

Referências Técnicas

SCBR

Solução Corretiva Baseada no Risco

Versão 3.25

Autores

Eng. Dr. Marcio R. Schneider
UFSC/REMA

Eng. Dr. André Moreira de Souza Filho
PETROBRAS/CENPES

Organizadora

Eng.^a Dra. Ana Claudia Canalli Bortolassi
UFSC/REMA



Referências Técnicas

SCBR

Solução Corretiva Baseada no Risco

Versão 3.25

Autores

Eng. Dr. Marcio R. Schneider
UFSC/REMA

Eng. Dr. André Moreira de Souza Filho
PETROBRAS/CENPES

Organizadora

Eng.^a Dra. Ana Claudia Canalli Bortolassi
UFSC/REMA



Editora chefe	
Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira	
Editora executiva	
Natalia Oliveira	
Assistente editorial	
Flávia Roberta Barão	
Bibliotecária	
Janaina Ramos	
Projeto gráfico	2024 by Atena Editora
Ellen Andressa Kubisty	Copyright © Atena Editora
Luiza Alves Batista	Copyright do texto © 2024 O autor
Nataly Evilin Gayde	Copyright da edição © 2024 Atena
Thamires Camili Gayde	Editora
Imagens da capa	Direitos para esta edição cedidos à
iStock	Atena Editora pelo autor.
Edição de arte	<i>Open access publication by Atena</i>
Luiza Alves Batista	Editora



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição Creative Commons. Atribuição-Não-Comercial-NãoDerivativos 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0).

O conteúdo da obra e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva do autor, inclusive não representam necessariamente a posição oficial da Atena Editora. Permitido o *download* da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos ao autor, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

Os manuscritos nacionais foram previamente submetidos à avaliação cega por pares, realizada pelos membros do Conselho Editorial desta editora, enquanto os manuscritos internacionais foram avaliados por pares externos. Ambos foram aprovados para publicação com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.

A Atena Editora é comprometida em garantir a integridade editorial em todas as etapas do processo de publicação, evitando plágio, dados ou resultados fraudulentos e impedindo que interesses financeiros comprometam os padrões éticos da publicação. Situações suspeitas de má conduta científica serão investigadas sob o mais alto padrão de rigor acadêmico e ético.

Conselho Editorial

Ciências Exatas e da Terra e Engenharias

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto

Profª Drª Alana Maria Cerqueira de Oliveira – Instituto Federal do Acre

Profª Drª Ana Grasielle Dionísio Corrêa – Universidade Presbiteriana Mackenzie

Profª Drª Ana Paula Florêncio Aires – Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro

Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás

- Prof^a Dr^a Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná
Prof. Dr. Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua – Colégio Militar Dr. José Aluisio da Silva Luz / Colégio Santa Cruz de Araguaina/TO
Prof^a Dr^a Cristina Aledi Felsemburgh – Universidade Federal do Oeste do Pará
Prof. Dr. Diogo Peixoto Cordova – Universidade Federal do Pampa, Campus Caçapava do Sul
Prof. Dr. Douglas Gonçalves da Silva – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Prof^a Dr^a Érica de Melo Azevedo – Instituto Federal do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará
Prof. Dr. Fabrício Moraes de Almeida – Universidade Federal de Rondônia
Prof^a Dr^a Glécilla Colombelli de Souza Nunes – Universidade Estadual de Maringá
Prof. Dr. Hauster Maximiler Campos de Paula – Universidade Federal de Viçosa
Prof^a Dr^a Iara Margolis Ribeiro – Universidade Federal de Pernambuco
Prof^a Dr^a Jéssica Barbosa da Silva do Nascimento – Universidade Estadual de Santa Cruz
Prof^a Dr^a Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho
Prof. Dr. Juliano Bitencourt Campos – Universidade do Extremo Sul Catarinense
Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas – Universidade Federal de Campina Grande
Prof. Dr. Leonardo França da Silva – Universidade Federal de Viçosa
Prof^a Dr^a Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Marcelo Marques – Universidade Estadual de Maringá
Prof. Dr. Marco Aurélio Kistemann Junior – Universidade Federal de Juiz de Fora
Prof. Dr. Marcos Vinicius Winckler Caldeira – Universidade Federal do Espírito Santo
Prof^a Dr^a Maria Iaponeide Fernandes Macêdo – Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Prof^a Dr^a Maria José de Holanda Leite – Universidade Federal de Alagoas
Prof^a Dr^a Mariana Natale Fiorelli Fabiche – Universidade Estadual de Maringá
Prof. Dr. Miguel Adriano Inácio – Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais
Prof. Dr. Milson dos Santos Barbosa – Universidade Tiradentes
Prof^a Dr^a Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte
Prof^a Dr^a Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba
Prof. Dr. Nilzo Ivo Ladwig – Universidade do Extremo Sul Catarinense
Prof^a Dr^a Priscila Natasha Kinas – Universidade do Estado de Santa Catarina
Prof^a Dr^a Priscila Tessmer Scaglioni – Universidade Federal de Pelotas
Prof. Dr. Rafael Pacheco dos Santos – Universidade do Estado de Santa Catarina
Prof. Dr. Ramiro Picoli Nippes – Universidade Estadual de Maringá
Prof^a Dr^a Regina Célia da Silva Barros Allil – Universidade Federal do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Sidney Gonçalo de Lima – Universidade Federal do Piauí
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista

Referências técnicas
SCBR - Solução corretiva baseada no risco: versão 3.25

Diagramação: Camila Alves de Cremo
Correção: Jeniffer dos Santos
Indexação: Amanda Kelly da Costa Veiga
Revisão: Os autores
Autores: Marcio Roberto Schneider
André Moreira de Souza Filho
Organizadora: Ana Claudia Canalli Bortolassi

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)	
S358	Schneider, Marcio Roberto Referências técnicas SCBR - Solução corretiva baseada no risco: versão 3.25 / Marcio Roberto Schneider, André Moreira de Souza Filho; Organizadora Ana Claudia Canalli Bortolassi. – Ponta Grossa - PR: Atena, 2024.
	Formato: PDF Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader Modo de acesso: World Wide Web Inclui bibliografia ISBN 978-65-258-2933-3 DOI https://doi.org/10.22533/at.ed.333242012
	1. Engenharia de Software. I. Schneider, Marcio Roberto. II. Souza Filho, André Moreira de. III. Bortolassi, Ana Claudia Canalli (Organizadora). IV. Título.
	CDD 005.2
Elaborado por Bibliotecária Janaina Ramos – CRB-8/9166	

Atena Editora

Ponta Grossa – Paraná – Brasil
Telefone: +55 (42) 3323-5493
www.atenaeditora.com.br
 contato@atenaeditora.com.br

DECLARAÇÃO DO AUTOR

Para fins desta declaração, o termo 'autor' será utilizado de forma neutra, sem distinção de gênero ou número, salvo indicação em contrário. Da mesma forma, o termo 'obra' refere-se a qualquer versão ou formato da criação literária, incluindo, mas não se limitando a artigos, e-books, conteúdos on-line, acesso aberto, impressos e/ou comercializados, independentemente do número de títulos ou volumes. O autor desta obra: 1. Atesta não possuir qualquer interesse comercial que constitua um conflito de interesses em relação à obra publicada; 2. Declara que participou ativamente da elaboração da obra, preferencialmente na: a) Concepção do estudo, e/ou aquisição de dados, e/ou análise e interpretação de dados; b) Elaboração do artigo ou revisão com vistas a tornar o material intelectualmente relevante; c) Aprovação final da obra para submissão; 3. Certifica que a obra publicada está completamente isenta de dados e/ou resultados fraudulentos; 4. Confirma a citação e a referência correta de todos os dados e de interpretações de dados de outras pesquisas; 5. Reconhece ter informado todas as fontes de financiamento recebidas para a consecução da pesquisa; 6. Autoriza a edição da obra, que incluem os registros de ficha catalográfica, ISBN, DOI e demais indexadores, projeto visual e criação de capa, diagramação de miolo, assim como lançamento e divulgação da mesma conforme critérios da Atena Editora.

DECLARAÇÃO DA EDITORA

A Atena Editora declara, para os devidos fins de direito, que: 1. A presente publicação constitui apenas transferência temporária dos direitos autorais, direito sobre a publicação, inclusive não constitui responsabilidade solidária na criação da obra publicada, nos termos previstos na Lei sobre direitos autorais (Lei 9610/98), no art. 184 do Código Penal e no art. 927 do Código Civil; 2. Autoriza e incentiva os autores a assinarem contratos com repositórios institucionais, com fins exclusivos de divulgação da obra, desde que com o devido reconhecimento de autoria e edição e sem qualquer finalidade comercial; 3. A editora pode disponibilizar a obra em seu site ou aplicativo, e o autor também pode fazê-lo por seus próprios meios. Este direito se aplica apenas nos casos em que a obra não estiver sendo comercializada por meio de livrarias, distribuidores ou plataformas parceiras. Quando a obra for comercializada, o repasse dos direitos autorais ao autor será de 30% do valor da capa de cada exemplar vendido; 4. Todos os membros do conselho editorial são doutores e vinculados a instituições de ensino superior públicas, conforme recomendação da CAPES para obtenção do Qualis livro; 5. Em conformidade com a Lei Geral de Proteção de Dados (LGPD), a editora não cede, comercializa ou autoriza a utilização dos nomes e e-mails dos autores, bem como quaisquer outros dados dos mesmos, para qualquer finalidade que não o escopo da divulgação desta obra.

SOLUÇÕES CORRETIVAS BASEDAS NO RISCO (SCBR)

O desenvolvimento do software SCBR é resultado da parceria entre a PETROBRAS/CENPES e a Universidade Federal de Santa Catarina, por meio do Núcleo Ressacada de Pesquisas em Meio Ambiente (REMA). Esse projeto contou com apoio financeiro da ANP – Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, associado ao investimento de recursos oriundos das Cláusulas de PD&I.

O desenvolvimento do *software* contou com uma equipe de pesquisadores das áreas de engenharia ambiental, geologia, mecânica dos fluidos computacional, computação e engenharia de controle e automação e com o conhecimento adquirido em mais de 25 anos na realização de pesquisas sobre a contaminação de solos, de águas subterrâneas e o gerenciamento de áreas contaminadas.

O modelo SCBR é registrado no Instituto Nacional de Propriedade Industrial do Ministério do Desenvolvimento, Indústria e Comércio Exterior sob o nº 00065320 em 14/01/2005.

PROPRIEDADE INTELECTUAL

O *software* SCBR é de propriedade da PETROBRAS e da UFSC com registro no Instituto Nacional de Propriedade Industrial (INPI):

Processo Nº:	BR512020002215-4.
Data do Depósito:	01/10/2019.
Linguagem:	C++ / PYTHON.
Campo de Aplicação:	IN-03 / MA-03 / MT-06.
Tipo Programa:	IA-02, SM-01, SM-04, TC-01.
Título:	SCBR.
Nome dos Titulares:	PETRÓLEO BRASILEIRO S/A – PETROBRAS e UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA -UFSC
Nome dos Autores:	HENRY XAVIER CORSEUIL / MARCIO ROBERTO SCHNEIDER / CLOVIS RAIMUNDO MALISKA JUNIOR / FÁBIO ZADROZNY / RODRIGO MACHADO LUCIANETTI.

AGRADECIMENTOS

Queremos registrar aqui nossos mais sinceros agradecimentos a todos que contribuíram para tornar este projeto realidade. O sucesso deste livro deve-se inteiramente à colaboração, ao apoio e à dedicação de pessoas que foram essenciais para sua realização.

Ao Prof. Dr. Henry Xavier Corseuil (*in memoriam*), da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), que iniciou os primeiros estudos sobre a contaminação de solos e águas subterrâneas e contribuiu muito com os avanços tecnológicos na área.

Ao corpo gerencial e técnico da Petrobras, André Bueno Portes, Bruno Pereira Faria, Camila Toledo Santos, Flavia Goncalves de Castro, Flavio Barbosa Bezerra, Marco Antonio Batista da Silva, Ricardo Schutz, Rodrigo Augusto Marques, Adriana Ururahy Soriano, Deivid Lucas dos Santos Migueleti, Leonardo Mitidiero Mansor, Leonardo Vieira Gomes da Silva, Luiz Fernando Martins, Marcelo Bizzoni, Marcus Paulus Martins Baessa e Tiago Magalhaes Soares, pelo apoio ao desenvolvimento e aplicação do software SCBR. Além disso, por compartilhar conhecimento e dados relevantes utilizados na simulação dos estudos de caso.

À Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) pelo apoio à pesquisa científica e incentivo à aplicação de tecnologias de inovação na indústria de petróleo, gás natural e combustível.

Aos pesquisadores, professores, técnicos e bolsistas de inovação tecnológica do Núcleo Ressacada de Pesquisas em Meio Ambiente (REMA), em especial ao Prof. Dr. Admir José Giachini (Coordenador do Projeto) e aos colaboradores Eng. M.Sc. Karina Lopes Joussef, Eng. M.Sc. Carlos José de Amorim Júnior, Eng. M.Sc. Muriel Edyth Lumsden Szymanski Patricio e Eng. M.Sc. Caio Brito Peres, que se dedicaram a esse projeto.

RESUMO EXECUTIVO

Este *Manual de Referências Técnicas* apresenta a base conceitual sobre as formulações matemáticas empregadas no desenvolvimento do software SCBR (Solução Corretiva Baseada no Risco) - versão 3.25.

Inicialmente, o SCBR foi desenvolvido para simular os potenciais impactos na água subterrânea decorrentes de potenciais derramamentos de combustíveis, incluindo a influência do etanol. A partir de novas demandas da PETROBRAS, o simulador evoluiu para uma importante ferramenta de apoio à tomada de decisão em ações preventivas e no gerenciamento ambiental de áreas contaminadas. Atualmente, além da simulação do fluxo da água subterrânea e do transporte de contaminantes na zona saturada (2D horizontal) e não saturada (1D vertical), o SCBR permite a realização de planos de amostragens de solo e água subterrânea, quantificação do risco à saúde humana (2D) e das concentrações máximas aceitáveis (CMA), determinação de estimativas de cubagem de solo contaminado, simulação de técnicas de remediação *in situ* e simulação preventiva de cenários acidentais de vazamentos.

As metas do desenvolvimento do SCBR têm sido alcançadas por meio das parcerias tecnológicas firmadas entre a **PETROBRAS (Petróleo Brasileiro S.A.)** e a **Universidade Federal de Santa Catarina – Núcleo Ressacada de Pesquisas em Meio Ambiente (REMA)**, com o apoio financeiro da **ANP - Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis**, associado ao investimento de recursos oriundos das Cláusulas de PD&I.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	1
2 MODELO CONCEITUAL	2
2.1 Cenários previstos.....	2
2.2 Concepção do SCBR	3
3 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA.....	5
3.1 Modelos de fluxo e transporte	5
3.1.1 Teoria do Fluxo: princípios do escoamento das águas subterrâneas.....	5
3.1.1.1 Teoria do Fluxo: equação do escoamento em aquíferos não confinados	7
3.1.1.2 Equação do fluxo subterrâneo	9
3.1.1.3 Condições de Contorno.....	10
3.1.2 Modelamento da conservação da massa	15
3.1.3 Equações do Transporte de Contaminantes na Zona Saturada.....	18
3.1.3.1 Difusão e Dispersão- Avaliação dos Fluxos – m_x e m_y	20
3.1.3.2 Termos Fonte, Biodegradação e Sorção (Zona Saturada).....	21
3.1.3.3 Cálculo da Concentração de Contaminantes na Água Subterrânea.....	23
3.1.3.4 Efeito Cossolvência	26
3.1.4 Calibração do Modelo de Fluxo Subterrâneo	26
3.1.5 Equações do Transporte de Contaminantes na Zona Não Saturada....	29
3.1.5.1 Teste da Fase Residual.....	31
3.1.5.2 Lixiviação.....	32
3.1.5.3 Modelo de Caixa (Box Model).....	34
3.1.5.4 Lente na Zona Não Saturada	35
3.1.6 Acoplamento entre a Zona Não Saturada e a Zona Saturada.....	37
3.1.7 Mapas 2D: Fluxo Subterrâneo e Transporte de Contaminantes.....	38
3.1.8 Configuração do Simulador	39
3.2 Métodos de Amostragem	41

SUMÁRIO

3.2.1 Amostragem Direcionada.....	42
3.2.2 Amostragem com Distribuição Aleatória Simples.....	42
3.2.3 Amostragem com Distribuição Aleatória Estratificada.....	42
3.2.4 Amostragem com Distribuição Sistemática	43
3.2.4.1 Cálculo da probabilidade de encontrar hot spots.....	43
3.2.4.2 Exemplo	45
3.3 Cálculo do Risco à Saúde Humana	45
3.3.1 Metodologia	46
3.3.2 Definição dos Cenários.....	47
3.3.3 Fonte, transporte e receptor.....	47
3.3.4 Caracterização da Exposição.....	48
3.3.5 Definição das Concentrações Máximas Aceitáveis (CMA).....	49
3.3.6 Quantificação do Risco à Saúde Humana	50
3.3.6.1 Quantificação do Risco à Saúde Humana por concentrações simuladas na água subterrânea	52
3.3.7 Cálculo das Concentrações Máximas Aceitáveis (CMA).....	55
3.4 Remediação.....	55
3.4.1 Bombeamento e Injeção	57
3.4.2 Barreiras	58
3.4.3 Áreas Reativas	58
3.4.4 Cubagem de Solo Contaminado	58
3.4.4.1 Cálculo da massa e volume de solo.....	59
3.4.4.2 Cálculo do erro quadrático médio (RMSE).....	62
3.4.4.3 Quartis	63
3.4.5 Exemplo	64
4 PARÂMETROS DE SIMULAÇÃO	72
4.1 Hidrogeologia	72

SUMÁRIO

4.2 Dispersividade	74
4.3 Adsorção.....	75
4.4 Biodegradação	76
4.5 Dados da fonte.....	78
4.6 Dados de monitoramento	80
4.7 Controle hidráulico	81
4.8 Dados gerais.....	82
4.9 Cubagem	82
4.10 Risco	83
a) Contato dérmico com solo superficial	83
b) Inalação de vapores a partir do solo superficial	84
c) Inalação de partículas a partir do solo superficial	86
d) Ingestão de solo superficial	87
e) Ingestão de vegetais (compostos metálicos).....	87
f) Ingestão de vegetais (compostos orgânicos)	88
g) Inalação em ambientes abertos a partir do solo subsuperficial.....	92
h) Inalação em ambientes fechados a partir do solo subsuperficial.....	94
i) Contato dérmico com água subterrânea	97
j) Inalação em ambientes abertos a partir da água subterrânea.....	98
k) Inalação em ambientes fechados a partir da água subterrânea.....	100
l) Ingestão de água subterrânea.....	102
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	104

1 INTRODUÇÃO

O SCBR (Solução Corretiva Baseada no Risco) é um simulador matemático de apoio ao gerenciamento de áreas impactadas, avaliação de riscos à saúde humana e remediação, ou de áreas onde são desenvolvidas atividades potencialmente poluidoras. O SCBR está alinhado com as diretrizes da Resolução CONAMA N° 420/2009 e Normas ABNT - NBR 15515-2/2023, NBR 15515-3/2013, NBR 16209/2013 e NBR 16210/2022 (ABNT, 2013a, 2013b, 2022, 2023), com o propósito de auxiliar na tomada de decisão em ações de gerenciamento ambiental de áreas contaminadas. O modelo SCBR possui diversas ferramentas necessárias ao gerenciamento de áreas contaminadas, destacando:

- Utilização de modelos numéricos para a simulação do fluxo bidimensional da água subterrânea e o transporte de contaminantes na zona não saturada (volatilização e lixiviação) e zona saturada.
- Simulação da interferência do etanol sobre a biodegradação e a solubilidade dos hidrocarbonetos de petróleo para os casos de contaminações por combustíveis onde se adicionam álcool.
- Estimativa do alcance e da velocidade de migração de plumas de contaminação na fase dissolvida.
- Definição de perímetros de proteção de aquíferos.
- Geração de relatórios e vídeos.
- Auxílio no dimensionamento de planos de amostragem com base em probabilidades.
- Geração de mapas de risco à saúde humana considerando a heterogeneidade do aquífero, indicando com precisão as regiões onde os valores estão acima do tolerável.
- Quantificação das metas de remediação baseadas no risco (Concentrações Máximas Aceitáveis - CMA).
- Simulação de tecnologias de remediação, incluindo barreiras físicas, bombeamento, atenuação natural, barreiras reativas, combinação de técnicas e determinação da cubagem de solo contaminado.
- Módulo de avaliação de risco configurável, permitindo a customização para utilização de equações, parâmetros de exposição e toxicidade de quaisquer referências, como ASTM, USEPA, CETESB, dentre outras.

2 MODELO CONCEITUAL

2.1 Cenários previstos

O vazamento de tanques de armazenamento de petróleo e derivados ou o rompimento de dutos podem ocasionar a liberação de quantidades significativas de compostos tóxicos ao meio ambiente. Parte destes compostos pode se transferir ao ar atmosférico, escoar pela superfície do terreno ou infiltrar no solo, alcançando tanto as águas subterrâneas quanto as superficiais. O SCBR pode ser utilizado preventivamente, ou seja, na simulação de possíveis cenários potenciais de contaminação, antes mesmo da ocorrência de um caso real. Desta forma, podem-se estabelecer estratégias que visem minimizar os impactos de áreas de maior risco. De outra forma, o SCBR também pode ser empregado no gerenciamento de áreas contaminadas, em todas as etapas do gerenciamento ambiental definidas pela Resolução CONAMA 420/2009 (BRASIL, 2009).

Um dos cenários típicos no qual o SCBR é utilizado é exemplificado na Figura 2.1, no qual um duto de óleo combustível rompeu e liberou o produto puro na superfície do solo. Apesar da ação emergencial ter recolhido o máximo de óleo possível, parte dos contaminantes se infiltraram no solo. A presença dos contaminantes na forma de produto puro na zona não saturada do solo podem atingir as águas subterrâneas devido à solubilização pela água da chuva, em um processo conhecido como lixiviação. Ainda, se o volume infiltrado for grande, parte do produto puro pode atingir a zona saturada do solo. O contato do produto puro com o fluxo da água subterrânea ocasiona a dissolução dos compostos solúveis, formando uma pluma de contaminantes dissolvidos que pode, então, migrar sob a influência de gradientes hidráulicos atuantes no aquífero e pelos processos de difusão química e dispersão mecânica, e atingir pontos de exposição (POE) críticos, resultando no comprometimento da saúde humana ou ecossistemas sensíveis.

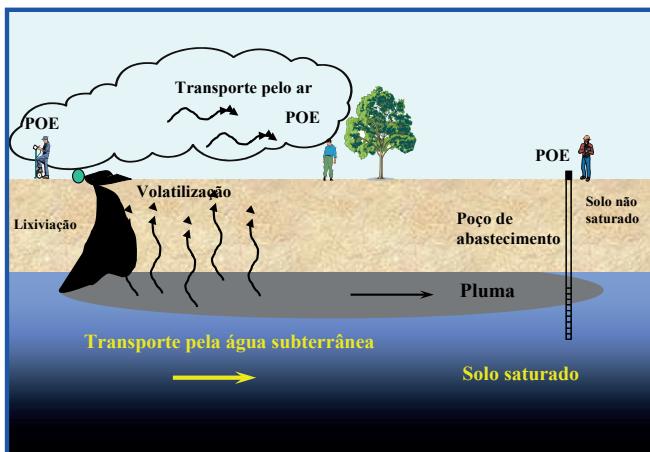


Figura 2.1 – Cenário típico de contaminação do solo e água subterrânea a partir do rompimento de um duto de óleo combustível na superfície.

2.2 Concepção do SCBR

O modelo conceitual no gerenciamento de áreas contaminadas consiste na representação escrita ou gráfica de um sistema ambiental e os processos biológicos, químicos e físicos que determinam o transporte dos contaminantes a partir das fontes de contaminação, através dos meios contaminados, até atingir os receptores envolvidos.

Com base em uma fonte de contaminação, matematicamente definida como o “termo de geração” ou “termo fonte”, o SCBR simula o fluxo, o transporte e a transformação de contaminantes na zona não saturada e saturada, reproduzindo um cenário de vazamento de contaminantes e a distribuição dos mesmos ao longo do tempo e do espaço. O termo fonte representa os contaminantes em fase pura, imiscível em água, em equilíbrio hidrostático ou imobilizado na zona saturada ou não saturada.

Na zona saturada, o SCBR simula a variação espacial bidimensional (2D), no plano horizontal, e temporal da concentração dos contaminantes dissolvidos na água subterrânea, em função dos mecanismos de transporte (advecção, dispersão e sorção) e de transformação (biodegradação) (Figura 2.2).

Na zona não saturada, o SCBR simula o transporte de contaminantes lixiviados através do solo (Figura 2.3). As equações de transporte na zona não saturada são resolvidas utilizando soluções unidimensionais (1D) de transporte advectivo e dispersivo de solutos na vertical. Caso a pluma dissolvida atinja a água subterrânea, o SCBR acomoda o acoplamento da distribuição dos contaminantes entre a zona saturada e não saturada. A formulação matemática implementada para a simulação do transporte na zona não saturada é semelhante à implementação na zona saturada, considerando os seguintes elementos: a) fonte finita, b) volatilização e transporte do vapor a partir da fonte para a superfície do solo, c) lixiviação, d) transporte advectivo e dispersivo da fase dissolvida, e) sorção e f) decaimento de primeira ordem no lixiviado. O modelo pode ainda simular o transporte na zona não saturada com a ausência ou presença de lentes.

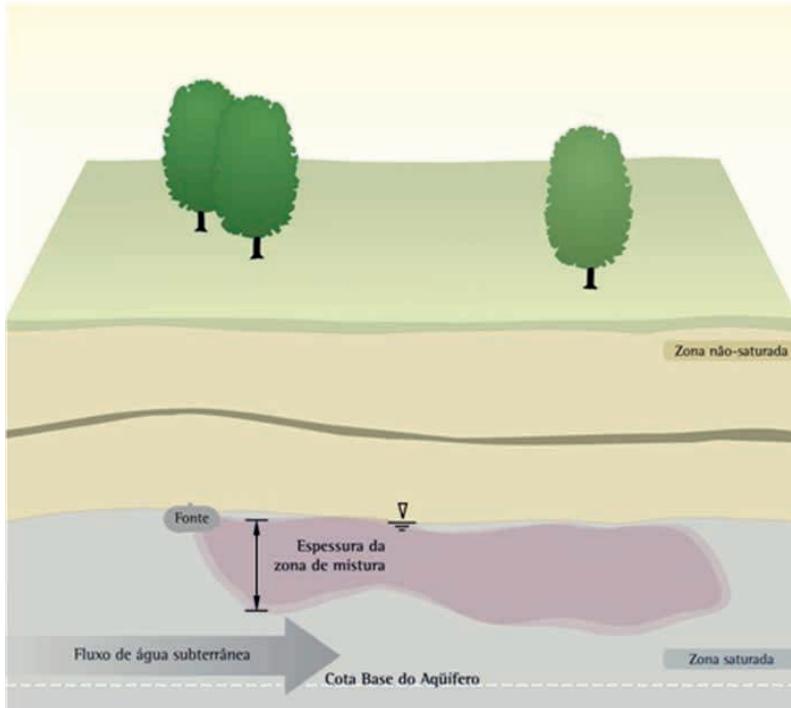


Figura 2.2 – Modelo conceitual de fonte de contaminação na zona saturada.

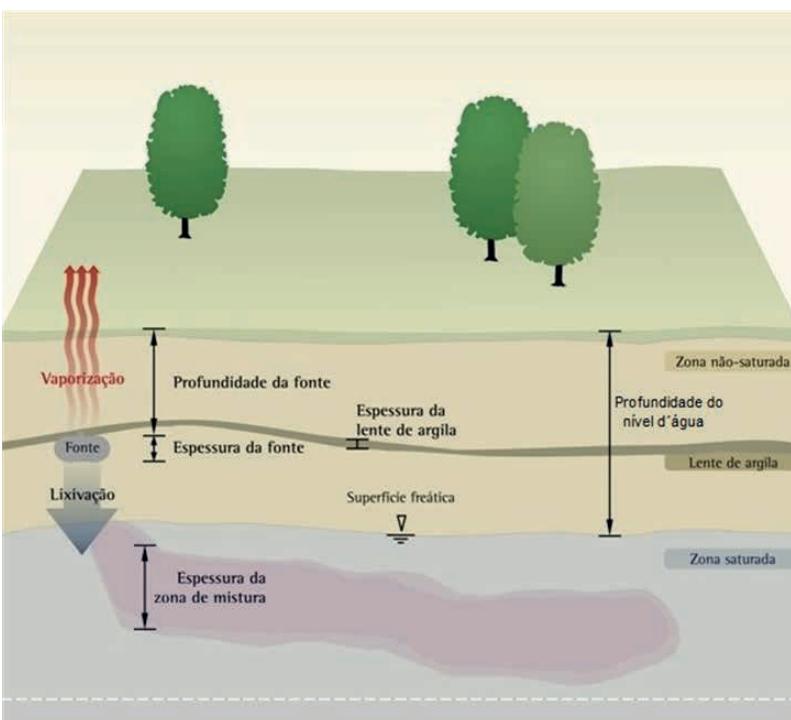


Figura 2.3 – Modelo conceitual de fonte de contaminação na zona não saturada.

3 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

A formulação matemática utilizada no SCBR depende do tipo de cenário que deseja simular e avaliar. Serão apresentados os modelos de fluxo e transporte, os métodos de amostragem, o cálculo do risco à saúde e as técnicas de remediação.

3.1 Modelos de fluxo e transporte

Neste tópico serão apresentadas as formulações matemáticas para o modelo saturado e não saturado, os métodos de interpolação utilizados, a calibração do modelo de fluxo e o acoplamento entre os dois modelos.

Em relação à formulação matemática utilizada no SCBR para a simulação de contaminantes dissolvidos nas águas subterrâneas de aquíferos não confinados, o modelo matemático envolve a solução das equações de Boussinesq e Darcy no meio poroso saturado e não confinado (que são as equações do movimento para este caso), acrescidas das equações de transporte de soluto. O SCBR utiliza o método de volumes finitos na solução da equação do escoamento para o caso bidimensional.

3.1.1 Teoria do Fluxo: princípios do escoamento das águas subterrâneas

Para derivação das equações do escoamento no meio poroso são feitas as seguintes considerações:

- O fluxo de água, q , escoando pelo meio poroso e atravessando um Volume de Controle (Figura 3.1), com dimensões Δx , Δy e Δz .
- O fluxo q é dado pela expressão de Darcy:

$$\vec{q} = q_x \vec{i}_x + q_y \vec{i}_y + q_z \vec{i}_z = -K \nabla h \quad (3.1)$$

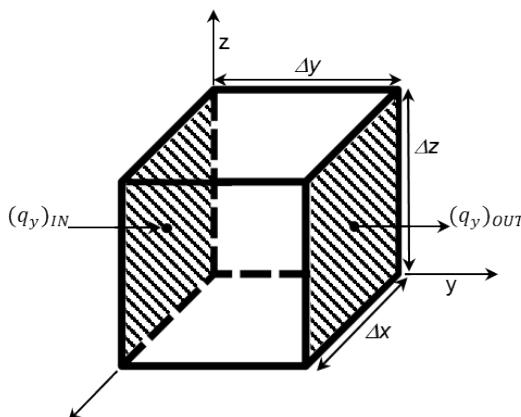


Figura 3.1 – Volume elementar representativo usado na derivação da equação do escoamento. São mostrados os componentes do fluxo “ q ” ao longo do eixo de coordenada y .

O balanço de massa de água no volume de controle representado na Figura 3.1 é dado por:

$$Variação\ no\ armazenamento = Saída_{água} - Entrada_{água} \quad (3.2)$$

Assim, ao longo do eixo y , o balanço de massa pode ser representado por:

$$\rho \left[(q_y)_{out} - (q_y)_in \right] \Delta x \Delta z \quad (3.3)$$

O qual também pode ser escrito como:

$$\rho \left[\frac{(q_y)_{out} - (q_y)_in}{\Delta y} \right] \Delta x \Delta y \Delta z \quad (3.4)$$

Ou na forma diferencial:

$$\rho \frac{\partial q_y}{\partial y} (\Delta x \Delta y \Delta z) \quad (3.5)$$

Expressões similares a esta podem ser definidas ao longo dos eixos x e z . Assim, a variação total do armazenamento de água no volume elementar representativo é dada por:

$$\rho \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) \Delta x \Delta y \Delta z = variação\ no\ armazenamento \quad (3.6)$$

Considerando que existe uma fonte (ou sumidouro) de água, R^* , onde o valor de R^* é positivo se for uma fonte, e negativo se for um sumidouro, a expressão acima se transforma:

$$\rho \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} - R^* \right) \Delta x \Delta y \Delta z = variação\ no\ armazenamento \quad (3.7)$$

Considere agora o lado direito da Equação 3.2. A variação no armazenamento é representada pelo armazenamento específico (S_s), o qual é definido como o volume de água liberado do armazenamento, por unidade de variação da carga hidráulica e por unidade de volume do meio, dado por:

$$S_s = - \frac{\Delta V}{\Delta h \Delta x \Delta y \Delta z} \quad (3.8)$$

De acordo com a convenção utilizada na expressão acima, a variação de volume, ΔV , é essencialmente positiva (água liberada do sistema) quando a variação de carga hidráulica, Δh , é negativa. Ou seja, a água é liberada do armazenamento quando a carga hidráulica decresce.

