

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA

CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA

CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL

CAMPUS II - CAMPINA GRANDE

ESTUDO DA PROPAGAÇÃO DAS PLUMAS DOS CONTAMINANTES 1,2 DICLOROETANO
1,2 DICLOROPROPANO E 1,2,3 TRICLOROPROPANO NO AQUIFERO BARREIRAS
NA ÁREA DO POLO CLOROQUÍMICO DE ALAGOAS

CARLOS MAURICIO ROCHA BARROSO

CAMPINA GRANDE - Pb

ABRIL, 1994

CARLOS MAURICIO ROCHA BARROSO

ESTUDO DA PROPAGAÇÃO DAS PLUMAS DOS CONTAMINANTES 1,2 DICLOROETANO
1,2 DICLOROPROPANO E 1,2,3 TRICLOROPROPANO NO AQUIFERO BARREIRAS
NA ÁREA DO POLO CLOROQUÍMICO DE ALAGOAS

DISSERTAÇÃO APRESENTADA AO CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA CIVIL DA UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO DE RECURSOS HÍDRICOS
EM CUMPRIMENTO ÀS EXIGÊNCIAS PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE

Dr. Seemanapalli V. K. Sarma - Ph.D.

Orientador

Dr. Hans D. M. Schuster

Orientador

Campina Grande

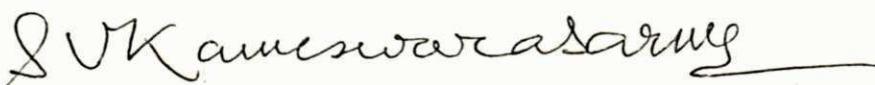
Abril, 1994

DIGITALIZAÇÃO:
SISTEMOTECA - UFCG

CARLOS MAURICIO ROCHA BARROSO

ESTUDO DA PROPAGAÇÃO DAS PLUMAS DOS CONTAMINANTES 1,2 DICLOROETANO
1,2 DICLOROPROPANO E 1,2,3 TRICLOROPROPANO NO AQUÍFERO BARREIRAS
NA ÁREA DO POLO CLOROQUÍMICO DE ALAGOAS

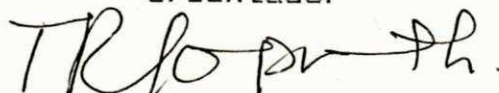
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO : RECURSOS HÍDRICOS


Dr. Seemanapalli V. K. Sarma - Ph.D.

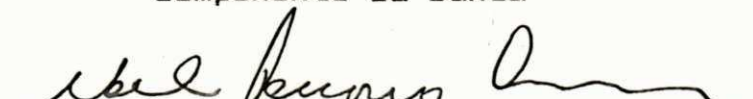
Orientador


Dr. Hans D. M. Schuster

Orientador


Dr. Gopnath T. R - Ph.D

Componente da Banca


Abel Tenório Cavalcante - M.Sc.

Componente da Banca

Campina Grande - Pb

Abril, 1994

AGRADECIMENTOS

Para a obtenção dos trabalhos de pesquisa objeto da presente dissertação de Mestrado, tornou-se imprescindível o apoio das Instituições e profissionais da área. Dentre tantos, destacamos os seguintes:

O professor da área de Recursos Hídricos da Universidade Federal da Paraíba, Dr. Seemanapalli V. K. Sarma, orientador da pesquisa, que participando ativamente no desenvolver da mesma muito contribuiu com sua larga experiência, conhecimento, objetividade, sem o qual o presente trabalho não seria realizado.

O professor Dr. Hans Dieter Max Schuster, os agradecimentos pela orientação e obséquios dispensados.

O professor Abel Tenório Cavalcante, os reconhecimentos pelas críticas e sugestões apresentadas.

A Universidade Federal de Alagoas pelo o incentivo e crédito a pesquisa.

A Universidade Federal da Paraíba que, com o curso de Mestrado ofertado, proporcionou a exequibilidade desta pesquisa.

Ao Exceletíssimo Sr Juiz da Comarca da Cidade de Marechal Deodoro - Al, pelos esclarecimentos quanto a obtenção dos dados de Relatórios das Empresas de Consultorias.

A todos os professores da área de recursos Hídricos da UFPB pela seriedade demonstrada no decorrer do curso.

Aos colegas mestrando José Vicente Ferreira Neto e Carlos Alberto Marques dos Anjos, pelo incondicional e permanente espírito de cooperação.

E, por fim, a todos aqueles que direta ou indiretamente contribuíram para a conclusão do presente trabalho.

RESUMO

Esta dissertação apresenta os resultados de uma pesquisa sobre a contaminação do "Aqüífero Barreiras" por orgaos clorados, no Polo Cloroquímico de Alagoas - PCA.

As substâncias químicas envolvidas no processo que são produtos que apresentam grande poder tóxico, comprometeram a qualidade do aqüífero, gerando um impacto ambiental significativo e da maior gravidade. Dentre tais contaminantes, destacam-se os compostos 1,2 dicloroetano (1,2 - DCE), 1,2 dicloropropano (1,2 - DCP) e 1,2,3 tricloropropano (1,2,3 - TCE), por apresentarem maiores valores em suas concentrações e por conseguinte, alvo da pesquisa.

O aqüífero Barreiras, na área do PCA, possui uma espessura média de 20 metros, constituindo-se litológicamente por um "pacote" areno-argiloso, intercalado por níveis descontínuos de material argiloso, sendo caracterizado como um aqüífero freático.

O modelo de fluxo adotado, baseado no método das diferenças finitas - algoritmo IADI - (Kinzelbach, 1986), utilizou os dados extraídos de relatórios da empresa Paranaguá - Engenharia e

Consultoria Ltda (1991). O mesmo, mostrou-se adequado para fins de simulações de fluxo bidimensionais em locais onde as informações são incipientes. Os valores dos parâmetros hidrodinâmicos do aquífero foram obtidos em consequência do aferimento do modelo de fluxo, e a velocidade média, linear, de propagação de fluxo no aquífero, de acordo com os parâmetros aferidos, é da ordem de 0.672 m/dia com direção NW - SE, sentido SE.

A propagação das plumas dos contaminantes acima mencionados, foram geradas utilizando-se o modelo de transporte embasado no método explícito das diferenças finitas como dado por Kinzelbach, (1986). As concentrações tomadas como referência para a calibração do modelo, foram aquelas amostradas em poços de monitoramentos e de produção (Paranaguá, 1991) e analisadas pelo laboratório americano Industrial and Environmental Analyses, Inc - IEA.

Apesar da simplicidade do modelo, principalmente por tratar o meio como homogêneo e isotrópico e processar os compostos como conservativos ou seja, substâncias químicas não reagentes, a pluma para o 1,2 - DCP apresentou um resultado que confirma a veracidade do modelo. Já as plumas para o 1,2 - DCE, para o 1,2,3 - TCP e para os organos totais (projetada com base nas análises do laboratório da Companhia Alagoas Industrial - CINAL, pois o IEA não os dosou), mostraram-se confiáveis.

A B S T R A C T

This dissertation presents the results of the research done on contamination of "Aquifero Barreiras" by organo-chlorides, in the Pole Chloro-chemicals of Alagoas - PCA.

The chemical substances involved in the process that are products which pose strong toxicity, affected the quality of the aquifer in question, creating significant environmental impact as a grave problem. The more important of these contaminants were the 1,2 Di-chloroethane (1,2 - DCE), 1,2 Di-chloropropane (1,2 DCP) and 1,2,3 Tri-chloropropane (1,2,3 - TCE), which appeared in greater concentrations, because of which the present investigation was attempted.

The Aquifer "Barreiras", within the PCA area has a mean depth of 20 m, lithologically represented by a packet of sandy-silt stratum, sandwiched by discontinuous clayey material, thus characterizing on the whole as a freatic aquifer.

The "flow model" adopted, based on the finite differences method - the Algorithm of IADI (Kinzelback, 1986), utilized data extracted from the reports of an enterprize by name "Paranagua' Engineering and Consultants Ltd. (1991). The cited model was found to be adequate for the purpose of simulating the two-dimentional flows in places where data is available. Values of hydrodynamic

parameters of the aquifer were obtained from the results of flow model and the mean linear propagation velocity in the aquifer, based on the input values, was of the order of 0.672 m/day, in the N.W. - S.E. from S.E. direction.

Plume propagations for the above mentioned contaminants were generated utilizing the "transport model", based on the explicit finite difference method as suggested by Kinzelbach (1986). Concentrations taken as reference for the model calibration were those values registered in the production and observation wells (Paranagua, 1991), the results of which were analyzed by an American laboratory by name Industrial and Environmental Analyses, Inc. (I.E.A.)

Despite the simplicity of the model, principally considering the porous media as homogeneous and isotropic, and considering the chemicals as conservative, i.e., chemical substances that do not react with water, the plume for 1,2 - DCP showed results that confirmed the veracity of the model. The plumes for 1,2 - DCE and 1,2,3 - TCP and for total organo-chlorides that are projected on the basis of analysis of the laboratory of Alagoas Industrial Co. -CINAL, also showed sufficiently reliable results.

Dedico este trabalho à
minha esposa Ivoneide,
aos meus filhos Aline e
Mauricio e ao professor

Fernando Antonio Milito

(in memoriam)

RELAÇÃO DE FIGURAS

FIG. 1.0	- Processo de Contaminação das Águas Subterrâneas.....	003
FIG. 2.0	- Indústrias de Grande Porte Instaladas no Polo Cloroquímico de Alagoas	010
FIG. 2.1	- Esquemas das Interligações das Unidades do Polo Cloroquímico com a CINAL	014
FIG. 3.0	- Tipos de Aquíferos	023
FIG. 3.1	- Cone de Depressão em Aquíferos Livres	035
FIG. 3.2	- Movimento da Água Subsuperficial de Alto para Baixo Potencial	037
FIG. 3.3	- Ilustração Gráfica da Heterogeneidade e Anisotropia.....	041
FIG. 3.4	- As Suposições de Dupuit.....	044
FIG. 3.5	- Fluxo Permanente não Confinado entre dois Reservatórios.....	049
FIG. 3.6	- Condições de Saída das Linhas de Fluxo.....	049
FIG. 3.7	- Volume de Controle para Derivação da Equação de Fluxo Bidimensional.....	053
FIG. 3.8	- Dcretização de Um Sistema Aquífero.....	057
FIG. 3.9	- Malhas em Diferenças Finitas.....	058
FIG. 3.10	- Nomenclatura para Definição Infinitesimal do Fluxo Convectivo do Poluente.....	064

FIG. 3.11 - Processo de Dispersão em Escala Microscópica.....	064
FIG. 3.12 - Balanço de Massa do Poluente Através de Um Volume de Controle.....	066
FIG. 3.13 - Dependência Escalar para a Dispersividade Longitudinal.....	070
FIG. 3.14 - Descrição Esquemática dos Efeitos da Advecção, Dispersão, Adsorção e Degradação.....	075
FIG. 3.15 - Efeito de Camadas e Lentes Sobre o Caminho de Fluxo em Um Sistema Subterrâneo.....	077
FIG. 3.16 - Efeito de Lentes no Avanço de Contaminantes	078
FIG. 5.0 - Mapa de Situação da Área de Estudo.....	082
FIG. 5.1 - Mapa de Isoetas	084
Fig. 5.2 - Histogramas de Precipitações Médias Mensais.....	085
FIG. 5.3 - Balanço Hídrico.....	092
FIG. 5.4 - Mapa Geológico da Área.....	096
FIG. 5.5 - Coluna Estratigráfica da Porção Continental Alagoana da Bacia Sergipe-Alagoas.....	097
FIG. 5.6 - Corte em Superfície da Área do Polo	099
FIG. 5.7 - Distribuição dos Poços de Monitoramento e Produção na Área do Polo.....	102
FIG. 5.8 - Corte Geológico Segundo Secção AA'.....	103
FIG. 5.9 - Corte Geológico Segundo Secção BB'.....	103
FIG. 5.10 - Corte Geológico Segundo Secção CC'.....	103
FIG. 5.11 - Curvas Iso-Potenciométricas.....	105

