da variação adotada para o fator de declividade (SF) utilizado para o cálculo do risco incremental de câncer (RIC).

Os resultados da avaliação de risco mostraram uma probabilidade de excedência estimada para os dois cenários maior que 0,5 % para o receptor 01 apenas quando se consideram o limite para o risco de 1×10^{-6} (um caso adicional de câncer em uma população exposta de um milhão de pessoas) e a curva superior de risco. O valor de referência 0,5 % é resultante do número de simulações realizadas (200). Para o cenário 01, a probabilidade de excedência estimada foi igual a 4,9 %, e para o cenário 02, foi igual a 17,4 %.

Estes resultados constituem o ponto central do desenvolvimento da presente tese. Há que se destacar que eles conferem uma dimensão a mais ao risco estimado pela avaliação de risco. As avaliações usuais expressam o risco apenas em termos das conseqüências, traduzidas pelo número de casos adicionais de câncer por população exposta.

No presente estudo, uma estimativa de chance de ocorrência é associada à conseqüência da exposição. Esta informação adicional permite que o risco seja expresso de uma forma mais abrangente, sendo definido pela sua conseqüência e pela sua chance de ocorrência. Essa dimensão adicional pode ser muito valiosa para o tomador de decisão, em razão da gravidade das conseqüências e do custo elevado dos processos de remediação.

Os resultados da avaliação de risco mostraram também que o cenário 02 representa uma condição mais crítica em termos do risco para o receptor 01 do que o cenário 01. A causa direta para o resultado obtido na comparação do RIC calculado para os cenários 01 e 02 são as

distribuições de frequência de concentrações estimadas para o receptor 01 nos referidos cenários e que foram utilizadas para o cálculo do RIC.

A investigação das possíveis causas para este resultado mostrou que a contribuição da lagoa no cenário 01 é menor do que a contribuição da lagoa acrescida da recarga natural na área de solo contaminado exposto no cenário 02. Além disso, o cenário 02 apresentou maiores velocidades médias de Darcy na vizinhança do receptor 01, em razão principalmente da existência de maiores gradientes hidráulicos junto ao contorno norte da lagoa, o que parece sugerir que a lagoa representa uma perturbação mais significativa para o escoamento na região próxima ao receptor 01 no cenário 02 (estação seca) do que no cenário 01 (estação chuvosa), considerando-se as condições de contorno impostas ao modelo de fluxo.

Outra causa que também colabora para os resultados obtidos é o modo como a retração da lagoa foi considerada. A diminuição da área da lagoa do cenário 01 para o cenário 02 foi representada principalmente no sentido Leste-Oeste e não no sentido Norte-Sul. Deste modo, a distância do receptor 01 até a fronteira norte da lagoa foi a mesma para os dois cenários.

Uma última causa destacada é a própria forma da pluma de contaminação. Para o cenário 01 (estação chuvosa), as maiores concentrações tendem a acontecer junto aos vértices do retângulo que define a área da lagoa. Já para o cenário 02 (estação seca), as maiores concentrações ocorrem ao longo do eixo de simetria da lagoa na direção Sul-Norte, que coincide justamente com a localização do receptor 01.

Em uma última análise, procurou-se comparar duas abordagens estocásticas distintas em termos de representação da variabilidade espacial da condutividade hidráulica, considerando-se a estação chuvosa.

A primeira abordagem considera o meio heterogêneo e procura representar a variabilidade espacial da condutividade hidráulica. Esta primeira abordagem já foi aqui mencionada várias vezes, sendo chamada de cenário 01. A segunda abordagem trata a condutividade hidráulica também como uma variável aleatória, mas assume o meio homogêneo. Esta segunda abordagem é encontrada em alguns modelos computacionais disponíveis comercialmente. Considerando-se o estudo de caso da presente tese, a adoção da hipótese de meio homogêneo teria como consequência uma subestimativa do risco quando comparada à hipótese de meio heterogêneo.

Em comparação a outros estudos já realizados relativos à questão da integração do conceito de análise de incerteza na propagação do contaminante com a avaliação do risco à saúde humana, apresentados no item 2.4.4, este estudo apresenta algumas importantes diferenças destacadas a seguir.

A primeira diferença a ser destacada é representada pelo próprio estudo de caso. Uma análise dos estudos anteriores mostra que nenhum deles contempla um problema similar ao abordado na presente tese e que tem como principal característica a contaminação do aquífero pela sua conexão hidráulica com uma lagoa e pela recarga natural.