Assim, a variação de volume de água por unidade de tempo pode ser representada por:

$$\frac{\Delta V}{\Delta t} = -S_s \frac{\Delta h}{\Delta t} \Delta x \Delta y \Delta z \quad (3.9)$$

Substituindo na expressão acima, e eliminando o termo $\Delta x \Delta y \Delta z$, tem-se:

$$\rho \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} - R^* \right) = -\rho S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.10)$$

Em que,

q_x , q_y e q_z = componentes do vetor velocidade específica, ao longo dos eixos de coordenadas x , y e z , respectivamente, [L/T];

ρ = densidade da água, [M/L³];

S_s = armazenamento específico, [1/L];

R^* = fonte ou sumidouro de água, representando o volume de água introduzido (ou retirado) por unidade de volume do meio e por unidade de tempo, em [L³/L³.T]. O valor de R^* é positivo, se for uma fonte, e negativo se for um sumidouro.

Agora, considerando a expressão de Darcy em três dimensões:

$$q_x = -K_x \frac{\partial h}{\partial x}$$

$$q_y = -K_y \frac{\partial h}{\partial y} \quad (3.11)$$

$$q_z = -K_z \frac{\partial h}{\partial z}$$

Em que, K_x , K_y e K_z = componentes principais do tensor condutividade hidráulica, ao longo dos eixos de coordenadas x , y e z , respectivamente, [L/T]; h = carga hidráulica, [L].

Efetuando a respectiva substituição na equação da continuidade, obtém-se a

Equação Geral do Escoamento no Aquífero:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) + R^* = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.12)$$

Observações:

- A equação 3.12 se aplica ao escoamento tridimensional da água subterrânea, tanto no aquífero confinado quanto no não confinado (freático);
- Para um aquífero não confinado, sob as condições de Dupuit, a expressão acima também pode ser modificada para uma representação bidimensional.
- O modelo SCBR simula o fluxo e transporte de contaminantes em aquíferos não confinados, através da solução numérica das equações.

3.1.1.1 Teoria do Fluxo: equação do escoamento em aquíferos não confinados

Para a resolução da equação geral de escoamento do aquífero (Equação 3.12), no caso de aquíferos não confinados deverão ser consideradas as condições de Dupuit:

- Aquífero não confinado (ou aquífero livre, ou lençol freático), com uma camada saturada de espessura h , medida desde a base impermeável do aquífero (cota base do aquífero) até a superfície do lençol d'água;

- Linhas de fluxo essencialmente horizontais (escoamento horizontal, bidimensional);
- Linhas equipotenciais essencialmente verticais, ou seja, carga hidráulica invariável na direção vertical;
- Gradiente hidráulico horizontal invariável na direção vertical; e,
- Gradiente hidráulico horizontal igual à declividade da superfície do lençol freático.

Observação:

A aproximação de Dupuit só pode ser rigorosamente válida para regiões do aquífero distantes de solicitações intensas de carga ou descarga, tais como poços de injeção ou extração d'água, drenos, irrigação forçada etc.

Integrando a Equação 3.12 na espessura da camada saturada do aquífero não confinado de 0 a h , ao longo da direção vertical z , e assumindo que a carga hidráulica seja constante ao longo de z , obtém-se:

$$(1) \int_0^h \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) dz = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \int_0^h dz \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x h \frac{\partial h}{\partial x} \right)$$

$$(2) \int_0^h \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) dz = \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \int_0^h dz \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y h \frac{\partial h}{\partial y} \right)$$

$$(3) \int_0^h \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) dz = \int_0^h \partial \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = - \int_0^h \partial q_z = |q_z|_0 - |q_z|_h = |q_z|_0 + I$$

$$(4) \int_0^h \left(S_s \frac{\partial h}{\partial t} \right) dz = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \int_0^h dz = S_s h \frac{\partial h}{\partial t} = S_y h \frac{\partial h}{\partial t}$$

$$(5) \int_0^h R^* dz = R^* \int_0^h dz = R^* h = R \quad (3.13)$$

Resultando na expressão abaixo para o escoamento em aquíferos não confinados, conhecida como equação de Boussinesq (BEAR, 1972; FETTER, 1994):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x h \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y h \frac{\partial h}{\partial y} \right) + (|q_z|_0 + I) + R = S_y h \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.14)$$

Em que,

K_x e K_y = componentes principais do tensor condutividade hidráulica, ao longo dos eixos de coordenadas x e y , respectivamente, [L/T];

Iq_z = velocidade específica da água subterrânea, na direção de z , que atravessa a base do aquífero, representando a drenança (ganho ou perda) de água através da interface com a camada confinante inferior, [L/T];

I = infiltração de água (recarga) através da superfície superior da zona saturada do meio, representando o volume de água introduzido no freático por unidade de área do meio, por unidade de tempo, [L/T];

S_y = coeficiente de armazenamento do meio não saturado, [adimensional];

R = fonte ou sumidouro de água, representando o volume de água introduzido (ou retirado) por unidade de área do meio e por unidade de tempo, em $[L^3/L^2 \cdot T]$. O valor de R é positivo, se for uma fonte, e negativo se for um sumidouro.

Observações:

A equação de Boussinesq, representada pela Equação 3.14, é não linear, pois os seus coeficientes, $K_x h$ e $K_y h$, dependem da variável dependente h (incógnita). A não linearidade desta equação traz uma dificuldade adicional para a sua solução numérica, exigindo o desenvolvimento de técnicas especialmente voltadas para equações não lineares.

O SCBR não simula o transporte em rios e lagos. Entretanto, para o balanço de massa dos contaminantes, consideram-se os rios e/ou lagos com concentração inicial igual a zero, em que a concentração no rio/lago será calculada como um reator de mistura completa.

3.1.1.2 Equação do fluxo subterrâneo

O modelo SCBR simula o fluxo subterrâneo em aquíferos não confinados através da equação de Boussinesq (Equação 3.14), por meio de métodos numéricos, devido à sua não linearidade. Para a solução da equação é necessário determinar a fronteira em que será calculado o fluxo, obtido através do domínio de simulação. Ele delimita a região do aquífero em que será calculado o fluxo subterrâneo. Além disso, como a equação de Boussinesq é uma equação diferencial não linear, para sua resolução é necessário que sejam utilizadas restrições, conhecidas como condições de contorno, que atribuem valores iniciais para o cálculo da equação por métodos iterativos.

O domínio de simulação é então dividido em volumes de controle, em que a equação do fluxo será resolvida para cada volume, cujo tamanho é definido na configuração do simulador pelo usuário. Em sua forma discreta, a equação de Boussinesq pode ser representada pela Equação 3.15.

$$R_p(h) = -\frac{1}{2} \left\{ \frac{\Delta y}{\Delta x} [K_e h_E^2 + K_w h_W^2 - (K_e + K_w) h_P^2] + \frac{\Delta y}{\Delta x} [K_n h_N^2 + K_s h_S^2 - (K_n + K_s) h_P^2] \right\} - I \Delta x \Delta y \quad (3.15)$$

Como método de iteração linear, a partir da equação discretizada aplicada ao centro de cada volume de controle, o SCBR utiliza o método iterativo Newton-Raphson

como método de resolução numérico. Este método consiste em estimar a raiz da equação através de um processo iterativo, a partir de uma estimativa inicial. Quando se tem uma única equação com uma única incógnita, utiliza-se a fórmula de recorrência apresentada em 3.16.

$$\varphi_n = \varphi_{n-1} - \frac{f(\varphi_{n-1})}{f'(\varphi_{n-1})} \quad (3.16)$$

No SCBR é resolvido o método de Newton-Raphson para um sistema de equações não lineares (em que as incógnitas são as condutividades hidráulicas em cada volume de controle). Nesse caso, é utilizada a versão do Newton-Raphson para um sistema linear de funções *resíduo* (R), que operam sobre um vetor solução (h):

$$h_n = h_{n-1} - J^{-1}R(h) \quad (3.17)$$

Partindo do método de Newton-Raphson para a resolução da equação em sua forma discreta no centro de cada volume de controle, faz-se necessário o cálculo da matriz Jacobiana para resolução do sistema de equações não lineares, como mostrado em 3.18.

$$\begin{aligned} J_{P,S} &= \frac{\partial R_p}{\partial h_s} = K_s \frac{\Delta x}{\Delta y} h_s \\ J_{P,W} &= \frac{\partial R_p}{\partial h_w} = K_w \frac{\Delta y}{\Delta x} h_w \\ J_{P,E} &= \frac{\partial R_p}{\partial h_e} = K_e \frac{\Delta y}{\Delta x} h_e \\ J_{P,N} &= \frac{\partial R_p}{\partial h_n} = K_n \frac{\Delta x}{\Delta y} h_n \\ J_{P,P} &= \frac{\partial R_p}{\partial h_p} = - \left(\frac{\Delta y}{\Delta x} (K_e + K_w) + \frac{\Delta x}{\Delta y} (K_s + K_n) \right) h_p \end{aligned} \quad (3.18)$$

A partir das condições de contorno adotadas pelo modelo, advindas das informações inseridas pelo usuário no SCBR, e da resolução iterativa das equações, obtém-se como resultado a carga hidráulica h .

Com o mapa potenciométrico gerado pelo SCBR, o usuário tem disponível no Inspetor de Ponto a ferramenta **Linhas de Fluxo** (no módulo Resultados do SCBR), em que a partir de um ponto estabelecido, são traçados caminhos de rastreamento para prever para onde a água subterrânea está fluindo (*Forward*), ou de onde vem a água subterrânea (*Backward*).

3.1.1.3 Condições de Contorno

Para a resolução das equações não lineares, as condições de contorno utilizadas pelo SCBR são as seguintes:

- Condição de Primeiro Tipo (ou Dirichlet): o valor da carga hidráulica, h , é dado no contorno, sendo que a carga pode ser uma constante ou uma função do espaço e do tempo. Por exemplo:

$$h = f(y, z, t) \quad \text{em} \quad x = 0$$

Ou ainda, definidas em rios de grande porte, lagos, barragens etc.

- Segundo Tipo (ou Neumann): o valor do fluxo de água subterrânea é especificado no contorno. Por exemplo:

$$-K_x \frac{\partial h}{\partial x} = g(y, z, t) \quad \text{em} \quad x = 0$$

O fluxo é definido como uma taxa volumétrica por unidade de área, [L^3/TL^2]. Nos contornos impermeáveis (ex: barreiras) e nos divisores de águas subterrâneas, aplica-se a condição especial de fluxo zero.

O SCBR utiliza as condições de contorno de primeiro e segundo tipo a partir dos dados de entrada fornecidos pelo usuário no módulo Ambiente.

Para a condição de Primeiro Tipo (Dirichlet), o SCBR atribui valores iniciais de carga hidráulica em cada volume de controle, na borda do domínio de simulação e no volume de controle externo à borda. Os valores de carga hidráulica são atribuídos em duas situações distintas:

- Apenas 3 pontos de análise com carga hidráulica: o SCBR efetua uma interpolação linear simples, calculando um plano com os valores de carga hidráulica nos três pontos e utilizando o valor que passa no centro de cada volume de controle;
- Em 4 ou mais pontos de análise com carga hidráulica: o SCBR determina os valores de carga hidráulica em cada volume de controle através do método de interpolação conhecido como krigagem. A krigagem efetuada pelo SCBR utiliza o variograma linear (não considera efeito pepita, é isotrópico, com inclinação igual a 1), assumindo a continuidade espacial.

Os valores de carga hidráulica serão atribuídos para todos os volumes de controle (inclusive para os pontos que possuem pontos de análise com valores de carga hidráulica medidos), para a borda e para os volumes de controle imediatamente exteriores à borda.

Caso haja informações de carga hidráulica fora do domínio de simulação, ela participará da definição da condição de contorno (krigagem).

No entanto, às vezes se faz necessário estabelecer uma condição de contorno fixa ou variável, em função, por exemplo, do relevo da área. Na versão 3.25, o SCBR disponibiliza ao usuário a ferramenta das *Linhas de Análise* (módulo Ambiente), em que é possível estabelecer estas condições através de valores de carga hidráulica inseridas pelo usuário. Essa ferramenta permite estabelecer as condições de contorno considerando os elementos geográficos de uma área, dentro do *Domínio de Simulação*, ou mesmo na sua fronteira. O simulador interpreta esta(s) linha(s) como pontos de análise distribuídos ao

longo da mesma e deve ser garantido que a linha intercepte todos os volumes de controle por onde ela passa, ou seja, cada volume de controle deve ter um ponto de análise.

Observações:

- Os pontos de análise fora do domínio de simulação não farão parte do fluxo, mas entram como condição de contorno para a determinação das cargas hidráulicas iniciais para o método de resolução numérico;
- Os valores de carga hidráulica que são atribuídos para a borda serão utilizados como condição de contorno, entretanto, para todo o domínio de simulação será atribuído um valor inicial de carga hidráulica;
- Os valores do nível d'água de rios e lagos entram na determinação das cargas hidráulicas iniciais da condição de contorno. Entretanto, os valores de cota do nível d'água dos rios e lagos não são recalculados como os pontos de análise, são fixos e invariáveis;
- Os valores de recarga são distribuídos uniformemente em cada volume de controle e entram na resolução da equação de Boussinesq (Equação 3.14).

A condição de Segundo Tipo (Neumann) é obtido através da resolução da equação de Boussinesq (Equação 3.14), em que o fluxo é determinado a partir dos valores de carga hidráulica imediatamente externos à borda (a partir da condição de Primeiro Tipo).

Observações:

- A vazão do rio não é considerada na condição de segundo tipo. Ela é apenas utilizada no balanço de massa da concentração no transporte de contaminantes. Pode ser considerada como uma condição de não fluxo;
- A barreira é um caso especial, pois os volumes de controle em que se encontram a barreira não participam do cálculo do fluxo;
- A condição de não fluxo representa uma barreira que elimina a célula da solução do sistema (não participa do cálculo), só usa de Primeiro Tipo. O rio entra na condição de contorno para a krigagem (Método de Interpolação - Krigagem);
- A condição de Terceiro Tipo ocorre em contorno semipermeável, que é representado matematicamente como sendo uma combinação linear da carga hidráulica e do fluxo. Esta condição não é utilizada na resolução das equações no SCBR.

As três principais condições de contorno utilizadas em Equações do Escoamento são representadas na Figura 3.2.

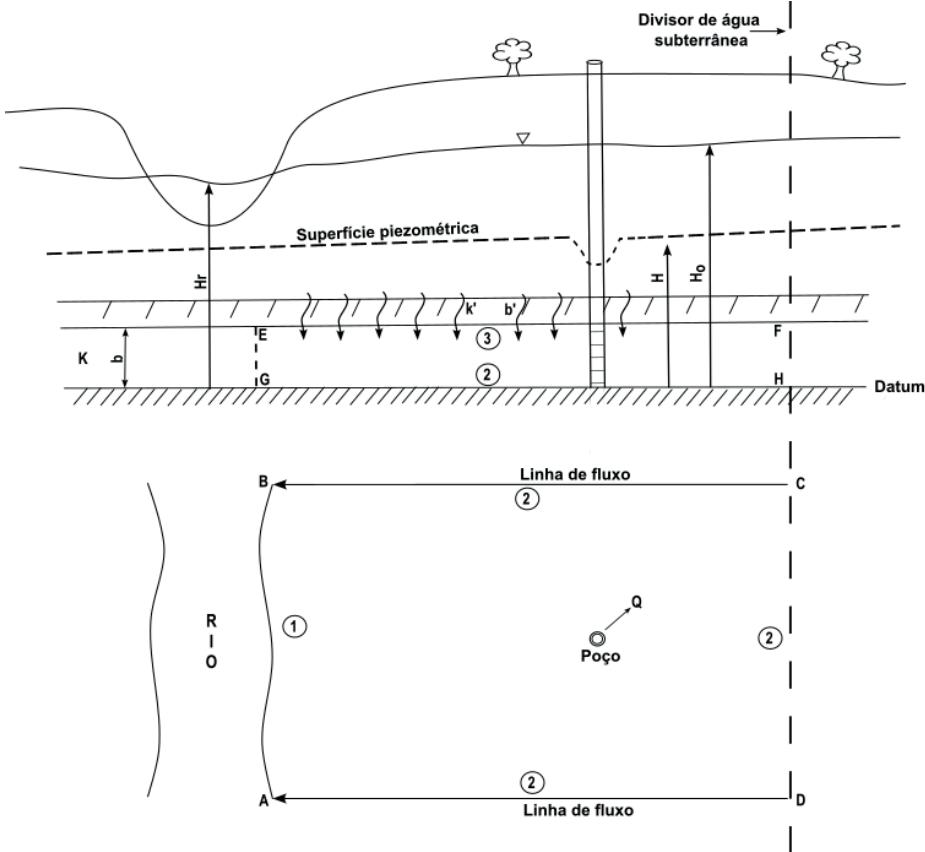


Figura 3.2 – Representação esquemática dos três tipos de condição de contorno empregados para a modelagem do escoamento (fluxo) de águas subterrâneas [Adaptado de Cleary (2007)].

A Krigagem estima pesos para interpolação (e/ou extração) para a posição do centro de cada célula. A interpolação é realizada para todas as células do domínio, sendo que o domínio também é estendido em uma célula para cada direção.

A função de covariância utilizada, para cada par de pontos com valores (i.e., cargas hidráulicas), é:

$$C(p_1, p_2) = 1 - \text{dist}(p_1, p_2) \quad (3.19)$$

Onde dist é a função de distância euclidiana entre os dois pontos.

A Krigagem é feita para todo o domínio, incluindo para a borda estendida. Os valores na borda estendida serão utilizados como condição de contorno, e os valores nas células internas ao domínio serão utilizados como estimativa inicial da solução.

A equação, na forma discreta, para células no interior do domínio, é:

$$R_p(h) = -\frac{1}{2} \left\{ \frac{\Delta y}{\Delta x} \left[K_e h_E^2 + K_w h_W^2 - (K_e + K_w) h_p^2 \right] + \frac{\Delta x}{\Delta y} \left[K_n h_N^2 + K_s h_S^2 - (K_n + K_s) h_p^2 \right] \right\} - I \Delta x \Delta y \quad (3.20)$$

Onde K é a condutividade hidráulica em cada fronteira, e h é o potencial hidráulico sendo resolvido, no meio de cada célula. Esse é um sistema de equações não-lineares, resolvidos pelo método de Newton-Raphson, e por isso precisa também ser calculada a matriz jacobiana (Equação 3.18).

Nas bordas, utiliza-se o valor da condição de contorno em vez da incógnita, sendo que a condição de contorno é inicializada logo após a krigagem, com a média entre o valor que cai fora do domínio (na borda estendida) e o valor da célula que está na fronteira do domínio pelo lado de dentro.

Na forma contínua, a equação é dada por:

$$-I = \frac{\partial}{\partial x} \left[K_{xx} h \frac{\partial h}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_{yy} h \frac{\partial h}{\partial y} \right] \quad (\text{Boussinesq}) \quad (3.21)$$

Discretização:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} h \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} h \frac{\partial h}{\partial y} \right) + I = 0 \\ & \iint \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} h \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} h \frac{\partial h}{\partial y} \right) + I \right] dx dy = 0 \\ & \Delta y \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} h \frac{\partial h}{\partial x} \right) dx + \Delta x \int_s^n \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} h \frac{\partial h}{\partial y} \right) dy = -\Delta x \Delta y I \\ & \Delta y \left[K_e h_e \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)_e - K_w h_w \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)_w \right] + \dots \\ & \Delta y \left[K_e \frac{(h_e + h_p)(h_e - h_p)}{2} - K_w \frac{(h_p + h_w)(h_p - h_w)}{2} \right] + \dots \\ & \frac{\Delta y}{2 \Delta x} \left[K_e (h_e^2 - h_p^2) - K_w (h_p^2 - h_w^2) \right] + \dots \\ & \frac{\Delta y}{2 \Delta x} \left[K_e h_e^2 + K_w h_w^2 - (K_e + K_w) h_p^2 \right] + \dots \end{aligned}$$

Não há limite de distância, todos os pontos de análise participam da krigagem.

Método de Interpolação - Krigagem

As condições de contorno do domínio de simulação são obtidas por meio da interpolação, utilizando a krigagem. Para tal é assumido o variograma isotrópico linear, baseado na metodologia do *Blackbox kriging* (WEBER; ENGLUND, 1992; BARRY; VER HOEF, 1996).

Variograma Isotrópico:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} \text{var}[Z(a) - Z(a+h)] \quad (3.22)$$

Modelo Linear de Variograma Isotrópico:

$$\gamma(h) = c_0 + bh \quad (3.23)$$

Onde h é a distância separando as localizações das amostras:

$$h = \sqrt{(x_1 - x_0)^2 + (y_1 - y_0)^2} \quad (3.24)$$

$y(h)$ é o semivariograma, c_0 é o efeito pepita (considerado 0 no SCBR), e b é o parâmetro de escala (considerado 1 no SCBR). Portanto, no SCBR, a equação é simplesmente:

$$\gamma(h) = h \quad (3.25)$$

A função que é passada à biblioteca GsTL, para o cálculo da krigagem, é a função de **covariância** (covariograma):

$$C(h) = \text{cov}[z(a_i), z(a_i + h)] \quad (3.26)$$

A relação entre o covariograma e o variograma é dado por:

$$\gamma(h) = C(0) - C(h)$$

$$C(h) = C(0) - \gamma(h) \quad (3.27)$$

$C(0)$ é a variância finita dos dados. No SCBR, supõe-se $C(0)=1$. Portanto, no SCBR, a equação utilizada é:

$$C(h) = 1 - h \quad (3.28)$$

Quando se tem três pontos, em vez da krigagem, realiza-se uma interpolação linear simples, calculando-se um plano com os valores nos três pontos, e utilizando o valor do plano que passa pelo centro de cada célula.

Como resultados do fluxo subterrâneo, o SCBR gera o mapa potenciométrico (carga hidráulica), mapa de velocidades (vetores) e mapas das componentes X e Y da velocidade do fluxo subterrâneo. Os mapas são baseados nas condições de contorno calculadas com o método de interpolação krigagem (3.1.1.3) e no modelo numérico do fluxo subterrâneo (item 3.1.1.2).

3.1.2 Modelamento da conservação da massa

Supondo um volume de controle elementar fixo de volume igual a $dxdy\Delta H$, no domínio do escoamento, e fazendo um balanço de massa neste volume, pode-se dizer que os fluxos de massa que entram e saem são aqueles representados na Figura 3.3.

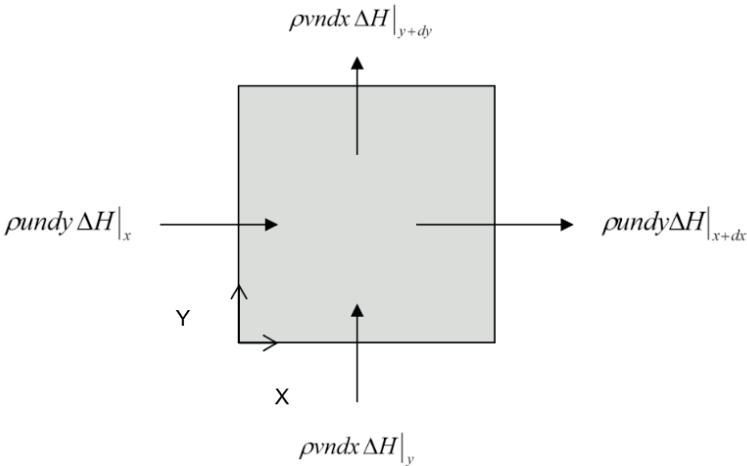


Figura 3.3 – Balanço de massa no volume de controle.

Onde ρ é a densidade do fluido, n a porosidade e u e v são as componentes da velocidade média intersticial.

 No centro do volume de controle, a velocidade fornecida ao usuário (mapa de velocidade) representa o valor da interpolação dos valores das velocidades das faces. Através do arquivo “.csv” gerado pelo *output* do SCBR, o usuário pode consultar tanto os valores interpolados como os valores originais nas faces (uw e vs) de cada volume de controle.

Sabendo que (Bejan, 1995):

$$\begin{bmatrix} \text{fluxo de} \\ \text{massa que} \\ \text{entra no} \\ \text{volume} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{fluxo de} \\ \text{massa que} \\ \text{sai do} \\ \text{volume} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{taxa de} \\ \text{variação de} \\ \text{massa no} \\ \text{volume} \end{bmatrix} \quad (3.29)$$

Chega-se a:

$$\rho u n dy \Delta H|_x - \rho u n dy \Delta H|_{x+dx} + \rho v n dx \Delta H|_y - \rho v n dx \Delta H|_{y+dy} = \frac{d}{dt} (n \rho dxdy \Delta H) \quad (3.30)$$

Assumindo a porosidade constante, dividindo a expressão anterior pelo volume de vazios do meio poroso e fazendo o limite de dx , dy e dt tender a zero, chega-se a

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho n) + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (3.31)$$

A equação anterior multiplicada pela porosidade (n) recupera a expressão apresentada por Bejan (1995), dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (n \rho) + \frac{\partial(n \rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(n \rho v)}{\partial y} = 0 \quad (3.32)$$

Onde $u' = un$ e $v' = vn$. Integrando a Equação 3.31 no espaço, no volume elementar da Figura 3.4, e no tempo na forma:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho) + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \right] dz dy dx = 0 \quad (3.33)$$

Chega-se a:

$$\frac{M_p - M_p^o}{\Delta t} + \dot{M}_e - \dot{M}_w + \dot{M}_n - \dot{M}_s = 0 \quad (3.34)$$

Que é a equação da conservação da massa discretizada, onde:

$$M_p = \rho \Delta x \Delta y \Delta H$$

$$\dot{M}_e = \rho u \Delta y \Delta H|_e$$

$$\dot{M}_w = \rho u \Delta y \Delta H|_w \quad (3.35)$$

$$\dot{M}_n = \rho v \Delta x \Delta H|_n$$

$$\dot{M}_s = \rho v \Delta x \Delta H|_s$$

E o índice “ o ” indica que a propriedade foi avaliada no passo temporal anterior.

Em uma situação em que há injeção de água no domínio analisado, a Equação 3.34 deverá levar em consideração o fluxo de massa injetado, na forma

$$\frac{M_p - M_p^o}{\Delta t} + \dot{M}_e - \dot{M}_w + \dot{M}_n - \dot{M}_s = \bar{q} + W\rho \quad (3.36)$$

Onde \bar{q} é o fluxo de massa e W é o fluxo volumétrico.

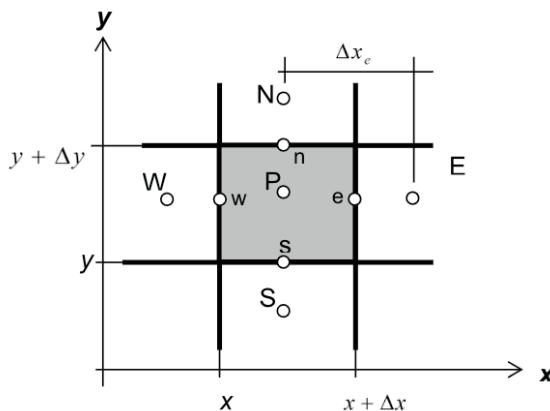


Figura 3.4 – Volume elementar e seus vizinhos, situação bidimensional.

3.1.3 Equações do Transporte de Contaminantes na Zona Saturada

Como visto anteriormente, os principais processos que influenciam o transporte de solutos em águas subterrâneas incluem advecção, difusão, dispersão, adsorção, biodegradação e reação química. Advecção é o movimento dos contaminantes causado pelo escoamento da água no meio poroso. Difusão é um processo de transporte molecular de massa no qual o soluto move-se de regiões de maior concentração para regiões de menor concentração. Dispersão é o processo que descreve a micro-advecção nos poros e depende do meio poroso, principalmente da sua tortuosidade. Adsorção é caracterizada pelo retardo criado a partir da retenção de contaminantes orgânicos na fase representada pela matriz sólida. Já a biodegradação representa a transformação de compostos orgânicos em dióxido de carbono e água na presença de micro-organismos no subsolo.

A advecção, neste caso, representa o movimento de um contaminante com o escoamento da água subterrânea, na velocidade intersticial do meio poroso, definida como:

$$V_i = \frac{K \cdot \partial h}{n_e \cdot \partial x_i} \quad (3.37)$$

Onde o termo $(k \partial h / \partial x_i)$ é a velocidade de Darcy; n_e é a porosidade efetiva; K é a condutividade hidráulica, h é a altura (carga hidráulica); e x é a distância longitudinal nesta direção. O fluxo advectivo de massa é dado por:

$$f a_{xi} = V_i C \quad (3.38)$$

Onde $f a_{xi}$ é o fluxo advectivo; V_i é a velocidade intersticial da água subterrânea; e C é a concentração do contaminante.

A difusão é um processo causado pelo gradiente de concentração. O transporte difusivo pode ocorrer na ausência de velocidade. O transporte no subsolo devido à difusão pode ser descrito pela primeira Lei de Fick da difusão:

$$f d_{xi} = -D \frac{\partial C}{\partial x_i} \quad (3.39)$$

Onde $f d_{xi}$ é o fluxo difusivo de massa na direção i ; D é o coeficiente de difusão (ou dispersão) e $\partial C / \partial x_i$ é o gradiente de concentração nesta mesma direção.

Um modelo de dispersão de Fick implica que o transporte de massa é proporcional ao gradiente de concentração e na mesma direção do gradiente de concentração (assim como a Lei de Fick para a difusão). Usando esse modelo, trata-se a dispersão de uma forma análoga à difusão (embora os processos de difusão e dispersão sejam bastante diferentes).

A dispersão mecânica é igual ao produto da velocidade média linear e um fator denominado dispersividade dinâmica (α_L).

$$Dm = \alpha_L v_x \quad (3.40)$$

Onde D_m é o coeficiente de dispersão mecânica, α_L é a dispersividade dinâmica e v_x é a velocidade linear da água subterrânea.

O processo da difusão molecular e da dispersividade mecânica não podem ser separados no fluxo de água subterrânea. A dispersão hidrodinâmica é o termo usado para incluir a difusão molecular e a dispersão mecânica, e representa o processo no qual a pluma de soluto de espalha na direção longitudinal (D_L - ao longo da direção de fluxo da água subterrânea) e na direção transversal (D_T - perpendicular ao fluxo).

$$D_L = \alpha_L v_x + D^* \quad (3.41)$$

$$D_T = \alpha_T v_x + D^* \quad (3.42)$$

Onde D_L é o coeficiente longitudinal da dispersão hidrodinâmica; α_L é a dispersividade hidrodinâmica longitudinal; v_x é a velocidade média linear da água subterrânea; D_T é o coeficiente transversal da dispersão hidrodinâmica; α_T é a dispersividade hidrodinâmica transversal e D^* é a difusão molecular.

O SCBR acomoda a equação de XU & ECKSTEIN (1995) no cálculo da dispersividade hidrodinâmica longitudinal (α_L) em função da escala na qual é definido o domínio de simulação:

$$\alpha_L = 0,83[\log(\text{escala})]^{2,414} \quad (3.43)$$

Onde *escala* é o valor da escala (em metros) adotado no domínio de simulação.

A dispersividade hidrodinâmica transversal pode ser definida como sendo 10% da dispersividade hidrodinâmica longitudinal (BEAR, 1972).

$$\alpha_T = 0,1 \cdot \alpha_L \quad (3.44)$$

A equação unidimensional para a dispersão hidrodinâmica (HOOPES; HARLEMAN, 1967) é dada por:

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (3.45)$$

$$\alpha_x = 0,0175 \cdot L_p^{1,46} \quad (3.46)$$

$$\alpha_y = 0,33 \cdot \alpha_x \quad (3.47)$$

Onde D_L é coeficiente longitudinal da dispersão hidrodinâmica; α_L é a dispersividade dinâmica; v_x é a velocidade média linear da água subterrânea; C é a concentração do soluto e t é o tempo desde o início da entrada do soluto no meio.

O ponto inicial no desenvolvimento de equações diferenciais para descrever o transporte de solutos em meios porosos é considerar a conservação de soluto em um volume elementar fixo no domínio do escoamento. Supondo um volume de controle elementar fixo de volume igual a $dxdy\Delta H$, no domínio do escoamento, e fazendo um balanço de concentração neste volume, pode-se dizer que:

$$\begin{bmatrix} \text{fluxo de} \\ \text{soluto que} \\ \text{entra no} \\ \text{volume} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{fluxo de} \\ \text{soluto que} \\ \text{sai do} \\ \text{volume} \end{bmatrix} \pm \begin{bmatrix} \text{perda ou} \\ \text{ganho de} \\ \text{soluto devido} \\ \text{a reações} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{taxa de} \\ \text{variação de} \\ \text{soluto no} \\ \text{volume} \end{bmatrix} \quad (3.48)$$

Representando, graficamente, os fluxos que entram e saem do volume de controle, tem-se o que está apresentando na Figura 3.5 e na Equação 3.30.

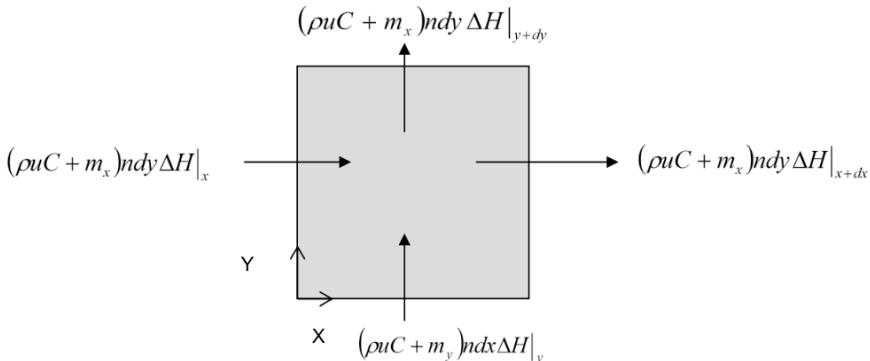


Figura 3.5 – Balanço de concentração no volume de controle.