FIG. 5.12	- Representação Tridimensional da Base do Aquífero.....	107
FIG. 5.13	- Representação Tridimensional da Espessura do Aquífero.....	108
FIG. 6.0	- Fluxograma Esquemático do Modelo de Fluxo Adotado.....	116
FIG. 6.1	- Rede para Utilização do Modelo de Fluxo.....	120
FIG. 6.2	- Curvas Características de Poços.....	125
FIG. 6.3	- Ilustração Esquemática dos Rebaixamentos Tomados como Referência para Calibração do Modelo de Fluxo.....	129
FIG. 7.1	- Coordenadas e Margens no Modelo de Transporte Adotado.....	134
FIG. 7.2	- Contaminação de um Aquífero Livre por um Líquido Orgânico.....	140
FIG. 7.3	- Poços Monitorados na Área do Polo.....	143
FIG. 7.4	- Bloco Diagrama com as Distribuições das Concentrações do 1,2 DCE.....	149
FIG. 7.5	- Bloco Diagrama com as Distribuições das Concentrações do 1,2 DCP.....	150
FIG. 7.6	- Bloco Diagrama com as Distribuições das Concentrações do 1,2 TCP.....	151
FIG. 7.7	- Rede para Utilização do Modelo de Transporte de Contaminantes.....	153

FIG. 7.8 - Processo Advectivo-Dispersivo para o	
1,2 - DCP Simulado pelo Modelo.....	159
FIG. 7.9 - Pluma de 1,2 DCP no Aquífero Simulada	
pele Modelo.....	160
FIG. 7.10 - Pluma de 1,2 DCE no Aquífero Simulada	
pele Modelo.....	163
FIG. 7.11 - Pluma de 1,2,3 TCP no Aquífero Simulada	
pele Modelo.....	164
FIG. 7.12 - Pluma de Organos Totais no Aquífero	
Simulada pelo Modelo.....	167
FIG. 8.0 - Curvas Típicas de Zona de Captura para um Poço	
de Bombeamento.....	174
FIG. 8.1 - Curvas Típicas de Zona de Captura para dois e	
três Poços de Bombeamento.....	174
FIG. 8.2 - Pluma de Organo Totais Simulada pelo Modelo	
de Transporte com Iso-Concentração de 0.05 ppm.....	178
FIG. 8.3 - Distribuição Espacial da Pluma de Organo	
Totais (0.05 ppm) Relativo as Curvas Típicas	
de Zona de Captura com 5 Poços de Bombeamento.....	183
FIG. 8.4 - Distribuição Espacial da Pluma de Organo	
Totais (0.05 ppm) Relativo as Curvas Típicas de	
Zona de Captura com 4 Poços de Bombeamento.....	184
FIG. 8.5 - Distribuição Espacial da Pluma de Organo	
Totais (0.05 ppm) Relativo as Curvas Típicas de	
Zona de Captura com 3 Poços de Bombeamento.....	185

FIG. 8.6 - Pluma de Organo Totais Envolvida por Curvas
Típicas de Zona de Captura com 3 poços de
Bombeamento Geradas pelo Modelo "PAthlines".....186

RELAÇÃO DAS TABELAS

TAB. 1.0 - Precipitações Médias Mensais.....	086
TAB. 2.0 - Estação Maceió - Evapotranspiração Potencial.....	088
TAB. 3.0 - Cálculo do Balanço Hídrico - Estação Maceió (SUDENE).....	090
TAB. 4.0 - Cálculo do Balanço Hídrico - Estação Maceió (INIMET).....	091
TAB. 5.0 - Níveis das Águas nos Poços Monitorados.....	104
TAB. 6.0 - Dados de Poços para Plotagem Tridimensional.....	106
TAB. 7.0 - Parâmetros Hidrodinâmicos obtidos pela Paranaguá.....	118
TAB. 8.0 - Resultados obtidos para os Parâmetros do Aquífero através do Programa "Estimativa de Parâmetros".....	121
TAB. 9.0 - Cargas Potenciométricas obtidas através do Modelo de Fluxo - 1.º Fase de Simulação.....	122
TAB. 10 - Cargas Potenciométricas obtidas através do Modelo de Fluxo - 2.º Fase de Simulação.....	123
TAB. 11 - Cargas Potenciométricas obtidas através do Modelo de Fluxo - 3.º Fase de Simulação.....	123
TAB. 12 - Rebaixamento Simulado pelo Modelo de Fluxo para o Poço Central - Q versus s.....	124
TAB. 13 - Cargas Potenciométricas obtidas através do Modelo de Fluxo - Fase Final de Simulação.....	126

TAB. 14	- Parâmetros Hidrodinâmicos do Aquífero Resultantes da Fase Final de Simulação do Modelo de Fluxo.....	127
TAB. 15	- Resultados das Análises para Orgânicos nos Poços Monitorados.....	145
TAB. 16	- Analogia entre as Concentrações Observadas com as Calculadas pelo Modelo de Transporte para o 1,2 DCP.....	157
TAB. 17	- Efeito da Dispersividade Transversal sobre os Valores Calculados da Tabela 16.....	158
TAB. 18	- Comparação entre as Concentrações Observadas com as Calculadas pelo Modelo de Transporte para o 1,2 DCE.....	161
TAB. 19	- Resultado das Concentrações Calculados pelo Modelo de Transporte versus o observado para o 1,2,3 TCP.....	162
TAB. 20	- Comparação entre os valores Gerados pelo Modelo de Transporte para as Concentrações dos Organo Totais e os observados.....	170
TAB. 21	- Distâncias Características para um, dois e três Poços de Bombeamento em Regime Regional de Fluxo....	177
TAB. 22	- Rebaixamentos Simulados pelo Modelo de Fluxo com 5 Poços de Bombeamento.....	181
TAB. 23	- Rebaixamentos Simulados pelo Modelo de Fluxo com 4 Poços de Bombeamento.....	184

TAB. 24 - Rebaixamentos Simulados pelo Modelo de Fluxo
com 3 Poços de Bombeamento.....185

ANEXOS

ANEXO I - DADOS DE ENTRADA PARA CALIBRAÇÃO DO MODELO DE FLUXO
ADOTADO.

ANEXO II - DADOS DE ENTRADA PARA CALIBRAÇÃO DO MODELO DE
TRANSPORTE ADOTADO E CONCENTRAÇÕES SIMULADAS.

ANEXO III - OS OPERADORES : GRADIENTE E DIVERGENTE.

ANEXO IV - ABORDAGEM NUMÉRICA DO MODELO DE FLUXO CONCEBIDO.

ANEXO V - ABORDAGEM NUMÉRICA DO MODELO DE TRANSPORTE CONCEBIDO.

INDICE

AGRADECIMENTOS

RESUMO

ABSTRACT

RELAÇÃO DAS FIGURAS

RELAÇÃO DAS TABELAS

ANEXOS

1.0 - INTRODUÇÃO.....	001
2.0 - RECONHECIMENTO DO PROBLEMA.....	007
2.1 - O Polo Cloroquímico de Alagoas.....	007
2.2 - Indústrias de Grande Porte.....	009
2.3 - Histórico da Contaminação.....	013
3.0 - CONSIDERAÇÕES GERAIS.....	017
3.1 - Água Subterrânea no Contexto Geral.....	017
3.2 - Água Subterrânea no Brasil.....	018
3.3 - Características das Águas Subterrâneas.....	020
3.4 - Caracterização e Classificação dos Aquíferos...021	
3.5 - Características da Zona Saturada.....	025
3.6 - Aspectos Hidrodinâmicos do Fluxo Subterrâneo...036	
3.7 - Modelação Matemática do Fluxo Subterrâneo.....	050

3.8 - Simulação Numérica de Transporte de Contaminantes em Sistemas Subterrâneos	061
4.0 - MÉTODOS UTILIZADOS PARA DESCONTAMINAÇÃO DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS.....	079
5.0 - CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO.....	081
5.1 - Localização da Área.....	081
5.2 - Caracterização Climática.....	081
5.3 - Caracterização Geológica.....	089
5.4 - Caracterização Hidrogeológica.....	100
6.0 - MODELAÇÃO DO FLUXO SUBTERRÂNEO NO POLO CLOROQUÍMICO DE ALAGOAS.....	112
6.1 - Generalidades.....	113
6.2 - Modelo de Fluxo Adotado.....	117
6.3 - Calibragem do Modelo com os Dados de Campo.....	127
6.4 - Velocidade de Propagação de Fluxo.....	130
6.5 - Comentários.....	132
7.0 - SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES NA ÁREA DO POLO CLOROQUÍMICO DE ALAGOAS.....	132
7.1 - Generalidades.....	133
7.2 - Modelo de Transporte Adotado.....	133

7.3 - As Substâncias Químicas Envolvidas no Processo.....	135
7.4 - O Processo de Simulação das Plumas de Organo Clorados.....	144
7.5 - Obtenção das Plumas de Organo Clorados.....	155
7.6 - Comentários.....	168
8.0 - PROPOSTA DE UM PROJETO CONCEITUAL PARA DESCONTAMINAÇÃO DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS NA ÁREA DO POLO CLOROQUÍMICO DE ALAGOAS.....	171
8.1 - Generalidades.....	171
8.2 - O Método Utilizado.....	171
8.3 - O Projeto Conceitual Proposto.....	179
8.4 - Comentários.....	183
9.0 - CONCLUSÕES.....	188
10 - RECOMENDAÇÕES.....	191
11 - BIBLIOGRAFIA.....	194

CAPITULO I

1.0 - INTRODUÇÃO

Até tempos recentes da história, as grandes reservas d'água serviam como esgotos infinitos. Mas recentemente devido a crescente densidade populacional, agricultura irrigada, instalação de Polos Indústrias, bem como a quantidade per capita de material de esgoto, indicara claramente que a capacidade de assimilação destas reservas, quer de superfície ou de subsuperfície, não são infinitas.

Entre outros resultados obtidos desta reavalição, foi a preocupante questão quanto ao número crescente de fatos narrados pela história de contaminação das reservas hídricas subterrâneas. Há informações de que a poluição subterrânea destaca-se e, possivelmente, alcançará uma crise de enormes proporções durante os próximos anos.

Em consequência do reconhecimento deste grave problema, existe um interesse crescente na implantação de programas de controle de poluição. Vários órgãos nacionais e internacionais vêm adotando medidas rigorosas para administrar problemas imediatos, aumentar o número de programas com incentivo financeiro, expandir base técnica de conhecimento e avaliar os custos e benefícios das medidas adotadas.

A contaminação das águas subterrâneas devido as atividades do homem, pode ocorrer por inúmeros caminhos : a água contaminada pode se infiltrar e chegar as reservas subsuperficiais através de desgastes de tubulações, tanques ou fossa sanitárias. Pesticidas,

nitratos e outros, fixados na parte superior do solo, podem ser carreados pela chuva, infiltrando-se e contaminando o lençol. Resíduos das indústrias, como por exemplo a de álcool onde a água da lavagem da cana, o bagaço e vinhaça apresentam cargas poluidoras significativas ou das Indústrias Químicas onde poluentes podem entrar no solo de forma imiscível com a água, (óleo e hidrocarbonetos clorados). Aterros sanitários municipais, depósitos de lixo abandonados e/ou sem beneficiamento são exemplos mais comuns. A figura 1.0, ilustra esquematicamente os diversos processos.

A contaminação subterrânea geralmente não é esperada. Não existe alarme prévio que informe que um poço com água de boa qualidade, mostrará evidências de contaminação. O complexo caminho percorrido pelo fluxo no sistema subterrâneo, uma grande quantidade de fontes poluidoras e o fato do fluxo não ser visto diretamente, contribuem com o fator surpresa.

Na zona não saturada, compreendida macroscopicamente entre a superfície e o topo da zona saturada, o transporte do contaminante é essencialmente vertical. O espalhamento de longo alcance dos contaminantes só é possível na zona saturada, onde os mesmos dissolvidos são carreados ao longo do fluxo predominante, principalmente na direção horizontal. A distância percorrida em um determinado tempo dependerá da velocidade do fluxo e a persistência do contaminante.