Destaca-se também que, nos estudos anteriores, a análise do problema de fluxo e transporte de contaminantes é restrita à condição de meio poroso saturado, ou seja, não se aborda a questão do fluxo e transporte no meio não saturado, bem como, a inter-relação entre estes dois meios. O estudo de caso aqui analisado requer que o fluxo e o transporte no meio não saturado seja avaliado para o cenário 02 (estação seca), no qual existe a retração da lagoa.

Outra diferença importante é a de que, embora os campos aleatórios de condutividade hidráulica nos estudos anteriores sejam gerados, em sua maioria, sob a forma de campos estacionários, bidimensionais e isotrópicos como na presente tese, as simulações são não condicionadas, ou seja, não necessariamente reproduzem os valores observados em campo.

Adicionalmente, em nenhum dos trabalhos anteriores, existe uma comparação direta entre duas abordagens estocásticas distintas quanto à variabilidade espacial da condutividade hidráulica, como apresentada no item 6.5.4, procurando identificar o efeito da adoção da hipótese de homogeneidade do meio poroso sobre os valores estimados de risco incremental de câncer (RIC).

Essas diferenças citadas entre o presente estudo e estudos anteriores não permitem uma comparação direta de resultados, seja ela do ponto de vista qualitativo ou quantitativo.

Finalizando esta parte relativa às conclusões do trabalho, tendo em mente o objetivo principal da presente tese, conclui-se que a abordagem estocástica para o processo de avaliação de risco à saúde humana devido à ingestão de água subterrânea contaminada aqui sugerida foi adequada para permitir a estimativa de valores de risco e das probabilidades de ocorrência associadas a estes valores. Destaca-se novamente que a referida abordagem se caracterizou pela representação da variabilidade espacial e das incertezas associadas à condutividade hidráulica do meio poroso.

A seguir são apresentadas algumas recomendações e sugestões para a continuidade e aprofundamento dos estudos relacionados ao desenvolvimento da presente tese. Conforme já destacado neste item, são listadas indistintamente recomendações específicas a cada assunto abordado, e recomendações mais genéricas, que abrangem o trabalho como um todo.

Uma das hipóteses simplificadoras da metodologia adotada foi a representação do fluxo e do transporte no meio poroso não saturado como unidimensional. Em uma primeira análise, esta hipótese parece ser conservadora, já que não considera a possível dispersão lateral do contaminante, no entanto uma linha de investigação poderia ser o efeito da

representação espacial, principalmente do transporte, nas concentrações de entrada no meio poroso saturado.

Em relação ao modelo computacional FLUXSAT, que trata do fluxo tridimensional permanente em meio poroso saturado, recomenda-se o aprimoramento do método de solução do sistema de equações lineares que calcula as cargas hidráulicas relativas às células do modelo conceitual do aquífero. Utilizou-se, na presente tese, o método SIP (*Strongly Implicit Procedure*). O referido método trabalha com parâmetros de relaxação/aceleração de convergência que nem sempre garantem a convergência da solução numérica do sistema de equações. A implantação de métodos mais modernos, como, por exemplo, o método PCG (*preconditioned conjugate gradient*) poderia melhorar o desempenho do modelo FLUXSAT.

Em relação ao modelo computacional TRANSPSAT, que trata do transporte tridimensional em meio poroso saturado sob regime de fluxo permanente, recomenda-se o aprimoramento do método numérico de solução. Utilizou-se, na presente tese, o método das características modificado (MMOC) por sua relativa facilidade de implementação computacional. Contudo, o referido método apresenta, como característica, a dificuldade de representação de frentes abruptas de contaminação, onde o processo de advecção é dominante. Uma sugestão seria a implantação do método das características híbrido (HMOC).

Outra linha de raciocínio na melhoria dos recursos computacionais seria a adaptação de modelos computacionais de código aberto e acesso livre, como, por exemplo, os modelos MODFLOW e MT3D, para a abordagem estocástica sugerida na presente tese.

A argumentação a seguir trata da adoção da hipótese simplificadora de fluxo permanente e pode ser entendida tanto do ponto de vista específico, em razão dos problemas de fluxo e transporte nos meios saturado e não saturado, como do ponto de vista genérico, em termos do estudo de caso analisado.