Onde ρ é a densidade do fluido, n a porosidade, u e v são as componentes da velocidade média intersticial, dadas pela velocidade de Darcy (velocidade média no volume) dividida pela porosidade (n), m_x e m_y é o fluxo de massa nas direções x e y , respectivamente, e C é a concentração de soluto transportada.

Chamando de G o termo de geração ou perda de soluto no volume, substituindo as expressões apresentadas na Figura 3.5 na Equação 3.35, tem-se:

$$\rho u C ndy \Delta H|_x - \rho u C ndy \Delta H|_{x+dx} + \rho v C ndx \Delta H|_y - \rho v C ndx \Delta H|_{y+dy} + m_x ndy \Delta H|_x +$$

$$- m_x ndy \Delta H|_{x+dx} + m_y ndx \Delta H|_y - m_y ndx \Delta H|_{y+dy} + G ndxdydz = \frac{d}{dt} (n \rho C dx dy \Delta H) \quad (3.49)$$

Assumindo a porosidade constante, dividindo a expressão anterior pelo volume de vazios do meio poroso ($ndxdy\Delta H$) e fazendo o limite de dx , dy e dt tender a zero, chega-se a:

$$-\frac{\partial(\rho u C)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v C)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x}(m_x) - \frac{\partial}{\partial y}(m_y) + G = \frac{\partial}{\partial t}(\rho C) \quad (3.50)$$

3.1.3.1 Difusão e Dispersão- Avaliação dos Fluxos – m_x e m_y

O fluxo de massa difusivo é dado por DULLIEN (1992):

$$m = -\rho \bar{D} \cdot \nabla C \quad (3.51)$$

onde \overline{D} é o coeficiente de dispersão hidrodinâmico, um tensor de segunda ordem, de onde se conclui que:

$$\dot{m}_x = - \left(\rho D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + \rho D_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \quad (3.52)$$

$$\dot{m}_y = - \left(\rho D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} + \rho D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \quad (3.53)$$

Substituindo as Equações 3.52 e 3.53 na Equação 3.50, obtém-se:

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) + G \quad (3.54)$$

3.1.3.2 Termos Fonte, Biodegradação e Sorção (Zona Saturada)

O termo chamado de geração ou sumidouro de concentração deve incluir, neste caso, os seguintes fenômenos:

- Decaimento de 1^a ordem (devido à biodegradação);
- Adsorção e dessorção, que são modeladas através do retardo do contaminante em meio à água subterrânea;
- A “geração” através de uma fonte, ou o sumidouro de concentração a partir de bombeamento. Se a água for succionada, tem-se eliminação de concentração.

As expressões para cada um dos três fenômenos mencionados anteriormente são apresentadas, sequencialmente, na equação abaixo.

$$G = - \left[\lambda \rho C + \lambda' \frac{\rho_b}{n} (\rho S) \right] - \frac{\rho_b}{n} \frac{\partial}{\partial t} (\rho S) + \left[\frac{W \rho C}{n \Delta x \Delta y \Delta H} + \frac{\rho_b}{n} \left(\frac{W \rho S}{n \Delta x \Delta y \Delta H} \right) \right] \quad (3.55)$$

Onde λ e λ' são os coeficientes de decaimento de 1^a ordem do contaminante na solução e na fase adsorvida, respectivamente, ρ_b a densidade do aquífero, n a porosidade, S a massa do soluto adsorvida por unidade de massa seca do meio poroso, e W o fluxo volumétrico, que assume sinal negativo se for o caso de succão.

Quando a biodegradação simulada envolve apenas um decaimento de 1^a ordem, pode-se assumir que $\lambda = \lambda'$ (BEAR, 1972; SRINIVASAN; MERCER, 1988), implicando que nestas condições o substrato degrada ou decai na mesma proporção na solução e na fase adsorvida. Sendo assim, assumindo esta igualdade, e substituída a Equação 3.55 na Equação 3.54, chega-se à equação diferencial que descreve o transporte de elementos reativos em um meio poroso saturado.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho C v_i) - \lambda \rho \left(C + \frac{\rho_b}{n} S \right) - \frac{\rho_b}{n} \frac{\partial}{\partial t} (\rho S) + \frac{W \rho}{n \Delta x \Delta y \Delta H} \left(C + \frac{\rho_b}{n} S \right) \quad (3.56)$$

Onde D_{ij} é o tensor dispersão, λ é o coeficiente de decaimento de 1^a ordem, ρ_b a densidade do aquífero, n a porosidade, W o fluxo volumétrico (função de x e y), e S é a massa de soluto adsorvida por unidade de massa seca do meio poroso, que pode ser calculada, conforme visto anteriormente, a partir da isoterma de Freundlich:

$$S = K_d C^b \quad (3.57)$$

Onde K_d é o coeficiente de distribuição e b é um coeficiente obtido experimentalmente. Se $b=1$ (hipótese assumida aqui), a Equação 3.56 é conhecida como isoterma linear. Substituindo a Equação 3.57 em 3.56, obtém-se a equação de transporte:

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} = \frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial(\rho C V_i)}{\partial x_i} \right] - \lambda \rho C + \frac{W \rho C}{n \Delta x \Delta y \Delta z} \quad (3.58)$$

Onde R é chamado fator de retardo, que tem o efeito de retardar as espécies adsorvidas em relação à velocidade advectiva da água subterrânea, representado por:

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{n} K_d \quad (3.59)$$

A favor da segurança, foi implementado no SCBR a equação do transporte de contaminantes assumindo que a biodegradação ocorre somente na fase dissolvida, ou seja, o termo λ' é igual a zero. Desta forma, a equação do transporte dos contaminantes dissolvidos na água subterrânea, assumindo uma cinética de biodegradação de primeira ordem, é representada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho C) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho C V_i) - \lambda \rho C - \frac{\rho_b}{n} \frac{\partial}{\partial t} (\rho S) + \\ &\quad \frac{W \rho}{n \Delta x \Delta y \Delta z} \left[C + \frac{\rho_b}{n} S \right] \end{aligned} \quad (3.60)$$

Introduzindo o fator de retardo R tem-se a seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C) = \frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho C V_i) - \lambda \rho C \right] + \frac{W \rho C}{n \Delta x \Delta y \Delta z} \quad (3.61)$$

O SCBR utiliza uma formulação matemática bidimensional que é resolvida numericamente. Tal metodologia, além de permitir considerar as heterogeneidades no modelo permite tratar a fonte de contaminação como fisicamente é, ou seja, um termo fonte para a equação diferencial. Em geral, as soluções analíticas trazem a “informação” da fonte de contaminação para a equação diferencial (dispersão hidrodinâmica + difusão molecular) a montante, que em alguns casos, embora assumindo valores pequenos, não pode ser desprezada. A solução numérica aqui proposta também permite a solução de problemas físicos que apresentem mais de uma fonte de contaminação no domínio analisado, o que justifica a escolha do método numérico em vez do analítico.

3.1.3.3 Cálculo da Concentração de Contaminantes na Água Subterrânea

A partir do momento que o contaminante chega ao aquífero, seja através da lixiviação a partir da zona não saturada ou de uma fonte diretamente em contato com a água subterrânea, os produtos químicos (p. ex. gasolina, diesel) serão transportados para a água subterrânea de acordo com a lei de Raoult (Equação 3.62). Os contaminantes serão então transportados segundo o fluxo da água subterrânea, de acordo com a equação de Boussinesq (3.14). Os mesmos processos que atuam no fluxo da água subterrânea agirão no transporte dos contaminantes. Entretanto, os contaminantes poderão migrar a uma velocidade igual ou inferior à água subterrânea, devido ao retardo.

3.1.3.3.1 Simulação na zona saturada – Lei de Raoult

A concentração da fase aquosa é calculada pela lei de Raoult:

$$C_w = X \cdot S \quad (3.62)$$

Em que X é a fração molar do composto na mistura de hidrocarbonetos e S é a solubilidade do composto puro em água. Na presença de etanol, o modelo considera o efeito cossolvência (Item 3.1.3.4).

3.1.3.3.2 Balanço de Massa – Volume de controle

Para cada fonte:

Para cada volume de controle i abaixo da fonte:

$$\Delta C_i = \max(a_i C_f - C_i, 0) \quad (3.63)$$

Onde a_i é um fator de cobertura da fonte naquele volume de controle. Se a fonte cobre todo o volume de controle, $a_i=1$, senão é uma razão entre a área da fonte no volume de controle, e a área do volume de controle inteira. Por exemplo, se a fonte só cobre 50% em um determinado volume de controle, $a_i=0,5$. A variável C_i é a concentração do contaminante no volume de controle (kg/m^3) e C_f é a concentração do contaminante na fonte.

Então temos, para cada contaminante c :

$$V_{c,\text{abaixo}} = \sum_i a_i \cdot C_{c,i} \cdot \frac{A_i \cdot \Delta z \cdot n_i}{\rho_c} \quad (3.64)$$

$$V_{c,\text{derramado}} = \min\left(V_{c,\text{fonte}}, \sum_i \Delta C_i \cdot \frac{A_i \cdot \Delta z \cdot n_i}{\rho_c}\right) \quad (3.65)$$

Onde A_i é a área do volume de controle i , Δz é a profundidade de mistura, n_i é a porosidade efetiva e ρ é a densidade do contaminante.

Os volumes são atualizados. Atualização do volume do componente c :

$$V_{c,\text{fonte}} \leftarrow V_{c,\text{fonte}} - V_{c,\text{derramado}} \quad (3.66)$$

Atualização do volume do produto (total):

$$V_{p,\text{fonte}} \leftarrow V_{p,\text{fonte}} - V_{c,\text{derramado}} \quad (3.67)$$

Número de mols do componente:

$$N_c = V_c \cdot \frac{\rho_c}{M_c} \quad (3.68)$$

Número de mols do produto:

$$N_p = V_p \cdot \frac{\rho_p}{M_p} \quad (3.69)$$

(Onde M representa a massa molar do componente ou produto).

Fração molar:

$$x_c = \frac{N_c}{N_p} \quad (3.70)$$

Concentração, pela Lei de Raoult:

$$C_{\text{raoult}} = x_c \cdot S_c \quad (3.71)$$

(Onde S é a solubilidade do componente na água).

Concentração com efeito cossolvêncio:

$$C_i = C_{\text{raoult}} 10^{B \cdot f_v^i_{\text{etanol}}} \quad (3.72)$$

Sendo:

$$B = 0.76 \log K_{ow} - 0.83$$

f_v = fração volumétrica do etanol na fase aquosa

A concentração dos pontos de análise não é usada no transporte.

Destaca-se que a abordagem para múltiplas fontes é a mesma que para uma única fonte (só que realizado múltiplas vezes, uma vez para cada fonte).

3.1.3.3 Modelo conceitual em Rios, Lagos e Barreiras

O SCBR não simula o transporte em rios e lagos. Entretanto, para o balanço de massa dos contaminantes, consideram-se nestes corpos hídricos com concentração inicial igual a zero, em que a concentração no rio/lago será calculada como um reator de mistura completa.

No caso de uma pluma que chega a um rio/lago, a concentração que aporta ao rio é dada por:

$$C \left[\frac{m^3}{s} \right] = \frac{M_{in} \left[\frac{kg}{s} \right]}{Q \left[\frac{m^3}{s} \right]} \quad (3.73)$$

C é a concentração, M é o fluxo de massa de contaminante aportando no rio, e Q é a vazão do rio/lago (especificada pelo usuário).

No caso da existência de barreiras, os volumes de controle em que se encontram a barreira (linear e/ou poligonal) não participam do cálculo do fluxo, ou seja, os volumes de controle pelos quais este elemento passa é igual a zero.

O SCBR gera um gráfico de concentrações no rio/lago em função do tempo, a partir dos seus elementos no módulo “Resultados”. No caso de plumas de contaminantes entrarem em contato com o rio em diversos pontos do rio, o valor da concentração de um contaminante num tempo t no rio é o somatório de todas as concentrações dos volumes de controle daquele contaminante que atingem o rio.

 Uma limitação do modelo na inserção do elemento Rio, e que deve ser considerada pelo usuário, é que sua largura deve ser igual ou maior que a diagonal do volume de controle para que o corpo hídrico seja considerado na simulação.

3.1.3.3.4 Simulação – Concentração Medida

Quando o usuário seleciona “concentração medida”, a concentração é fixa por todo o tempo de simulação, até que o componente se esgote na fonte (respeitando o balanço de massa). Por outro lado, se não for selecionada a concentração medida, a concentração é determinada pela Lei de Raoult. Portanto, varia ao longo do tempo, já que a quantidade de componente está diminuindo na fonte (e consequentemente a fração molar).

O modelo não verifica se a concentração de fase dissolvida digitada pelo usuário excede a solubilidade efetiva do composto. É importante que o usuário introduza uma concentração que não exceda a solubilidade efetiva dos compostos químicos.

O SCBR, na opção concentração medida, calcula o tempo de esgotamento do composto pelo balanço de massa abaixo:

$$\Delta M = (C_{medida} - C_{atual}) \cdot A \cdot h \quad (3.74)$$

Onde M é a massa (kg), C são as concentrações medida (a se atingir) e a concentração atual abaixo da fonte (obtida apenas pelo transporte do passo de tempo anterior), A é a área, e h é a altura da zona de mistura.

O transporte advectivo afeta o balanço de massa, pois afeta C_{atual} , i.e., a concentração atual abaixo da fonte em cada passo de tempo.

No cálculo da fração molar ($X_i = f_v \cdot \frac{PM_{combustivel}}{PM_{composto}} \cdot \frac{M_{composto}}{M_{combustivel}}$) do composto (p.ex. benzeno), o valor da fração volumétrica no combustível (gasolina), no tempo zero, é aquela do benzeno no combustível (p.ex. $f_v=0,000484$).

O modelo verifica qual o volume do composto (p.ex. benzeno) que se transferiu para a água subterrânea e subtrai do valor inicial derramado. O modelo se baseia no volume total de gasolina derramada e o volume total de gasolina também é subtraído da quantidade de benzeno que foi para a água. A fração volumétrica é volume de componente / volume total de produto. No tempo 0, a fração é especificada no produto, depois, os volumes vão sendo atualizados individualmente.

Na simulação do composto químico, o SCBR considera que a fração volumétrica é sempre 100% ao longo de todo o tempo. O modelo no “módulo concentração medida” não usa a Lei de Raoult, transfere apenas o composto para a água subterrânea, na quantidade suficiente para que se atinja a solubilidade máxima na zona de mistura abaixo da fonte.

3.1.3.4 Efeito Cossolvência

Em presença de certos compostos, a solubilidade dos contaminantes pode ser alterada. Um exemplo desse composto é o etanol. Devido à sua infinita solubilidade em água e em compostos orgânicos, ele pode aumentar a solubilidade dos compostos presentes nos combustíveis, propriedade conhecida como efeito cossolvência. Esta propriedade pode aumentar a concentração dos contaminantes na água subterrânea e gerar plumas mais longas dos contaminantes.

A partir do coeficiente de partição octanol-água (K_{ow}), a nova concentração do contaminante considerando o efeito cossolvência é calculada pela seguinte fórmula (CORSEUIL; KAIPPER; FERNANDES, 2004):

$$C_{wb-cos} = 10^{[\log C_{wb} + (0,76 \cdot \log K_{ow} - 0,83) \cdot f_{ETOH}]} \quad (3.75)$$

Em que a fração de etanol na fase aquosa (f_{ETOH}) é calculada com a seguinte fórmula (ZOBY, 2006):

$$f_{ETOH} = \frac{c_{ETOH}}{M_{etanol}} \quad (3.76)$$

3.1.4 Calibração do Modelo de Fluxo Subterrâneo

A calibração do modelo é um passo fundamental na simulação do fluxo, pois avalia como a predição dos valores simulados se relaciona com os valores medidos. Apesar de existirem normas que auxiliam na análise estatística da relação entre valores simulados e medidos, a condição de modelo calibrado depende do usuário do modelo, pois leva em consideração diversos fatores que as análises estatísticas podem não abranger.

O modelo SCBR possui como ferramentas de auxílio na calibração do modelo uma análise gráfica (qualitativa) e uma análise residual (quantitativa) dos valores simulados e medidos, de acordo com o recomendado pelas normas ASTM D5981 de 2008 (*Calibrating a groundwater flow model application*) e ASTM D5490 de 2008 (*Comparing groundwater flow*

(model simulations to site-specific information). Ao gerar o mapa potenciométrico, o SCBR automaticamente apresenta os resíduos entre os valores de carga hidráulica simulados e observados, bem como as seguintes estatísticas descritivas: amplitude, resíduos mínimo e máximo, média residual, média residual absoluta, desvio padrão residual, desvio padrão residual/amplitude, erro quadrático médio (RMS), erro quadrático médio normalizado e coeficiente de correlação.

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

Na análise residual, o **resíduo** (r_i) é calculado a partir da diferença entre valores simulados e medidos.

$$r_i = h_i - H_i \quad (3.77)$$

Onde r_i representa o resíduo do ponto i ; h_i o valor de carga hidráulica simulada no ponto i e H_i o valor de carga hidráulica medida no ponto i .

Os valores dos resíduos podem assumir valores positivos ou negativos e são mostrados em uma tabela como resultados de calibração.

A **amplitude** é a diferença entre o valor máximo e mínimo de carga hidráulica medida dentro do domínio de simulação.

$$A = H_{imax} - H_{imin}$$

Onde A é a amplitude (m); H_{imax} é o valor máximo de carga hidráulica medido dentro do domínio de simulação (m) e H_{imin} é o valor mínimo de carga hidráulica medido dentro do domínio de simulação (m).

Para análise dos valores, o SCBR também calcula a **média residual** (R) e seu **desvio padrão** (s), em que seu cálculo pode ser observado na Equação 3.78 e Equação 3.79.

$$R = \frac{\sum r_i}{n} \quad (3.78)$$

Onde R representa a média dos resíduos; r_i o resíduo para cada ponto i e n o número total de pontos utilizados.

$$s = \left[\frac{\sum (r_i - R)^2}{(n-1)} \right]^{1/2} \quad (3.79)$$

Onde s representa o desvio padrão dos resíduos; r_i o resíduo no ponto i ; R a média dos resíduos e n o número total de pontos utilizados.

A **média residual absoluta** considera apenas o módulo das diferenças e pode ser calculada pela seguinte fórmula:

$$\bar{R} = \frac{\sum |h_i - H_i|}{n} \quad (3.80)$$

A soma do quadrado dos resíduos é dada pela Equação 3.81:

$$R = \sum (h_i - H_i)^2 \quad (3.81)$$

O quociente entre o desvio padrão e a amplitude é dada por:

$$Q = \frac{s}{A} \quad (3.82)$$

A raiz do erro quadrático médio (RMS), raiz do erro quadrático médio normalizado e o coeficiente de correlação são determinadas pelas equações a seguir:

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n R_i^2} \quad (3.83)$$

Sendo:

$$R_i = X_{cal} - X_{obs} \quad (3.84)$$

Onde R_i é o resíduo; n o número de pontos analisados; X_{cal} é o valor calculado (simulado) e X_{obs} é o valor observado de campo.

$$RMS_{normalizado} = \frac{RMS}{(X_{obs})_{max} - (X_{obs})_{min}} \quad (3.85)$$

Onde RMS é o erro médido quadrático; e a diferença entre $(X_{obs})_{max}$ - $(X_{obs})_{min}$ é a amplitude.

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (3.86)$$

Sendo:

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \quad (3.87)$$

Recomenda-se que para garantir que a calibração do modelo de fluxo apresente resultados significativos, a relação entre o Desvio Padrão Residual e a Amplitude deve estar abaixo de 15% (ANDERSON; WOESSNER; HUNT, 2015), e que os valores dos resíduos sejam uma pequena fração da diferença entre o maior e menor valor de carga hidráulica medida em toda a área.

O ajuste das propriedades que influenciam nos valores de fluxo simulado depende do usuário. A partir da análise dos resultados apresentados pelo SCBR, o usuário determinará se o modelo está calibrado ou não. Caso não esteja calibrado, cabe o usuário ajustar as propriedades (e.g.: dimensão do volume de controle, tamanho do domínio de simulação, condições de contorno, valores de carga hidráulica considerados na simulação etc.), e efetuar uma nova simulação até que o modelo possa ser considerado como calibrado.

3.1.5 Equações do Transporte de Contaminantes na Zona Não Saturada

O transporte de contaminantes no solo não saturado considera a migração do contaminante através da zona não saturada apenas sob a forma dissolvida (solubilização dos contaminantes na água que passa através da zona não saturada devido à recarga do aquífero), como lixiviado, e o transporte de vapores a partir do solo para o ar. O modelo utilizado para o transporte do contaminante na lixiviação é o proposto por Van Genuchten & Alves (1982), modelo analítico e unidimensional. Para o cálculo do transporte da volatilização utiliza-se o modelo de caixa (*Box Model*), com o comprimento da caixa igual ao comprimento da fonte (cenário crítico).

O modelo de migração proposto por Van Genuchten & Alves (1982) utiliza as seguintes equações, calculadas linearmente, a partir das variáveis inseridas pelo usuário no SCBR.

A permeabilidade relativa (K_r) é calculada com os dados de entrada q (taxa de infiltração na zona não saturada) e K_{sw} (condutividade hidráulica saturada), através da equação de Darcy para o gradiente unitário:

$$K_r = \frac{q}{K_{sw}} \quad (3.88)$$

 No modelo SCBR (versão 3.25), os parâmetros *Taxa de Infiltração* e *Recarga* atuam de maneiras distintas, sendo o primeiro específico para o transporte de contaminante na zona não saturada (lixiviação), e o segundo, para o modelo hidráulico na zona saturada. Assim, é necessário que o usuário insira um valor de taxa de infiltração (módulo Ambiente) em toda a simulação de fonte de contaminação na zona não saturada.

O coeficiente de distribuição de tamanho do poro (γ) é obtido com a fórmula abaixo (VAN GENUCHTEN; ALVES, 1982), a partir do parâmetro de van Genuchten (n):

$$\gamma = 3 + \frac{2}{(n-1) \cdot (1 - 0,5^{\frac{n}{n-1}})} \quad (3.89)$$

A partir da fórmula da permeabilidade relativa de Brooks & Corey (1964), com os dados de porosidade total (θ_t) e água de constituição (θ_r), pode-se calcular a umidade volumétrica do solo (θ_w), também conhecida como porosidade preenchida de água:

$$K_r = \left(\frac{\theta_w - \theta_r}{\theta_t - \theta_r} \right)^\gamma \quad (3.90)$$

A porosidade total representa o volume do poro que pode ser ocupado por um fluido. Com isso, a porosidade preenchida de ar (θ_a) é obtida através da diferença entre porosidade total (θ_t) e umidade volumétrica (θ_w), também conhecida como porosidade preenchida de água.

$$\theta_t = \theta_a + \theta_w \quad (3.91)$$

A velocidade de percolação pode ser calculada por:

$$\bar{v} = \frac{q}{\theta_w} \quad (3.92)$$

O comprimento para lixiviação (x_m) é a distância que o composto tem para percolar e chegar à zona saturada, ou seja, a distância entre a base da fonte e o nível do lençol. A dispersividade (α_L) é calculada por uma fórmula empírica, dada por:

$$\begin{cases} \ln \alpha_L = -4,933 + 3,811 \cdot \ln x_m & (x_m < 2) \\ \ln \alpha_L = -2,727 + 0,584 \cdot \ln x_m & (x_m \geq 2) \end{cases} \quad (3.93)$$

O coeficiente de dispersão é obtido pelo produto da dispersividade e velocidade de percolação:

$$D = \bar{v} \cdot \alpha_L \quad (3.94)$$

O volume da fonte é calculado pelo produto entre área da fonte e sua espessura (não se considera uma zona de mistura):

$$V = A \cdot L_w \quad (3.95)$$

A massa da fonte é obtida a partir da densidade do solo:

$$m_{fonte} = d_{solo} \cdot V \quad (3.96)$$

A massa de TPH na fonte é obtida a partir da massa de solo na fonte, pela concentração de TPH no solo:

$$m_{TPH} = C_{TPH} \cdot m_{fonte} \quad (3.97)$$

A massa de contaminante se refere ao contaminante que será analisado na planilha (p.ex.: benzeno, tolueno etc.). Ela é calculada a partir da massa da fonte e da concentração do composto no solo da fonte.

$$m_{cont} = C_{cont} \cdot m_{fonte} \quad (3.98)$$

O número de mols (n) do contaminante e do TPH é calculado com a massa molar (MM) do composto e a massa que há na fonte.

$$n_i = \frac{m_i}{MM_i} \quad (3.99)$$

A fração de massa representa a concentração do contaminante no solo, expressa de maneira adimensional. Por exemplo, se houver uma concentração de benzeno no solo de 150 mg/kg (150 mg de benzeno em 1 kg de solo), a fração de massa será dada por:

$$F_{benzeno} = \frac{150 \text{ mg}}{1 \text{ kg}} = \frac{0,150 \text{ g}}{1000 \text{ g}} = 1,5 \cdot 10^{-4} \quad (3.100)$$

A fração molar do contaminante e TPH é a relação entre o número de mols do contaminante e o número de mols de TPH.

$$Fi_{TPH} = \frac{n_i}{n_{TPH}} \quad (3.101)$$

O volume de contaminante na fonte é obtido através de sua massa e massa específica:

$$V_i = \frac{m_{cont}}{\rho_{cont}} \quad (3.102)$$

O coeficiente de difusão efetiva (D_{eff}) na fonte é calculado com a seguinte fórmula:

$$D_{eff} = D_{air} \cdot \left(\frac{\theta_a^{10/3}}{\theta_t^2} \right) + D_{water} \cdot \frac{1}{K_H} \cdot \left(\frac{\theta_w^{10/3}}{\theta_t^2} \right) \quad (3.103)$$

O coeficiente de difusão do ar (D_{air}), o coeficiente de difusão da água (D_{water}) e a constante de Henry (K_H) podem ser obtidos no banco de dados do SCBR.

A concentração de equilíbrio na fase aquosa (C_{ws}) é calculada a partir da fração molar do composto e a solubilidade do composto em água. A concentração (C_{ws}) é verificada com a solubilidade do composto, não podendo ser superior a ela. Caso a concentração seja superior à solubilidade, é considerado como fase livre.

$$C_{ws} = Fi_{TPH} \times S_i \quad (3.104)$$

A concentração que é transportada do não saturado e atinge a interface do nível do lençol é válida para toda a fonte (o não saturado é 1D) e esta vai sendo transportada por advecção e transformações do saturado. O efeito cossolvêncio não é considerado no não saturado.

A concentração na fase vapor na fonte (C_{vs}) é calculada pela Lei de Henry:

$$C_{vs} = K_H \times C_{ws} \quad (3.105)$$

O comprimento do caminho de difusão é a distância do centro da fonte até a superfície, ou seja, distância da metade da espessura da fonte até a superfície.

A taxa de decaimento de massa por volatilização por área é dada por:

$$J_v = D_{eff} \cdot \frac{C_{vs}}{L_d} \quad (3.106)$$

A taxa de decaimento de massa por percolação por área é dada por:

$$J_w = q \cdot C_{ws} \quad (3.107)$$

A taxa de decaimento total é obtida através da soma das duas taxas de decaimento:

$$J_w = J_v + J_w \quad (3.108)$$

3.1.5.1 Teste da Fase Residual

O teste da fase residual é efetuado para verificar a presença de contaminantes em concentrações superiores à de solubilidade, as quais são consideradas como fontes de contaminação, pois podem alimentar a contaminação do aquífero. O teste para detectar a

presença de fase residual é efetuado comparando-se a concentração do contaminante na fase aquosa, equação abaixo (3.109), com a concentração na fase dissolvida pela Lei de Raoult (Equação 3.104):

$$C_{ws} = \frac{C_{cont} \cdot d_{solo}}{d_{solo} \cdot K_d + \theta_w \cdot \theta_a \cdot K_H} \quad (3.109)$$

Se a concentração calculada (C_{ws}) pela equação acima (3.109) for superior à concentração de solubilidade do composto em análise (Equação 3.104), assume-se que há fase residual; e assim, calcula-se a concentração da fase aquosa (lixiviação) na zona não saturada.

 Entretanto, mesmo que a comparação acuse que não há fase residual, ou seja, concentração na fase aquosa é menor que a concentração na fase dissolvida pela Lei de Raoult, o modelo alerta o resultado da análise, e efetuará a simulação das concentrações na zona não saturada se o usuário desejar. Essa condição de simulação se deve ao fato de que é possível detectar concentrações dos contaminantes na zona não saturada que estão acima dos valores orientadores na água subterrânea, e abaixo da concentração de solubilidade do composto.

Quando a fase residual não está presente, assume-se que as concentrações do produto químico estão em equilíbrio, e as perdas por lixiviação e volatilização são calculadas pelas equações abaixo:

$$\beta_w = \frac{q}{(d_{solo} \cdot K_{oc} \cdot F_{oc}) + \theta_w + (\theta_a \cdot K_H) \cdot L_w} \quad (3.110)$$

$$\beta_v = \frac{D_{eff} \cdot K_H}{(d_{solo} \cdot K_{oc} \cdot F_{oc}) + \theta_w + (\theta_a \cdot K_H) \cdot L_d \cdot L_w} \quad (3.111)$$

Onde β_w é a perda por lixiviação; q é a taxa de infiltração; d_{solo} é a densidade do solo; K_{oc} é o coeficiente de partição carbono orgânico-água; θ_w é a porosidade preenchida pela água ou umidade volumétrica; θ_a é a porosidade preenchida pelo ar; K_H é a constante da Lei de Henry; L_w é a espessura da fonte de contaminação; D_{eff} é o coeficiente de difusão efetiva (cm^2/s); e L_d é o comprimento do caminho de difusão (m).

3.1.5.2 Lixiviação

O SCBR considera que os contaminantes migram na zona não saturada sob a forma dissolvida, como lixiviado, a partir da fonte, que se esgota ao longo do tempo. A equação de transporte utilizada na zona não saturada (VAN GENUCHTEN; ALVES, 1982) está abaixo especificada:

$$R \frac{\partial C_w}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C_w}{\partial x^2} - \bar{v} \frac{\partial C_w}{\partial x} - \mu C_w \quad (3.112)$$

Onde C_w é a concentração na fase dissolvida do composto (mg/L); D_x é o coeficiente de dispersão na zona não saturada (cm^2/d); \bar{v} é a velocidade intersticial da água que infiltra

no solo (cm/d); μ é a taxa de biodegradação (1/d); x é a distância abaixo da fonte (medido de forma positiva para baixo) (cm); t é o tempo (dia); e R é o coeficiente de retardamento (-).

Para solucionar a equação de transporte na zona não saturada, o modelo utiliza condições de contorno apresentadas a seguir.

- a) Assume-se que no tempo igual a zero, a concentração imediatamente abaixo da fonte é igual a zero.

$$C_w(x, 0) = 0 \quad (3.113)$$

- b) Assume-se que a concentração abaixo da fonte sofre decaimento ao longo do tempo.

$$C_w(0, t) = C_{w0} \cdot e^{(\beta_t \cdot t)} \quad (3.114)$$

Onde $C_w(0, t)$ é a concentração do percolado que deixa a fonte no tempo t ; C_{w0} é a concentração inicial, β_t é a taxa de perda de massa devido à volatilização e lixiviação, e β_t é o tempo.

- c) Assume que a uma longa distância abaixo da fonte, a concentração do contaminante é igual a zero.

$$\frac{\partial C_w}{\partial t}(\infty, t) = 0 \quad (3.115)$$

A partir das condições de contorno propostas, a solução analítica apresentada por Van Genuchten & Alves (1982) é apresentada abaixo:

$$C_w(z, t) = C_{w0} e^{-\beta_t} B(z, t) \quad (3.116)$$

Sendo:

$$B(z, t) = \frac{1}{2} \exp\left(\frac{(\bar{v} - w)z}{2D_z}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{Rz - wt}{2\sqrt{D_z R t}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{(\bar{v} + w)z}{2D_z}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{Rz + wt}{2\sqrt{D_z R t}}\right) \quad (3.117)$$

$$w = \bar{v} \sqrt{1 + \frac{4D_z}{\bar{v}^2} (\mu - R\beta)} \quad (3.118)$$

Onde D_z é o coeficiente de dispersão vertical, μ é a taxa de biodegradação, R é o coeficiente de retardamento, e \bar{v} é a velocidade intersticial da água de infiltração no solo.