Quando informado do incidente da contaminação, surgem as seguintes questões:

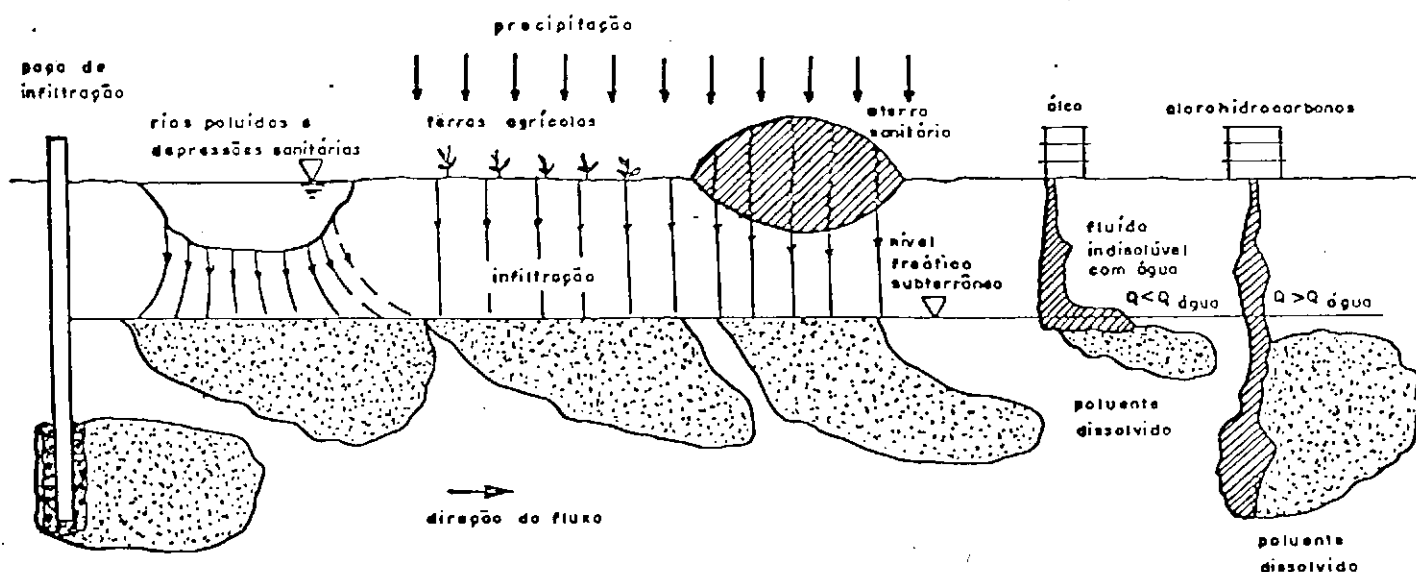


Figura 1.0 - Processos de contaminação das águas subterrâneas

(Kinzelbach, 1986)

- Qual é a natureza da contaminação?
- Qual é a fonte de contaminação?
- Qual é a extensão da contaminação?
- Qual a resposta apropriada ?

A indicação inicial do problema de contaminação pode vir através da água com sabor, odor e aparência física não comum com a que lhe é peculiar, uma indicação vegetativa ou animal ou, ainda, pode ser observado por teste de rotina de qualidade d'água. Estas

indicações iniciais podem fornecer alguma informação sobre o contaminante mas não sobre a fonte, extensão ou grau do problema.

Detectado a presença de agentes poluidores nas águas subterrâneas, estudos de imediato devem ser realizados. Todas as informações pertinentes a questão deverão ser abordadas.

A abordagem física inclui todas as informações geológicas e topográficas que descrevem o meio ambiente através do fluxo subterrâneo e assim, o fluxo do contaminante. Estas incluem a espessura e extensão da área, espessura e continuidade das unidades geológicas, unidades que provavelmente afetem o comportamento dos contaminantes bem como mapas de variabilidade espacial de parâmetros hidrodinâmicos do aquífero tais como: transmissividade, condutividade hidráulica, porosidade efetiva e outros.

O sistema hidráulico é definido pelas propriedades que controlam o movimento d'água através do sistema físico. Estes dados incluem informações dos níveis subterrâneos, mapas potenciométricos para interpretação da direção do fluxo, locais de recarga e descarga, conexões hidráulicas entre água subterrânea e superficial, variação espacial da qualidade da água e outras condições de contorno do sistema de fluxo.

Comuntamente a abordagem física, são efetuados estudos para caracterizar o poluente e avaliar o grau de contaminação. Geralmente, coletam-se amostras a diferentes profundidades em poços já existentes ou recém-contruídos, estrategicamente distribuídos, e submete-nas a análises.

Com dados confiáveis, consequência de um bom monitoramento do problema, frequentemente se estabelece não só o grau e a extensão da contaminação, mas a direção de fluxo da pluma dos contaminantes da água subterrânea.

A presente dissertação de mestrado desenvolveu estudos sobre a contaminação do aquífero Barreiras por orgão clorados, na área do Polo Cloroquímico de Alagoas - PCA.

O PCA está localizado em área dos tabuleiros costeiros, no Município de Marechal Deodoro, Alagoas, entre as lagoas Mundaú e Manguaba e os canais que compõem o complexo estuarino lagunar.

Este Polo envolve a produção de orgão clorados, a partir de insumos produzidos pela Salgema Indutrias Químicas S.A. e outras indústrias do Polo Petroquímico de Camagari na Bahia. Atualmente funcionando com apenas uma indústria produtora, a CPC (Companhia Petroquímica de Alagoas), o PCA conta também com presença da Alclor (Alclor Química de Alagoas) que está desativada e a CINAL (Companhia Alagoas Industrial), que é uma central de insumos e tratamento de efluentes.

O aproveitamento d'água subterrânea foi solução encontrada como alternativa para o abastecimento do PCA, uma vez que a construção de uma barragem para captação de água no rio dos Remédios foi preterida devido aos custos de implantação.

No início do ano de 1990 foi detectado a presença de orgão clorados na água servida às indústrias, notadamente na CPC, devido ao sabor e forte odor revelado por seus funcionários. A partir daí seguiram-se investigações que vieram confirmar a presença de tais

substâncias. Estas substâncias, segundo a Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (Environmental Protection Agency - EPA), são classificadas como produtos de grande poder tóxico, sendo consideradas carcinogênicas, mutagênicas e teratogênicas.

Durante a pesquisa, modelos numéricos de fluxo e de transporte foram utilizados com a finalidade de aferir os parâmetros hidráulicos do aquífero e avaliar a extensão da pluma de alguns dos contaminantes detectados em maiores concentrações ou seja, os compostos 1,2-Dicloroetano (1,2-DCE), 1,2-Dicloropropano (1,2-DCP) e 1,2,3-Tricloropropano (1,2,3-TCP).

Estes compostos foram tratados pelo modelo de transporte como conservativos (produtos químicos não reagentes) e, admitindo-se que a contaminação tenha ocorrido no início de 1989.

Por fim, estabeleceu-se uma correlação entre a massa poluente projetada pelo modelo para os orgânicos clorados totais no aquífero e os dados divulgados em relatórios sobre a questão. Com base nestes dados e aplicando-se a teoria proposta por Javandel & Tsang, (1987), para descontaminação de aquíferos, foi desenvolvido um projeto conceitual de descontaminação para a área de estudo.

Os dados manuseiados nesta pesquisa, baseiam-se em dados extraídos de relatórios das empresas de consultorias contratadas pelas indústrias do PCA e instituições ambientais, os quais foram obtidos segundo orientação do Excelentíssimo Senhor Juiz da Comarca de Marechal Deodoro.

CAPITULO II

2.0 - RECONHECIMENTO DO PROBLEMA

2.1 - O Polo Cloroquímico de Alagoas

Em 1943, época em que foram iniciadas as prospecções de Petróleo na região de Maceió pela equipe técnica do Conselho Nacional de Petróleo - CNP, foi detectada a existência de pequenas partículas do mineral salgema.

As pesquisas realizadas, indicaram que a extensão da jazida apresentava uma profundidade média de 1000 metros e uma reserva recuperável da ordem de 125 milhões de toneladas de Cloreto de Sódio de elevada pureza.

Confirmada a reserva recuperável anos depois, tratou então o empresário Euvaldo da Luz, detentor da concessão da jazida, de unir-se ao capital estrangeiro procurando atrair interesse para a exploração da referida jazida.

A partir daí, o Governo Federal e Estadual acionaram mecanismos de atração de grupos privados, surgindo então em 18/01/67 o primeiro projeto aprovado pela SUDENE; o de implantação da Salgema Indústrias Químicas S/A.

Devido as indefinições ocorridas no quadro de acionistas da SALGEMA, foi que somente em 12/06/70 o citado projeto mereceu aprovação do Conselho de Desenvolvimento Industrial-CDI.

Com o advento do II Plano Nacional de Desenvolvimento - PND, nasce a política de desconcentração Industrial e conseqüentemente o surgimento de Polos de desenvolvimento.

Atrelada a estas diretrizes, surgem processos de diversificação Industrial em Alagoas, com a implantação de um Complexo Químico criado em 1975 e apoiado na capacidade germinativa da Salgema.

Com a criação da Coordenação do Complexo Químico de Alagoas, iniciaram-se os primeiros estudos sobre sua localização, tendo em 27/07/76 o Governo do Estado definido como de interesse para o desenvolvimento do Estado uma área de 8567 ha, próximo a cidade de Maceió, abrangendo parte do tabuleiro da cidade de Marechal Deodoro, a ilha de Santa Rita e uma área litorânea, ao sul, o Pontal da Barra, com vistas a implantação de unidades industriais químicas.

Como medida de apoio ao programa, o Conselho de Desenvolvimento Econômico - CDE, aprovou uma unidade de dicloroetano para Alagoas recomendando ainda, o desenvolvimento de estudos para a produção de eteno, aproveitando assim, a substancial produção alagoana de álcool.

Em 1970 o complexo da SALGEMA foi ampliado, passando a contar com uma Unidade de Dicloroetano, consumindo ainda o eteno proveniente do Polo Petroquímico de Camaçari, Ba. Ao final de 1981 entrou em operação a unidade produtora de eteno proveniente do álcool.

A partir do núcleo de indústrias de produtos clorados decorrente da produção da SALGEMA e, ainda com o aproveitamento das vantagens comparativas do Estado como : produção de gás e principalmente os derivados da agroindústria canavieira, surge

através de Decreto Federal datado de 19/04/82, o Polo Cloroquímico de Alagoas - PCA.

Assim sendo, em seu planejamento básico, o PCA foi concebido em duas áreas distintas. A restinga, onde ficam localizadas a SALGEMA e uma unidade de dicloroetano, que se caracteriza como uma área Industrial de limitação e restrição, cabendo nesta área ainda um parque de armazenamento de granéis químicos, coletor de efluentes e serviços de escoamento de produção, através do terminal da SALGEMA. A outra é a área do tabuleiro de Marechal Deodoro, reservada para instalação de indústrias químicas de grande porte, que insumam álcool e/ou cloro, e de indústrias de transformação, ou seja aquelas que procurarão aproveitar as disponibilidades das matérias primas ofertadas pelas de grande porte.

2.2 - Indústrias de Grande Porte

Atualmente encontram-se instaladas na área do tabuleiro de Marechal Deodoro as Indústrias ALCLOR QUÍMICA DE ALAGOAS S.A - ALCLOR, COMPANHIA PETROQUÍMICA DE ALAGOAS - CPC e a COMPANHIA ALAGOAS INDUSTRIAL - CINAL (Figura 2.0).