A hipótese simplificadora de fluxo permanente foi adotada em razão dos horizontes de tempo, normalmente utilizados em avaliações de risco, serem relativamente longos, da ordem de algumas décadas. Existem duas questões básicas relacionadas a esta característica:

- Para um horizonte de tempo da ordem de décadas, existe a necessidade de representação de frentes de umedecimento/secamento que caracterizam os processos de fluxo no meio poroso não saturado e que ocorrem em uma escala de tempo bem menor?
- Para um horizonte de tempo da ordem de décadas, existe a necessidade de representação da variação intra-ano do fluxo no meio poroso saturado?

A primeira questão levantada é respondida pelo trabalho de alguns pesquisadores, conforme destacado no texto, que sugerem que a frente de contaminação média, originada a partir de uma longa seqüência de chuvas gerada aleatoriamente, tende à frente de contaminação obtida a partir da consideração de uma taxa constante de infiltração. Deste modo, o uso de taxas de infiltração constantes no tempo não resulta em erros significativos na estimativa do transporte, proporcionando economia em esforço computacional e coleta de dados.

Uma resposta para a segunda questão levantada pode ser induzida pelos próprios resultados das avaliações de risco, obtidos no desenvolvimento deste estudo. A comparação entre os resultados obtidos para os cenários 01 (estação chuvosa) e 02 (estação seca) parecem sugerir a importância da representação da variação intra-ano do fluxo no meio poroso saturado.

No contexto do estudo de caso abordado na presente tese, a representação desta variação intra-ano não é algo trivial de ser implantado. A principal dificuldade seria a representação do mecanismo de retração da lagoa ao longo do ano. Além disso, como os modelos computacionais desenvolvidos para o estudo de caso não são realmente integrados, uma vez que a “integração” é feita através de geração/leitura de arquivos de dados, seria muito difícil o gerenciamento da execução dos modelos, principalmente devido à abordagem estocástica. O desenvolvimento de um ambiente integrado seria fundamental nesta situação. Uma recomendação seria o desenvolvimento deste ambiente integrado, visando inicialmente a solução do problema, segundo uma abordagem determinística.

Em relação à questão da análise da variabilidade espacial da condutividade hidráulica e da geração dos campos aleatórios de condutividade, é imperativo destacar, como primeira recomendação, o uso de um maior número de informações de condutividade hidráulica para a análise de questões, como, por exemplo, a anisotropia. Um conjunto maior de informações obtidas em campo pode, inclusive, possibilitar a utilização de técnicas mais sofisticadas do que o método de simulação gaussiana seqüencial (SGS) para a geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica, permitindo até a representação de descontinuidade de propriedades entre as camadas do solo.

Um aspecto não explorado na presente tese, mas que merece investigação, seria a análise de sensibilidade dos campos aleatórios gerados em relação a características dos modelos teóricos de variograma utilizados na geração dos referidos campos, como, por exemplo, efeito-pepita, patamar e amplitude. Outra análise de sensibilidade importante se refere ao próprio tipo de modelo teórico de variograma adotado (Gaussiano, Esférico, Exponencial e Potência) para a geração dos campos.

Uma questão pertinente em relação às análises de sensibilidade sugeridas seria: qual critério usar para caracterizar a variabilidade dos campos aleatórios gerados em função da variação das características e do tipo de modelo teórico de variograma? Uma sugestão poderia ser criar conjuntos de critérios intrínsecos e extrínsecos, como comentados a seguir.

Os critérios intrínsecos seriam aqueles que procurariam caracterizar a variabilidade dos campos aleatórios gerados pela análise de suas próprias características. Este tipo de análise foi a adotada na presente tese, onde se procurou comparar os campos gerados pelos modelos gaussiano e esférico pela avaliação de características dos referidos campos.

Os critérios extrínsecos se caracterizariam por avaliar a variabilidade dos campos aleatórios gerados pela análise dos resultados de sua aplicação. Por exemplo, comparar os resultados do modelo FLUXSAT obtidos com o uso do conjunto de campos aleatórios gerados pelo modelo gaussiano e pelo modelo esférico.

Finalmente, para não ser exaustivo, uma última sugestão de linha de investigação se refere à questão de escala. Existem na literatura, trabalhos que sugerem procedimentos para transformar os dados obtidos na escala de campo para a escala da discretização espacial adotada para a grade que define o modelo conceitual da área de estudo. Este tipo de questão não foi abordada no desenvolvimento do presente estudo.