Se houver fase residual, a perda de massa total (β) é obtida através da soma da perda por lixiviação (β_w) e perda por vapor (β_v).

$$\beta_w = \frac{q \cdot M_{TPH} \cdot S_i}{d_{solo} \cdot L_w \cdot F_{TPH} \cdot M_{Mi}} \quad (3.119)$$

$$\beta_v = \frac{D_{eff} \cdot K_H \cdot M_{TPH} \cdot S_i}{F_{TPH} \cdot d_{solo} \cdot L_d \cdot L_w \cdot M_{Mi}} \quad (3.120)$$

$$\beta = \beta_w + \beta_v \quad (3.121)$$

O retardo do contaminante na zona não saturada é dado por:

$$R = 1 + \frac{d_{solo} f_{oc} K_{oc}}{\theta_w} \quad (3.122)$$

Onde d_{solo} é a densidade do aquífero (g/cm^3); f_{oc} é a fração de carbono orgânico no solo não contaminado (adimensional); K_{oc} é o coeficiente de partição carbono orgânico-água (L/kg); θ_w é a porosidade preenchida pela água ou umidade volumétrica ($\text{cm}^3\text{-água}/\text{cm}^3\text{-solo}$). O fluxo de massa de contaminantes que atinge o nível do lençol freático é dado pela Equação 3.123:

$$Q(Lu, t) = q \cdot C(Lu, t) \cdot \left(\frac{L}{1000 \text{ cm}^2} \right) \quad (3.123)$$

Onde $Q(Lu, t)$ é o fluxo de massa no nível d'água em função do tempo ($\text{g/cm}^2/\text{d}$); q é a taxa de infiltração (cm/d); $C(Lu, t)$ é a concentração da fase dissolvida do contaminante no nível d'água e função do tempo (mg/L); e Lu é a distância da fonte ao nível d'água (cm).

3.1.5.3 Modelo de Caixa (Box Model)

O modelo de caixa (*Box Model*) assume que a emissão volátil que sai do solo contaminado entra em uma área de uma caixa diretamente acima do solo (Figura 3.6). A abordagem mais conservadora é igualar o comprimento da caixa ao comprimento da fonte. Supõe-se que esta caixa seja bem ventilada e ocorra a mistura completa do contaminante.

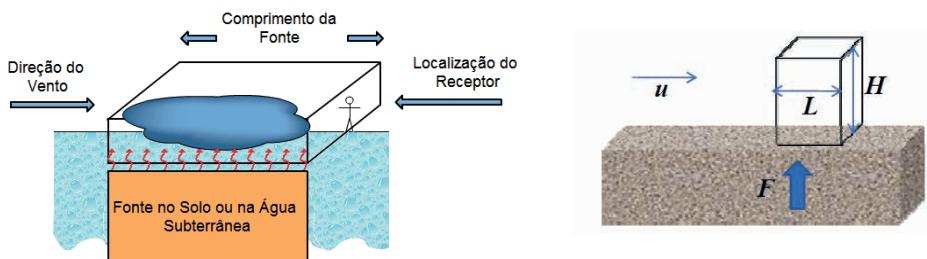


Figura 3.6 – Modelo *Box Model* (zona não saturada).

O cálculo da concentração do contaminante no ar é então dada por:

$$C = \frac{J_v \cdot L}{u \cdot H} \left(\frac{m}{100 \text{ cm}} \right) \quad (3.124)$$

Onde C é a concentração do contaminante no ar (g/cm^3); J_v é a taxa de decaimento de massa por volatilização por área ($\text{g/cm}^2/\text{d}$), L é o comprimento da caixa na direção do vento (m), H é a altura da caixa (m) e u é a velocidade do vento (m/s).

Sendo:

$$J_v = D_{eff} \cdot \frac{C_{vs}}{L_d} (86400 \text{ s}) \quad (3.125)$$

Onde J_v é a taxa de decaimento de massa por volatilização por área ($\text{g}/\text{cm}^2/\text{d}$); D_{eff} é o coeficiente de difusão efetiva (cm^2/s); C_{vs} é a concentração do composto na fase de vapor na fonte (g/cm^3); L_d é o comprimento do caminho de difusão – distância do centro da fonte até a superfície do solo (cm);

$$C_{vs} = C_{ws} \cdot K_H \cdot \left(\frac{L}{1000 \text{ cm}^3} \cdot \frac{g}{1000 \text{ mg}} \right) \quad (3.126)$$

Onde C_{vs} é a concentração do composto na fase de vapor na fonte (g/cm^3); C_{ws} é a concentração de equilíbrio na fase aquosa (Lei de Raoult) (mg/L); e K_H é a constante da Lei de Henry do composto ($\text{mg}/\text{L-vapor})/(\text{mg}/\text{L-água})$.

3.1.5.4 Lente na Zona Não Saturada

No modelo conceitual da zona não saturada a presença de lente só se aplica acima da fonte de contaminação, alterando o fluxo de vapor nessa região (Figura 3.7). Deve ser especificado a espessura da lente, seu material e sua profundidade, pois ela afetará diretamente a taxa de decaimento de massa por volatilização por área. A lente não influencia a migração para a zona saturada, pois o modelo conceitual não prevê a lente embaixo da fonte, apenas acima da fonte. Ainda que a lente seja acima da fonte não influencie diretamente a percolação do contaminante, o processo de infiltração é influenciado pela lente, alterando a concentração do produto dissolvido que atinge a zona saturada.

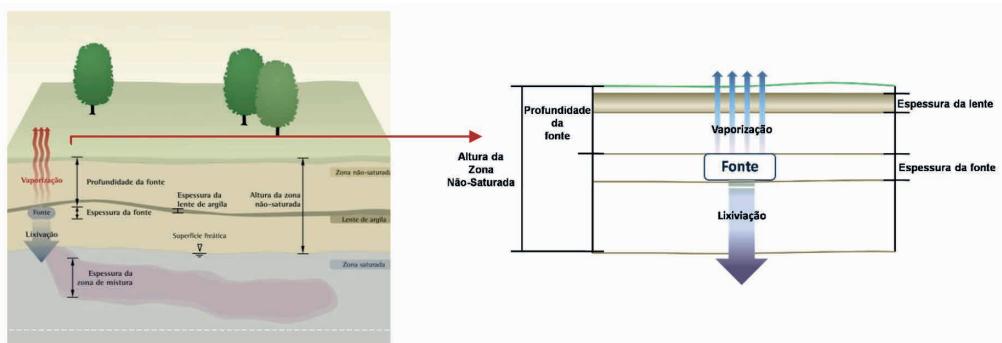


Figura 3.7 – Modelo conceitual da zona não saturada com a presença de lente.

O modelo divide a altura da zona não saturada em 4 camadas:

- Camada / Layer 0:** constituída pelo mesmo tipo de solo escolhido pelo usuário (Módulo *Estudo ou Ambiente*), assume valor de 0,001 m de espessura;
- Camada / Layer 1 (Lente):** camada intermediária que possui um solo diferenciado, lente propriamente dita, e é dimensionada na Aba *Ar*;
- Camada / Layer 2:** camada abaixo da lente e acima da fonte (espessura igual à profundidade da fonte menos as espessuras da lente e da camada 0);

d) Camada / Layer 3: corresponde a espessura do solo abaixo da fonte de contaminação, onde ocorre a lixiviação (igual à altura da zona não-saturada menos a profundidade da fonte e da espessura da lente).

A espessura do solo acima da fonte é dada pela diferença entre a profundidade da fonte (cota superior) e a espessura da lente:

$$h_v = H_{\text{fonte}} - h_{\text{lente}} \quad (3.127)$$

A distância do centro da fonte à superfície do solo é dada por:

$$L_d = H_{\text{fonte}} + \frac{L_w}{2} \quad (3.128)$$

A permeabilidade relativa da lente ($K_{r\text{lente}}$) é calculada com os dados de entrada q (recarga líquida do aquífero) e K_{sw} (condutividade hidráulica saturada da lente), através da equação de Darcy para o gradiente unitário:

$$K_{r\text{lente}} = \frac{q}{K_{sw}} \quad (3.129)$$

O coeficiente de distribuição de tamanho do poro da lente (γ_{lente}) é obtido com a fórmula abaixo (VAN GENUCHTEN; ALVES, 1982), a partir do parâmetro de van Genuchten (n):

$$\gamma_{lente} = 3 + \frac{2}{(n-1)\left(1-0,5\left(\frac{n}{n-1}\right)^{\frac{1}{n-1}}\right)} \quad (3.130)$$

A partir da fórmula da permeabilidade relativa de Brooks & Corey (1964), com os dados de porosidade total (θ_t) e água de constituição (θ_r), pode-se calcular a umidade volumétrica do solo (θ_w), também conhecida como porosidade preenchida de água:

$$K_{r\text{lente}} = \left(\frac{\theta_w - \theta_r}{\theta_t - \theta_r}\right)^{\gamma_{lente}} \quad (3.131)$$

A porosidade total representa o volume do poro que pode ser ocupado por um fluido. Com isso, a porosidade preenchida de ar (θ_a) é obtida através da diferença entre porosidade total (θ_t) e umidade volumétrica (θ_w), também conhecida como porosidade preenchida de água.

$$\theta_t = \theta_a + \theta_w \quad (3.132)$$

O coeficiente de difusão efetiva da lente ($D_{eff\text{lente}}$) é calculado com a seguinte fórmula:

$$D_{eff\text{lente}} = D_{air} \cdot \left(\frac{\theta_a^{10/3}}{\theta_t^2}\right) + D_{water} \cdot \frac{1}{K_H} \cdot \left(\frac{\theta_w^{10/3}}{\theta_t^2}\right) \quad (3.133)$$

O coeficiente de difusão efetiva total é dado pela média harmônica das difusões efetivas. Considerando apenas uma lente acima da fonte, o coeficiente de difusão efetiva total é dado por:

$$D_{efftotal} = \frac{(h_1+h_2)}{\frac{h_1}{D_{eff1}} + \frac{h_2}{D_{eff2}}} \quad (3.134)$$

Em que h_1 é a espessura de solo 1 acima da fonte, h_2 é a espessura de solo 2 acima da fonte, D_{eff1} é o coeficiente de difusão efetiva do solo 1 e D_{eff2} é o coeficiente de difusão efetiva do solo 2.

Portanto, a taxa de decaimento de massa por volatilização por área considerando a lente acima da fonte é dada por:

$$J_{vlente} = D_{eff} \cdot \frac{C_{vs}}{L_d} \quad (3.135)$$

3.1.6 Acoplamento entre a Zona Não Saturada e a Zona Saturada

Termos:

I	- taxa de infiltração	[m/s]
n	- porosidade	[m³/m³]
Δx	- comprimento da célula	[m]
Δy	- largura da célula	[m]
ΔH	- altura da zona de mistura na célula	[m]
Δt	- passo de tempo da simulação numérica discreta	[s]
ρ	- densidade do componente	[kg/m³]
C_p	- concentração atual na célula	[kg/m³]
C_v	- concentração na interface entre a zona não saturada e a saturada [kg/m³]	

Definimos o fluxo que entra a partir do topo da célula como:

$$W = I \cdot \Delta x \cdot \Delta y \quad (3.136)$$

(fluxo volumétrico de água sendo injetada pela zona não saturada) [m³/s]

$$\bar{q} = \frac{\rho \cdot W}{n} \quad (3.137)$$

(fluxo de massa) [kg/s]

Na equação de balanço de massa da concentração:

$$A_p C_p = A_E C_E + A_W C_W + A_N C_N + A_S C_S + A_{NE} C_{NE} + A_{SE} C_{SE} + A_{NW} C_{NW} + A_{SW} C_{SW} + B \quad (3.138)$$

Adiciona-se o termo de fluxo que vem da zona não saturada:

$$A_p C_p = A_E C_E + A_W C_W + A_N C_N + A_S C_S + A_{NE} C_{NE} + A_{SE} C_{SE} + A_{NW} C_{NW} + A_{SW} C_{SW} + \bar{q} C_v + B \quad (3.139)$$

Este fluxo é adicionado no termo B , que anteriormente era:

$$B = \frac{M_P^o C_P^o}{\Delta t} \quad [(\text{kg/s}) \cdot (\text{kg/m}^3)] \quad (3.140)$$

Onde

$$M_P^o = \rho \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta H \quad (3.141)$$

Ficando:

$$B = \frac{M_P^o C_P^o}{\Delta t} + \bar{q} \cdot C_v \quad [(\text{kg/s}) \cdot (\text{kg/m}^3)] \quad (3.142)$$

$$B = \frac{M_P^o C_P^o}{\Delta t} + \rho \cdot W \cdot C_v = \frac{M_P^o C_P^o}{\Delta t} + \rho \cdot \frac{\bar{I} \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot C_v}{n} \quad (3.143)$$

 **Nota:** a massa é transferida para cada volume de controle abaixo da fonte, de acordo com a proporção que a fonte cobre cada volume de controle, de forma que a massa total transferida é M . Logo após a transferência da massa, é resolvida a equação do transporte na zona não-saturada, na sequência a massa dissolvida é transferida para a zona saturada (acoplamento da zona não saturada com a zona saturada).

3.1.7 Mapas 2D: Fluxo Subterrâneo e Transporte de Contaminantes

O SCBR gera mapas 2D da porosidade efetiva e condutividade hidráulica (propriedades do aquífero). Além disso, em relação ao transporte dos compostos químicos, são gerados mapas do coeficiente de biodegradação e do retardo. Todas estas variáveis estão implementadas com o método de interpolação denominado vizinho mais próximo.

O usuário pode estipular para cada poço de monitoramento (ponto de análise) valores diferentes de condutividade hidráulica, porosidade efetiva, densidade do solo e de carbono orgânico. Estes parâmetros são considerados na interpolação das propriedades do aquífero. O valor inserido de condutividade hidráulica e porosidade efetiva, inseridos em “Propriedades Gerais”, e de densidade e carbono orgânico, inseridos em “Sorção”, não são considerados a partir do momento que se tem 1 valor medido dos referidos parâmetros em um ponto de análise.

No caso do coeficiente de biodegradação, o usuário pode estipular um coeficiente de biodegradação para um determinado composto que é usado em todo o domínio de simulação. Se houver volumes de controle com diferentes coeficientes de biodegradação, por exemplo, no caso de áreas reativas, cada volume de controle usa o seu valor de decaimento (λ).

O retardo é calculado conforme a Equação 3.59, a não ser que o usuário especifique na simulação do contaminante um valor específico para o retardo. Se esta especificação for realizada, os valores inseridos nos pontos de análise referentes ao retardo (densidade do solo e fração de carbono orgânico) são ignorados pelo modelo.

O valor da dispersividade é igual para toda a área de simulação.

3.1.8 Configuração do Simulador

As definições do simulador podem ser visualizadas na seleção do item “Configurar Simulador”.

- Número de volumes

Direção i: Define o refinamento da malha na direção i (eixo x).

Direção j: Define o refinamento da malha na direção j (eixo y). O ideal é que sejam utilizadas malhas quadradas, isto é, malhas com volumes de controle com mesmo tamanho em ambas as direções. Para isso, recomenda-se que a razão entre Direção i e Direção j seja igual à razão entre a largura e o comprimento da área de simulação. Quanto maior o refinamento da malha, maior será a precisão da simulação e o tempo que o modelo demorará a simular a pluma.

Parâmetros para o cálculo da velocidade

- Parâmetros GMRES:

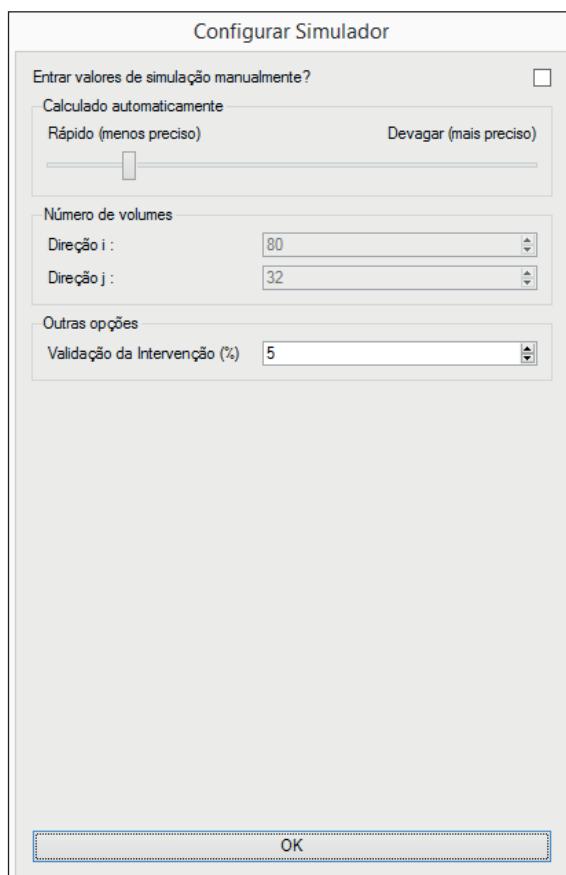


Figura 3.8 – Configurar simulador I.

Tolerância: Tolerância é um parâmetro que definirá o limite a partir do qual a convergência de uma iteração é aceitável. Recomenda-se que o valor seja inferior a 0.0001. Quanto menor a tolerância, maior será a precisão da simulação e o tempo que o modelo demorará a simular a pluma.

Limite de Iterações: Define o número máximo de iterações que uma simulação executará. Quanto maior o limite de iterações, maior será a precisão da simulação e o tempo que o modelo demorará a simular a pluma. Se a simulação passar desse número de iterações, significa que não convergiu.

Reinício: Parâmetro avançado do GMRES. Reinício significa a cada quantas iterações vai fazer um reinício. Quanto menor for este número, menos memória será usada. Por outro lado, mais iterações serão necessárias.

- Parâmetros Newton-Raphson:

Usa Newton-Raphson?: Indica se será usado o método Newton-Raphson ou não.

Tolerância: Tolerância é um parâmetro que definirá o limite a partir do qual a convergência de uma iteração é aceitável. Recomenda-se que o valor seja inferior a 0.0001. Quanto menor a tolerância, maior será a precisão da simulação e o tempo que o modelo demorará a simular a pluma.

Limite de Iterações: Define o número máximo de iterações que uma simulação executará. Quanto maior o limite de iterações, maior será a precisão da simulação e o tempo que o modelo demorará a simular a pluma. Se a simulação passar desse número de iterações, significa que não convergiu.

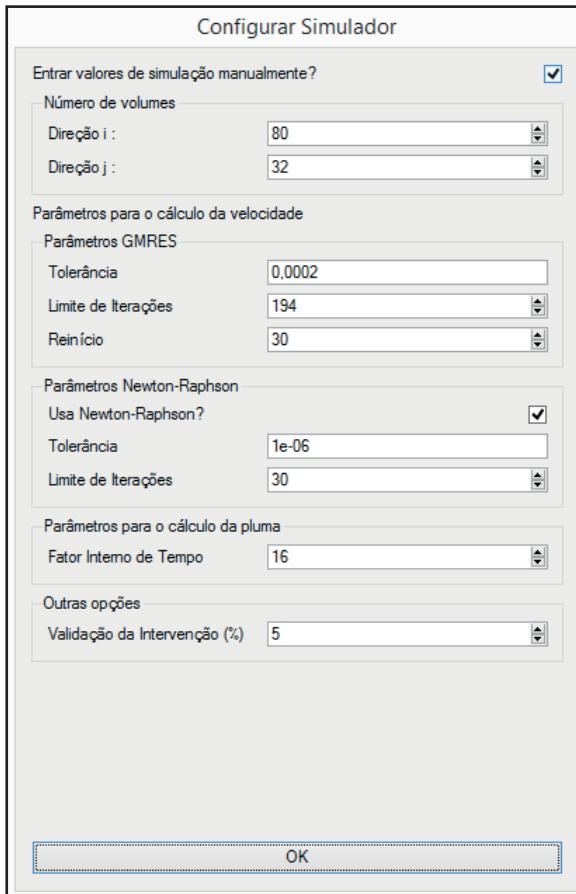


Figura 3.9 – Configurar simulador II.

- Parâmetros para o cálculo da pluma:

Fator Interno de Tempo: O SCBR divide cada intervalo de tempo definido em Estudo/Tempo em subintervalos. O parâmetro Fator Interno de Tempo definirá em quantos subintervalos o SCBR dividirá cada intervalo de tempo. Recomenda-se que cada intervalo de tempo seja próximo de 3 dias.

- Outras opções:

Validação da Intervenção (%): Este parâmetro define o percentual para validação da intervenção.

3.2 Métodos de Amostragem

De acordo com o Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas da CETESB (SÃO PAULO, 2021), o tipo de amostragem para a investigação ambiental de solos e águas

subterrâneas a ser adotado depende dos objetivos predefinidos e do grau de precisão desejado, pois as amostras devem ser as mais representativas possíveis, levando-se em conta também toda informação pré-existente da área.

A metodologia de amostragem do solo que consta no Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas da CETESB é baseada no documento da U.S. EPA (2004) - *Soil Sampling Quality Assurance – Users Guide*. A adoção de um esquema de amostragem depende se a distribuição dos contaminantes na área é conhecida, se é difusa e gradiente, se é concentrada em pontos e do tipo de substância presente. Serão abordadas as amostragens: direcionada, aleatória simples, aleatória estratificada e sistemática (com malha quadrangular e triangular). Deve-se salientar que os tipos de amostragem podem ser combinados, não sendo obrigatória a utilização de apenas um tipo de amostragem. A seguir são apresentados os métodos de amostragem utilizados no SCBR.

3.2.1 Amostragem Direcionada

Neste tipo de amostragem a locação dos pontos é realizada de acordo com o conhecimento prévio da área e evidências visuais. Este tipo de amostragem pode ser afetado por um grande número de fatores, podendo gerar resultados tendenciosos. Portanto, vê-se necessário analisar caso a caso para determinar se a amostragem direcionada pode ser usada como único método ou concomitantemente com os demais.

3.2.2 Amostragem com Distribuição Aleatória Simples

Este método pode ser aplicado em áreas com pouca informação prévia da área, assumindo uma distribuição irregular das zonas contaminadas. Os pontos serão distribuídos aleatoriamente na área de amostragem, simplificando a análise estatística. Entretanto, é um método muito dispendioso e difícil de ser justificado.

3.2.3 Amostragem com Distribuição Aleatória Estratificada

A distribuição aleatória estratificada é similar à aleatória simples, entretanto a área de amostragem é dividida em subáreas, as quais terão um esquema de distribuição aleatória dos pontos em cada uma delas, assegurando que cada subárea possua uma investigação. Na amostragem aleatória (simples ou estratificada), os pontos podem ser alocados muito próximos, gerando redundância nas informações, pois a correlação espacial entre as propriedades do solo não é considerada. Outra consideração que deve ser feita ao optar por este tipo de amostragem é a adequação da malha à área de amostragem no SCBR. Dependendo do espaçamento da malha adotado e da posição geográfica da área amostrada, os pontos podem ser alocados fora da área de amostragem, havendo necessidade de alterar o tamanho da malha ou remover os pontos alocados fora da área de amostragem, de maneira direcionada.

3.2.4 Amostragem com Distribuição Sistemática

A amostragem sistemática faz a distribuição dos pontos de acordo com uma malha, dividindo a região em subáreas, evitando o problema de coleta de amostras em pontos muito próximos. O SCBR possui as opções de malha quadrada e triangular, em que os pontos são alocados nos nós da malha triangular e no centro da malha quadrada. No documento da CETESB (SÃO PAULO, 2021) não há indicação para colocar os pontos amostrais (no centro ou nós), entretanto há figura indicativa mostrando que para a malha quadrada os pontos localizam-se no centro e para malha triangular, nos nós. Na norma em que se baseia o Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas da CETESB (SÃO PAULO, 2021), U. S. Environmental Protection Agency (U.S. EPA, 1991), há a descrição de que em uma distribuição sistemática, os pontos de amostragem deverão ser alocados nos nós, independentemente do tipo de malha utilizada.

A vantagem deste tipo de amostragem é a praticidade na implantação, podendo ser complementada com uma amostragem direcionada. A desvantagem deste método é a ocorrência de obstruções que impeçam a locação do ponto, em que neste caso o ponto deverá ser relocado para o ponto mais próximo possível do originalmente demarcado. De acordo com a U.S. EPA (1991), a melhor malha amostral é a triangular, pois é a que fornece maior probabilidade de se encontrar *hot spots* com o menor número de pontos amostrados. Entretanto, este mesmo documento afirma que a malha retangular é mais facilmente aplicável, não havendo significativa diferença de probabilidade de encontrar *hot spots* em relação à malha triangular.

3.2.4.1 Cálculo da probabilidade de encontrar *hot spots*

A probabilidade de encontrar *hot spots* é feita de acordo com o descrito por Gilbert (1987), em que se baseia nas dimensões da malha de amostragem e no comprimento e largura do *hot spot*. Como simplificação, determina-se o *hot spot* como sendo uma elipse, de diâmetro maior a e diâmetro menor b (Figura 3.10).

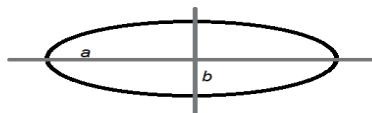


Figura 3.10 – Forma da elipse que representa a pluma de contaminação, com diâmetro maior a e diâmetro menor b .

A seguir serão mostrados os passos para o cálculo da probabilidade de encontrar *hot spots*:

- Determinar o tamanho do diâmetro do menor *hot spot* a ser detectado (L), dado pela metade do comprimento do maior diâmetro da elipse ($L = a/2$).
- Especificar a forma do *hot spot* (S), dada por: $S = \frac{\text{menor diâmetro (b)}}{\text{maior diâmetro (a)}}$
- Especificar uma probabilidade β de não encontrar um *hot spot*.
- Escolher o tipo de malha (triangular ou quadrangular) e calcular a relação L/G , em que G representa o espaçamento da malha utilizada. Optar pelo gráfico adequado para encontrar o valor de β .

Para o cálculo da probabilidade de se encontrar *hot spots*, foi implementado no SCBR o método descrito por Gilbert (1987), que se baseia nos diâmetros da elipse do *hot spot*, no tipo de malha a ser adotado e encontra o valor de probabilidade em um ábaco de probabilidades (GILBERT, 1987).

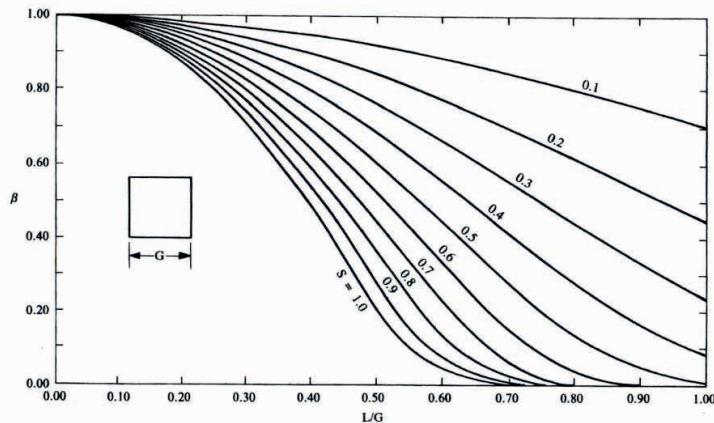


Figura 3.11 – Malha quadrada: relação entre β (probabilidade de não encontrar um *hot spot*) e L/G (metade do diâmetro maior da elipse sobre tamanho da malha).

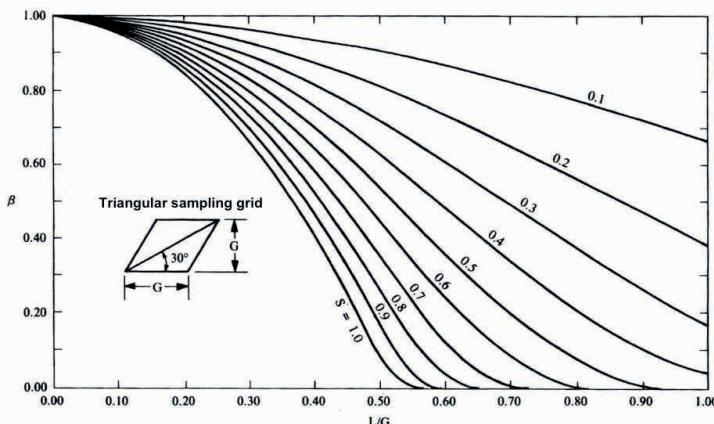


Figura 3.12 – Malha triangular: relação entre β (probabilidade de não encontrar um *hot spot*) e L/G (metade do diâmetro maior da elipse sobre tamanho da malha).

Observar que $0 < S \leq 1$ e quando $S = 1$, o *hot spot* tem a forma de um círculo. Caso não se conheça a forma do *hot spot*, recomenda-se utilizar $S = 0,5$.

3.2.4.2 Exemplo

Determine qual a melhor malha (quadrada ou triangular) para encontrar um *hot spot* na forma de uma elipse, com 5 m de diâmetro menor e 10 m de diâmetro maior. Sabe-se que o espaçamento da malha é de 20 m.

Resolução:

A partir do enunciado, podem-se obter os seguintes dados:

$$L = \frac{10}{2} = 5\text{m} \quad S = \frac{5}{10} = 0,5 \quad \frac{L}{G} = \frac{5}{20} = 0,25 \quad (3.144)$$

A partir dos gráficos (Figura 3.11 e Figura 3.12), os valores de β podem ser determinados:

Como $L/G=0,25$ e $S=0,5$, o valor de β para a malha quadrada é 0,90 e para a malha triangular é 0,87. Portanto, a probabilidade de encontrar um *hot spot* é dada por:

$$P_{\text{quadrada}} = 1 - 0,90 = 0,10 = 10\%$$

$$P_{\text{triangular}} = 1 - 0,87 = 0,13 = 13\% \quad (3.145)$$

A partir destes resultados, conclui-se que o melhor tipo de malha para encontrar um *hot spot* com as características apresentadas é a malha triangular, pois é a que possui maior probabilidade de encontrar um *hot spot*.

3.3 Cálculo do Risco à Saúde Humana

Neste tópico é apresentada uma breve introdução sobre a avaliação de risco à saúde humana. Também são incluídos alguns conceitos e definições, mostrando como o SCBR pode ser utilizado nos procedimentos de avaliação de risco à saúde humana.

A avaliação de risco à saúde humana representa uma importante etapa do gerenciamento ambiental em áreas contaminadas ou em áreas que possam ser impactadas por derramamentos de petróleo e derivados. Trata-se do processo de estimar a natureza e a probabilidade de ocorrência de efeitos adversos à saúde em seres humanos que podem estar expostos aos produtos químicos em meios ambientais contaminados, no cenário atual ou futuro. A tomada de decisão baseada no risco é um mecanismo que permite a definição de ações corretivas adequadas considerando o risco potencial de uma área específica, possibilitando assim, uma melhor alocação dos recursos para as áreas que representam maior necessidade, comprovada com base na quantificação do risco. Para explicar isso melhor, uma avaliação de riscos para a saúde humana aborda questões tais como:

- Que tipos de problemas de saúde podem ser causados e estresse ambiental pela liberação de produtos químicos no meio ambiente?

- Qual é a chance de as pessoas terem problemas de saúde quando expostas a diferentes níveis de contaminação ambiental?
- Existe um nível aceitável abaixo do qual algumas substâncias químicas não representam um risco para a saúde humana?
- Em que níveis e por quanto tempo as pessoas poderão estar expostas aos compostos químicos liberados no meio ambiente?
- Algumas pessoas poderão estar mais suscetíveis à contaminação ambiental?

As respostas a estas perguntas podem ajudar os tomadores de decisão a entenderem melhor os possíveis riscos à saúde humana e as ações necessárias para minimizar estes riscos.

3.3.1 Metodologia

A metodologia de avaliação de risco à saúde humana descreve uma sequência lógica de etapas a serem cumpridas desde a suspeita da contaminação até o alcance das metas legais para encerramento das atividades de remediação. As etapas da avaliação de risco podem ser personalizadas para se adequarem a uma determinada região impactada (ou que possa vir a ser impactada). Dentro de um processo decisório, a metodologia de avaliação de riscos funciona como embasamento científico para tomada de decisões que priorizam as áreas a serem remediadas com base no risco que cada área representa à saúde pública e ao meio ambiente, permitindo a seleção de parâmetros de remediação mais viáveis economicamente. No caso de áreas ainda não impactadas, a aplicação desta metodologia permite que sejam tomadas medidas preventivas para minimização dos riscos e determinação das áreas mais críticas. Desta forma, a alocação de recursos se dá de forma mais racional. Estudos realizados nos EUA apontam reduções de 30% a 50% dos custos de avaliação e remediação em locais contaminados com o uso da metodologia americana de avaliação de risco (U.S. EPA, 2023).

Países como a Holanda, Estados Unidos, Canadá e Alemanha já adotam padrões de remediação baseados no risco (CASARINI, 1996), sendo a Holanda e os Estados Unidos os países nos quais esta prática se encontra mais consolidada. Nestes países, a avaliação de risco é usada na caracterização e avaliação da exposição, seleção de fatores de exposição e de estudos toxicológicos dos compostos químicos de interesse seguidos do uso de modelos matemáticos de transporte e transformação dos contaminantes. Os resultados de estudos toxicológicos e os modelos matemáticos, usados conjuntamente, permitem a previsão das concentrações dos contaminantes bem como o grau de remediação necessário para que os padrões de risco não sejam extrapolados e a saúde das populações envolvidas não seja ameaçada.

Nos Estados Unidos, a metodologia de avaliação de risco utilizada nos processos decisórios é chamada de ação corretiva baseada no risco ou RBCA. A RBCA é uma

metodologia genérica de avaliação e remediação de locais contaminados por produtos perigosos. Especificamente para contaminações com derivados de petróleo, foi desenvolvido pela ASTM - *American Society for Testing and Materials* - um guia especial denominado RBCA para locais contaminados por hidrocarbonetos de petróleo (ASTM, 2015).

No Brasil, a Resolução CONAMA nº 420/2009 (BRASIL, 2009) estabelece a realização da avaliação de risco à saúde humana como parte integrante do gerenciamento de áreas contaminadas, mas não define a metodologia a ser utilizada. Atualmente, encontra-se implementada no SCBR (versão 3.25) a metodologia da Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB), através das equações presentes nas *Planilhas para Avaliação de Risco em Áreas Contaminadas sob Investigação* (SÃO PAULO, 2023). Além desta metodologia, o usuário pode inserir novas metodologias de cálculo de risco à saúde humana (i.e.: ABNT, ASTM, EPA etc.), caso seja de seu interesse. O banco de dados físico-químico e toxicológico utilizado no cálculo do risco e da CMA está atualizado até a presente divulgação deste documento, com base na atualização do *Regional Screening Level* (RSLs) da U.S. EPA (2023) de novembro de 2023.