2.2.1 - Alclor Química de Alagoas S.A - ALCLOR

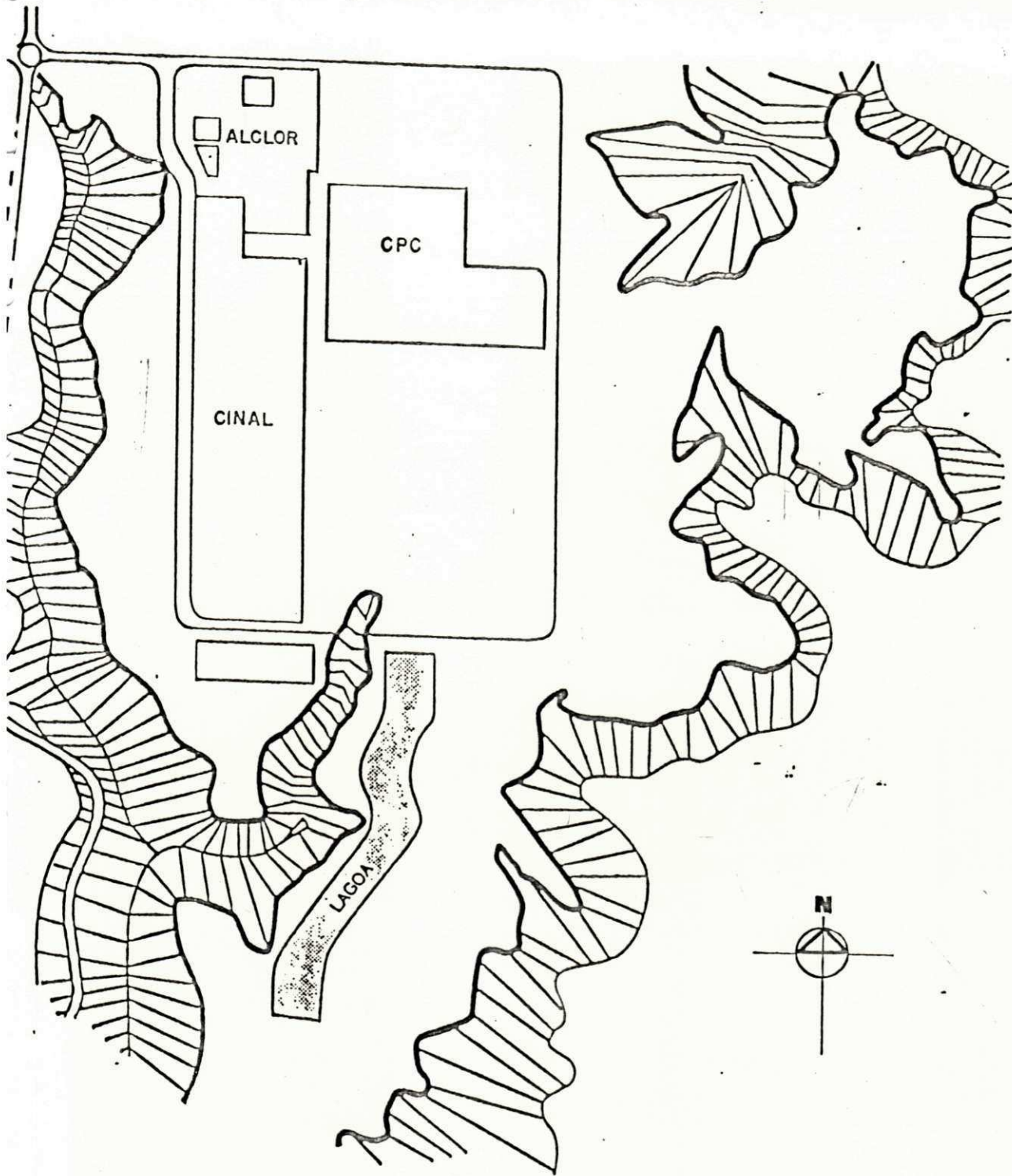


Figura 2.0 - INDÚSTRIAS DE GRANDE PORTE INSTALADAS
NO POLO CLOROQUÍMICO DE ALAGOAS

Esta indústria começou a operar em agosto de 1988, objetivando a produção e comercialização de produtos químicos, especialmente a epicloridina.

As matérias químicas necessárias a produção de epicloridina são: cloro, cal e propeno. A mesma encontra-se desativada desde 29/04/90, em consequência do vazamento de orgão clorados ocorrido em suas instalações.

2.2.2 - Companhia Petroquímica de Alagoas - CPC

Começou a operar a planta de MVC (Cloreto de vinila - monômero) em janeiro de 1989, cuja matéria prima para tal é o dicloroetano e o eteno. Posteriormente iniciou a produção do policloreto de vinila (PVC) a partir do monômero (MVC). Entre 18/04/90 e 25/05/90 permaneceu paralisada devido a crise financeira. É a única empresa em funcionamento na atualidade.

2.2.3 - Companhia Alagoas Industrial - CINAL

A CINAL, entre seus objetivos estão produção e fornecimento de vapor, água e tratamento de efluentes e resíduos do FCA.

O sistema de tratamento de efluentes líquidos é composto por:

- TRATAMENTO ORGANICO

A ETE orgânica tem por finalidade receber, condicionar e tratar despejos sanitários proveniente das indústrias em implantação ou a serem implantadas no PCA, de modo a serem atendidos os padrões estabelecidos na legislação vigente no Estado, evitando impactos ambientais incompatíveis com o uso do solo e respectivas atividades da área de influência dos destinos finais dos resíduos líquidos e sólidos.

- TRATAMENTO INORGANICO

Recebe despejos inorgânicos, a totalidade das águas pluviais e os efluentes tratados provenientes da estação de tratamento de efluentes orgânicos.

A ETE inorgânica consiste :

Lagoa Primária - Tem como função armazenar, equalizar e condicionar os efluentes e águas pluviais.

Lagoa de Polimento - Através do processo de adsorção, tem por objetivo remover metais pesados e compostos tóxicos residuais, antes de ser lançado no emissário terrestre. Este une-se ao emissário da Salgema e segue para sua dispersão final, no mar.

- UNIDADE DE INCERINAÇÃO DE RESÍDUOS ORGNO-CLORADOS LÍQUIDOS

Local onde são destruídos esses resíduos, convertendo-se cloro em ácido clorídico, para neutralização ou reutilização.

A Figura 2.1 mostra, esquematicamente, as interligações das unidades do Polo com a CINAL.

2.3 - Histórico da Contaminação

Em 1976, a Companhia de Desenvolvimento do Estado de Alagoas - CODEAL, solicitou estudos sobre a potencialidade das reservas subterrâneas, das fontes e do rio dos Remédios, na área do PCA. Os mesmos indicaram, em ordem prioritária, uma barragem no rio dos Remédios e captação de água subterrânea para o abastecimento do Complexo Industrial. A barragem foi inicialmente preterida devido aos altos custos.

No início de 1990, houve reclamação por parte dos funcionários da Companhia Petroquímica de Alagoas - CPC, quanto ao sabor e forte odor na água consumida. Devido a tal, a empresa coletou uma amostra d'água e fez uma análise para orgânicos.

A análise detectou valores significativos de compostos orgânicos; 0,06 ppm de dicloroetano (seis vezes mais que o admitido pela resolução de 1986 do Conselho Nacional de Meio Ambiente - CONAMA) e 1,72 ppm de orgânicos totais. Isto fez com que a indústria mudasse a fonte de abastecimento de água potável,

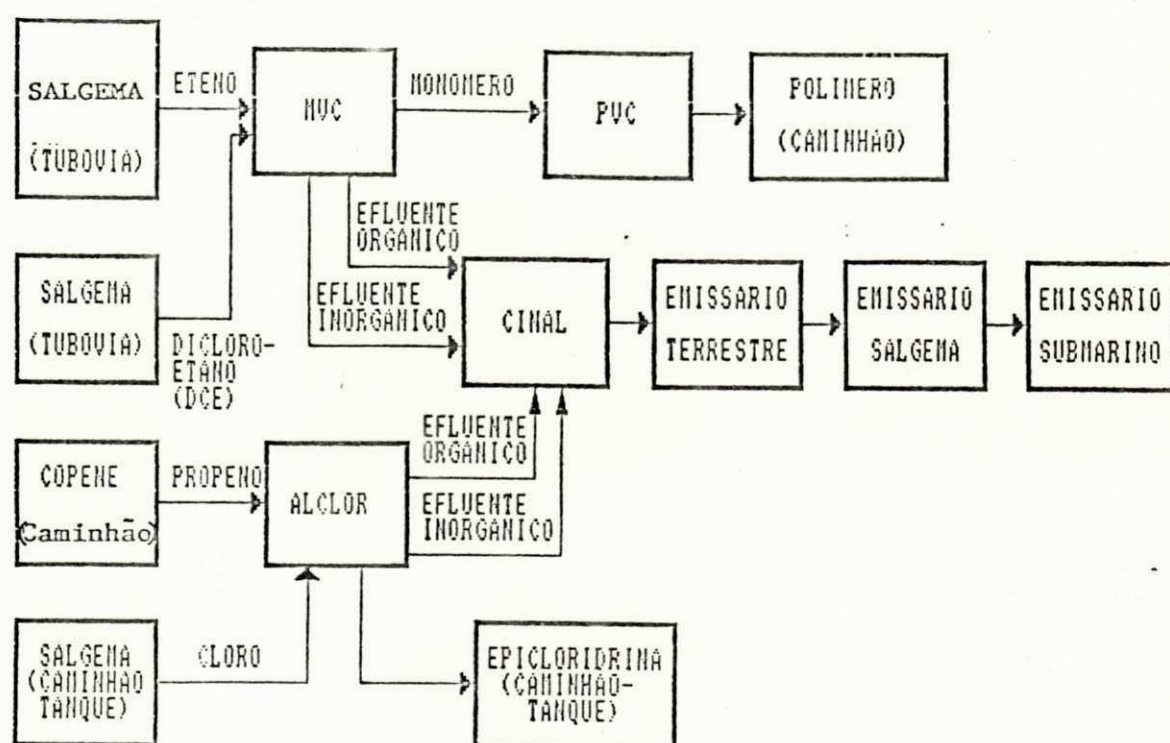


Figura 2.1 - ESQUEMA DAS INTERLIGAÇÕES DAS UNIDADES DO POLO CLOROQUÍMICO DE ALAGOAS COM A CINAL (Paranaguá, 1991)

deixando de usar o poço profundo, passando a ser abastecida pela CINAL, cujo manancial é o rio dos Remédios. A partir daí houve o envolvimento das três Indústrias do PCA (ALCLOR, CPC e CINAL) onde as mesmas iniciaram uma inspeção em suas instalações assim como, a dosagem de compostos nos poços em operação para captação de água subterrânea.

Entre 16/02/90 e 04/03/90, amostras coletadas e analisadas no poço PVC indicaram a presença de 0.7 ppm de dicloropropano (1,2-DCP) e 0.14 ppm de dicloroetano (1,2-DCE).

Em 04/90 foram coletadas amostras em um poço raso que abastecia uma escola, em um olho d'água e em um minador próximo a lagoa de inorgânicos da CINAL. Nestas, foram detectados dicloroetano na ordem de 0.3 ppm e no poço da escola surge o tricloropropano (1,2,3-TCE) em teores de 0.3 ppm. Os resultados indicavam que o problema era de uma extensão maior do que se supunha.

A contaminação teve tal repercussão que envolveu o Ministério Público do Estado de Alagoas, que juntamente com a Comarca de Marechal Deodoro investigou o caso, abrindo inquérito e processo para apurar as causas e consequências do acontecido.

Firmas de consultoria foram contratadas pela SALGEMA e ALCLOR com a finalidade de avaliar a extensão da contaminação, sua origem e suas consequências.

Segundo as consultoras e instituições ambientais, a contaminação ocorreu devido ao surgimento de fissuras na estrutura da tancagem subterrânea de alvenaria, usada pela ALCLOR para

recuperação de hidrocarbonetos clorados - CHC, e no " pit " de drenagem da área de fabricação da epicloridina da ALCLOR. Conforme dados de análises realizadas, a surgência à jusante da lagoa da Cinal, apresentou resíduos de CHC, o que indica haver infiltração também nesta área.

A extensão da contaminação está sendo alvo de estudos, mas as empresas contratadas desenvolveram projeto recomendando uma bateria de poços que servirão para extração d'água contaminada, tentando evitar que as concentrações de orgão clorados "atinjam" as águas surgentes nas imediações do rio dos Remédios.

CAPITULO III

3.0 - CONSIDERAÇÕES GERAIS

Sendo um tema interligado com física dos solos, fluxo saturado em meio poroso, contaminação de aquíferos por poluentes químicos, modelo de fluxo e de transporte, neste capítulo, as observações sobre os mesmos serão discutidos separadamente.

3.1 - Água Subterrânea no Contexto Geral

A água subterrânea, na maioria dos casos, é adequada ao consumo humano, sem a necessidade de tratamento (salvo em casos de contaminação natural e/ou artificial). Além disso, os custos para implementação de poços são geralmente bem inferiores às obras de captação de águas superficiais que envolvem barragens, adutoras e estações de tratamentos. Estas obras contribuem decisivamente para o crescente abastecimento de pequenas e médias populações urbanas e/ou em comunidades rurais, através de água subterrânea.

É estimado que até a virada do século (ano 2.000) a demanda d'água cresça quatro vezes nas proximidades de duas décadas, em consequência do incremento populacional do planeta e, assim sendo, maiores serão as exigências domésticas, industriais e agro-pecuárias (Programa das Nações Unidas para o Meio Ambiente, 1976).

Atualmente, 30% da população mundial tem suprimento garantido de água de superfície e os demais 70% dependem dos poços, com incertezas, devido ao processo crescente de contaminação.