3.3.2 Definição dos Cenários

Os derramamentos de compostos tóxicos, como o petróleo ou seus derivados, podem ocorrer em dois cenários básicos. O primeiro cenário é definido por derramamentos em corpos hídricos superficiais como o mar, estuários, rios ou lagos. Neste caso, geralmente é dada ênfase a metodologias e técnicas que incluem ações emergenciais de contenção, devido a elevadas taxas de deslocamento dos contaminantes no meio aquático. O SCBR não é aplicável ao cenário acima descrito.

O segundo cenário é definido por possíveis derramamentos que venham a ocorrer no ambiente terrestre, podendo comprometer o ar, o solo, as águas subterrâneas e superficiais. Ao contrário do que acontece no primeiro cenário, o deslocamento dos contaminantes que se infiltram no solo é relativamente lento, resultando em metodologias emergenciais e de avaliação de riscos conceitualmente diferentes. O SCBR é aplicável aos cenários nos quais a contaminação tenha atingido as águas subterrâneas, formando plumas de contaminantes dissolvidos que tendem a migrar com o fluxo das águas subterrâneas. Ele também pode calcular o risco em casos que se possua concentração medida de contaminantes no solo e água subterrânea.

3.3.3 Fonte, transporte e receptor

As metodologias de avaliação de risco geralmente estabelecem que um derramamento que atingiu as águas subterrâneas seja definido através de um cenário caracterizado em termos de uma fonte de contaminação, mecanismos de transporte e receptores, como ilustrado na Figura 3.13. A fonte de contaminação representa o ponto

de origem do derramamento. Geralmente, é o local onde são encontradas as mais altas concentrações dos contaminantes. Os mecanismos de transporte representam os mecanismos que resultam na transferência de massa dos contaminantes através do solo, água ou ar, para uma posição relativa ao receptor. O receptor é um ponto que representa risco ecológico ou à saúde humana, cuja denominação mais comum é ponto de exposição. Os poços de abastecimento de água, lagos, mangues, rios, estuários e todos os elementos ambientais que tem comunicação com as águas subterrâneas são exemplos de elementos passíveis de caracterizarem pontos de exposição (POE).

Uma avaliação de risco considerando os elementos apresentados no esquema da Figura 3.13 pode resultar na adoção de medidas corretivas baseadas no risco, as quais poderão incluir:

- A remoção ou tratamento da fonte de contaminação;
- A interrupção do transporte dos contaminantes ao receptor;
- O controle das atividades no ponto de exposição ou a sua remoção.



Figura 3.13 – Modelo conceitual de exposição.

A adoção de uma destas medidas evita que o receptor (ponto de exposição potencial ou real) seja atingido pela contaminação. O SCBR, durante o processo de avaliação de risco, pode auxiliar a tomada de decisão sobre qual é a medida mais efetiva a ser adotada, ou se é realmente necessária alguma intervenção, para evitar a contaminação do receptor.

3.3.4 Caracterização da Exposição

Para definição das metas de remediação de um local, é necessário que se construa um cenário identificando a fonte de contaminação, a existência de mecanismos de transporte e a identificação dos receptores reais ou potenciais. Desta forma, é possível determinar as rotas preferenciais de migração dos contaminantes, se a exposição é crônica ou aguda e se existe a possibilidade de contato direto ou indireto dos poluentes com seres humanos.

Tendo como origem uma fonte de contaminação, parte dos poluentes pode se adsorver ao solo, particionar para o ar através de volatilização, ou para água subterrânea através de solubilização, em função do contato direto com água do subsolo ou devido à lixiviação. Em derramamentos no solo superficial também é possível que ocorraescoamento dos contaminantes em direção aos cursos de água, em função da permeabilidade e da declividade do terreno. No caso de volatilização, os contaminantes têm como mecanismo de transporte o ar atmosférico, podendo ocasionar a inalação ou ingestão de particulados

contendo poluentes por indivíduos presentes na área de influência da contaminação. Quando os contaminantes atingem a água subterrânea, o principal mecanismo de transporte é o fluxo na região saturada do aquífero. Neste caso, o contato com um indivíduo poderá ser o contato dérmico ou a ingestão da água, mesmo que a fonte de contaminação esteja afastada. A Figura 3.14 apresenta as principais vias de exposição relacionadas ao ar, água subterrânea e o solo.

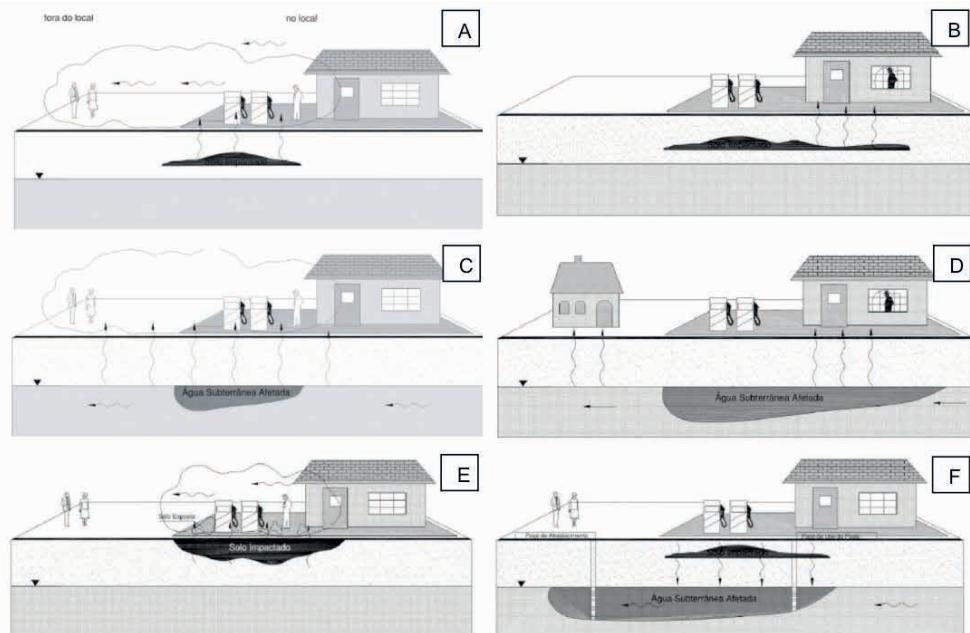


Figura 3.14 – Vias de exposição (SÃO PAULO, 2006). (A) Inalação em ambientes abertos a partir do solo subsuperficial; (B) Inalação em ambientes fechados a partir do solo subsuperficial; (C) Inalação em ambientes abertos a partir da água subterrânea; (D) Inalação em ambientes fechados a partir da água subterrânea; (E) Ingestão, contato dérmico e inalação de vapores e partículas a partir do solo superficial; (F) Ingestão e contato dérmico a partir da água subterrânea contaminada.

3.3.5 Definição das Concentrações Máximas Aceitáveis (CMA)

Na metodologia de avaliação de risco, após a definição dos cenários nos quais estão incluídos os derramamentos, é possível estabelecer as concentrações máximas aceitáveis (CMA) para um local impactado. No caso em que os dados analíticos coletados em uma área contaminada forem superiores aos padrões orientadores estabelecidos na legislação ambiental ou na ausência de valores orientadores, devem ser estabelecidos as CMA.

As CMA são determinadas através de simulações em modelos matemáticos, nos quais são utilizados como entrada de dados informações específicas do local: características da via de exposição (tipo, localização, tempo de permanência), características físico-químicas dos contaminantes, características físicas do local (características hidrogeológicas, velocidade e direção dos ventos, etc.), localização das fontes de contaminação e parâmetros de risco

toxicológico do composto químico de interesse. De forma prática, as CMA representam as concentrações limites de um contaminante na fonte que, se alcançadas, determinarão risco a um ponto de exposição específico, real ou potencial. As CMA são ajustadas para que os contaminantes não excedam o risco limite no ponto de exposição, como, por exemplo, não ultrapassem o risco de câncer de 1×10^{-5} . Estas concentrações limites são específicas para o local impactado, pois dependem do tipo de contaminante, da existência ou não de mecanismos de transporte, da localização e das características dos pontos de exposição.

Os pontos de exposição são os principais fatores de referência na determinação das CMA, podendo ser reais (cenário atual) ou potenciais (futuros). Com os padrões específicos para o local comparados aos dados de monitoramento da área impactada para um determinado período, é possível estabelecer a necessidade de: medidas de remediação, maior aprofundamento nas investigações do local e medidas sobre os pontos de exposição. A Figura 3.15 ilustra os pontos de exposição como os principais fatores na determinação das CMA.

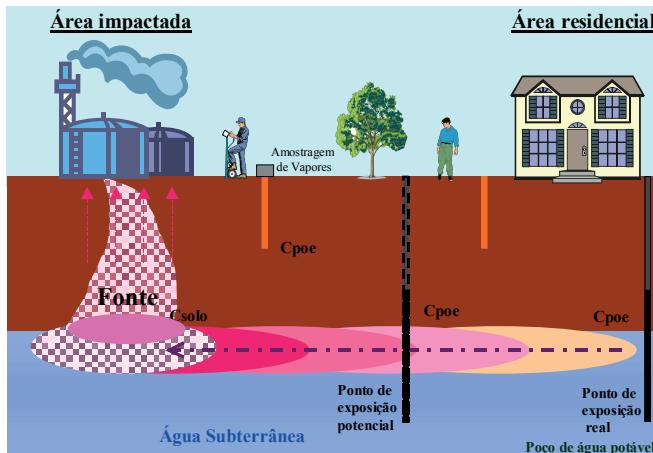


Figura 3.15 – Principais fatores na determinação das CMA nos pontos de exposição.

3.3.6 Quantificação do Risco à Saúde Humana

De acordo com o tipo de efeito adverso que a substância química pode causar ao ser humano, o risco pode ser do tipo carcinogênico ou não carcinogênico. Esta distinção é de acordo com as propriedades toxicológicas dos contaminantes.

As concentrações de exposição das substâncias químicas de interesse utilizadas na quantificação do risco podem ser estimadas utilizando-se os:

- Dados de concentrações medidas dos meios afetados pela contaminação, quando se dispõem de tais informações; ou
- Dados obtidos por meio de simulação matemática do transporte de contaminantes.

Já o cálculo do ingresso corresponde à quantificação da carga de substâncias químicas que ingressam no organismo exposto, considerando cada caminho de exposição identificado, e é geralmente estimado por meio de uma equação genérica:

$$I = C \cdot FE \quad (3.146)$$

Onde I é o ingresso ou quantidade de contaminante que ingressa no organismo humano por uma via de ingresso [mg.(kg.dia) $^{-1}$]; C é a concentração do contaminante medido ou simulado no meio de exposição [mg.L $^{-1}$]; e FE é o fator de exposição [L.(kg.dia) $^{-1}$].

A partir da dose de ingresso (I) e do fator de carcinogenicidade (SF) pode-se calcular o risco para substâncias químicas que manifestam efeitos carcinogênicos no organismo humano (Equação 3.147). Este risco representa um incremento da probabilidade de um indivíduo desenvolver câncer ao longo do tempo de sua vida, como resultado de um evento de exposição a uma substância química de interesse que potencialmente gere câncer.

$$Risco = I_n \cdot SF \quad (3.147)$$

Onde $Risco$ é o Risco Carcinogênico [adimensional]; I_n é a Dose de Ingresso para o cenário de exposição “ n ” calculado através da Equação 3.148 [mg.(kg.dia) $^{-1}$]; e SF é o Fator de Carcinogenicidade – valor tabelado para cada substância químico em função do caminho de exposição [(mg/(kg.dia) $^{-1}$]].

Os efeitos não carcinogênicos associados a um evento de exposição em áreas contaminadas são avaliados por meio da comparação da dose de ingresso (I) com uma dose de referência (RfD) para um período de exposição similar.

$$HQ = \frac{I_n}{RfD_i} \quad (3.148)$$

Onde HQ é o Quociente de Perigo não Carcinogênico [adimensional] e RfD_i é a Dose de Referência para a via de ingresso i . Se HQ é maior que 1, existe um perigo de ocorrência de efeitos não carcinogênicos adversos à saúde humana.

No software SCBR (versão 3.25), os mapas de risco (carcinogênico e não carcinogênico) são calculados a partir da concentração inserida em cada unidade de exposição definida pelo usuário. Uma Unidade de Exposição representa a área geográfica com características físicas, de receptores e de contaminação semelhantes em toda a sua extensão, e na qual o receptor de interesse entra em contato com o meio contaminado durante todo o período de duração da exposição. A avaliação de risco à saúde humana bidimensional com o software SCBR exige a definição de unidades de exposição para a distribuição espacial da quantificação do risco. A definição das Unidades de Exposição no SCBR pode ser realizada de duas formas: (a) por meio de processo direcional, ou seja, o usuário define os vértices das poligonais conforme o julgamento técnico ou (b) a definição é realizada pelo próprio SCBR, pelo método de polígonos de Thiessen. O método,

também conhecido como Diagrama de Voronoi, consiste em atribuir uma região ao ponto de referência de concentração mais próximo, conforme ilustrado na Figura 3.16.

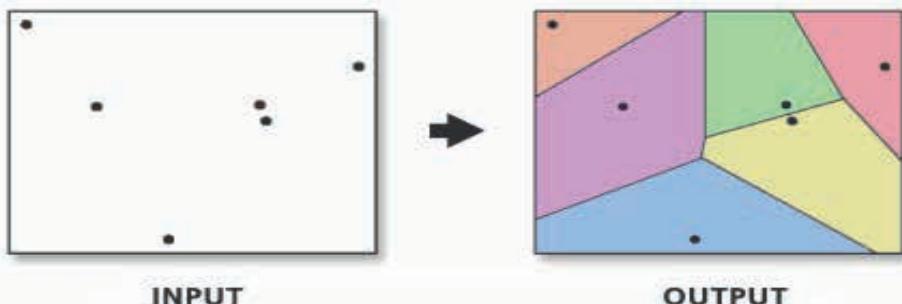


Figura 3.16. Representação gráfica do método dos Polígonos de Thiessen.

3.3.6.1 Quantificação do Risco à Saúde Humana por concentrações simuladas na água subterrânea

Para a água subterrânea, a quantificação do risco pode ser realizada tanto por concentrações medidas (fórmulas de 3.146 a 3.148), quanto por concentrações simuladas. Quando utilizados valores provenientes da simulação, o SCBR utiliza para a geração de mapas de riscos, a concentração simulada para todo o período de tempo, e em cada volume de controle, de acordo com o método selecionado pelo usuário: *Máxima*, *UCL 95*, *UCL 99* ou *Variável*.

Cabe destacar que o valor da concentração simulada em cada volume de controle utilizada no cálculo do risco à saúde humana depende do método selecionado, e do intervalo de saída (mensal, anual, diária etc.) escolhido pelo usuário no módulo Estudo. Assim, cabe o usuário avaliar o tipo de concentração simulada que deseja para a quantificação dos riscos (*Máxima*, *UCL 95*, *UCL 99* ou *Variável*) e o intervalo de saída do simulador que melhor se adeque ao modelo conceitual elaborado.

· Concentração Máxima

Este método utiliza como concentração para o cálculo do risco à saúde humana, a máxima concentração simulada ao longo do tempo de simulação, em cada volume de controle.

· UCL 95 e UCL 99

O limite superior de confiança (*Upper Confidence Limit - UCL*) de uma média é definido como um valor que, quando calculado aleatoriamente e repetidamente para subconjuntos de dados, resultará em um valor igual ou superior à média em X% das vezes. A UCL fornece uma estimativa conservadora da concentração média (tendência central), pois representa o resultado da soma da média com o desvio-padrão da amostra. Se a variabilidade dos dados não for elevada, ela será inferior à concentração máxima.

No SCBR estão disponíveis as opções de UCL 95 e UCL 99, que representam, respectivamente, limites superiores de confiança de 95% e 99%. Portanto, tendo o usuário escolhido uma dessas opções, é calculada a UCL (95 ou 99) considerando que a distribuição dos dados não é paramétrica, isto é, somente distribuições livres. Em relação aos testes não paramétricos, foi escolhido a desigualdade de Chebyshev (U.S. EPA, 2002), motivada pela cobertura que o método oferece para uma gama de distribuições livres. Abaixo segue a formulação utilizada para o cálculo da UCL (95% ou 99%):

$$UCL_{1-\alpha} = \bar{X} + \left[\left(\sqrt{\frac{1}{\alpha}} - 1 \right) \cdot \left(\frac{S}{\sqrt{n}} \right) \right] \quad (3.149)$$

Onde $(1-\alpha)$ é o limite superior de confiança escolhido; \bar{X} é a concentração média das amostras; S é o desvio padrão e n é o número de amostras.

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \quad (3.150)$$

Onde \bar{X} é a concentração média das amostras; n é o número de amostras e X é a concentração de cada amostra.

· Concentração Variável

Este método considera todas as concentrações simuladas ao longo do tempo de simulação na quantificação do risco à saúde humana, ou seja, a quantidade do composto que entra em contato com o receptor não é constante ao longo do tempo (JOUSSEF, 2013). A formulação genérica utilizada no cálculo da taxa de dose potencial é exibida abaixo.

$$TDpot_{,t} = C_{POE,t} \cdot A \quad (3.151)$$

Onde $TDpot_{,t}$ é a taxa de dose potencial no tempo t (mg/ano); $C_{POE,t}$ é a concentração de exposição no tempo t (m/gL) e A é o coeficiente em função da rota de ingresso considerada.

Inalação em Ambientes Abertos a partir da Água Subterrânea

$$A = VFAquaSubAbe \cdot IRa_{amb} \cdot EF \cdot ETa_a \quad (3.152)$$

Onde $VFAquaSubAbe$ é o fator de volatilização em ambientes abertos a partir da água subterrânea (L/m^3); IRa_{amb} é a taxa de inalação diária em ambientes abertos (m^3/h); EF é a frequência de exposição (dias/ano) e ETa_a é o tempo de exposição para inalação de vapores em ambientes abertos (h/dia).

Inalação em Ambientes Fechados a partir da Água Subterrânea

$$A = VFAquaSubFec \cdot IRa_{esp} \cdot EF \cdot ETa_f \quad (3.153)$$

Onde $VFAquaSubFec$ é o fator de volatilização em ambientes fechados a partir da água subterrânea (L/m^3); IRa_{esp} é a taxa de inalação diária em ambientes fechados (m^3/h); EF é a frequência de exposição (dias/ano) e ETa_f , é o tempo de exposição para inalação de vapores em ambientes fechados (h/dia).

Contato Dérmico com Água Subterrânea

$$A = PConst \cdot SA \cdot EF_{derms} \cdot ET_{wsubderm} \cdot CFd \quad (3.154)$$

Onde $PConst$ é a constante de permeabilidade dérmica (cm/h); SA é a área superficial da pele disponível para contato dérmico (cm^2); EF_{derms} frequência de exposição para contato dérmico com água subterrânea (dias/ano), $ET_{wsubderm}$ é o tempo de exposição para contato dérmico com água subterrânea (h/dia) e CFd é o fator de conversão de L para cm^3 (L/cm^3).

Ingestão de Água Subterrânea

$$A = IRw \cdot EF \quad (3.155)$$

Onde IRw é a taxa de ingestão diária de água (L/h) e EF é a frequência de exposição (dias/ano).

A dose potencial total do composto químico ($Dpot_{TOTAL}$) para um tempo total de exposição (n) corresponde a somatória dos valores das taxas de doses potenciais recebidas durante vários intervalos de exposição (ED_t).

$$Dpot_{TOTAL} = \sum_{t=1}^n TDpot_{t,t} \cdot ED_t \cdot \frac{10^{-3}g}{mg} \quad (3.156)$$

Onde $TDpot_{t,t}$ é a taxa de dose potencial no tempo t (mg.ano^{-1}) e ED_t é a duração de exposição da concentração no tempo t (anos).

A partir das doses potenciais totais o cálculo do risco total carcinogênico e não carcinogênico para o tempo de exposição considerado são calculados pelas seguintes fórmulas:

$$R_{TOTAL} = \left[\frac{Dpot_{TOTAL}}{BW \cdot AT_c} \cdot \frac{10^3 mg}{g} \right] \cdot SF \quad (3.157)$$

$$HQ_{TOTAL} = \left[\frac{Dpot_{TOTAL}}{BW \cdot AT_{nc}} \cdot \frac{10^3 mg}{g} \right] \cdot \frac{1}{RfD} \quad (3.158)$$

Onde R_{TOTAL} e HQ_{TOTAL} são os riscos carcinogênico e não carcinogênico totais, respectivamente (adimensional); $Dpot_{TOTAL}$ é a dose potencial total (g) para o tempo total de exposição; BW é o peso corpóreo (kg); AT_c é o tempo médio de exposição para efeitos carcinogênicos (anos); AT_{nc} é o tempo médio de exposição para efeitos não carcinogênicos (anos); SF é o fator de carcinogenicidade (mg/kg.dia); RfD é a dose de referência ($\text{mg.kg}^{-1}/\text{dia}$).

3.3.7 Cálculo das Concentrações Máximas Aceitáveis (CMA)

As concentrações máximas aceitáveis (CMA), também conhecidas como *SSTLs* (*Site Specific Target Levels*), são valores de concentração calculados a partir do risco alvo (carcinogênico e não carcinogênico), e são utilizados como metas de remediação da área contaminada. O SCBR calcula as CMA baseado no risco alvo inserido pelo usuário (1,0E-05 e 1,0E+00), através da equação do cálculo do risco, isolando o termo da concentração. Portanto, a CMA carcinogênica pode ser calculada como mostrado na Equação 3.159.

$$CMA_C = \frac{R_{C-alvo}}{FE \cdot SF} \quad (3.159)$$

Onde CMA_C é a concentração máxima aceitável para compostos carcinogênicos, R_{C-alvo} é o risco alvo carcinogênico (de acordo com a CONAMA nº 420/2009, o valor é de 1,0E-05), FE é o fator de exposição e SF é o fator de carcinogenicidade.

Baseado no mesmo princípio, a equação para o cálculo da CMA não carcinogênica é dada pela equação abaixo:

$$CMA_{NC} = \frac{R_{NC-alvo} \cdot RfD}{FE} \quad (3.160)$$

Onde CMA_{NC} é a concentração máxima aceitável não carcinogênica, $R_{NC-alvo}$ é o risco alvo não carcinogênico (igual a 1,0E+00), RfD é a dose de referência e FE é o fator de exposição.

O cálculo da CMA de determinada substância química de interesse (SQL) em um meio, considerando múltiplas rotas de exposição, é realizado a partir da CMA Acumulado. Para SQL carcinogênica (CMA_{AcumC}) e não carcinogênicas (CMA_{AcumNC}), a CMA Acumulado é calculado pelas Equações 3.161 e 3.162, respectivamente.

$$CMA_{AcumC} = \frac{R_{C-alvo}}{\sum(FE \times SF)_i} \quad (3.161)$$

$$CMA_{AcumNC} = \frac{R_{NC-alvo}}{\sum\left(\frac{FE}{RfD}\right)_i} \quad (3.162)$$

Recomenda-se neste caso (múltiplas rotas de exposição) que o valor da CMA a ser utilizado como meta de remediação seja o menor valor calculado (mais restritivo), dentre todas as vias de exposição consideradas, ou seja, a **CMA Aplicável**, a qual salvaguarda todos os receptores.

3.4 Remediação

O SCBR pode simular técnicas de remediação que poderão auxiliar no gerenciamento de áreas contaminadas, no preparo de um plano preventivo de contingenciamento em caso de acidentes, bem como na seleção ou dimensionamento de técnicas de remediação. Com o SCBR é possível estimar a melhor vazão de bombeamento e localização das

bombas, minimizando o número de bombas utilizadas com a menor vazão possível aplicada, reduzindo significativamente os custos de remediação. O SCBR também possui a ferramenta de cubagem para solo contaminado, que fornece o volume efetivo de solo a ser remediado a partir das concentrações medidas do solo na investigação detalhada e metas de remediação indicadas pelo usuário.

Os resultados de simulação obtidos no SCBR podem ser usados para selecionar os níveis de remediação de locais contaminados. Para os locais onde a taxa de transporte dos contaminantes no aquífero em direção aos pontos de exposição é muito elevada, mais rápida deverá ser a resposta da tecnologia de remediação adotada. Em outros casos, como em aquíferos de baixo risco, a tecnologia de atenuação natural pode ser uma opção razoável de controle do risco. Através da técnica de “áreas reativas” no SCBR, pode-se simular a degradação acelerada dos compostos, através da inserção do valor de coeficiente de decaimento ou de meia vida.

A escolha da resposta mais adequada aos derramamentos de petróleo e derivados depende da magnitude dos riscos ambientais e dos riscos de comprometimento da saúde humana em um determinado local. Para os casos em que existe um perigo imediato, ou seja, um risco iminente dos contaminantes atingirem pessoas ou ecossistemas frágeis, é necessária a adoção de medidas emergenciais de remoção dos contaminantes. Nos casos em que existe uma ameaça de exposição crônica de pessoas e animais, mas não perigo imediato, é necessário que se efetive a remediação e o monitoramento contínuo do local. Em situações em que a avaliação de risco indique que a contaminação somente atingirá os pontos de exposição em um período superior a dois anos é recomendado que se façam monitoramentos constantes da evolução dos contaminantes. Em alguns casos, os derramamentos podem não apresentar risco à saúde ou ao meio ambiente que seja significativo. No entanto, podem ocorrer impactos estéticos, mas que não justificam uma ação de remediação. Desta forma, podem ser realizados monitoramentos para avaliação do deslocamento dos contaminantes. A Tabela 3.1 resume as principais medidas a serem tomadas como resposta à contaminação de um local por derramamento de petróleo e derivados.

Tabela 3.1 – Medidas a serem tomadas em função da classificação do local contaminado.

Perigo presente	Classificação do local	Resposta inicial
Agudo	Classe 1: Tratamento imediato	Eliminação da liberação do contaminante
Crônico	Classe 2: Ameaça em um período curto (0-2 anos)	Monitoramento /Remediação
	Classe 2: Ameaça em um período futuro (>2 anos)	Monitoramento /Averiguação
Estético	Classe 4: Não há risco presente demonstrável	Somente Monitoramento

Fonte: ASTM (2015).

Após a avaliação dos riscos ambientais, a seleção da resposta mais adequada para diminuição dos impactos nas áreas contaminadas pode ser determinada através da adoção de uma matriz de decisão. Em função da natureza do impacto ou se a pluma de contaminantes atingiu um ponto de exposição potencial, um ponto de exposição real ou se ela ainda está avançando (aumenta com o tempo), é possível estabelecer a necessidade de medidas de remediação e quais são as medidas mais adequadas. Como ilustra a Figura 3.15, se os pontos de exposição real e potencial não forem atingidos e se a pluma não estiver avançando (não tem dependência com o tempo), não há necessidade de remediação e o caso pode ser fechado. No caso em que somente o ponto de exposição potencial for atingido e a pluma não está avançando, a solução mais adequada é a adoção da remediação por atenuação natural. Esta técnica de remediação é adotada para locais de baixo risco onde as concentrações dos contaminantes são reduzidas pela ação de mecanismos naturais como a biodegradação, volatilização, dispersão e diluição. Quando os contaminantes migram de tal forma que o risco de contaminação dos pontos de exposição seja muito alto, ou se os contaminantes já atingiram os pontos de exposição, a resposta mais adequada nestes casos é a adoção de medidas ativas de remediação.

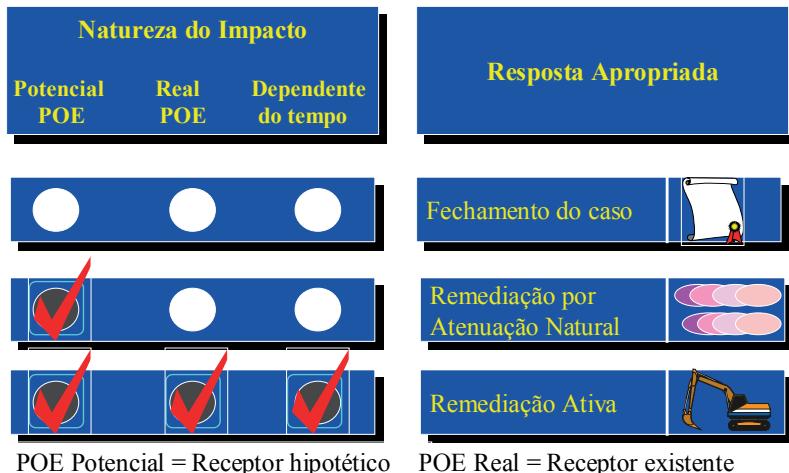


Figura 3.17 – Seleção da remediação: matriz de decisão.

3.4.1 Bombeamento e Injeção

O SCBR pode simular o efeito do bombeamento da água subterrânea como técnica de remediação no aquífero. Salienta-se que o SCBR não simula o bombeamento de fase livre, mas fornece uma boa estimativa das taxas de extração da água subterrânea para definição do raio de influência do sistema de extração por bombeamento, o que auxilia sobremaneira no dimensionamento da remediação.

Outra forma de utilização da simulação com o SCBR é a simulação de injeção água, o qual poderá provocar a modificação dos gradientes hidráulicos e com isso a mudança

da direção de fluxo e da pluma de contaminação. Para alteração da direção do fluxo subterrâneo, quando se insere um valor de vazão positivo (injeção), e bombeamento, quando o valor de vazão é negativo.

A simulação do fluxo considera a injeção ou bombeamento através do termo R na equação de Boussinesq (Equação 3.14). Portanto, o bombeamento e injeção utilizados na remediação possui o mesmo comportamento que o sumidouro e fonte de injeção empregados no módulo ambiente.

3.4.2 Barreiras

O SCBR pode simular barreiras (lineares e poligonais) no domínio de simulação, as quais são consideradas como regiões em que não há fluxo. Nos volumes de controle em que se encontram as barreiras, o SCBR não efetua o cálculo do fluxo, sendo uma área desconsiderada do domínio de simulação. As barreiras são normalmente utilizadas para direcionar o fluxo para uma região de interesse ou para impedir o avanço de plumas, visando à proteção de regiões de interesse. As barreiras possuem as mesmas propriedades que os obstáculos utilizados no módulo ambiente.

3.4.3 Áreas Reativas

As áreas reativas são regiões em que se podem simular propriedades diferenciadas dentro do domínio de simulação, como diferentes valores de sorção (influenciando no retardamento), valores de coeficientes de decaimento ou meia vida (para simular uma bioestimulação, por exemplo). Estas propriedades diferenciadas são atribuídas aos volumes de controle que abrangem dentro do domínio de simulação, alterando o cálculo destas propriedades apenas na região destas áreas. As áreas reativas possuem as mesmas propriedades que as áreas de análise do módulo ambiente. As propriedades afetam os volumes de controle se a área cobrir mais de 50% da área dos mesmos.

3.4.4 Cubagem de Solo Contaminado

A cubagem de solo contaminado é um método de remediação em que consiste na estimativa volumétrica e mássica do solo contaminado a ser remediado. O SCBR determina o volume de solo contaminado, para que se possa dimensionar o tratamento a partir da massa de contaminante ou calcular o volume de solo a ser disposto em aterro industrial.

A unidade principal para os cálculos da cubagem é o volume de controle, definida pelo número de vezes que é dividida a área de cubagem, com profundidade da camada cubada, em que o centro da área do volume de controle é o ponto de referência para os cálculos. As propriedades no volume de controle são consideradas como homogêneas em todo o volume.

3.4.4.1 Cálculo da massa e volume de solo

Para o cálculo de massa de contaminante e volume de solo contaminado, deve-se escolher a área de cubagem onde haverá os pontos de análise de concentração do contaminante no solo, baseado no conhecimento da área em questão, ou nos dados de concentração medida.

O usuário poderá determinar o número de volumes de controle desejado na área a ser cubada. O número de volumes na direção i representa o número de volumes de controle em que será dividida a direção x da área de cubagem. Na direção j , o número de volumes da direção y .

Cada volume de controle possui um mesmo valor de concentração para todo o volume. A concentração é determinada a partir do método de interpolação escolhido nos dados de entrada, seja nos volumes de controle que possuem pontos medidos ou não. O SCBR possui dois métodos de interpolação para o cálculo da concentração em cada volume de controle: inverso da distância ao quadrado e vizinho mais próximo. Recomenda-se optar pelo método que apresentar o menor erro quadrático médio (RMSE) do cálculo da concentração.

Cálculo da concentração - Inverso da distância ao quadrado

O cálculo da concentração em cada volume de controle através do método inverso da distância ao quadrado é efetuado a partir da seguinte fórmula:

$$C = \frac{\sum C_i / D_i^2}{\sum (1 / D_i^2)} \quad (3.163)$$

Em que C representa a concentração calculada para o volume de controle, C_i as concentrações medidas (pontos de sondagem) e o valor de borda ($C = 0$), D_i a distância do ponto de sondagem até o ponto do centro do volume de controle e o valor de borda. No somatório, além dos pontos de sondagem, deve-se incluir o valor de borda, com concentração igual a zero e a menor distância até a borda. As concentrações deverão ser calculadas para cada volume de controle, inclusive nos que possuem concentrações medidas.