Reconhecidamente, quase três-quartos da superfície da terra é coberta pela água e 97% desta está nos oceanos. Os rios e lagos contêm menos de 1% do total da água da terra (0.017%), enquanto 2.14% estão nas capas polares e na forma glacial. A água subterrânea é estimada em $4 \times 10^6 \text{ km}^3$ até uma profundidade de 1/2 km abaixo da superfície (UNEP, Programas das Nações Unidas para a Proteção do Meio Ambiente - 1976).

A quantidade total de água subterrânea foi estimada em $8,4 \times 10^6 \text{ km}^3$, metade da qual se encontra a mais de 800 metros de profundidade, Nace (1960), Bouwer (1978) e Feth (1973). Freeze e Cherry (1979), utilizando dados mais recentes de Nace (1971), estimaram as reservas em $60 \times 10^6 \text{ km}^3$, enquanto Heath (1983) foi mais conservativo, dando o valor das reservas em torno de $4 \times 10^6 \text{ km}^3$, baseado no trabalho de Lvovitch (1970).

3.2 - Água Subterrânea no Brasil

O início de aproveitamento de água subterrânea no Brasil data do século passado, quando estudiosos sugeriram a construção de poços, como meio de combate aos fenômenos das secas no Nordeste. A partir de 1919, com a criação do IFDCS (atual DNOCS), intensificou-se o programa de construção de poços tubulares, com ênfase especial para as regiões mais pobres em recursos hídricos subsuperficiais: o cristalino.

Em 1959, com a criação da SUPERINTENDÊNCIA de DESENVOLVIMENTO DO NORDESTE (SUDENE), novo impulso e amplas perspectivas eram abertas para a captação e uso das reservas hídricas profundas, implementando bases mais consistentes, acerca do aproveitamento sistemático destes recursos.

A crescente densidade populacional aliada a migração rural em decorrência dos efeitos da seca e a escassez de recursos hídricos de superfície, fez com que as capitais dos estados nordestinos aderissem de modo crescente ao uso de água subterrânea. Situadas geologicamente em locais privilegiados, bacias sedimentares costeiras, onde os recursos de subsuperfície apresentam em geral um bom potencial e uma água de ótima qualidade, cidades como Maceió (cerca de 67% do total da água consumida é de origem subterrânea), Natal e outras, dependem cada vez mais destes recursos.

Apesar de toda a importância das águas subterrâneas no contexto, existem muito pouca (e as vezes nenhuma) preocupação com sua preservação. Atualmente existem cidades abastecidas, em parte ou totalmente, por águas subterrâneas e que começam a experimentar basicamente dois tipos de problemas:

- Superexploração de aquíferos: A perfuração de um número excessivo de poços ou poços muito próximos uns aos outros, e que funcionam continuamente, está provocando um abatimento dos níveis de água nos aquíferos. Isto acarretará um aumento dos custos de bombeamento, diminuição do rendimento dos poços, e, em casos extremos, exaustão dos aquíferos.

- Contaminação dos aquíferos: É talvez o problema mais grave e nem por isso tem recebido a devida atenção.

O comportamento geral das águas subterrâneas em escala local e regional, continua carente de dados confiáveis, detalhados, em termos quantitativos e / ou qualitativos.

A maioria dos aquíferos explorados com altas vazões, consistem de areias e cascalhos inconsolidados encontrados em planícies costeiras, bacias interiores, vales aluviais e outros. Além destes tipos, também são aquíferos adequados os arenitos, os basaltos fraturados e os calcários com canais formados por dissolução e com fraturas.

Em algumas áreas, como no Polígono das Sêcas, na região do Nordeste, rochas cristalinas fraturadas, tal como granito, tem sido perfuradas para o suprimento de água, mas as vazões são em geral bem baixas, se comparadas às dos aquíferos não consolidados.

3.3 - Características das Águas Subterrâneas

As águas subterrâneas movimentam-se muito lentamente, em comparação com as águas superficiais.

O fluxo de água subterrânea é um processo laminar. Lvovitch (1970), estimou o tempo médio de residência em 280 anos, com alguma água residindo em aquíferos profundos por um tempo tão longo quanto 30.000 anos ou mais (Pearson e White, 1967), enquanto nos rios o mesmo é da ordem de algumas semanas. Portanto, a

respeito da água subterrânea, as taxas de recarga anual são pequenas e, conseqüentemente torna a água subterrânea uma reserva confiável e segura a longo prazo, efetivamente imune às flutuações anuais de precipitação.

Por outro lado, isto significa, também, que um aquífero uma vez poluído, pode levar tempo considerável (até anos) para conseguir promover uma autodescontaminação, através de mecanismo natural de fluxo.

3.4 - Caracterização e Classificação dos Aquíferos

3.4.1 - Caracterização dos aquíferos

Os aquíferos são formações com suficiente permeabilidade e porosidade interconectada para armazenar e transmitir quantidades significativas de água, sob gradientes hidráulicos naturais.

Enquanto aquíferos fornecem quantidades significantes de água, aquitardes são formações de baixa permeabilidade, que armazenam água, mas não podem suprir poços de bombeamento. Eles podem, contudo, através de drenança vertical, transmitir água suficiente por enormes áreas, tornando-se importantes em estudos regionais de recargas de águas. As camadas de argila e de folhelho que separam muitos aquíferos confinados são exemplos de aquitardes

A facilidade com que a água flui através de um aquífero ou de uma camada é expressa pelo coeficiente de permeabilidade (K).

Areias e cascalhos apresentam altos valores de K , variando na ordem de 10^{-2} a 10 cm/s, enquanto folhelhos e argilas possuem valores relativamente baixos de ordem de 10^{-10} a 10^{-7} cm/s.

3.4.2 - Classificação dos Aquíferos

Os aquíferos podem ser classificados como confinados e não confinados ou livres, dependendo da ausência ou presença de um lençol freático ou uma superfície freática, que se situa na parte superior da zona de saturação e que está em contato direto com o ar, mantendo assim, sempre a pressão atmosférica, entre os vazios que existem na matriz, como é o caso do aquífero no presente estudo.

A Fig. 3.0. mostra um aquífero "A" classificado como não confinado, também chamado aquífero freático ou livre. Isto significa que a superfície freática não está confinada ou não está impedida de movimentar-se para cima e para baixo. Sob condições de fluxo horizontal, os níveis d'água em poços que penetram num aquífero livre, indicam a posição da superfície do lençol freático em redor desse poço.

Se esta água tem extensão horizontal limitada, trata-se de um tipo especial de aquífero não confinado, conhecido como aquífero suspenso. As localizações 3 e 4 na Fig. 4. são exemplos de aquíferos suspensos.

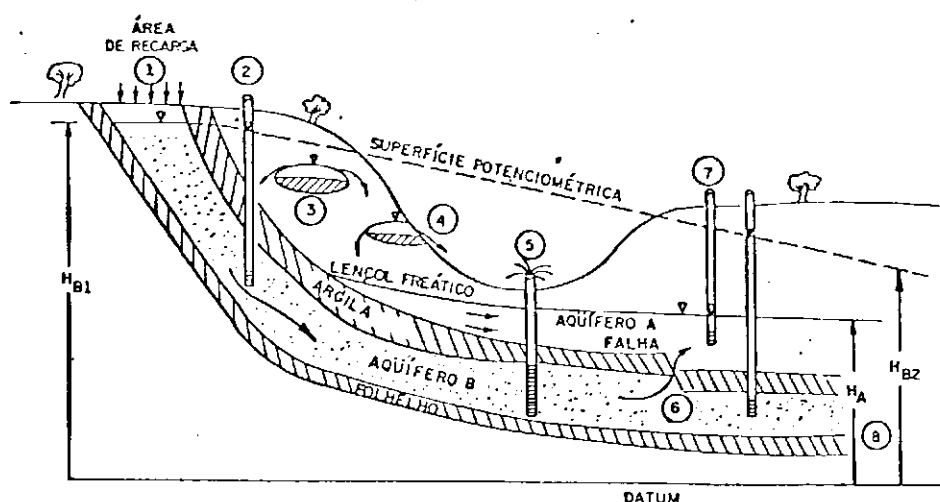


Figura 3.0. - Tipos de Aquíferos (segundo ABRH, 1989).

Dependendo da extensão e da espessura saturada, os aquíferos suspensos ou falsos podem ser fontes adequadas para poços residenciais. Porém, eles serão inadequados como fontes para poços municipais bombeados por longos períodos. No campo, deve-se ter cuidado para não tomar erradamente esta água não confinada, como sendo o aquífero freático principal. Na maioria dos casos uma idéia aproximada da profundidade da água pode ser obtida através de perfuração prévia ou de programas de monitoramento.

Quando dados de campo são limitados, os padrões de fluxo complexo em aquíferos não homogêneos, anisotrópicos e de multicamadas, podem ser estimados por meio de modelos de fluxos multidimensionais.

Os aquíferos confinados são formações geológicas permeáveis, que são limitados abaixo e acima por materiais

relativaente impermeáveis, e que estão sob pressões maiores do que a atmosférica. O aquífero B da Figura 3.0, ilustra um exemplo de aquífero confinado.

Freeze e Witherspoon (1966, 1967, 1968) estão entre os primeiros pesquisadores a usarem modelos numéricos de fluxos bidimensionais, para estudarem padrões de fluxo regional de água subterrânea sob condições geológicas não homogêneas. Os citados autores contribuíram substancialmente para o campo da água subterrânea.

3.4.3 - Fluxo Bidimensional nos Aquíferos Livres

As dimensões horizontais, tipicamente expressas pelos símbolos X e Y, da maioria dos aquíferos, são muito maiores que as componentes na direção vertical, expressas por Z. Isso com frequência, resulta em equilíbrio relativamente rápido do potencial na direção vertical, com relação aos potenciais nas direções horizontais de X e Y. O potencial torna-se, então, uma função de somente X e Y, e o aquífero é caracterizado por condições de fluxo horizontal. Sob estas circunstâncias, podem-se ignorar as variações do potencial na direção Z e caracterizar o fluxo do aquífero como bidimensional.

O potencial é tratado também como carga hidráulica, uma vez que $\phi = -Kh$ e com K constante, ϕ pode ser tratado como $\phi = h$. Em áreas de descarga, de recarga e nas proximidades de poços

parcialmente penetrantes, as condições de fluxo não horizontal estão presentes. Assim, a suposição de não ocorrerem mudanças no potencial com a profundidade, torna-se irreal. Quando o potencial (carga hidráulica) varia em três dimensões, deve-se incluir a direção Z. O potencial é, então, simplesmente chamado de carga total.

Bear (1979), tratou com ambos os tipos de fluxo, porém a maioria dos estudos publicados de modelação de fluxo de água subterrânea ou de descontaminação de aquíferos usam os conceitos do fluxo bidimensional (X,Y).

3.5 - Características da Zona Saturada

A zona saturada se refere aquela com vazios 100% preenchidos, nas quais são instalados poços de bombeamento, visando o suprimento de água. A matriz na zona saturada pode ser classificada em termos de suas propriedades de fluxo e características de armazenamento.

Os espaços porosos da formação na zona saturada estão totalmente preenchidos por água. No caso dos aquíferos freáticos, os primeiros metros abaixo da superfície freática podem ter também ar dissolvido ou preso, se a atividade biológica aeróbica for desprezível. De outro modo, o conteúdo de oxigênio pode aproximar-se de zero.

As principais propriedades de fluxo são a condutividade hidráulica e a transmissividade, ao passo que as características

de armazenamento incluem a porosidade, porosidade específica, o coeficiente de armazenamento o coeficiente de armazenamento específico e a vazão específica.

3.5.1 - Parâmetros Envolvidos no Estudo da Zona Saturada

3.5.1.1 - Condutividade Hidráulica

A condutividade hidráulica é a facilidade com que um aquífero conduz água sob a influência do gradiente de uma superfície freática ou livre. Esta, porém, é uma propriedade tanto do meio poroso como do fluido que o atravessa. Quanto maior a condutividade, melhor o aquífero conduz a água. Embora muitos pesquisadores tenham tentado, ainda não conseguiram estabelecer uma relação entre a condutividade hidráulica, a porosidade e a distribuição dos grãos.

Poder-se-ia imaginar que um material com uma alta porosidade tivesse uma alta condutividade hidráulica. As argilas tem porosidade mais alta do que as areias, mas suas condutividades hidráulicas são bem mais baixas que as das areias. Pode-se razoavelmente argumentar que as areias possuem mais poros interconectados que as argilas e, por essa razão, suas condutividades hidráulicas são maiores. Contudo, isso não explica os dados de laboratório de Kelly e Frohlich (1985) para as areias aluvionais do rio Mississippi, que mostraram a condutividade hidráulica diminuindo na medida em que a porosidade natural vai

aumentando. Isto é exatamente o oposto do que se poderia intuitivamente esperar.

Kelly e Frohlich (1985) explicam que aparentemente em algumas formações altamente porosas como as areias, materiais menos permeáveis como os siltes, tendem a preencher os poros do meio. Com os poros assim preenchidos, a condutividade hidráulica do sedimento sofre uma redução em seu valor. A tendência é de que, quanto mais porosa a formação tanto mais preenchido com material de baixa condutividade e menor a condutividade hidráulica do conjunto.

3.5.1.2 - Fatores que Afetam a Condutividade Hidráulica

Embora a lei de Darcy tenha sido desenvolvida experimentalmente, várias tentativas tem sido feitas para deriva-las analiticamente (Taylor, 1948). Derivações eram usadas para uma compreensão completa dos fatores que dependem de K.

Numa outra aproximação, Poiseuille (1840) trabalhou sobre o fluxo de flúidos entre tubos capilares. Esta lei foi modificada subsequentemente para uso em formações geológicas pela introdução de certa equivalência com os parâmetros do solo (Taylor, 1948). As equações derivadas são as seguinte:

$$K \text{ (cm/s)} = C_s \frac{\gamma_w e^3}{\mu (1+e)} D_s^2 \quad (3.1a)$$

$$K \text{ (cm/s)} = C_s \frac{\gamma_w n^3}{\mu (1-n)} D_s^2 \quad (3.1b)$$

onde:

γ_w = peso unitário da água, g/cm³.

μ = viscosidade dinâmica ou absoluta, g·s/cm².

e = índice de vazios do solo = V_v (volume de vazios) / V_s (volume dos sólidos), (cm³/cm³)

n = porosidade do solo = $e/(1+e)$, (cm³/cm³).

C_s = fator de forma que depende do molde do sistema do tubo capilar no solo e da tortuosidade do caminho do fluxo.

D_s = diâmetro do meio ideal do fluxo que contém grãos esféricos de igual tamanho.

As vezes D_s é assumido como diâmetro médio de uma granulometria real e é aproximadamente igual a D_{10} do solo natural. As Eqs. 3.1a e 3.1b não podem ser usadas como tal para calcular K por causa da complexidade envolvida na obtenção dos valores razoáveis e aceitáveis para C_s e D_s .

Para as areias usadas como material do filtro, Hazen (1911) desenvolveu a seguinte fórmula para K em cm/s, em termos do tamanho efetivo do grão, D_{10} , em cm.

$$K = C_h D_{10}^2 \quad (3.2)$$

O fator C_h é aproximadamente igual a 100, tendo dimensão de s⁻¹ cm⁻¹, e as unidades de K e D_{10} serão cm/s e cm, respectivamente. Hazen (1911), restringiu o valor de D_{10} entre

0.1m e 3mm e a equação citada acima deve ser usada toda vez que o Coeficiente de Uniformidade, $C_u = D_{60}/D_{10}$, exceda 5.

Comparando as Eqs. (3.1a) e (3.2) pode-se concluir que C_u depende das propriedades do fluido e da estrutura do solo:

$$C_h = C_s \frac{\gamma_w}{\mu} \frac{e^3}{1+e} \quad (3.3)$$

A eq. 3.1a pode ser escrita como:

$$K = k \frac{\gamma_w}{\mu} \quad (3.4)$$

onde $k = C_s D_s^2 e^3 / (1+e)$, sendo k a permeabilidade intrínseca ou física. A unidade, darcy, é definida como a taxa do fluxo em cm^3/s , que atravessa uma área seccional unitária de 1 cm^2 com gradiente unitário de pressão de 1 atmosfera/cm quando a viscosidade do fluido envolvido é 1 c_p (um centipoise).

3.5.1.3 - Coeficiente de Permeabilidade

O coeficiente de permeabilidade é matematicamente descrito como um tensor simétrico de segunda ordem, com nove componentes (Bear, 1979; Francis, 1980). Para entender o conceito de um

tensor, é útil discutir os dois termos: escalar e vetorial. Um escalar possui somente magnitude, como é o caso da carga hidráulica, enquanto que um vetor possui magnitude, direção e sentido, como o gradiente na lei de Darcy.

Um tensor é um vetor cuja magnitude varia ao longo de uma dada direção, como no caso das formações anisotrópicas. Desta forma, numa determinada direção o valor da permeabilidade muda com a variação das litologias na formação.

Bear (1979), Francis (1980) e Marsily (1986) exemplificaram as implicações práticas do coeficiente de permeabilidade como um tensor, sobre o qual serão discutidos em detalhe no capítulo 3.6.

3.5.1.4 - Dependência da Permeabilidade Sobre Propriedades do Meio Fluido

A permeabilidade é a taxa volumétrica de fluxo no meio poroso por unidade de área por gradiente unitário. Quanto mais permeável o meio poroso, maior será o valor da permeabilidade. A variação da permeabilidade pode ser mais de doze ordens de grandeza; de 10^{-9} até 10^2 . Os valores típicos de k são 10^{-2} cm/s para areias médias; 10^{-7} cm/s para argilas não fraturadas; 10^{-10} cm/s para bentonita.

A permeabilidade k (LT^{-2}), é uma função das propriedades do meio poroso e das características do fluido. Assim:

$$k = \frac{K \gamma}{\mu} \quad (3.5)$$

onde:

K = permeabilidade intrínseca (uma função dos diâmetros dos grãos), T^{-2} .

μ = viscosidade dinâmica do flúido, $ML^{-1}T^{-1}$.

γ = peso específico, $ML^{-2}T^{-2}$, ($\gamma = \rho g$, onde ρ é a densidade, ML^{-3} , e g é a aceleração da gravidade), LT^{-2} .

Estes parâmetros são propriedades particulares do flúido. Embora K seja chamada de permeabilidade, muitos engenheiros hidrólogos usam condutividade hidráulica para não confundir com permeabilidade intrínseca.

3.5.1.5 - Transmissividade

A transmissividade está diretamente relacionada com a permeabilidade e é principalmente usada quando da validade do fluxo bidimensional. Para um aquífero confinado de espessura " m " e permeabilidade K , a transmissividade T é definida como:

$$T = K m \quad (3.6)$$

que é a taxa volumétrica de fluxo através de uma secção de largura unitária e igual a espessura " m " do aquífero, quando o gradiente hidráulico é unitário, com unidade de m^2/dia .

Nos aquíferos fráticos, em que a espessura muda com a distância x , e o tempo t , K pode variar com a carga hidráulica, tornando não linear a descrição matemática do problema.

3.5.1.6 - Porosidade

A porosidade total de um solo é definida como sendo seu volume total. Uma vez que o volume total de vazios é incluído nessa definição, a porosidade total representa a quantidade máxima de água que um dado volume de um solo pode conter. No caso da zona não saturada, a porosidade total é igual ao valor máximo para o conteúdo de umidade (em cm^3 de água/ cm^3 de solo).

Os poros nas areias e cascalhos são exemplos de porosidade primária, enquanto as fraturas nos gnaisses e os canais de dissolução nos calcários são exemplos de porosidade secundária.

Bear e Verruijt (1987) chamam a porosidade interconectada como porosidade efetiva para fluxo através do meio, n_{ef} , e não somente de porosidade efetiva, n_e . Deste modo, a importante conexão com o fluxo é estabelecida. A velocidade real de um contaminante depende do valor do n_{ef} , sendo que sua distinção do n_e é mais do que apenas semântica.

A porosidade efetiva de fluxo, n_{ef} só pode ser determinada confiavelmente através do experimento que utilize amostras da formação e um traçador numa coluna de laboratório.

3.5.1.7 - Coeficiente de Armazenamento

O coeficiente de armazenamento, S , é definido como sendo o volume de água que um aquífero libera ou armazena, por unidade de área superficial do aquífero, por unidade de variação no componente de carga normal àquela superfície (Todd, 1980). Nos aquíferos confinados, usa-se o coeficiente de armazenamento específico, S_s , que é definido em termos das propriedades compressivas e físicas do meio geológico e da água como mostra a equação abaixo:

$$S_s = \rho g (\alpha + n_e \beta) \quad (3.7)$$

onde ρ é a densidade do fluido, g a aceleração da gravidade, α a compressibilidade do meio geológico, n_e a porosidade específica e β a compressibilidade da água.

Em aquíferos freáticos, o coeficiente de armazenamento, S_w , é definido como uma função da vazão específica S_y (razão do volume de água que uma rocha saturada fornecerá sob influência da gravidade sobre seu próprio volume) e do coeficiente de armazenamento específico (Hantush, 1964):

$$S_w = S_y + H_o S_s \quad (3.8)$$

onde H_o é a espessura saturada do aquífero, acima da base do

mesmo. Em muitos casos, S_y é muito maior que $H_0 S_s$ e, por essa razão, o coeficiente de armazenamento para um aquífero freático é normalmente tomado como sendo a vazão específica.

O coeficiente de armazenamento é principalmente usado nas análises bidimensionais de aquíferos de fluxo horizontal, em que as variações verticais de carga são desprezíveis.

3.5.1.8 - Rebaixamento

O rebaixamento é uma medida de quanto a carga ou o potencial da água está fora de equilíbrio. No equilíbrio a água encontra-se no nível potenciométrico estático, H_0 . Essa superfície é idealizada, as vezes, como uma linha horizontal, porém no campo ela geralmente é inclinada. O rebaixamento num dado local de raio r , é definido como sendo a diferença entre o nível potenciométrico estático, H_0 , e a carga, H , no local de mesmo raio, dado por: $s = H_0 - H$.

Num local fixo, um incremento da taxa de bombeamento causaria aumentos nos rebaixamentos e conseqüente diminuições nas cargas hidráulicas (Figura 3.1).

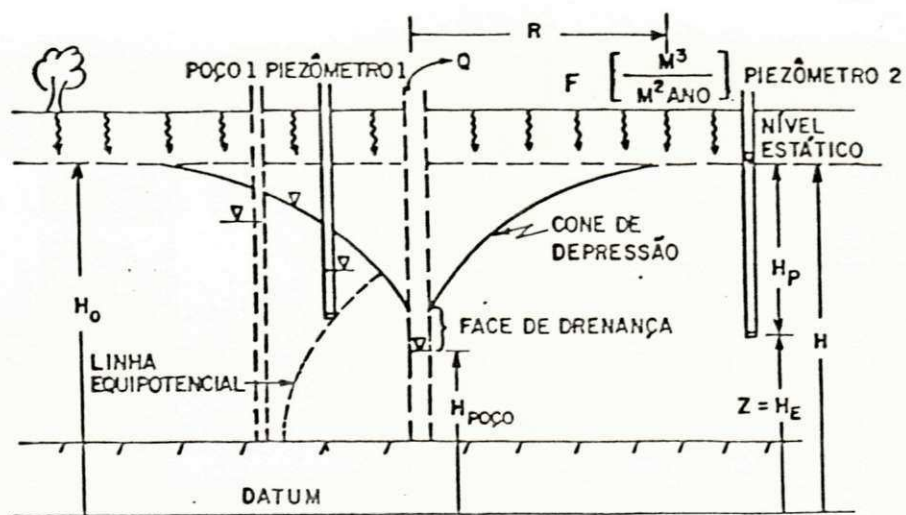


Figura 3.1 - Cone de depressão em aquífero livre

(ABRH, 1989)

3.6 - ASPECTOS HIDRODINAMICOS DO FLUXO SUBTERRÂNEO

3.6.1 - Generalidades

A água subterrânea está sempre em movimento, partindo de áreas de recargas natural ou artificial em direção a áreas de descarga natural ou artificial. Enquanto a recarga natural principal é a precipitação e os rios influentes, a recarga artificial pode ser, por exemplo, a irrigação. As áreas de descarga natural incluem rios, riachos, lagos e o oceano, enquanto o poço representa uma descarga artificial pontual.

A água subterrânea sempre se move de áreas de alto potencial para áreas de baixo potencial. Embora o conceito de potencial envolva pressão, gravidade e energia cinética, na prática, mede-se simplesmente a altura da água (acima de um determinado datum) nos poços construídos como piezômetros (filtro curto e espaço anelar selado), para determinar o potencial do aquífero no exato local do filtro.