Cálculo da Concentração - Vizinho mais próximo

Para o cálculo da concentração em cada volume de controle através do método do vizinho mais próximo, o SCBR compara as distâncias entre o centro do volume de controle e os pontos de sondagem e borda, adotando o valor de concentração do ponto que possuir a menor distância. Caso as distâncias sejam iguais, o SCBR adotará o maior valor de concentração. Bem como no inverso da distância ao quadrado, o SCBR também utiliza o valor de borda na comparação ($C = 0$), em que será utilizada na comparação a menor distância entre o centro do volume de controle e a borda.

Estimativa da massa específica e fator de empolamento (FE)

a) Densidade da partícula

$$d_p = \frac{d_s}{1-\theta_t} \quad (3.164)$$

d_p = densidade da partícula ($g.cm^{-3}$)

d_s = massa específica do solo ($g.cm^{-3}$)

θ_t = porosidade total (%)

b) Fator de empolamento

$$FE = \frac{1}{E} \quad (3.165)$$

FE = Fator de Empolamento (-)

E = Empolamento (-)

Vale lembrar que os métodos de interpolação escolhidos valem somente para o cálculo da concentração, para as demais propriedades (massa específica do solo e fator de empolamento - FE) o SCBR adota diferentes critérios de cálculo.

A média ponderada é efetuada apenas em casos que se tenham profundidades diferentes em um mesmo ponto, em que a ponderação será efetuada em função da profundidade em que foi determinada a propriedade, em uma mesma camada. Como exemplo, será utilizada uma camada de 1,0 m de espessura, com 4 pontos de análise: P1 (a 10 cm de profundidade, com FE_1 e d_{s1}), P2 (a 32,5 cm de profundidade, com FE_2 e d_{s2}), P3 (a 55 cm de profundidade, com FE_3 e d_{s3}) e P4 (a 82,5 cm de profundidade, com FE_4 e d_{s4}), conforme Figura 3.18.

A massa específica do solo e fator de empolamento no volume de controle em que se encontra este ponto é dada pela média ponderada dos pontos, cujo peso é a espessura na camada.

A espessura é dada pela metade da distância entre um ponto e outro, em que no ponto mais profundo este valor é considerado também abaixo do ponto. No exemplo apresentado, o fator de empolamento FE e a massa específica na camada (d_s) são dados por:

$$FE = \frac{FE_1 \cdot 20 + FE_2 \cdot 25 + FE_3 \cdot 20 + FE_4 \cdot 35}{20+25+20+35} \quad (3.166)$$

$$d_s = \frac{d_{s1} \cdot 20 + d_{s2} \cdot 25 + d_{s3} \cdot 20 + d_{s4} \cdot 35}{20+25+20+35} \quad (3.167)$$

Distância entre dois pontos (x_1, y_1) e (x_2, y_2)

$$D_i = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \quad (3.168)$$

x_i = coordenadas dos pontos no eixo x

y_i = coordenadas dos pontos no eixo y

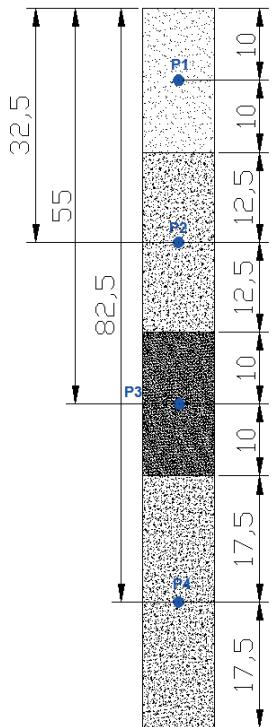


Figura 3.18 – Estimativa massa específica e fator de empolamento.

A partir do cálculo das concentrações nos volumes de controle, o SCBR compara com os valores inseridos nas metas de remediação: se o valor de concentração no volume de controle for superior ao da meta de remediação, ele deverá ser cubado. A massa de solo total cubada representa toda a massa de solo contaminado a ser removida, com concentrações acima da meta de remediação, em todas as camadas, devido a todos os contaminantes, em todos os volumes de controle. Caso ocorra um valor de massa igual à zero, significa que na região não há solo a ser removido, em que suas concentrações estão abaixo da meta de remediação.

Cálculo da Massa

O cálculo da massa no volume de controle é feito a partir da massa específica do solo inserida nos dados de entrada. Caso não haja ponto de sondagem no volume de controle, o SCBR adota o valor do vizinho mais próximo baseado na concentração, ou seja, o SCBR adotará o valor de massa específica do ponto que possuir menor distância; caso as distâncias sejam iguais, o SCBR adotará o valor de massa específica do ponto que possuir maior concentração.

$$m_s = V \cdot d_s \quad (3.169)$$

Em que m_s representa a massa de solo calculada, V o volume de solo do volume de controle e d_s a massa específica de solo do volume de controle.

A massa de contaminante no solo é calculada a partir da massa de solo do volume de controle e sua concentração.

$$m_c = m_s \cdot C \quad (3.170)$$

Em que m_c representa a massa de contaminante no volume de controle, m_s a massa de solo do volume de controle e C a concentração do contaminante no volume de controle.

O volume de solo solto representa o volume de solo contaminado a ser destinado ou tratado, obtido através do volume de controle dividido pelo fator de empolamento.

$$V_s = \frac{V}{E} \quad (3.171)$$

Em que V_s representa o volume de solo solto calculado, V é o volume de solo do volume de controle e E é o fator de empolamento.

Caso não haja ponto de sondagem no volume de controle, o SCBR adota o valor do vizinho mais próximo, ou seja, o SCBR adotará o valor de fator de empolamento do ponto que possuir menor distância; caso as distâncias sejam iguais, o SCBR adotará o menor valor de fator de empolamento.

3.4.4.2 Cálculo do erro quadrático médio (RMSE)

A partir do erro quadrático médio (RMSE) pode-se estimar qual o melhor método de interpolação a ser utilizado na estimativa do volume de solo contaminado. O melhor método será o que possuir o valor do RMSE calculado mais próximo de zero.

Para o cálculo serão considerados apenas os pontos de sondagem, em que será comparada a concentração medida com a concentração calculada a partir do método escolhido. A concentração é calculada como mencionado anteriormente, levando-se em consideração os demais pontos e a borda ($C = 0$), lembrando que não é considerado o centro do volume de controle (apenas a posição do ponto).

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum (C_m - C_c)^2} \quad (3.172)$$

Em que $RMSE$ representa o erro quadrático médio, n o número de pontos de sondagem (sem considerar a borda), C_m a concentração medida no ponto, C_c a concentração calculada pelo método de interpolação escolhido.

Equação da Interpolação por Inverso da Distância ao Quadrado

Considerando os n pontos P_i , sendo os pontos de dados (cujos valores respectivos são v_i), sendo que $1 \leq i \leq n$, e considerando que \vec{d}_i é o vetor distância entre um ponto de dado P_i e o ponto atual que quer se achar o valor interpolado P , o valor interpolado é dado por:

$$\tilde{v} = \frac{\sum_{i=0}^n \frac{1}{d_i^2} v_i}{\sum_{i=0}^n \frac{1}{d_i^2}} \quad (3.173)$$

d_0 é a menor distância do ponto P até a borda, sendo que o valor considerado na borda é sempre 0, ou seja, $v_0=0$.

Equação do Cálculo do Erro Médio Quadrático

Para calcular o erro quadrático médio, usa-se os valores originais dos pontos v_i e os valores interpolados nesses mesmos pontos \tilde{v}_i (ignorando-se o valor do ponto que se está interpolando).

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (v_i - \tilde{v}_i)^2 \quad (\text{erro médio quadrático}) \quad (3.174)$$

$$RMSE = \sqrt{MSE} \quad (\text{raiz do erro médio quadrático}) \quad (3.175)$$

$$NMSE = \frac{\sum_{i=1}^n (v_i - \tilde{v}_i)^2}{\sum_{i=1}^n v_i^2} \quad (\text{erro médio quadrático normalizado}) \quad (3.176)$$

3.4.4.3 Quartis

Na saída de dados da cubagem, o usuário tem acesso aos valores mínimo, máximo e aos quartis 25%, 50% (mediana) e 75% dos valores interpolados pelo método escolhido (inverso da distância ponderada ou vizinho mais próximo).

$$E_{Qj} = \frac{j \cdot n}{4} \quad (3.177)$$

Onde:

E_{Qj} é a posição do quartil;

j é o índice que se refere à ordem do quartil que queremos calcular (três quartis: $j=1,2,3$);

n é o número de observações do conjunto.

$$Q_{j=1} = l_{Qj} + \frac{\frac{j \cdot n}{4} - F_{ant}}{f_{Qj}} \cdot h \quad (3.178)$$

l_{Qj} é o limite inferior da classe que contém o quartil desejado (Q_j);

E_{Qj} é o elemento quartil, ou seja, a posição onde se encontra o Q_j ;

F_{ant} é a frequência acumulada anterior à classe que contém Q_j ;

f_{Qj} é a frequência simples da classe que o Q_j pertence;

h é a amplitude do intervalo que contém o Q_j .

3.4.5 Exemplo

Dados de entrada

Tabela 3.2 – Pontos de sondagem.

Sondagem	X (m)	Y (m)	Amostra	Prof.	Data	d_s	d_p	θ_t	Tipo solo	FE	C_m^1
S1	44,14	16,00	A	0,5	10/04/2012	1,5	NA	NA	Silte argiloso	0,8	10
S2	33,89	2,90	B	0,5	10/04/2012	2	NA	NA	Silte argiloso	0,8	5
S3	8,62	6,35	C	0,5	10/04/2012	1,6	NA	NA	Areia	0,6	10

¹ Como neste exemplo só foi utilizado o benzeno como contaminante, há apenas uma coluna de concentração.

Tabela 3.3 – Área de cubagem.

Volume	X (m)	Y (m)
Volume 1	0	20
Volume 2	0	0
Volume 3	50	0
Volume 4	50	20
Área	20m x 50m	2

Metas de remediação

De acordo com a resolução CONAMA 420/2009, o valor que deverá ser inserido como meta de remediação é 0,08 mg/kg.

Simulação

A área será dividida em quatro volumes de controle ($i = 2$ e $j = 2$). Serão utilizados ambos os métodos de interpolação, para que se possa verificar qual método possui menor erro quadrático médio (RMSE) neste caso.

Resultados

Cálculo da concentração nos volumes de controle:

Para mostrar os cálculos nos volumes de controle, serão considerados os seguintes volumes de controle, como mostra a figura abaixo:

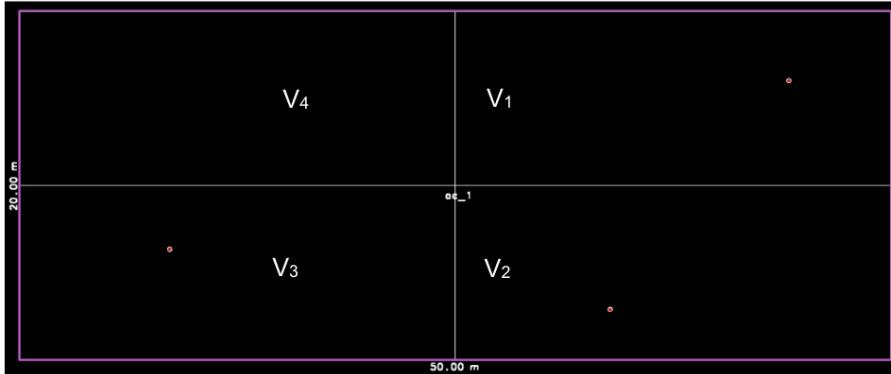


Figura 3.19 – Volumes de controle.

Cada volume de controle possui um volume de 250 m^3 ($250 \text{ m}^2 \times 1 \text{ m}$).

- Inverso da distância ao quadrado:

V₁:

Coordenadas do centro do volume de controle: (37,50; 15,00)

Coordenadas dos pontos utilizados no cálculo:

S₁ (44,14; 16,00)

S₂ (33,89; 2,90)

S₃ (8,62; 6,35)

Borda (37,50; 20,00)

Cálculo das distâncias:

$$D_{V1-S1} = \sqrt{(37,50 - 44,14)^2 + (15,00 - 16,00)^2} = 6,71 \text{ m}$$

$$D_{V1-S2} = \sqrt{(37,50 - 33,89)^2 + (15,00 - 2,90)^2} = 12,63 \text{ m}$$

$$D_{V1-S3} = \sqrt{(37,50 - 8,62)^2 + (15,00 - 6,35)^2} = 30,15 \text{ m}$$

$$D_{V1-\text{Borda}} = \sqrt{(37,50 - 37,50)^2 + (15,00 - 20,00)^2} = 5 \text{ m} \quad (3.179)$$

Cálculo da concentração de V₁:

$$C_{V1} = \frac{\frac{10}{(6,71)^2} + \frac{5}{(12,63)^2} + \frac{10}{(30,15)^2} + \frac{0}{(5)^2}}{\frac{1}{(6,71)^2} + \frac{1}{(12,63)^2} + \frac{1}{(30,15)^2} + \frac{1}{(5)^2}} = 3,79787 \text{ mg/kg} \quad (3.180)$$

V₂:

Coordenadas do centro do volume de controle: (37,50; 5,00)

Coordenadas dos pontos utilizados no cálculo:

S₁ (44,14 ; 16,00)

S₂ (33,89 ; 2,90)

S₃ (8,62 ; 6,35)

Borda (37,50 ; 0,00)

Cálculo das distâncias:

$$D_{V2-S1} = \sqrt{(37,50 - 44,14)^2 + (5,00 - 16,00)^2} = 12,85 \text{ m}$$

$$D_{V2-S2} = \sqrt{(37,50 - 33,89)^2 + (5,00 - 2,90)^2} = 4,18 \text{ m}$$

$$D_{V2-S3} = \sqrt{(37,50 - 8,62)^2 + (5,00 - 6,35)^2} = 28,91 \text{ m}$$

$$D_{V2-Borda} = \sqrt{(37,50 - 37,50)^2 + (5,00 - 0,00)^2} = 5 \text{ m} \quad (3.181)$$

Cálculo da concentração de V_2 :

$$C_{V2} = \frac{\frac{10}{(12,85)^2} + \frac{5}{(4,18)^2} + \frac{10}{(28,91)^2} + \frac{0}{(5)^2}}{\frac{1}{(12,85)^2} + \frac{1}{(4,18)^2} + \frac{1}{(28,91)^2} + \frac{1}{(5)^2}} = 3,43448 \text{ mg/kg} \quad (3.182)$$

V_3 :

Coordenadas do centro do volume de controle: (12,50 ; 5,00)

Coordenadas dos pontos utilizados no cálculo:

S_1 (44,14 ; 16,00)

S_2 (33,89 ; 2,90)

S_3 (8,62 ; 6,35)

Borda (12,50 ; 0,00)

Cálculo das distâncias:

$$D_{V3-S1} = \sqrt{(12,50 - 44,14)^2 + (5,00 - 16,00)^2} = 33,50 \text{ m}$$

$$D_{V3-S2} = \sqrt{(12,50 - 33,89)^2 + (5,00 - 2,90)^2} = 21,49 \text{ m}$$

$$D_{V3-S3} = \sqrt{(12,50 - 8,62)^2 + (5,00 - 6,35)^2} = 4,11 \text{ m}$$

$$D_{V3-Borda} = \sqrt{(12,50 - 12,50)^2 + (5,00 - 0,00)^2} = 5 \text{ m} \quad (3.183)$$

Cálculo da concentração de V_3 :

$$C_{V3} = \frac{\frac{10}{(33,50)^2} + \frac{5}{(21,49)^2} + \frac{10}{(4,11)^2} + \frac{0}{(5)^2}}{\frac{1}{(33,50)^2} + \frac{1}{(21,49)^2} + \frac{1}{(4,11)^2} + \frac{1}{(5)^2}} = 5,98446 \text{ mg/kg} \quad (3.184)$$

V_4 :

Coordenadas do centro do volume de controle: (12,50 ; 15,00)

Coordenadas dos pontos utilizados no cálculo:

S_1 (44,14 ; 16,00)

S_2 (33,89 ; 2,90)

S_3 (8,62 ; 6,35)

Borda (12,50 ; 20,00)

Cálculo das distâncias:

$$\begin{aligned}
 D_{V4-S1} &= \sqrt{(12,50 - 44,14)^2 + (15,00 - 16,00)^2} = 31,66 \text{ m} \\
 D_{V4-S2} &= \sqrt{(12,50 - 33,89)^2 + (15,00 - 2,90)^2} = 24,58 \text{ m} \\
 D_{V4-S3} &= \sqrt{(12,50 - 8,62)^2 + (15,00 - 6,35)^2} = 9,48 \text{ m} \\
 D_{V4-Borda} &= \sqrt{(12,50 - 12,50)^2 + (15,00 - 20,00)^2} = 5 \text{ m}
 \end{aligned} \tag{3.185}$$

Cálculo da concentração de V_4 :

$$C_{V4} = \frac{\frac{10}{(31,66)^2} + \frac{5}{(24,58)^2} + \frac{10}{(9,48)^2} + \frac{0}{(5)^2}}{\frac{1}{(31,66)^2} + \frac{1}{(24,58)^2} + \frac{1}{(9,48)^2} + \frac{1}{(5)^2}} = 2,40835 \text{ mg/kg} \tag{3.186}$$

- Vizinho mais próximo:

\underline{V}_1 :

A partir dos cálculos das distâncias, foi escolhida a concentração do ponto mais próximo do centro de V_1 :

$$\begin{aligned}
 D_{V1-S1} &= \sqrt{(37,50 - 44,14)^2 + (15,00 - 16,00)^2} = 6,71 \text{ m} \\
 D_{V1-S2} &= \sqrt{(37,50 - 33,89)^2 + (15,00 - 2,90)^2} = 12,63 \text{ m} \\
 D_{V1-S3} &= \sqrt{(37,50 - 8,62)^2 + (15,00 - 6,35)^2} = 30,15 \text{ m} \\
 D_{V1-Borda} &= \sqrt{(37,50 - 37,50)^2 + (15,00 - 20,00)^2} = 5 \text{ m}
 \end{aligned} \tag{3.187}$$

Como a menor distância é $D_{V1-Borda} = 5 \text{ m}$, a concentração do volume de controle V_1 é a mesma concentração da borda, ou seja, $C_{V1} = 0 \text{ mg/kg}$.

\underline{V}_2 :

A partir dos cálculos das distâncias, foi escolhida a concentração do ponto mais próximo do centro de V_2 :

$$\begin{aligned}
 D_{V2-S1} &= \sqrt{(37,50 - 44,14)^2 + (5,00 - 16,00)^2} = 12,85 \text{ m} \\
 D_{V2-S2} &= \sqrt{(37,50 - 33,89)^2 + (5,00 - 2,90)^2} = 4,18 \text{ m} \\
 D_{V2-S3} &= \sqrt{(37,50 - 8,62)^2 + (5,00 - 6,35)^2} = 28,91 \text{ m} \\
 D_{V2-Borda} &= \sqrt{(37,50 - 37,50)^2 + (5,00 - 0,00)^2} = 5 \text{ m}
 \end{aligned} \tag{3.188}$$

Como a menor distância é $D_{V2-S2} = 4,18 \text{ m}$, a concentração do volume de controle V_2 é a mesma concentração de S2, ou seja, $C_{V2} = 5 \text{ mg/kg}$.

\underline{V}_3 :

A partir dos cálculos das distâncias, foi escolhida a concentração do ponto mais próximo do centro de V_3 :

$$D_{V3-S1} = \sqrt{(12,50 - 44,14)^2 + (5,00 - 16,00)^2} = 33,50 \text{ m}$$

$$D_{V3-S2} = \sqrt{(12,50 - 33,89)^2 + (5,00 - 2,90)^2} = 21,49 \text{ m}$$

$$D_{V3-S3} = \sqrt{(12,50 - 8,62)^2 + (5,00 - 6,35)^2} = 4,11 \text{ m}$$

$$D_{V3-Borda} = \sqrt{(12,50 - 12,50)^2 + (5,00 - 0,00)^2} = 5 \text{ m} \quad (3.189)$$

Como a menor distância é $D_{V3-S3} = 4,11 \text{ m}$, a concentração do volume de controle V_3 é a mesma concentração de S3, ou seja, $C_{V2} = 10 \text{ mg/kg}$.

V_4 :

A partir dos cálculos das distâncias, foi escolhida a concentração do ponto mais próximo do centro de V_4 :

$$D_{V4-S1} = \sqrt{(12,50 - 44,14)^2 + (15,00 - 16,00)^2} = 31,66 \text{ m}$$

$$D_{V4-S2} = \sqrt{(12,50 - 33,89)^2 + (15,00 - 2,90)^2} = 24,58 \text{ m}$$

$$D_{V4-S3} = \sqrt{(12,50 - 8,62)^2 + (15,00 - 6,35)^2} = 9,48 \text{ m}$$

$$D_{V4-Borda} = \sqrt{(12,50 - 12,50)^2 + (15,00 - 20,00)^2} = 5 \text{ m} \quad (3.190)$$

Como a menor distância é $D_{V4-Borda} = 5 \text{ m}$, a concentração do volume de controle V_4 é a mesma concentração da Borda, ou seja, $C_{V4} = 0 \text{ mg/kg}$.

Tabela 3.4 – Resumo das concentrações pelos métodos de interpolação do SCBR.

Volumes de controle	Inverso da distância ao quadrado (mg/kg)	Vizinho mais próximo (mg/kg)
V_1	3,80	0,00
V_2	2,43	5,00
V_3	5,98	10,00
V_4	2,41	0,00

Cálculo do erro quadrático médio (RMSE).

O erro quadrático médio é calculado a partir da comparação entre as concentrações medidas e calculadas, portanto utilizam-se apenas os pontos de sondagem.

- Inverso da distância ao quadrado:

Tabela 3.5 – Dados de entrada na interpolação.

Pontos	X (m)	Y (m)	C_m (mg/kg)
S1	44,14	16,00	10
S2	33,89	2,90	5
S3	8,62	6,35	10
Borda 1	44,14	20,00	0
Borda 2	33,89	0,00	0
Borda 3	8,62	0,00	0

Cálculo das distâncias:

$$\begin{aligned}
 D_{S1-S2} &= \sqrt{(44,14 - 33,89)^2 + (16,00 - 2,90)^2} = 16,63 \text{ m} \\
 D_{S1-S3} &= \sqrt{(44,14 - 8,62)^2 + (16,00 - 6,35)^2} = 36,81 \text{ m} \\
 D_{S1-\text{Borda}} &= \sqrt{(44,14 - 44,14)^2 + (16,00 - 20,00)^2} = 4,00 \text{ m} \\
 D_{S2-S3} &= \sqrt{(33,89 - 8,62)^2 + (2,90 - 6,35)^2} = 25,50 \text{ m} \\
 D_{S2-\text{Borda}} &= \sqrt{(33,89 - 33,89)^2 + (2,90 - 0)^2} = 2,90 \text{ m} \\
 D_{S3-\text{Borda}} &= \sqrt{(8,62 - 8,62)^2 + (6,35 - 0)^2} = 6,35 \text{ m}
 \end{aligned} \tag{3.191}$$

Cálculo das concentrações:

$$\begin{aligned}
 C_{C1} &= \frac{\frac{5}{(16,63)^2} + \frac{10}{(36,81)^2} + \frac{0}{(4)^2}}{\frac{1}{(16,63)^2} + \frac{1}{(36,81)^2} + \frac{1}{(4)^2}} = 0,38074 \text{ mg/kg} \\
 C_{C2} &= \frac{\frac{10}{(16,63)^2} + \frac{10}{(25,50)^2} + \frac{0}{(2,90)^2}}{\frac{1}{(16,63)^2} + \frac{1}{(25,50)^2} + \frac{1}{(2,90)^2}} = 0,41527 \text{ mg/kg} \\
 C_{C3} &= \frac{\frac{10}{(36,81)^2} + \frac{5}{(25,50)^2} + \frac{0}{(6,35)^2}}{\frac{1}{(36,81)^2} + \frac{1}{(25,50)^2} + \frac{1}{(6,35)^2}} = 0,55651 \text{ mg/kg}
 \end{aligned} \tag{3.192}$$

Cálculo do RMSE:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{3} \cdot [(10 - 0,38074)^2 + (5 - 0,41527)^2 + (10 - 0,55651)^2]} = 8,22049 \tag{3.193}$$

- Vizinho mais próximo:

Cálculo das distâncias:

$$\begin{aligned}
 D_{S1-S2} &= \sqrt{(44,14 - 33,89)^2 + (16,00 - 2,90)^2} = 16,63 \text{ m} \\
 D_{S1-S3} &= \sqrt{(44,14 - 8,62)^2 + (16,00 - 6,35)^2} = 36,81 \text{ m} \\
 D_{S1-\text{Borda}} &= \sqrt{(44,14 - 44,14)^2 + (16,00 - 20,00)^2} = 4,00 \text{ m} \\
 D_{S2-S3} &= \sqrt{(33,89 - 8,62)^2 + (2,90 - 6,35)^2} = 25,50 \text{ m} \\
 D_{S2-\text{Borda}} &= \sqrt{(33,89 - 33,89)^2 + (2,90 - 0)^2} = 2,90 \text{ m} \\
 D_{S3-\text{Borda}} &= \sqrt{(8,62 - 8,62)^2 + (6,35 - 0)^2} = 6,35 \text{ m}
 \end{aligned} \tag{3.194}$$

Cálculo das concentrações:

Como a menor distância é $D_{S1-\text{Borda}} = 4 \text{ m}$, a concentração calculada em S_1 é a mesma concentração da borda, ou seja, $C_{C1} = 0 \text{ mg/kg}$.

Como a menor distância é $D_{S2-\text{Borda}} = 2,90 \text{ m}$, a concentração calculada em S_2 é a mesma concentração da borda, ou seja, $C_{C2} = 0 \text{ mg/kg}$.

Como a menor distância é $D_{S3-Borda} = 6,35$ m, a concentração calculada em S_3 é a mesma concentração da borda, ou seja, $C_{c3} = 0$ mg/kg.

Cálculo do RMSE:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{3} \cdot [(10 - 0)^2 + (5 - 0)^2 + (10 - 0)^2]} = 8,66025 \quad (3.195)$$

Comparando os erros quadráticos médios de ambos os métodos de interpolação, o melhor método para o cálculo da concentração é o inverso da distância ao quadrado, pois é o método que possui o RMSE mais próximo de zero.

Cálculo do volume de solo solto

O volume de solo solto é calculado para cada volume de controle, em que o total da camada é dado pela soma de todos os volumes de controle e o total é dado pela soma de todas as camadas.

Cálculo do volume de solo solto

$$\begin{aligned} V_{S1} &= \frac{250}{0,8} = 312,5 \text{ m}^3 \\ V_{S2} &= \frac{250}{0,8} = 312,5 \text{ m}^3 \\ V_{S3} &= \frac{250}{0,6} = 416,7 \text{ m}^3 \end{aligned} \quad (3.196)$$

Como o SCBR utiliza o método do vizinho mais próximo para as propriedades do solo, o FE utilizado no cálculo de V_4 é o mesmo de V_3 , pois é o elemento mais próximo:

$$V_{S4} = \frac{250}{0,6} = 416,7 \text{ m}^3 \quad (3.197)$$

Cálculo do volume de solo solto da camada:

$$V = 312,5 + 312,5 + 416,7 + 416,7 = 1458,33 \text{ m}^3 \quad (3.198)$$

Cálculo da massa de solo

A massa de solo na camada é dada pela soma de todos os volumes de controle e a massa total, pela soma de todas as camadas.

$$\begin{aligned} m_1 &= 250 \cdot 1500 = 375000 \text{ kg} \\ m_1 &= 250 \cdot 2000 = 500000 \text{ kg} \\ m_1 &= 250 \cdot 1600 = 400000 \text{ kg} \\ m_1 &= 250 \cdot 1600 = 400000 \text{ kg} \end{aligned} \quad (3.199)$$

Cálculo da massa total:

$$m_t = 375000 + 500000 + 400000 + 400000 = 1,675 \cdot 10^6 \text{ kg} \quad (3.200)$$

Cálculo da massa de contaminante

Como a massa de contaminante depende da concentração do volume de controle, a massa será calculada para ambos os métodos de interpolação.

- Inverso da distância ao quadrado:

$$\begin{aligned}m_{c1} &= 375000 \cdot 3,79787 = 1424201 \text{ mg} = 1,42 \text{ kg} \\m_{c2} &= 500000 \cdot 3,43448 = 1717240 \text{ mg} = 1,71 \text{ kg} \\m_{c3} &= 400000 \cdot 5,98446 = 2393784 \text{ mg} = 2,39 \text{ kg} \\m_{c4} &= 400000 \cdot 2,40835 = 963340 \text{ mg} = 0,96 \text{ kg}\end{aligned}\tag{3.201}$$

Cálculo da massa total:

$$m_t = 1,42 + 1,71 + 2,39 + 0,96 = 6,49857 \text{ kg}\tag{3.202}$$

- Vizinho mais próximo:

$$\begin{aligned}m_{c1} &= 375000 \cdot 0 = 0 \\m_{c2} &= 500000 \cdot 5 = 2500000 \text{ mg} = 2,5 \text{ kg} \\m_{c3} &= 400000 \cdot 10 = 400000 \text{ mg} = 4,0 \text{ kg} \\m_{c4} &= 400000 \cdot 0 = 0\end{aligned}\tag{3.203}$$

Cálculo da massa total:

$$m_t = 0 + 2,5 + 4,0 + 0 = 6,50 \text{ kg}\tag{3.204}$$

4 PARÂMETROS DE SIMULAÇÃO

O objetivo deste tópico é apresentar um sumário dos principais parâmetros de simulação utilizado no SCBR, incluindo os de entrada do modelo. Nos itens subsequentes são apresentadas informações como valores típicos, as unidades e a obtenção de parâmetros utilizados na simulação.

4.1 Hidrogeologia

Parâmetro	Condutividade Hidráulica (k)	
Unidade	cm/s	
Descrição	Condutividade hidráulica do meio poroso saturado.	
Valores Típicos	Argilas: Siltos: Areias siltosas: Areias finas: Cascalho	< 1×10^{-6} cm/s $1 \times 10^{-6} - 1 \times 10^{-3}$ cm/s $1 \times 10^{-5} - 1 \times 10^{-1}$ cm/s $1 \times 10^{-4} - 1$ cm/s > 1 cm/s
Fonte de dados	Medidas pontuais obtidas através de testes de bombeamento e de <i>Slug</i> no local.	
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente nos pontos de análise, locados no domínio definido pelo usuário ou no módulo <i>Estudo, Hidrogeologia</i> .	

Parâmetro	Gradiente Hidráulico (i)
Unidade	Adimensional
Descrição	Representa a inclinação da superfície potenciométrica da água subterrânea. Em aquíferos não confinados é equivalente à inclinação da superfície da água.
Valores Típicos	0,0001 – 0,05
Fonte de dados	É obtido através da construção de mapas de superfície potenciométrica usando dados de monitoramento do nível estático da água subterrânea em poços e calculando a declividade do nível potenciométrico.
Como entrar com os dados	É uma resposta do modelo. Pode ser definido através da carga hidráulica nos pontos de análise.

Parâmetro	Porosidade Efetiva (n_e)	
Unidade	Adimensional	
Descrição	<p>A porosidade total (n) é o volume de vazios em uma unidade de volume do aquífero, podendo ser representada por: $n = 1 - \rho_b/\rho_s$, onde:</p> <p>ρ_b é a densidade do aquífero e ρ_s é a densidade da partícula de solo.</p> <p>A porosidade efetiva (n_e) representa os espaços intersticiais do solo disponíveis para o escoamento do fluido, podendo ser calculada por: $n_e = n - S_r$, onde S_r é o coeficiente de retenção de água no meio devido à força da gravidade.</p>	
Valores Típicos	Argila	0,01 – 0,2
	Silte	0,01 – 0,3
	Areia fina	0,1 – 0,3
	Areia média	0,15 – 0,3
	Cascalho fino	0,2 – 0,35
Fonte de dados	A metodologia mais precisa para obtenção da porosidade efetiva é através de ensaios com traçador, mas por serem onerosos e demorados usualmente são utilizados os valores da literatura.	
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente nos pontos de análise, locados no domínio definido pelo usuário ou no módulo <i>Ambiente, Propriedades Gerais do Aquífero</i> .	

Parâmetro	Velocidade de Infiltração (v)	
Unidade	m/ano	
Descrição	É a velocidade intersticial da água subterrânea. Representa o fluxo advectivo no aquífero.	
Valores Típicos	10^{-7} a 10^3 m/ano	
Fonte de dados	O SCBR calcula a velocidade intersticial da água subterrânea em todo domínio em função dos gradientes hidráulicos, condutividades hidráulicas e porosidade efetiva definidos no domínio.	
Como entrar com os dados	Este parâmetro é uma resposta do modelo, não podendo ser entrado diretamente.	

Parâmetro	Recarga (I)	
Unidade	mm/ano	
Descrição	Representa a infiltração de água através da superfície superior da zona saturada do meio, representando o volume de água introduzido no freático por unidade de área do meio, por unidade de tempo.	
Valores Típicos	-	
Fonte de dados	Este parâmetro é obtido através de estudos hidrológicos. Algumas equações empíricas permitem estimar a infiltração em função da precipitação e das características do meio.	
Como entrar com os dados	A recarga é entrada diretamente no módulo <i>Ambiente, Propriedades Gerais do Aquífero</i> .	

Parâmetro	Cota Base do Aquífero
Unidade	m
Descrição	Representa a cota de fundo do aquífero, geralmente referenciado em relação ao nível do mar (<i>Datum</i>).
Valores Típicos	-
Fonte de dados	Este parâmetro é obtido através de levantamentos altimétricos na área de interesse.
Como entrar com os dados	Entrando diretamente no módulo <i>Ambiente</i> , <i>Propriedades Gerais do Aquífero</i> .