Caso o aquífero esteja sob fluxo horizontal naquele local, a posição vertical e o comprimento do filtro não afetam o nível de água do poço. Por outro lado, numa área de gradientes verticais, o nível da água indica o potencial médio de toda a altura do filtro como mostra a Figura 3.2.

Se a água movimentar-se do ponto A para o ponto B, pode-se ter certeza de que a altura da água no piezômetro B é mais baixa do que a altura d'água no piezômetro A (para um mesmo datum). A

Figura abaixo ilustra os dois casos.

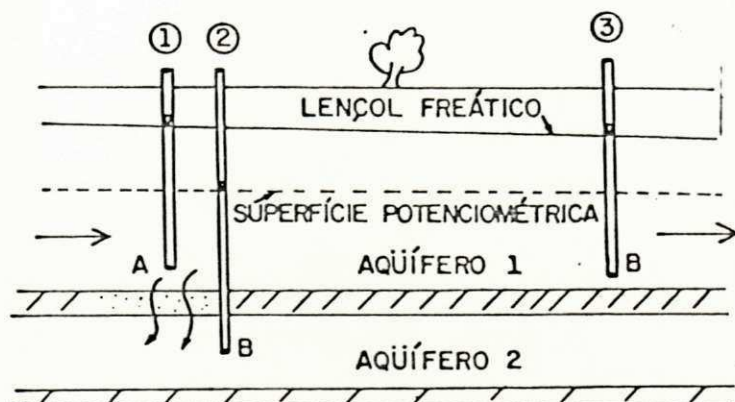


Figura 3.2 - Movimento da água subsuperficial
do Alto para Baixo Potencial
(ABRH, 1989)

O ponto B pode estar localizado horizontalmente a jusante (piezômetro 3), no mesmo aquífero que o do ponto A (piezômetro 1), ou pode estar em um outro aquífero recebendo drenança vertical (piezômetro 2).

Assim, a direção geral do fluxo subterrâneo em aquíferos isotrópicos, quando determinada simplesmente através da comparação entre os níveis de água em piezômetros apropriadamente localizados, nada refere-se quanto a velocidade do fluxo. Para determiná-la, a relação fundamental é lei de Darcy.

3.6.2 - As Relações Entre Velocidades Subterrâneas e Gradientes Hidráulicos

Henri Darcy, um engenheiro hidráulico francês, em 1856 ficou interessado no fluxo de água através de camadas de areia, usadas para filtrar água que, posteriormente seriam consumidas. Seus resultados, com base em experimentos de colunas de areia, mostraram uma relação experimental que ficou conhecida como a "Lei de Darcy" que diz: "A taxa volumétrica de água, através de uma coluna de areia é diretamente proporcional a queda no potencial, através da coluna e inversamente proporcional a altura da coluna".

Os resultados foram expressos na forma de uma relação de fluxo, baseado no gradiente do potencial através da altura da coluna. Suas descobertas são comumente expressas matematicamente pela equação:

$$V_D = q = Q/A = -k \cdot dh/dx \quad \text{onde:} \quad (3.6)$$

V_D = velocidade de Darcy (L/T)

q = descarga específica ($L^3/T/L^2$)

Q = taxa volumétrica de fluxo (L^3/T)

A = área total da secção transversal, perpendicular a direção de fluxo (L^2)

K = condutividade hidráulica (L/T)

dh = perda de carga hidráulica (L) através da distância dx (L)

dh/dx = gradiente hidráulico

3.6.3 - Validade da Lei de Darcy

A lei de Darcy é válida quando o fluxo q , aumenta linearmente com o gradiente hidráulico. A equação funciona para a maioria das velocidades e formações geológicas encontrados nos estudos de água subterrânea. Porém, ela desvia-se desse comportamento em velocidades muito baixas, como aquelas encontradas em argilas muito compactas, bem como com velocidades muito altas, em rochas cristalinas fraturadas. Na última situação, relações não lineares da seguinte forma são muito comuns:

$$V_D = -K (dh/dx)^N, \text{ onde } N \text{ varia de } 1/2 \text{ a } 2/3 \quad (3.7)$$

Na realidade, V_D é a taxa volumétrica de fluxo por unidade total de área ($L^3/T/L^2$).

Evidentemente, toda a área não estará disponível para o fluxo, sendo V_D uma velocidade aparente, baseada na área total, modificada quando se deseja a velocidade verdadeira através do meio poroso. A velocidade real ou verdadeira, é dada por:

$$V_R = V_D / n_{ef} = -k i / n_{ef} (dh/dx). \quad (3.8)$$

que é a velocidade de Darcy dividida pela porosidade efetiva para o fluxo, n_{ef} . Esta leva em consideração a porção da porosidade total que se encontra, de fato, disponível para o fluxo (Bear, 1979).

A condutividade hidráulica, K , e a porosidade efetiva, n_{ef} , serão raramente constantes ao longo de uma dada linha vertical, embora o gradiente na equação 3.8 possa ser constante.

A estratificação de velocidade é responsável pelo o fenômeno da macro-dispersão dinâmica que acontece na poluição de água subterrânea, resultando em tempos maiores ou menores de chegada de contaminantes do que os previstos na lei de Darcy. Sem os efeitos de estratificação, o contaminante se espalharia somente sob o comando da difusão molecular.

Em problemas de contaminação de água subterrânea, a estimativa do tempo em que levará um poluente para que se desloque de um ponto A para B é de interesse das instituições envolvidas na proteção do meio ambiente.

A lei de Darcy, associada a porosidade efetiva, foi utilizada para determinar com que velocidade uma "taxa" de contaminante deslocaria-se até um ponto pré-determinado num certo intervalo de tempo. A velocidade calculada, contudo, só leva em consideração os efeitos de fluxo, ou seja, como se todas as partículas estivessem movendo-se à mesma velocidade da água e ao longo da mesma frente. A velocidade real calculada, Equação 3.8, representa o valor médio, linear, do centro de massa de um pulso de contaminante.

Devido aos caminhos tortuosos percorridos pela água subterrânea através de um determinado meio poroso, uma parte da água iria mover-se relativamente mais rápida do que a velocidade média, enquanto outra parte movimentar-se-ia mais lentamente.

3.6.4 - Homogeneidade e Anisotropia

Os papéis da isotropia, anisotropia, homogeneidade e heterogeneidade estratigráfica são: se a condutividade hidráulica não depende da direção num dado local, a propriedade neste local é caracterizada como isotrópica. Por outro lado, o local é anisotrópico se a condutividade hidráulica depender da direção num determinado ponto do aquífero. Numa formação geológica homogênea, a condutividade hidráulica pode ser isotrópica ou anisotrópica, mas essa característica não varia de um local para outro do aquífero, enquanto nas formações heterogêneas, que é uma regra da natureza, a condutividade hidráulica varia de um local para outro. A anisotropia e a heterogeneidade são melhores explicadas na Figura 3.3.

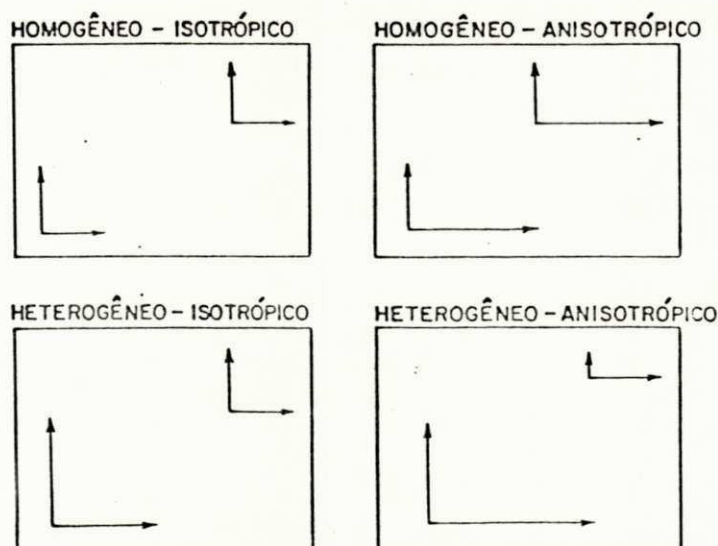


Figura 3.3 - Ilustração gráfica de heterogeneidade e anisotropia (Freeze e Cherry, 1979)

3.6.5 - Generalidades da Lei de Darcy

A equação de Darcy (3.6), é uma equação vetorial e pode ser escrita em três componentes espaciais:

$$V_x = -k_x \frac{\partial H}{\partial X} ; V_y = -k_y \frac{\partial H}{\partial Y} ; V_z = -k_z \frac{\partial H}{\partial Z} \quad (3.9)$$

A lei de Darcy pode ser expressa com os efeitos dominantes, em termos da densidade do fluido e da permeabilidade intrínseca, K , quando utilizado a condutividade hidráulica sob a forma da Eq. 3.4. Assim :

$$V_x = -k_x \frac{\partial H}{\partial X} = - \frac{K \gamma}{\mu} \frac{\partial}{\partial X} \left[\frac{P}{\gamma} + Z \right] = - \frac{K}{\mu} \frac{\partial}{\partial X} [P + \rho g Z] \quad (3.10)$$

A lei de Darcy Eq. 3.6 pode ser escrita para meio homogêneo e anisotrópico, na forma (Bear 1972):

$$\begin{aligned} V_x = q_x &= K_{xx} J_x + K_{xy} J_y + K_{xz} J_z \\ V_y = q_y &= K_{yx} J_x + K_{yy} J_y + K_{yz} J_z \\ V_z = q_z &= K_{zx} J_x + K_{zy} J_y + K_{zz} J_z \end{aligned} \quad (3.11)$$

Na Eq. 3.11 acima, q_x , q_y e q_z são componentes nas direções x , y e z respectivamente, da vazão específica (q), J_x , J_y e J_z são os componentes do gradiente hidráulico (j) e K_{xx} , ..., K_{xy} , ..., K_{zz} os componentes independentes do tensor da condutividade hidráulica, $[K]$.

Simbolicamente pode-se escrever:

$$[K] = \begin{vmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{vmatrix} ; \quad [K] = \begin{vmatrix} K_{xx} & K_{xy} \\ K_{yx} & K_{yy} \end{vmatrix} \quad (3.12)$$

A equação 3.12 representa o tensor K em três e em duas dimensões.

Existem, na realidade, seis componentes distintos no fluxo tridimensional, enquanto no fluxo bidimensional, teremos três componentes, com os quais realmente se definem completamente a condutividade hidráulica, sendo $K_{xy} = K_{yx}$; $K_{zx} = K_{xz}$ e $K_{yz} = K_{zy}$.

Quando os eixos x , y e z do tensor K são orientados nas direções principais (x , y e z) os componentes diagonais tornam-se nulos ($k_{i,j} = 0$ para $i \neq j$ e $k_{i,j} \neq 0$ para $i = j$).

A expressão:

$$[K] = \begin{vmatrix} K_x & 0 & 0 \\ 0 & K_y & 0 \\ 0 & 0 & K_z \end{vmatrix} ; \quad [K] = \begin{vmatrix} K_x & 0 \\ 0 & K_y \end{vmatrix} \quad (3.13)$$

sendo:

$$q_x = K_x J_x ; \quad q_y = K_y J_y ; \quad q_z = K_z J_z \quad (3.14)$$

onde $k_{xx} + k_{yy} + k_{zz} = K_x + K_y + K_z$

3.6.6 - Equação de DUPUIT - Extensão da Lei de DARCY

Para Aplicação Prática

A equação de DUPUIT é um artifício poderoso e uma ferramenta simples para ser usada pelos técnicos em soluções de problemas ligados com os aquíferos não confinados. A equação pressupõe declividades suaves da superfície freática. A vazão que atravessa uma área unitária, q_s , está dada pela lei de Darcy:

$$q_s = -k \, d\phi / ds = -k \, dz / ds = -k \, \text{sen } \theta \quad (3.15)$$

Um ângulo θ pequeno pode ser substituído por $\text{tg}\theta$, assim pela declividade dh/dx . A suposição que θ é pequeno significa que as linhas de fluxo são quase horizontais (Figura 3.4a), assim $\phi = \phi(x)$ em vez de $\phi = \phi(x, z)$. Então a equação não se aplica.