4.2 Dispersividade

Parâmetro	Dispersividade Longitudinal (a_L) e Transversal (a_T)
Unidade	m
Descrição	A dispersão representa o processo no qual a pluma de soluto se espalha na direção longitudinal (ao longo da direção de fluxo da água subterrânea) e na direção transversal (perpendicular ao fluxo) devido à dispersão mecânica e difusão molecular.
Valores Típicos	A seleção dos valores de dispersividade não é um processo muito simples, considerando a dificuldade da medição da dispersão no campo. Alguns pesquisadores indicam variações da dispersividade de 2 a 3 ordens de grandeza em relação ao comprimento de pluma (GELHAR; WELTY; REHFELDT, 1992). O SCBR acomoda a equação de XU & ECKSTEIN (1995) no cálculo da dispersividade longitudinal (a_L) em função da escala na qual é definido o domínio a ser simulado, denominado XU & ECKSTEIN: $a_L = 0,83 [\log (\text{escala})]^{2,44}$, com escala em [m]. A dispersividade transversal é definida como sendo 10% da dispersividade longitudinal.
Fonte de dados	A metodologia mais precisa é através de ensaios com traçadores, mas usualmente são estimados através das relações apresentadas acima, em função da escala do domínio de simulação.
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente com o valor da dispersividade em metros ou o SCBR calcula a partir da escala do domínio definido.

4.3 Adsorção

Parâmetro	Fator de Retardo (R)
Unidade	Adimensional
Descrição	Se a velocidade média dos contaminantes no aquífero for menor que a velocidade de infiltração da água subterrânea é dito que os contaminantes estão sofrendo <i>retardo</i> . Isto ocorre porque os contaminantes hidrofóbicos tendem a adsorver a matriz do aquífero. Um valor do fator de retardo 2 indica que a velocidade da água subterrânea é duas vezes maior que a velocidade dos contaminantes. Nesta versão do modelo não foi considerado um possível efeito do etanol no retardo dos contaminantes.
Valores Típicos	Geralmente varia entre 1 e 2 para os BTEX e podendo ser >100 dependendo das características do contaminantes e do aquífero.
Fonte de dados	Usualmente o fator de retardo é estimado utilizando as seguintes relações: $R = 1 + \frac{k_d \cdot \rho_b}{n_e}$, onde $k_d = k_{oc} \cdot f_{oc}$. ρ_b = densidade do aquífero, n = porosidade, k_{oc} = coeficiente de partição carbono orgânico-água, k_d = coeficiente de distribuição, e f_{oc} é fração de carbono orgânico no solo não contaminado.
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente nos pontos de análise, locados no domínio definido pelo usuário ou calculados a partir de ρ_b , n , k_d , f_{oc} .

Parâmetro	Densidade do Aquífero (ρ_b)
Unidade	Kg/m ³
Descrição	A densidade da matriz do aquífero (ρ_b) está relacionada à porosidade total (n) e à densidade dos grãos ρ_s que compreendem o aquífero, sendo definida por: $\rho_b = (1-n)\rho_s$
Valores Típicos	Os valores de ρ_b podem ser determinados em laboratório, no entanto, valores estimados são frequentemente utilizados: Solos arenosos: $\rho_b = 1810 \text{ kg/m}^3$ Solos argilosos: $\rho_b = 1100 \text{ kg/m}^3$ Valor usual: $\rho_b = 1700 \text{ kg/m}^3$
Fonte de dados	A partir de análises de amostras de solo do aquífero em laboratório geotécnico ou de tabelas que relacionam a densidade com a densidade do solo.
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente nos pontos de análise, locados no domínio definido pelo usuário.

NOTA: No caso da simulação de compostos químicos inorgânicos, o coeficiente de distribuição K_d não é calculado em função de K_{oc} . Na simulação de metais, por exemplo, o retardamento deve ser calculado para valores K_d específicos para as condições do local, devendo ser observado o pH do meio. Desta forma, a simulação de metais no SCBR deverá ser precedida pelo cálculo do retardamento através da Equação 3.59 e a inserção do valor de retardamento encontrado.

Parâmetro	Coeficiente de Partição Carbono Orgânico-Água (k_{oc})
Unidade	L/kg
Descrição	É um coeficiente de partição entre o carbono orgânico do solo e a fase aquosa, específico para cada contaminante. Altos valores de k_{oc} indicam uma grande afinidade dos contaminantes pela fração de carbono orgânico do solo e a elevação do Fator de Retardo.
Valores Típicos	Os valores de k_{oc} variam em função do tipo de contaminante, sendo que existe uma grande amplitude de valores. A ASTM (2021) propõe alguns valores para os seguintes compostos: benzeno 38 L/kg, tolueno 135 L/kg, etilbenzeno 95 L/kg e xilenos 240 L/kg.
Fonte de dados	Os valores de k_{oc} podem ser obtidos na literatura da área química ou através de relações entre k_{oc} e a solubilidade ou k_{ow} e o coeficiente de partição octanol-água (k_{ow}).
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente no campo destinado à alimentação de informações sobre os contaminantes.

Parâmetro	Fração de Carbono Orgânico (f_{oc})
Unidade	Adimensional
Descrição	Representa a fração de carbono orgânico naturalmente presente nas amostras (não contaminadas) de solo do aquífero. Quanto maior f_{oc} , maior será a adsorção dos contaminantes orgânicos no aquífero.
Valores Típicos	0,0001 – 0,1
Fonte de dados	Os valores de f_{oc} são obtidos através de análises laboratoriais de amostras de solo (não contaminadas) do aquífero. Na inexistência de dados, o valor 0,001 é usualmente empregado.
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente nos pontos de análise, locados no domínio definido pelo usuário.

4.4 Biodegradação

Parâmetro	Coeficiente de Decaimento de Primeira Ordem (λ)
Unidade	1/ano
Descrição	Coeficiente que representa o decaimento dos contaminantes dissolvidos na água subterrânea devido aos processos que reduzem a massa dos contaminantes. A cinética de decaimento dos contaminantes é modelada como um decaimento de primeira ordem. A biodegradação é o principal mecanismo de redução da massa dos contaminantes, no entanto, outros fatores como a volatilização, podem contribuir. Nos procedimentos de avaliação de risco, o usuário deve ser cuidadoso na seleção de valores de λ , pois uma seleção inadequada pode trazer o ônus da subestimação ou superestimação dos riscos da contaminação. O coeficiente λ pode ser prescrito em pontos de análise que determinam os locais onde a biodegradação está sendo acelerada através de medidas ativas como a estimulação pela injeção de nutrientes, receptores de elétrons e etc. Nestes casos, deve-se estimar λ em função das taxas fornecidas pelos fornecedores das tecnologias de remediação.
Valores Típicos	0,1 – 36 ano ⁻¹

Fonte de dados	<p>Dois métodos são usualmente empregados na determinação de λ:</p> <ul style="list-style-type: none"> Seleção de valores da literatura: várias referências dispõem valores de λ para os mais diversos compostos orgânicos perigosos como, por exemplo, Howard (1990). Calibração com dados de campo existentes: O SCBR pode ser utilizado para determinar λ através do ajuste dos valores de concentração preditos pelo modelo aos dados de campo pela variação de λ, em um procedimento de tentativa e erro. Para o caso de plumas em expansão, este método pode superestimar os coeficientes de biodegradação.
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente no campo destinado a entrada de informações dos contaminantes e do etanol e nos pontos de análise, locados no domínio definido pelo usuário.

Parâmetro	Tempo de meia-vida ($t_{1/2}$)
Unidade	ano
Descrição	Representa o tempo necessário para que a concentração dos contaminantes seja reduzida em 50% da concentração inicial em função dos processos de transformação. Em um modelo de decaimento de primeira ordem, o tempo $t_{1/2}$ pode ser calculado em função do coeficiente de biodegradação: $t_{1/2} = \ln 2 / \lambda$
Valores Típicos	BTEX: de 0,2 ano a 2 anos, etanol: 0,1 ano a 1 ano. Estes valores foram obtidos através de experimentos de derramamentos controlados de gasolina com etanol e diesel, realizado na Fazenda Experimental da Ressacada.
Fonte de dados	Igual ao caso do coeficiente de biodegradação λ , o tempo de meia vida pode ser obtido através da seleção de valores da literatura ou pela calibração com dados de campo existentes.
Como entrar com os dados	Os dados são inseridos diretamente no campo destinado a entrada de informações dos contaminantes e do etanol e nos pontos de análise, locados no domínio definido pelo usuário ou no módulo <i>Estudo</i> .

Parâmetro	Concentração de Inibição ($C_{inibição}$)
Unidade	mg/L
Descrição	A concentração de inibição é a concentração de etanol a partir da qual a biodegradação dos hidrocarbonetos do petróleo é inibida. Isto ocorre por que o etanol é o substrato preferencial dos microrganismos degradadores em relação aos hidrocarbonetos do petróleo.
Valores Típicos	Os estudos de campo de derramamentos controlados de gasolina com etanol e diesel com etanol, realizados na Fazenda Experimental da Ressacada, têm demonstrado que concentrações de 10 mg/L de etanol podem inibir a biodegradação dos hidrocarbonetos do petróleo. Em favor da segurança, devem ser adotados valores entre 1,0 e 10,0 mg/L
Fonte de dados	Avaliação de derramamentos no campo e ensaios de laboratório.
Como entrar com os dados	Os dados são inseridos diretamente no campo destinado à entrada de informações do etanol no módulo <i>Estudo</i> .

4.5 Dados da fonte

Parâmetro	Volume Derramado (V)
Unidade	L
Descrição	O volume derramado representa a quantidade de contaminante presente na zona saturada do aquífero na forma de produto puro (<i>NAPL</i>).
Valores Típicos	100 – 20000 L
Fonte de dados	Em casos em que o volume derramado é desconhecido, uma estimativa pode ser obtida através do histórico do derramamento, controle de estoques dos tanques, inferências sobre informações de sondagens e concentrações de contaminantes na área impactada.
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente no campo designado aos dados da fonte: Volume Derramado.

Parâmetro	Área Superficial (A)
Unidade	m^2
Descrição	Área superficial corresponde a região bidimensional dentro do domínio de simulação onde são obtidas as maiores leituras de concentrações de contaminantes.
Valores Típicos	1 – 10 m^2
Fonte de dados	Avaliações <i>in loco</i> através de análise do solo e da água subterrânea em poços de monitoramento.
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente no campo designado aos dados da fonte: Área Superficial.

Parâmetro	Profundidade de Mistura (h_m)
Unidade	m
Descrição	É a profundidade na qual o produto puro (<i>NAPL</i>) fica submerso na zona saturada do aquífero. A profundidade de mistura e a área superficial definem o volume de produto puro no qual a água subterrânea fica em contato e solubiliza os contaminantes.
Valores Típicos	1 – 3 m
Fonte de dados	Avaliação <i>in loco</i> ou estimativas a partir de casos semelhantes.
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente no campo designado aos dados da fonte: Profundidade de Mistura.

Parâmetro	Densidade (μ)
Unidade	g/cm ³
Descrição	Termo utilizado no balanço de massa que representa a densidade do contaminante a ser simulado, como por exemplo, os compostos do grupo BTEX.
Valores Típicos	Varia em função do tipo de contaminante: benzeno 0,876 g/cm ³ , tolueno 0,867 g/cm ³ , etilbenzeno 0,867 g/cm ³ , <i>m,p</i> -xileno 0,861 g/cm ³ , <i>o</i> -xileno 0,880 g/cm ³ e etanol* 0,792 g/cm ³ . *No modelo já está incluída a densidade do etanol.
Fonte de dados	Seleção de valores da literatura: Howard (1990).
Como entrar com os dados	Os dados são entrados no banco de dados dos contaminantes e diretamente no campo designado aos dados da fonte: Densidade.
Parâmetro	Peso Molecular (PM)
Unidade	g/mol
Descrição	Termo utilizado no balanço de massa que representa a massa contida em uma molécula de contaminante a ser simulado, como por exemplo, os compostos do grupo BTEX.
Valores Típicos	Varia em função do tipo de contaminante: benzeno 78,11 g/mol, tolueno 92,13 mol, etilbenzeno 106,16 g/mol, <i>m,p</i> -xileno 106,16 g/mol, <i>o</i> -xileno 106,16 g/mol e etanol 46,07 g/mol.
Fonte de dados	Seleção de valores da literatura: Howard (1990) e Schwarzenbach; Gschwend & Imboden (1993).
Como entrar com os dados	Os dados são entrados no banco de dados dos contaminantes e diretamente no campo designado aos dados da fonte: Peso Molecular.

Parâmetro	Fração Volumétrica do Contaminante (f_{vc})
Unidade	Adimensional
Descrição	Corresponde à fração de soluto a ser simulado em relação ao volume de produto puro derramado (V). Por exemplo: se o lençol freático foi contaminado por gasolina e deseja-se simular o transporte e transformação do benzeno (um dos compostos da gasolina), então é necessário definir a fração volumétrica de benzeno presente na gasolina (aprox. 0,42%). Mas se o derramamento não for de gasolina ou diesel, mas de apenas um produto, como o tolueno, então, a $f_v = 100\%$. Em caso da presença do etanol, deverá ser incluída a fração de etanol presente no produto derramado.
Valores Típicos	Depende do tipo de contaminante. Para a gasolina comercial brasileira, Fernandes; Marins & Corseuil (1997) apresentaram a fração volumétrica de alguns constituintes: benzeno 0,6%, tolueno 3,3%, etilbenzeno 1,2%, <i>m,p</i> -xileno 4,6% e <i>o</i> -xileno 1,4%.
Fonte de dados	No caso de petróleo e derivados, consultar tabelas de composição.
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente no campo designado aos dados da fonte: Fração Volumétrica.

Parâmetro	Concentração do Contaminante na Fonte (C_f)
Unidade	mg/L
Descrição	Corresponde à concentração de contaminante medida na região da fonte ou calculada pelo modelo. Este parâmetro está diretamente relacionado à taxa de transferência de massa de contaminante da fonte. Se o usuário não tiver medidas de concentração na fonte, o modelo poderá calcular a concentração na fonte em função da massa derramada, da geometria da fonte utilizando a Lei de Raoult.
Valores Típicos	Apresentam grandes variações.
Fonte de dados	Leituras de concentração no campo ou adotar a opção de cálculo pelo modelo.
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente no campo designado aos dados da fonte: Concentração na Fonte.

Parâmetro	Fração Volumétrica de Etanol (f_{ve})
Unidade	Adimensional
Descrição	Corresponde ao percentual de etanol presente no soluto derramado. Este parâmetro é necessário quando o etanol está presente na fonte.
Valores Típicos	No caso da gasolina comercial brasileira varia entre 20 e 26%.
Fonte de dados	Histórico da contaminação e investigação do local
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente no campo designado aos dados da fonte: Etanol, Fração Volumétrica.

4.6 Dados de monitoramento

Parâmetro	Concentração Máxima Admitida (C_{max})
Unidade	mg/L
Descrição	Estas concentrações representam as concentrações estabelecidas pela legislação ambiental. Desta forma, é possível verificar se as concentrações simuladas estão superando as concentrações máximas admitidas. Em um procedimento de avaliação de risco, é necessário estabelecer as concentrações máximas admitidas em determinados pontos do domínio de simulação.
Valores Típicos	Variam em função do tipo de contaminante e da legislação (municipal, estadual e federal).
Fonte de dados	Legislação ambiental
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente no campo destinado à entrada de informações de monitoramento nos pontos de análise, locados no domínio definido pelo usuário.

Parâmetro	Concentração Observada (C_{obs})
Unidade	mg/L
Descrição	Refere-se às concentrações dos contaminantes dissolvidos na água subterrânea medidas no campo através de poços de monitoramento. Estes dados são utilizados na calibração do modelo, ou seja, é efetuado o ajuste dos valores preditos pelo modelo aos dados observados.
Valores Típicos	As concentrações variam em função das características dos contaminantes (ex.: solubilidade), geralmente variando da ordem de mg/L a mg/L.
Fonte de dados	Podem ser obtidas através da análise laboratorial de amostras de águas subterrâneas em poços de monitoramento.
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente no campo destinado à entrada de informações de monitoramento nos pontos de análise, locados no domínio definido pelo usuário.

4.7 Controle hidráulico

Parâmetro	Vazão de Injeção / Bombeamento (q)
Unidade	L/s
Descrição	São medidas de controle hidráulico adotadas como tecnologias de remediação e controle de áreas impactadas. A alteração do fluxo no aquífero através de injeções e bombeamentos pode evitar que áreas de risco sejam atingidas.
Valores Típicos	Variam em função das características do local e das metas a serem atingidas. Vazões negativas representam bombeamento e vazões positivas injeção de água no aquífero.
Fonte de dados	Catálogo de fabricantes e fornecedores, comparação com locais de mesmas características.
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente no campo destinado à entrada de informações sobre bombeamento nos pontos de análise, locados no domínio definido pelo usuário.

Parâmetro	Barreiras
Unidade	m
Descrição	São medidas de controle hidráulico adotadas como tecnologias de remediação e controle de áreas impactadas. A alteração do fluxo no aquífero através de barreiras pode impedir que áreas de risco sejam atingidas. Além disso, as barreiras podem ser posicionadas de tal forma que direcione o fluxo dos contaminantes a regiões onde a biodegradação é acelerada (biorremediação ativa), como no caso da tecnologia <i>Funnel and Gate</i> . As barreiras podem ser locadas no domínio de simulação como polígonos ou linhas, definindo regiões de condutividade hidráulica nula (impermeáveis).
Valores Típicos	As dimensões das barreiras variam em função das metas a serem atingidas e das características do local.
Fonte de dados	Experiências obtidas em outros casos e dados de literatura da área.
Como entrar com os dados	As barreiras são definidas através da ferramenta barreira (poligonal ou linear) onde são definidas as dimensões através de coordenadas xy ou desenhando com o mouse.

4.8 Dados gerais

Parâmetro	Tempo de Simulação (t)
Unidade	Ano
Descrição	É o período definido pelo usuário no qual a simulação do transporte e transformação de contaminantes será efetuada. Geralmente, o período é definido na tentativa de se prever qual a dimensão temporal necessária para a pluma atingir determinada concentração em uma região do domínio, ou para estimar a extensão da pluma em um determinado período. Ao definir o tempo de simulação é necessário definir o passo temporal para simulação e visualização dos resultados, denominado intervalo de saída.
Valores Típicos	1 – 50 anos
Fonte de dados	-
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente no campo destinado ao tempo de simulação.

Parâmetro	Informações do Estudo
Título	Campo destinado ao preenchimento de um título que identifique a simulação.
Responsável	Refere-se ao responsável técnico executor das simulações.
Data	Data na qual foi efetuada a simulação.
Local	Cidade, estado, município e bairro referente à área impactada.
Observações	Observações importantes que possam contribuir como informação do estudo.
Requerente	A pessoa física ou jurídica, órgão ou setor a quem se destina as informações e os resultados das simulações.

4.9 Cubagem

Parâmetro	Metas de remediação
Unidade	mg/kg
Descrição	São valores de concentração prescritos na legislação vigente que serão utilizados como valores máximos de concentração que poderão ser encontrados na área. As CMAs são frequentemente utilizadas como metas de remediação.
Valores Típicos	Variam em função da legislação para cada região.
Fonte de dados	Legislação ambiental vigente (como CONAMA 420/2009, etc.).
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente no campo destinado a entrada de informações ao adicionar um composto químico na aba de cubagem.

Parâmetro	Fator de empolamento
Unidade	Adimensional
Descrição	É a propriedade do solo que mostra em quantas vezes o solo expandirá seu volume quando se transformar em solo solto.
Valores Típicos	Areia e cascalho: 0,87; areia fina: 0,89; areia média: 0,89; areia siltosa: 0,80; argila: 0,71; argila siltosa: 0,77; cascalho: 0,95; silte: 0,80.
Fonte de dados	Análise do solo.
Como entrar com os dados	Os dados são entrados diretamente na edição dos pontos de sondagem.

4.10 Risco

A seguir são apresentadas as equações dos fatores de exposição (FE) para cada via de exposição da metodologia CETESB (SÃO PAULO, 2023), utilizadas no cálculo do risco à saúde humana e das concentrações máximas aceitáveis (CMA), e que estão implementadas na versão 3.25 do SCBR.

a) Contato dérmico com solo superficial

$$FE = \frac{ABS.SA.AF.EFderms.ED.EV.CFK}{BW.AT} \quad (4.1)$$

Onde:

FE: fator de exposição (1/dia);

ABS: fator de sorção (-);

SA: área superficial da pele disponível para contato dérmico (cm²);

AF: fator de aderência do solo na pele (mg/cm².evento);

EFderms: Frequência de exposição para contato dérmico com solo superficial (dias/ano);

ED: duração de exposição (anos);

EV: frequência de eventos para contato dérmico com solo (eventos/dia);

CFk: fator de conversão de mg para kg (kg/mg);

BW: massa corpórea (kg);

ATn: tempo médio para efeitos não carcinogênicos (dias);

ATc: tempo médio para efeitos carcinogênicos (dias).

b) Inalação de vapores a partir do solo superficial

$$FE = \frac{VFSoloSupVap.IRaamb.EF.ETs.ED}{BW.AT} \quad (4.2)$$

Onde:

FE: fator de exposição ($m^3/kg.\text{dia}$);

VFSoloSupVap: fator de volatilização de vapores a partir do solo superficial (menor valor entre *VFSoloSupVap1* e *VFSoloSupVap2*) – (kg/m^3);

IRaamb: taxa de inalação diária em ambientes abertos (m^3/hora);

EF: frequência de exposição (dias/ano);

ETs: tempo de exposição para inalação de partículas e vapores a partir do solo superficial (horas/dia);

ED: duração de exposição (anos);

BW: massa corpórea (kg);

ATn: tempo médio para efeitos não carcinogênicos (dias);

ATc: tempo médio para efeitos carcinogênicos (dias).

- *VFSoloSupVap1* (kg/m^3):

$$VFSoloSupVap1 = \left[\left(\frac{2.Ws.RHOS.CF4}{Uar.CF2.SIGMAar.CF3} \right) \cdot \sqrt{\left(\frac{Dsolo.Heff}{\pi.(\theta_{ws} + (Kd.RHOS.CF4) + (Heff.\theta_{as})).T} \right)} \right] . CF1 \quad (4.3)$$

Onde:

Ws: largura do solo superficial impactado (m);

RHOS: densidade do solo (kg/m^3);

Uar: velocidade do Vento (m/s);

SIGMAar: altura da caixa (m);

Dsolo: coeficiente de difusão efetiva – solo (cm^2/s);

Heff: coeficiente efetivo da Lei de Henry ($cm^3\text{-água}/cm^3\text{-ar}$);

θws: conteúdo volumétrico de água na zona não saturada ($cm^3\text{-água}/cm^3\text{-solo}$);

Kd: coeficiente de distribuição (L-água/kg-solo);

θas: conteúdo volumétrico de ar na zona não saturada ($cm^3\text{-ar}/cm^3\text{-solo}$);

T: tempo médio do fluxo de vapor a partir da fonte (s);

CF1: fator de conversão 1 (-);

CF2: fator de conversão 2 (cm/m);

CF3: fator de conversão 3 (cm);

CF4: fator de conversão 4 ($g.m^3/kg.cm^3$).

- $VFSoloSupVap2$ (kg/m^3):

$$VFSoloSupVap2 = \left(\frac{Ws.RHOs.CF4.LSoloSup}{Uar.CF2.SIGMAar.CF3.t} \right) . CF1 \quad (4.4)$$

Onde:

Ws : largura do solo superficial impactado (m);

$RHOs$: densidade do solo (kg/m^3);

Uar : velocidade do vento (m/s);

$LSoloSup$: espessura do solo superficial impactado (cm);

t : tempo médio do fluxo de vapor a partir da fonte (s);

$SIGMAar$: altura da caixa (m);

$CF1$: fator de conversão 1 (-);

$CF2$: fator de conversão 2 (cm/m);

$CF3$: fator de conversão 3 (cm);

$CF4$: fator de conversão 4 ($\text{g} \cdot \text{m}^3$)/($\text{kg} \cdot \text{cm}^3$).

- $Dsolo$ (coeficiente de difusão efetiva do solo - cm^2/s):

$$Dsolo = \frac{Dair.\Theta_{as}^{3,33}}{\Theta t^2} + \frac{Dwat.\Theta ws^{3,33}}{Heff.\Theta t^2} \quad (4.5)$$

Onde:

$Dair$: coeficiente de difusão da substância química no ar (cm^2/s);

$Heff$: coeficiente efetivo da Lei de Henry ($\text{cm}^3\text{-água}/\text{cm}^3\text{-ar}$);

Θws : conteúdo volumétrico de água na zona não saturada ($\text{cm}^3\text{-água}/\text{cm}^3\text{-solo}$);

Θ_{as} : conteúdo volumétrico de ar na zona não saturada ($\text{cm}^3\text{-ar}/\text{cm}^3\text{-solo}$);

Θt : porosidade total (-);

$Dwat$: coeficiente de difusão da substância química na água (cm^2/s).

- Θws (conteúdo volumétrico de água na zona não saturada ($\text{cm}^3\text{-água}/\text{cm}^3\text{-solo}$)):

$$\Theta ws = \Theta t \cdot 0,39 \quad (4.6)$$

Onde:

Θt : porosidade total (-).

- Θ_{as} (conteúdo volumétrico de ar na zona não-saturada ($\text{cm}^3\text{-ar}/\text{cm}^3\text{-solo}$)):

$$\Theta_{as} = \Theta t - \Theta ws \quad (4.7)$$

Onde:

- θ_{ws} : conteúdo volumétrico de água na zona não saturada ($\text{cm}^3\text{-água}/\text{cm}^3\text{-solo}$);
- θ_t : porosidade total (-).

- Kd (*coeficiente de distribuição (L-água/kg-solo)*):

$$Kd = Koc \cdot foc \cdot CF5 \quad (4.8)$$

Onde:

Koc : coeficiente de participação do carbono orgânico-água (L/kg);

foc : fração de carbono orgânico (%);

$CF5$: fator de conversão 5 (-).

c) Inalação de partículas a partir do solo superficial

$$FE = \frac{VFSoloSupPar \cdot IRaamb \cdot EF \cdot ETs \cdot ED}{BW \cdot AT} \quad (4.9)$$

Onde:

FE : fator de exposição ($\text{m}^3/\text{kg}\cdot\text{dia}$);

$VFSoloSupPar$: fator de volatilização de partículas a partir do solo superficial (kg/m^3);

$IRaamb$: taxa de inalação diária em ambientes abertos (m^3/hora);

EF : frequência de exposição (dias/ano);

ETs : tempo de exposição para inalação de partículas e vapores do solo superficial (horas/dia);

ED : duração de exposição (anos);

BW : massa corpórea (kg);

ATn : tempo médio para efeitos não carcinogênicos (dias);

ATc : tempo médio para efeitos carcinogênicos (dias).

- $VFSoloSupPar$ (*fator de volatilização de partículas a partir do solo superficial (kg/m^3)*):

$$VFSoloSupPar = \left(\frac{Pa \cdot WS}{Uar \cdot CF2 \cdot SIGMAar \cdot CF3} \right) \cdot CF1 \quad (4.10)$$

Onde:

P_a : taxa de emissão de partículas ($\text{g}/\text{cm}^2.\text{s}$);

W_s : largura do solo superficial impactado (cm);

U_{ar} : velocidade do vento (m/s);

$SIGMA_{ar}$: altura da caixa (m);

CF_1 : fator de conversão 1 (-);

CF_2 : fator de conversão 2 (cm/m)

CF_3 : fator de conversão 3 (cm)

d) Ingestão de solo superficial

$$FE = \frac{IR_s.EF.ED.FI.CF_k}{BW.AT} \quad (4.11)$$

Onde:

FE : fator de exposição ($\text{m}^3/\text{kg}.dia$);

IR_s : taxa de ingestão de solo (mg/dia);

EF : frequência de exposição (dias/ano);

ED : duração de exposição (anos);

FI : fração ingerida da fonte de contaminação - solo (-);

CF_k : fator de conversão de mg para kg (kg/mg);

BW : massa corpórea (kg);

AT_n : tempo médio para efeitos não carcinogênicos (dias);

AT_c : tempo médio para efeitos carcinogênicos (dias).

e) Ingestão de vegetais (compostos metálicos)

$$FE = IRL \cdot \left(\frac{BCFF + cdpx}{frbveg} \right) + \frac{IRR.BCF}{frkveg} \cdot \left(\frac{Flveg.EFveg.EDveg}{BW.AT} \right) \quad (4.12)$$

Onde:

FE : fator de exposição ($\text{m}^3/\text{kg}.dia$);

IRL : taxa de ingestão de culturas caseiras foleáceas/estruturais (kg/dia);

$BCFF$: fator de bioconcentração para metais (foleáceas/estruturais);

$cdpx$: porção depositada descontando-se a concentração do solo (-);

$frbveg$: fator de conversão de peso em base seca para base úmida para culturas foliáceas (-);

IRR: taxa de ingestão de culturas caseiras tuberosas (kg/dia);
BCF: fator de bioconcentração para metais (raiz);
frkveg: fator de conversão de peso em base seca para base úmida para raízes (-);
Flveg: fração ingerida de vegetais provenientes de área contaminada (-);
EFveg: frequência de exposição para consumo de vegetais (dias/ano);
EDveg: duração da exposição para consumo de vegetais (anos);
BW: massa corpórea (kg);
ATc: tempo médio para carcinogênicos (dias);
ATn: tempo médio para não carcinogênicos (dias).

- *BCFF (fator de bioconcentração para metais (foleáceas/estruturais – adimensional)):*

$$BCFF = e^{2,67 - 1,12 \cdot \log(Kd)} \quad (4.13)$$

Onde:

Kd: coeficiente de distribuição (L-água/kg-solo).

- *BCF (fator de bioconcentração para metais (raiz – adimensional)):*

$$BCF = e^{2,67 - 1,12 \cdot \log(Kd)} \quad (4.14)$$

Onde:

Kd: coeficiente de distribuição (L-água/kg-solo).

f) Ingestão de vegetais (compostos orgânicos)

$$FE = \left\{ IRL \cdot \left[\left(\frac{RHOs.CF4.pw.tscf.Qveg}{Vwveg.pplantveg.a.Vlveg} \right) + cdpx.fdwsvsveg \right] + IRR.BCFR \right\} \cdot \left(\frac{Flveg.EFveg.EDveg}{BW.AT} \right) \quad (4.15)$$

Onde:

FE: fator de exposição (m³/kg.dia);

IRL: taxa de ingestão de culturas caseiras foleáceas/estruturais (kg/dia);

RHOs: densidade do Solo (kg/m³);

CF4: fator de conversão 4 (g.m³/ kg.cm³);

pw: fração da massa de água no solo para contaminantes orgânicos (-);

tscf: fator de concentração do fluxo de transpiração para contaminantes (-);

Qveg: fluxo de transpiração (L/dia);

Vwveg: fração volume água (-);

pplantveg: densidade do tecido da planta (kg/m³)

a: expressão de perda para as folhas;

Vlveg: volume foliar (0,002 m³);

cdpx: porção depositada descontando-se a concentração do solo (-);

fdwsveg: razão de base seca para base úmida em culturas foliáceas (kg/kg);

IRR: taxa de ingestão de culturas caseiras tuberosas (kg/dia);

BCFR: fator de bioconcentração para culturas tuberosas de contaminantes orgânicos (mg/kg-cultura/mg/kg-solo);

Flveg: fração ingerida de vegetais provenientes de área contaminada (-);

EFveg: frequência de exposição para consumo de vegetais (dias/ano);

EDveg: duração da exposição para consumo de vegetais (anos);

BW: massa corpórea (kg);

ATn: tempo médio para não carcinogênicos (dias);

ATc: tempo médio para carcinogênicos (dias).

- *pw* (*fração da massa de água no solo para contaminantes orgânicos – adimensional*)

$$pw = \frac{zw.Vwveg}{za.Vaveg + zw.Vwveg + zs.Vsveg} \quad (4.16)$$

Onde:

zw: constante de fugacidade da água para contaminantes orgânicos (mol/m³.Pa);

Vwveg: fração de volume na água (-);

za: constante de fugacidade para o ar para contaminantes orgânicos (mol/m³.Pa);

Vaveg: fração do volume do ar (-);

zs: constante de fugacidade para o solo para contaminantes orgânicos (mol/m³.Pa);

Vsveg: fração de volume no solo (-).

- *zw* (*constante de fugacidade da água para compostos orgânicos (mol/m³.Pa)*):

$$zw = \frac{s.(\frac{1}{MW})}{(pvap.101325)} \quad (4.17)$$

Onde:

S : solubilidade da substância química pura na água (mg/L);

MW : peso molecular (g/mol);

p_{vap} : pressão de vapor (mm-Hg).

- za (*capacidade de fugacidade dos compostos orgânicos no ar (mol/m³.Pa)*):

$$za = \frac{1}{R.Tarveg} \quad (4.18)$$

Onde:

R : constante universal dos gases (Pa.m³/mol.K);

$Tarveg$: temperatura (K).

- z (*capacidade de fugacidade dos compostos orgânicos no solo (mol/m³.Pa)*):

$$zs = \frac{Kd.RHOs.CF4.zw}{Vsveg} \quad (4.19)$$

Onde:

Kd : coeficiente de distribuição (L-água/kg-solo);

$RHOs$: densidade do solo (kg/m³);

$CF4$: fator de conversão 4 (g.m³/kg.cm³);

zw : constante de fugacidade da água para contaminantes orgânicos (mol/m³.Pa);

$Vsveg$: fração de volume no solo (-).

- $Vaveg$ (*fração do volume do ar – adimensional*):

$$Vaveg = \theta t - \theta ws \quad (4.20)$$

Onde:

θt : porosidade total (-);

θws : conteúdo volumétrico de água na zona não saturada (cm³-água/cm³-solo).

- $Vsveg$ (*fração de volume no solo – adimensional*)

$$Vsveg = (1 - \theta t) \quad (4.21)$$

Onde:

θt : porosidade total (-)

- *tsc (fator de concentração do fluxo de transpiração para contaminantes – adimensional):*

$$tscf = \frac{0,784 \cdot e^{-(kow-1,78)^2}}{2,44} \quad (4.22)$$

Onde:

kow: coeficiente de partição octanol-água (log kow) (-);

- *Vwveg (fração de volume na água – adimensional):*

$$Vwveg = \theta t \cdot 0,39 \quad (4.23)$$

Onde:

θt: porosidade total (-)

- *a (expressão de perda para as folhas (1/dia)):*

$$a = \left(\frac{Alveg \cdot gveg}{kla \cdot Vlveg} \right) + \lambda mveg + \lambda pveg + \lambda gveg \quad (4.24)$$

Onde:

Alveg: área foliar (m²);

gveg: condutância (m/dia);

kla: coeficiente de partição entre as folhas e a atmosfera para contaminantes orgânicos (-);

Vlveg: volume foliar (m³);

λmveg: constante da taxa de metabolismo (1/dia);

λpveg: constante da taxa de foto degradação (1/dia);

λgveg: constante da taxa de crescimento (1/dia).

- *Kla (coeficiente de partição entre folha e atmosfera para contaminantes orgânicos - adimensional):*

$$kla = \frac{Wpveg + Lpveg \cdot (10^{kow})^{bveg}}{Heff} \quad (4.25)$$

Onde:

Wpveg: teor de umidade nas folhas das plantas (g/g);

Lpveg: conteúdo lipídico na planta foleácea (g/g);

kow: coeficiente de partição octanol-água (log kow) (-);

bveg: expoente de correção para diferenças entre lipídios da planta e octanol (-);

Heff: coeficiente efetivo da Lei de Henry (cm³-água/cm³-ar).

- *BCFR* (*fator de bioconcentração (mg/kg-cultura)/(mg/kg-solo)*):

$$BCFR = \frac{\frac{Qveg}{Kd}}{\left(\frac{Qveg}{Krw}\right) + (Kveg \cdot Vtrappveg)} \quad (4.26)$$

Onde:

Qveg: fluxo de transpiração (L/dia);

Kd: coeficiente de distribuição (L-água/kg-solo);

Krw: equilíbrio da partição entre raiz e água para contaminantes orgânicos (L/kg);

Kveg: constante de primeira ordem da taxa de crescimento (1/dia);

Vtrappveg: volume radicular (L).

- *Krw* (*equilíbrio de partição entre raiz e água para compostos orgânicos (L/Kg)*)

$$Krw = Wtrappveg + Ltrappveg \cdot aveg \cdot (10^{kow})^{btrappveg} \quad (4.27)$$

Onde:

Wtrappveg: teor de umidade nas raízes (gm/gm);

Ltrappveg: conteúdo lipídico na raiz (gm/gm);

aveg: correção da densidade (-);

kow: coeficiente de partição octanol-água (log kow) (-);

btrappveg: fator empírico (-).

g) Inalação em ambientes abertos a partir do solo subsuperficial

$$FE = \frac{VFSoloSubAbe \cdot IRaamb \cdot EF \cdot ETaa \cdot ED}{BW \cdot AT} \quad (4.28)$$

Onde:

FE: fator de exposição (m³/kg dia);

VFSoloSubAbe: fator de volatilização em ambientes fechados a partir do solo subsuperficial (menor valor entre VFSoloSubAbe1 e VFSoloSubAbe2);

IRaamb: taxa de inalação diária em ambientes abertos (m³/hora);

EF: frequência de exposição (dias/ano);

ETaa: tempo de exposição para inalação de vapores em ambientes abertos (horas/dia);

ED: duração de Exposição (anos);

BW: massa corpórea (kg);

ATn: tempo médio para efeitos não carcinogênicos (dias);

ATc: tempo médio para efeitos carcinogênico (dias).

- *VFSoloSubAbe1* (*fator de volatilização de vapores a partir do solo superficial (kg/m³)*):

$$VFSoloSubAbe1 = \left\{ \frac{Heff.RHOs.CF4}{[(Kd.RHOs.CF4) + \theta_{ws} + (Heff.\theta_{as})] \cdot [1 + \frac{Uar.CF2.SIGMAar.CF3.Lss}{D_{solo}.Wss}]} \right\} \cdot CF1 \quad (4.29)$$

Onde:

Heff: coeficiente efetivo da Lei de Henry (m³-água/m³-ar);

RHOs: densidade do solo (kg/m³);

Kd: coeficiente de distribuição (L-água/kg-solo);

\theta_{ws}: conteúdo volumétrico de água na zona não saturada (cm³-água/cm³-solo);

\theta_{as}: conteúdo volumétrico de ar na zona não saturada (cm³-ar/cm³-solo);

Uar: velocidade do vento (m/s);

SIGMAar: altura da caixa (m);

Lss: profundidade da fonte no solo subsuperficial (cm);

Dsolo: coeficiente de difusão efetiva do solo (cm²/s);

Wss: largura do solo subsuperficial impactado (cm);

hv: espessura da zona não saturada (cm);

LSoloSup: espessura do solo superficial impactado (cm);

CF2: fator de conversão 2 (cm/m);

CF3: fator de conversão 3 (cm);

CF4: fator de conversão 4 (g.m³/kg.cm³).

- *VFSoloSubAbe2* (*fator de volatilização de vapores a partir do solo superficial (kg/m³)*):

$$VFSoloSubAbe2 = \left(\frac{Wss.RHOs.CF4.dss}{Uar.CF2.SIGMAar.CF3.t} \right) \cdot CF1 \quad (4.30)$$

Onde:

Wss : largura do solo subsuperficial impactado (cm);

$RHOs$: densidade do solo (kg/m^3);

$CF4$: fator de conversão 4 ($\text{g} \cdot \text{m}^3 / \text{kg} \cdot \text{cm}^3$);

dss : espessura do solo subsuperficial impactado (cm);

Uar : velocidade do vento (m/s);

$CF2$: fator de conversão 2 (cm/m);

$SIGMAar$: altura da caixa (m);

$CF3$: fator de conversão 3 (cm);

$CF1$: fator de conversão 1 (-)

τ : (788400000).

- Dss (espessura da camada de solo subsuperficial contaminado (cm)):

$$dss = hv - L_{\text{soLoSup}} \quad (4.31)$$

Onde:

hv : espessura da zona não saturada (cm);

L_{soLoSup} : espessura do solo superficial impactado (cm).

h) Inalação em ambientes fechados a partir do solo subsuperficial

$$FE = \frac{VFSoloSubFec.IRaesp.EF.ETaf.ED}{BW.AT} \quad (4.32)$$

Onde:

FE : fator de exposição ($\text{m}^3/\text{kg dia}$);

$VFSoloSubFec$: fator de volatilização em ambientes fechados a partir do solo subsuperficial (menor valor entre $VFSoloSubFec1$, $VFSoloSubFec2$ e $VFSoloSbuFec3$);

$IRaesp$: taxa de inalação diária em ambientes fechados (m^3/hora);

EF : frequência de exposição (dias/ano);

$ETaf$: tempo de exposição para inalação de vapores em ambientes fechados (horas/dia);

ED : duração de exposição (anos);

BW : massa corpórea (kg);

ATn: tempo médio para efeitos não carcinogênicos (dias);

ATc: tempo médio para efeitos carcinogênicos (dias).

- *VFSoloSubFec1* (*fator de volatilização proveniente do solo subsuperficial em ambientes fechados (kg/m³)*):

$$VFSoloSubFec1 = \left(\frac{RHOS.CF4.dss}{Lb.ER.\tau} \right) . CF1 \quad (4.33)$$

Onde:

RHOS: densidade do solo (kg/m³);

CF4: fator de conversão 4 (g.m³/kg.cm³);

dss: espessura do solo superficial impactado (cm);

CF1: fator de conversão 1;

Lb: pé direito (cm);

ER: razão de troca de ar em espaços fechados (1/s);

τ : tempo médio do fluxo de vapor a partir da fonte (s).

- *VFSoloSubFec2* (*fator de volatilização proveniente do solo subsuperficial em ambientes fechados (kg/m³)*):

$$VFSoloSubFec2 = \left[\frac{\left(\frac{Heff.RHOS.CF4}{(Kd.RHOS.CF4)+\theta ws+(Heff.\theta as)} \right) \left(\frac{Dsolo}{LSS} \right) \cdot e^E}{e^E + \left(\frac{Dsolo}{ER.Lb} \right) + \left(\frac{Dsolo}{\frac{Dfendasconstrucoes}{Lcrk}} \right) \cdot (e^E - 1)} \right] . CF1 \quad (4.34)$$

Onde:

Heff: coeficiente efetivo da Lei de Henry (cm³-água/cm³-ar);

RHOS: densidade do solo (kg/m³);

CF4: coeficiente de conversão 4 (g.m³/kg.cm³);

Kd: coeficiente de distribuição (L-água/kg-solo);

θws: conteúdo volumétrico de água na zona não saturada (cm³-água/cm³-solo);

θas: conteúdo volumétrico de ar na zona não saturada (cm³-ar/cm³-solo);

Dsolo: coeficiente de difusão efetiva do solo (cm²/s);

Lss: profundidade da fonte no solo subsuperficial (cm);

ER: razão de troca de ar em espaços fechados (1/s);

Lb: pé direito (cm);

E : coeficiente de difusão efetiva – fluxo convectivo de ar através das fissuras das fundações (-);

$D_{fendasconstruções}$: coeficiente de difusão efetiva – fendas das construções (cm^2/s);

L_{crk} : espessura das fundações/paredes de construções (cm);

ETA : fração da área de rachaduras/fendas nas fundações/paredes ($\text{cm}^2\text{-fenda}/\text{cm}^2\text{-área total}$).

- $VFSoloSubFec3$ (fator de volatilização proveniente do solo subsuperficial em ambientes fechados (kg/m^3)):

$$VFSoloSubFec3 = \left[\frac{\left(\frac{Heff.RHOs.CF4}{(Kd.RHOs.CF4) + \theta ws + (Heff.\theta as)} \right) \left(\frac{Dsolo}{LSS} \right)}{1 + \left(\frac{Dsolo}{ER.Lb} \right) + \left(\frac{Dsolo}{LSS} \right) \left(\frac{Dfendasconstruções}{Lcrk} \right)} \right] . CF1 \quad (4.35)$$

Onde:

$Heff$: coeficiente efetivo da Lei de Henry ($\text{cm}^3\text{-água}/\text{cm}^3\text{-ar}$);

$RHOs$: densidade do solo (kg/m^3);

$CF4$: coeficiente de conversão 4 ($\text{g}.\text{m}^3/\text{kg}.\text{cm}^3$);

Kd : coeficiente de distribuição ($\text{L-água}/\text{kg-solo}$);

θws : conteúdo volumétrico de água na zona não saturada ($\text{cm}^3\text{-água}/\text{cm}^3\text{-solo}$);

θas : conteúdo volumétrico de ar na zona não saturada ($\text{cm}^3\text{-ar}/\text{cm}^3\text{-solo}$);

ER : razão de troca de ar em espaços fechados ($1/\text{s}$);

Lb : pé direito (cm);

$Dsolo$: coeficiente de difusão efetiva –solo (cm^2/s);

Lss : profundidade da fonte no solo subsuperficial (cm);

$Dfendasconstruções$: coeficiente de difusão efetiva – fendas das construções (cm^2/s);

L_{crk} : espessura das fundações/paredes de construções (cm);

ETA : fração da área de rachaduras/fendas nas fundações/paredes ($\text{cm}^2\text{-fenda}/\text{cm}^2\text{-área total}$).

- E (coeficiente de difusão efetiva - fluxo convectivo de ar através das fissuras das fundações (cm^2/s)):

$$E = \frac{\frac{Qs}{Ab}}{\left(\frac{Dfendasconstruções}{Lcrk} \right) . ETA} \quad (4.36)$$

Onde:

Qs: fluxo convectivo de ar pela laje (cm^3/s);

Ab: área das fundações (cm^2)

Dfendasconstruções: coeficiente de difusão efetiva – fendas das construções (cm^2/s);

Lcrk: espessura das fundações/paredes de construções (cm);

ETA: fração da área de rachaduras/fendas nas fundações/paredes ($\text{cm}^2\text{-fenda}/\text{cm}^2\text{-área total}$).

- *Qs*: (fluxo convectivo ao longo das fundações (cm^3/s))

$$Qs = \frac{2\pi.dp.kv.Xcrk}{Uar.\log\left(\frac{2.Zcrk.Xcrk}{Ab.ETA}\right)} \quad (4.37)$$

Onde:

dp: Gradiente de pressão (g/cm-s^2);

Lcrk: Espessura das fundações/paredes de construções (cm);

kv: Permeabilidade do solo ao vapor (cm^2);

Xcrk: Perímetro da Fundação (cm);

Uar: Velocidade do vento (m/s);

Zcrk: Profundidade da base das fundações (cm);

Ab: Área das fundações (cm^2);

ETA: Fração da área de rachaduras/fendas nas fundações/paredes ($\text{cm-fenda}/\text{cm}^2\text{-área total}$);

i) Contato dérmico com água subterrânea

$$FE = \frac{PConst.SA.EFderm.ED.ETwsubderm.CFd}{BW.AT} \quad (4.38)$$

Onde:

FE: fator de exposição ($\text{m}^3/\text{kg dia}$)

PConst: constante de permeabilidade dérmica [cm/h];

SA: Área superficial da pele disponível para contato dérmico (cm^2);

EFderm: frequência de exposição para contato dérmico com água subterrânea (dias/ano);

ED: duração de exposição (anos);

$ET_{wsu\text{b}derm}$: tempo de exposição para contato dérmico com água subterrânea (horas/dia);

CF_d : fator de conversão de L para cm^3 (L/cm^3);

BW : massa corpórea (kg);

AT_n : tempo médio para efeitos não carcinogênicos (dias);

AT_c : tempo médio para efeitos carcinogênicos (dias).

j) Inalação em ambientes abertos a partir da água subterrânea

$$FE = \frac{VFAguaSubAbe.IRaamb.EF.ETaa.ED}{BW.AT} \quad (4.39)$$

Onde:

FE : fator de exposição ($\text{m}^3/\text{kg dia}$);

$VFAguaSubAbe$: fator de volatilização em ambientes abertos a partir da água subterrânea (L/m^3);

$IRaamb$: taxa de inalação diária em ambientes abertos (m^3/hora);

EF : frequência de exposição (dias/ano);

$ETaa$: tempo de exposição para inalação de vapores em ambientes abertos (horas/dia);

ED : duração de exposição (anos);

BW : massa corpórea (kg);

AT_n : tempo médio para efeitos não carcinogênicos (dias);

AT_c : tempo médio para efeitos carcinogênicos (dias).

- $VFAguaSubAbe$: (fator de volatilização em ambientes abertos a partir da água subterrânea (L/m^3))

$$VFAguaSubAbe = \left(\frac{Heff}{1 + \frac{Uar.CF2.SIGMAar.CF3.Lgwa}{Ww.Daguasub solo}} \right) . CF1 \quad (4.40)$$

Onde:

$Heff$: coeficiente efetivo da Lei de Henry ($\text{cm}^3\text{-água}/\text{cm}^3\text{-ar}$);

Uar : velocidade do vento (m/s);

$SIGMAar$: altura da caixa (m);

$CF2$: fator de conversão 2 (cm/m);

$CF3$: fator de conversão 3 (cm);

Lgwa: profundidade do nível d'água (cm);

Ww: largura da área fonte na direção paralela ao fluxo da água subterrânea (cm);

Daguasubsolo: coeficiente de difusão efetiva da água subterrânea-solo (cm^2/s);

CF1: fator de conversão 1 (-)

- *Daguasubsolo*: Coeficiente de difusão efetiva da água subterrânea-solo (cm^2/s)

$$Daguasubsolo = \frac{hcap + hv}{\left(\frac{hcap}{Dfranjacapilar}\right) + \left(\frac{hv}{Dsolo}\right)} \quad (4.41)$$

Onde:

hcap: espessura da franja capilar (cm);

hv: espessura da zona não saturada (cm);

Dfranjacapilar: coeficiente de difusão efetiva – franja capilar (cm^2/s);

Dsolo: Coeficiente de difusão efetiva – solo (cm^2/s)

- *hv*: Espessura da zona não-saturada (cm)

$$hv = Lgwa - hcap \quad (4.42)$$

Onde:

Lgwa: profundidade do nível d'água (cm);

hcap: espessura da franja capilar (cm)

- *Dfranjacapilar*: Coeficiente de difusão efetiva da franja capilar (cm^2/s)

$$Dfranjacapilar = \frac{Dair \cdot \Theta acap^{3,33}}{\Theta t^2} + \frac{Dwat \cdot \Theta wcap^{3,33}}{Heff \cdot \Theta t^2} \quad (4.43)$$

Onde:

Dair: coeficiente de difusão da substância química no ar (cm^2/s);

Θacap: conteúdo volumétrico de ar na franja capilar ($\text{cm}^3\text{-ar}/\text{cm}^3\text{-solo}$);

Θt: porosidade total (-)

Dwat: coeficiente de difusão da substância química na água(cm^2/s);

wcap: conteúdo volumétrico de água na franja ($\text{cm}^3\text{-água}/\text{cm}^3\text{-solo}$);

Heff: coeficiente efetivo da Lei da Henry ($\text{m}^3\text{-água}/\text{m}^3\text{-ar}$);

- Θ_{acap} : Conteúdo volumétrico de ar na franja capilar ($cm^3\text{-ar}/cm^3\text{-solo}$)

$$\Theta_{acap} = 0,1 \cdot \Theta_t \quad (4.44)$$

Onde:

- Θ_t : porosidade total (-);

- Θ_{wcap} : Conteúdo volumétrico de água na franja capilar ($cm^3\text{-água}/cm^3\text{-solo}$)

$$\Theta_{wcap} = 0,9 \cdot \Theta_t \quad (4.45)$$

Onde:

- Θ_t : porosidade total (-);

k) Inalação em ambientes fechados a partir da água subterrânea

$$FE = \frac{VFAguasubFec \cdot IRaesp \cdot EF \cdot ETaf \cdot ED}{BW \cdot AT} \quad (4.46)$$

Onde:

FE : fator de exposição ($m^3/kg\ dia$);

$VFAguasubFec$: fator de volatilização em ambientes fechados a partir da água subterrânea (L/m^3);

$IRaesp$: taxa de inalação diária em ambientes fechado ($m^3/hora$);

EF : frequência de exposição (dias/ano);

$ETaf$: tempo de exposição para inalação de vapores em ambientes fechados (horas/dia);

ED : duração de exposição (anos);

BW : massa corpórea (kg);

ATc : tempo médio para efeitos carcinogênicos (dias);

ATn : tempo médio para efeitos não carcinogênicos (dias).

- $VFAguasubFec$: Fator de volatilização em ambientes fechados a partir da água subterrânea (L/m^3)

$$VFAguasubFec = \left\{ \frac{Heff \cdot \left[\frac{(Daguasubsolo/Lgwa)}{ER.Lb} \right]}{1 + \left[\frac{(Daguasubsolo/Lgwa)}{ER.Lb} \right] + \left[\frac{(Daguasubsolo/Lgwa)}{(Dfendaconstruções/Lcrk) \cdot ETA} \right]} \right\} \cdot CF1 \quad (4.47)$$

Onde:

$Heff$: coeficiente efetivo da Lei da Henry ($m^3\text{-água}/m^3\text{-ar}$);

$Daguasub solo$: coeficiente de difusão efetiva da água subterrânea-solo (cm^2/s);

$Lgwa$: profundidade do nível d'água (cm);

ER : razão de troca de ar em espaços fechados (1/s);

Lb : pé direito (cm);

$Dfendaconstruções$: coeficiente de difusão efetiva nas fendas das fundações de construções (cm^2/s);

$Lcrk$: espessura das fundações/paredes de construções (cm);

ETA : fração da área de rachaduras/fendas nas fundações/parede ($cm^2\text{-fenda}/cm^2\text{-área total}$);

$CF1$: fator de conversão 1 (-)

- $Dfendaconstruções$: Coeficiente de difusão efetiva nas fendas das fundações de construções (cm^2/s)

$$Dfendaconstruções = (Dair \cdot \frac{\theta acrk^{3,33}}{\theta t^2}) + (Dwat \cdot \frac{1}{Heff} \cdot \frac{\theta wcrck^{3,33}}{\theta t^2}) \quad (4.48)$$

Onde:

$Heff$: coeficiente efetivo da Lei de Henry ($m^3\text{-água}/m^3\text{-ar}$);

$Daguasub solo$: coeficiente de difusão efetiva da água subterrânea-solo (cm^2/s);

$Lgwa$: profundidade do nível d'água (cm);

ER : taxa de renovação de ar em espaços fechados (L/s);

Lb : pé direito (cm);

$Dfendaconstruções$: coeficiente de difusão efetiva - fendas das construções (cm^2/s);

$Lcrk$: espessura das fundações/paredes de construções (cm);

ETA : fração da área de rachaduras/fendas nas fundações/paredes ($cm^2\text{-fenda}/cm^2\text{-área total}$);

$Dair$: coeficiente de difusão da substância química no ar (cm^2/s);

$\theta acrk$: conteúdo volumétrico de ar nas fendas das fundações ($cm^3\text{-ar}/cm^3\text{-volume total}$);

$\theta wcrk$: conteúdo volumétrico de água nas fendas das fundações ($cm^3\text{-água}/cm^3\text{-volume total}$);

$Dwat$: coeficiente de difusão da substância química na água (cm^2/s);

θt : porosidade total (-).

I) Ingestão de água subterrânea

$$FE = \frac{IRw.EF.ED}{BW.AT} \quad (4.49)$$

Onde:

FE: fator de exposição (m^3/kg dia);

IRw: taxa de ingestão diária de água (L/dia);

EF: frequência de exposição (dias/ano);

ED: duração de exposição (anos);

BW: massa corpórea (kg);

ATn: tempo médio para efeitos não carcinogênicos (dias);

ATc: tempo médio para efeitos carcinogênicos (dias).

Tabela 4.1 – Parâmetros de exposição definidos para os receptores (SÃO PAULO, 2023).

Parâmetro			Receptores					
			Residen- cial Rural (Adulto)	Residen- cial Rural (Criança)	Resi- dencial Urbano (Adulto)	Resi- dencial Urbano (Criança)	Traba- lhador Comercial / Industrial	Trabalha- dor em Obras Civis e de Escavação
Tempo médio para efeitos carcinogênicos	ATc	(dias)	26.280	26.280	26280	26280	26.280	26.280
Tempo médio para efeitos não carcinogênicos	ATn	(dias)	26.280	2.190	10950	2190	9.125	730
Fator de aderência do solo na pele	AF	(mg/cm ² . evento)	0,07	0,20	0,07	0,2	0,2	0,2
Massa corpórea	BW	(kg)	63	15	70	15	70,0	70,0
Duração da exposição	ED	(anos)	72	6	30	6	25	2
Duração da exposição para consumo de vegetais	EDveg	(anos)	72	6	30	6	-	-
Frequência da exposição	EF	(dias/ano)	350	350	350	350	290	290
Frequência de exposição para contato dérmico com solo superficial	EFderms	(dias/ano)	350	350	350	350	290	290
Frequência de eventos para contato dérmico com solo	EV	(eventos/dia)	1	1	1	1	1,0	1,0
Frequência de exposição para consumo de vegetais	EFveg	(dias/ano)	350	350	350	350	-	-

Parâmetro			Receptores					
			Residen-cial Rural (Adulto)	Residen-cial Rural (Criança)	Resi-dencial Urbano (Adulto)	Resi-dencial Urbano (Criança)	Traba-lhador Comercial / Industrial	Trabal-hador em Obras Civis e de Escavação
Tempo de exposição para inalação de vapores em ambientes abertos	Etaa	(h/dia)	8	8	8	8	8	8
Tempo de exposição para inalação de partículas e vapores do solo superficial	ETs	(h/dia)	8	8	2	4	8	8
Tempo de exposição para contato dérmico com água subterrânea	ETsub-derm	(h/dia)	4	2	4	2	2	8
Tempo de exposição para inalação de vapores em ambientes fechados	ETaf	(h/dia)	16	16	16	16	8	8
Fração ingerida da fonte de contaminação - solo	FI	(-)	1	1	1	1	1,0	1,0
Fração ingerida de vegetais provenientes de área contaminada	Flveg	(-)	0,33	0,33	0,04	0,33	-	-
Área superficial da pele disponível para contato dérmico	SA	(cm²)	10367	4783	10367	4783	2.457,0	2.457,0
Razão de troca de ar em espaços fechados	ER	(1/s)	0,0003125	0,0003125	0,000139	0,0003125	0,000139	0,000139
Taxa de inalação diária em ambientes abertos	IRaamb	(m³/h)	1,2	0,78	1,2	0,78	1,2	1,2
Taxa de inalação em ambientes fechados	IRaesp	(m³/ hora)	0,95	0,62	0,95	0,62	1,2	1,2
Taxa de ingestão diária de água	IRw	(L/dia)	2	1	2	1	1,0	1,0
Taxa de ingestão de solo	IRs	(mg/ dia)	100	200	-	200	50,0	200,0
Taxa de ingestão de culturas caseiras foleáceas/estruturais	IRL	(kg/ dia)	0,016	0,008	0,013	0,007	1,0	1,0
Taxa de ingestão de culturas caseiras tuberosas	IRR	(kg/ dia)	0,038	0,019	0,031	0,016	-	-
Tempo médio do fluxo de vapor a partir da fonte	tau	(s)	2270592000	2270592000	946080000	946080000	788400000	63072000

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABNT. Avaliação de passivo ambiental em solo e água subterrânea — Parte 3: Investigação detalhada. *ABNT NBR 15515-3*, 2013a.
- ABNT. Avaliação de risco a saúde humana para fins de gerenciamento de áreas contaminadas. *ABNT NBR 16209*, 2013b.
- ABNT. Modelo conceitual no gerenciamento de áreas contaminadas — Procedimento. *ABNT NBR 16210*, 2022.
- ABNT. Passivo ambiental em solo e água subterrânea — Parte 2: Investigação confirmatória. *ABNT NBR 15515-2*, 2023.
- ANDERSON, M. P.; WOESSNER, W. W.; HUNT, R. J. *Applied Groundwater Modeling*. Second ed. [s.l.] Elsevier, 2015.
- ASTM. Standard Guide for Risk-Based Corrective Action Applied at Petroleum Release Sites. *ASTM E1739-95*, 2015.
- ASTM. *Standard Test Method for Distribution Coefficients of Inorganic Species by Batch Method C1733-21*. Disponível em: <<https://compass.astm.org/document/?contentCode=ASTM%7CC1733-21%7Cen-US&proxycl=https%3A%2F%2Fsecure.astm.org&fromLogin=true>>.
- BARRY, R. P.; VER HOEF, J. M. Blackbox kriging: spatial prediction without specifying the variogram. *Journal of Agricultural, Biological and Environmental Statistics*, v. 1, p. 297–322, 1996.
- BEAR, J. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. New York: American Elsevier, 1972.
- BEJAN, A. *Convection Heat Transfer*. New York: John Wiley & Sons, 1995.
- BRASIL. Resolução nº 420, de 28 de dezembro de 2009. p. 16, 2009. Disponível em: <<https://cetesb.sp.gov.br/areas-contaminadas/wp-content/uploads/sites/17/2017/09/resolucao-conama-420-2009-gerenciamento-de-acr.pdf>>. Acesso em: 29 nov. 2022.
- BROOKS, R. H.; COREY, A. T. *Hydraulic Properties of Porous Media*. Fort Collins: Hydrology Papers Colorado State University, 1964.
- CASARINI, D. C. P. Padrões de qualidade de solos e águas subterrâneas. In: Anais Workshop sobre Biodegradação, Campinas. *Anais...* Campinas: 1996.
- CLEARY, R. W. *Águas Subterrâneas*. [s.l.] Clean Environment Brasil, Princeton Groundwater Inc. e Associação Brasileira de Recursos Hídricos (ABRH), 2007.
- CORSEUIL, H. X.; KAIPPER, B. I. A.; FERNANDES, M. Cosolvency effect in subsurface systems contaminated with petroleum hydrocarbons and ethanol. *Water Research*, v. 38, n. 6, p. 1449–1456, 2004.
- DULLIEN, F. A. L. *Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure*. 2. ed. San Diego: Academic Press, 1992.

FERNANDES, M.; MARINS, M. D.; CORSEUIL, H. X. Efeito potencial do etanol na solubilidade dos BTX em águas subterrâneas contaminadas com gasolina. In: VI Congresso Brasileiro de Geoquímica, Salvador. *Anais...* Salvador: 1997.

FETTER, C. W. *Applied hydrogeology*. Fourth ed. New Jersey: Prentice Hall PTR, 1994.

GELHAR, L. W.; WELTY, C.; REHFELDT, K. R. A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers. *Water Resources Research*, v. 28, n. 7, p. 1955–1974, 9 jul. 1992. Disponível em: <<https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1029/92WR00607>>.

GILBERT, R. O. *Statistical Methods for Environmental Pollution Monitoring*. [s.l.] Van Nostrand Reinhold Company Inc, 1987.

HOOPES, J. A.; HARLEMAN, D. R. F. Dispersion in radial flow from a recharge well. *Journal of Geophysical Research*, v. 72, n. 14, p. 3595–3607, 1967.

HOWARD, P. H. *Handbook of environmental fate and exposure data for organic chemicals*. [s.l.] CRC press, 1990. v. Volume II,

JOUSSEF, K. L. *Influência da Taxa de Dose Potencial Variável em Áreas Contaminadas no Cálculo do Risco à Saúde Humana*. 2013. Universidade Federal de Santa Catarina, 2013.

SÃO PAULO. Decisão de Diretoria Nº 010-2006-C. Dispõe sobre os novos Procedimentos para o Licenciamento de Postos e Sistemas Retalhistas de Combustíveis e dá outras providências. *Companhia Ambiental do Estado de São Paulo - CETESB*, 2006.

SÃO PAULO. *Manual de gerenciamento de áreas contaminadas*. Disponível em: <<https://cetesb.sp.gov.br/areas-contaminadas/documentacao/manual-de-gerenciamento-de-areas-contaminadas/informacoes-gerais/apresentacao-2>>.

SÃO PAULO. Planilhas para Avaliação de Risco em Áreas Contaminadas sob Investigação. *Companhia Ambiental do Estado de São Paulo - CETESB*, 2023.

SCHWARZENBACH, R. P.; GSCHWEND, P. M.; IMBODEN, D. M. *Environmental Organic Chemistry*. New York: John Wiley & Sons, 1993.

SRINIVASAN, P.; MERCER, J. W. Simulation of Biodegradation and Sorption Processes in Ground Water. *Groundwater*, v. 26, n. 4, p. 475–487, 21 jul. 1988. Disponível em: <<https://ngwa.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1745-6584.1988.tb00414.x>>.

U.S. EPA. Health and Environmental Effects Document for 4-Aminopyridine. 1991. Disponível em: <<https://cfpub.epa.gov/ncea/risk/recordisplay.cfm?deid=44649>>.

U.S. EPA. Calculating upper confidence limits for exposure point concentrations at hazardous waste sites. 2002.

U.S. EPA. Soil Sampling Quality Assurance User's Guide. 2004. Disponível em: <https://cfpub.epa.gov/si_si_public_record_report.cfm?Lab=ORD&dirEntryId=37385>.

U.S. EPA. *Regional Screening Levels (RSLs) - Generic Tables*, 2023. Disponível em: <<https://www.epa.gov/risk/regional-screening-levels-rsls-generic-tables>>.

VAN GENUCHTEN, M. T.; ALVES, W. J. *Analytical Solutions of One Dimensional Convective Dispersive Solute Transport Equations*. Technical ed. Washington DC: U.S. Department of Agriculture, 1982.

WEBER, D.; ENGLUND, E. Evaluation and Comparison of Spatial Interpolators. *Mathematical Geology*, v. 24, n. 4, 1992.

XU, M.; ECKSTEIN, Y. Use of Weighted Least-Squares Method in Evaluation of the Relationship Between Dispersion and Field Scale. *Groundwater*, v. 33, n. 6, p. 905–908, 4 nov. 1995. Disponível em: <<https://ngwa.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1745-6584.1995.tb00035.x>>.

ZOBY, J. L. G. *Atenuação natural de pluma de contaminação de gasolina e etanol em água subterrânea*. 2006. Universidade de São Paulo – USP, São Paulo, 2006.

Referências Técnicas

SCBR

Solução Corretiva Baseada no Risco

Versão 3.25

- 🌐 www.atenaeditora.com.br
- ✉️ contato@atenaeditora.com.br
- 📷 [@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora)
- ⬇️ www.facebook.com/atenaeditora.com.br



Referências Técnicas

SCBR

Solução Corretiva Baseada no Risco

Versão 3.25

- 🌐 www.atenaeditora.com.br
- ✉️ contato@atenaeditora.com.br
- 📷 [@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora)
- FACEBOOK www.facebook.com/atenaeditora.com.br