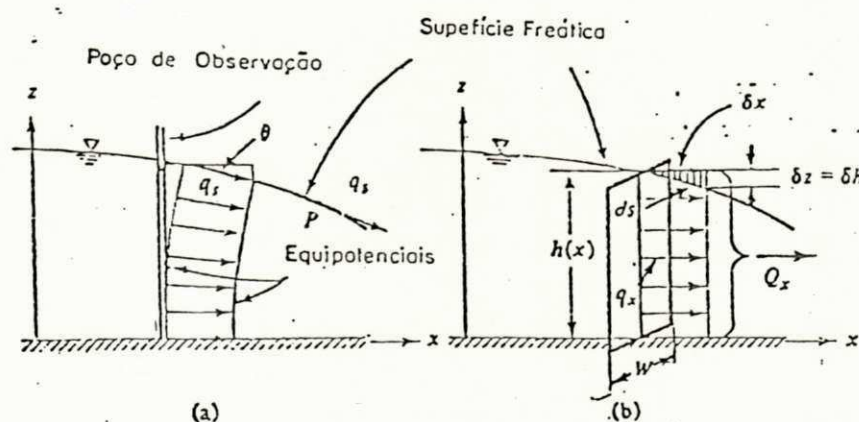


Figura 3.4 - As Suposições de Dupuit (1863)

Em geral, a altura piezométrica $h = h(x,y)$, onde:

$$q_x = -K \frac{\partial h}{\partial x}; \quad q_y = -K \frac{\partial h}{\partial y}; \quad h = h(x,y) \quad (3.15a)$$

ou

$$q = - [K] \nabla' h \quad (3.15b)$$

A medida que a vazão "Q" é constante, independente da elevação, a descarga total correspondente que atravessa uma secção vertical de largura W, normal a direção do fluxo (Figura 3.4b) é:

$$Q_x = -KW h \frac{\partial h}{\partial x} \quad ; \quad Q_y = -KWh \frac{\partial h}{\partial y} \quad ; \quad h = h(x,y) \quad (3.16)$$

ou na forma vetorial compacta, podemos expressar Q como:

$$Q = - [K] W \nabla' h = - [K] W \nabla' (h^2/2) \quad (3.17)$$

Em uma secção vertical com largura unitária têm-se:

$$Q' = Q/W = - [K] h \nabla' h = - [K] \nabla' (h^2/2) \quad (3.18)$$

Nas equações 3.16, 3.17 e 3.18 o fundo do aquífero é supostamente horizontal. Na maioria dos casos, as suposições de Dupuit podem ser tratadas como aproximações razoáveis, como em algumas regiões, onde o valor de θ é realmente pequeno e/ou o fluxo é essencialmente horizontal.

Uma vantagem importante, empregado pelas suposições de Dupuit é que $\phi = \phi(x,y,z)$, tendo sido substituído pela expressão $h = h(x,y)$, em que Z não aparece como uma variável independente. Além disso, a medida que há um ponto na superfície freática, $p = 0$ ou $p =$ pressão atmosférica e $\phi = h$, a linha vertical através deste ponto também é uma linha equipotencial em que $\phi = h = \text{cte}$. Em geral, h varia também com o tempo a medida que $h = h(x,y,t)$.

3.6.7 - Fluxo Permanente em um Aquífero Livre

A Fig.- 3.5 a seguir mostra o caso do fluxo permanente no meio homogêneo de um aquífero livre. A descarga total na direção X por largura unitária através de uma seção vertical de altura $h(x)$ dado por 3.18 se torna:

$$Q'_x = Q' = qh(x) = -Kh(x) dh/dx = \text{Const.}; Q'dx = -Kh(x)dh \quad (3.19)$$

Com condições de contorno $x = 0$, onde $h = h_0$ e uma distância x , onde $h = h(x)$ têm-se:

$$Q' \int_{x^*=0}^x dx^* = -K \int_{h^*=h_0}^{h(x)} h^*(x^*) dh^* \quad \dots$$

$$Q'_x = k \frac{h_0^2 - h^2(x)}{2} \quad (3.20)$$

A Eq. 3.20 define a superfície freática, $h = h(x)$, como uma parábola que passa pelos pontos $x = 0$, $h = h_0$ e $x = H_L$ e $h = H_S$.

Quando $h(x)$ está a uma distância x podemos usar a Eq. 3.20 para obter Q' (obviamente caso K seja conhecido).

A condição de contorno no outro lado será $x = L$, porém é mais complicado. Uma vez que a superfície freática aproxima a margem externa do lado jusante do domínio do fluxo, a superfície terminará sempre a um ponto acima do nível d'água, Figura 3.5. Os pontos A e B da Fig. 3.6 são tais pontos explicados.

O segmento AB, da margem acima do nível d'água do reservatório e abaixo da superfície freática, é chamado face do fluxo subterrâneo. Ao longo desta face a água aparece como uma fonte exposta a pressão atmosférica.

As suposições de Dupuit, não se tratam de tal presença de superfície e assim a superfície freática passará pelo ponto $x = L$ e $h = h_L$. Usando a condição jusante da margem teremos a equação governante de Dupuit-Forchheimer, para cálculo da vazão, como:

$$Q' = K \frac{h_0^2 - h_1^2}{2L} \quad (3.21)$$

A superfície freática parabólica será portanto a linha cheia. Enquanto a superfície ou a linha freática deve ser tangencial a linha horizontal, $x = 0$, e também tangencial à superfície vertical, $x = L$, existe uma anomalia no caso para a linha freática parabólica que terá um gradiente de $dh/dx|_{x=0} = -Q'/Kh_0$, e $x = L$; a face exposta à atmosfera é desprezado. Na

ausência da face livre, a teoria exata da margem freática e da aproximação de Dupuit serão coincidentes. Como regra simples podemos dizer que para as distâncias maiores que 1,5 a 2 vezes a altura do domínio do fluxo, a equação de Dupuit tem precisão suficiente pelo menos para o cálculo da vazão, se não fosse as elevações freáticas (Bear, 1972).

O limite superior da zona subterrânea pode ser fixo através dos níveis piezométricos registrados nos poços de observações, contudo exige uma investigação do fluxo subterrâneo na direção horizontal.

Para simplificar a análise hidráulica podem ser consideradas como condições iniciais:

1- A velocidade é proporcional linearmente ao gradiente hidráulico (Lei de Darcy).

2- O fluxo é horizontal e assim a velocidade é constante ao longo de uma seção vertical. Assim o valor numérico da velocidade pode ser calculado em função da declividade da superfície freática (aproximação de DUPUIT).

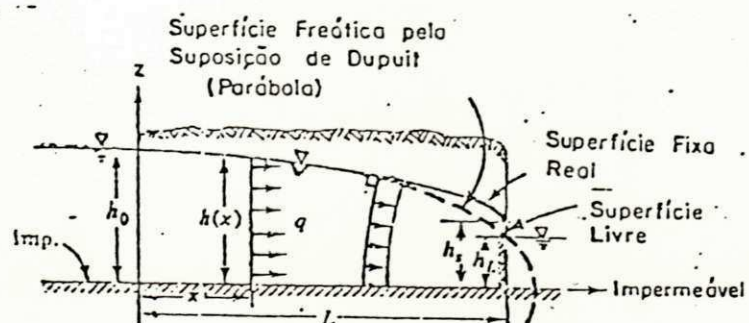


Figura 3.5 - Fluxo Permanente não Confinado
Entre Dois Reservatórios

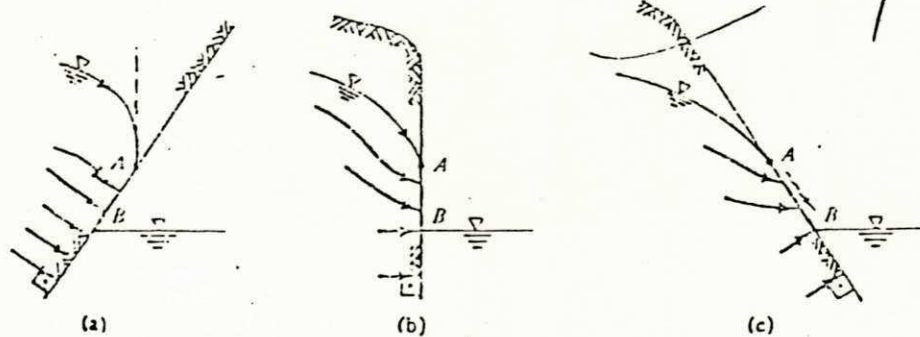


Fig. 3.6 - Condições de Saída das Linhas de Fluxo
Superfície livre AB

3.7 - MODELAÇÃO MATEMÁTICA DO FLUXO DE ÁGUA SUBTERRÂNEA

3.7.1- Generalidades

Os modelos, de uma forma geral, são ferramentas utilizadas para o planejamento e previsão de situações reais. Como exemplo, podemos citar a aplicação dos mesmos para compreender e prever fenômenos de fluxo e de transporte em sistemas de aquíferos heterogêneos, anisotrópicos e estratificados.

Portanto, modelos são representações simplificadas de uma situação real, e como tal, têm suas limitações. Logo, um modelo matemático será uma simplificação através de equações matemáticas. No caso da hidrogeologia, são utilizadas as equações que regem o fluxo subterrâneo.

Os modelos matemáticos podem ser subdivididos da seguinte forma :

- Modelos Analíticos
- Modelos Numéricos

Os modelos analíticos são aqueles que utilizam funções analíticas bem definidas, por exemplo, a equação de Theis. Na obtenção dessas funções é necessário fazer-se diversas simplificações, limitando sua utilização a casos particulares. Já os modelos numéricos (diferenças finitas e elementos finitos), trabalham diretamente com as equações diferenciais do fluxo

subterrâneo, discretizando-as no tempo e no espaço, eliminando assim as aproximações dos modelos analíticos, o que permite a utilização destes modelos numéricos nas mais variadas situações hidrogeológica.

3.7.2 - A Equação Diferencial de Fluxo

A equação de fluxo, para todos os tipos de aquífero, pode ser obtida através de dois princípios básicos:

- Equação da Continuidade
- Lei de Darcy

O princípio da continuidade requer a conservação das massas de água e a Lei de Darcy diz que no meio poroso a velocidade de fluxo é proporcional ao valor negativo do gradiente hidráulico. Para abordagem hidráulica (Bear, 1972) o fluxo é horizontal e a equação bidimensional para o escoamento da água subterrânea pode ser escrita sob a forma geral:

$$\vec{v} = - [K] \vec{\nabla} h \quad (3.22)$$

onde $\vec{v} (v_x, v_y)$, $\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right)$ e $[K]$ a condutividade hidráulica.

A equação diferencial do escoamento é derivada através do

balanço hídrico em torno do volume infinitesimal que se estendeem direção vertical da espessura total, m , da zona saturada é dada por:

$$\Delta V = \Delta x \Delta y m \quad (3.23)$$

Em um determinado intervalo de tempo $(t, t+\Delta t)$ o total de fluxo efluente no volume, ΔV , deve ser balanceado por um fluxo afluente e o acréscimo de água acumulada neste volume.

$$Q_{\text{efluente}} - Q_{\text{afluente}} = \pm Q_{\text{acumulado}} \quad (3.24)$$

Desta forma:

$$\Delta t \left[(mv_x)|_{x+\Delta x} \Delta y - (mv_x)|_x \Delta y + (mv_y)|_{y+\Delta y} \Delta x - (mv_y)|_y \Delta x + q \Delta x \Delta y \right] = S \Delta x \Delta y (h(t + \Delta t) - h(t)) \quad (3.24)$$

onde S é o coeficiente de armazenamento, q a recarga /descarga por área unitária e tempo unitário ($L^3 / L^2/T$) e $\Delta t v_x = \Delta x$; $\Delta t v_y = \Delta y$

Dividindo-se a Eq. 3.24 por $\Delta t \Delta x \Delta y$ obtém-se:

$$\Delta \frac{mv_x}{\Delta x} + \Delta \frac{mv_y}{\Delta y} + q = S \frac{\Delta h}{\Delta t} \quad (3.25)$$

Tomando os limites Δx , Δy e $\Delta t \rightarrow 0$ na Eq. 3.25, chega-se a equação diferencial parcial:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[m v_x \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[m v_y \right] + q = S \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.26)$$

ou escrito com o operador Nabla, ∇ :

$$\nabla \cdot (m \vec{V}) + q = S \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.27)$$

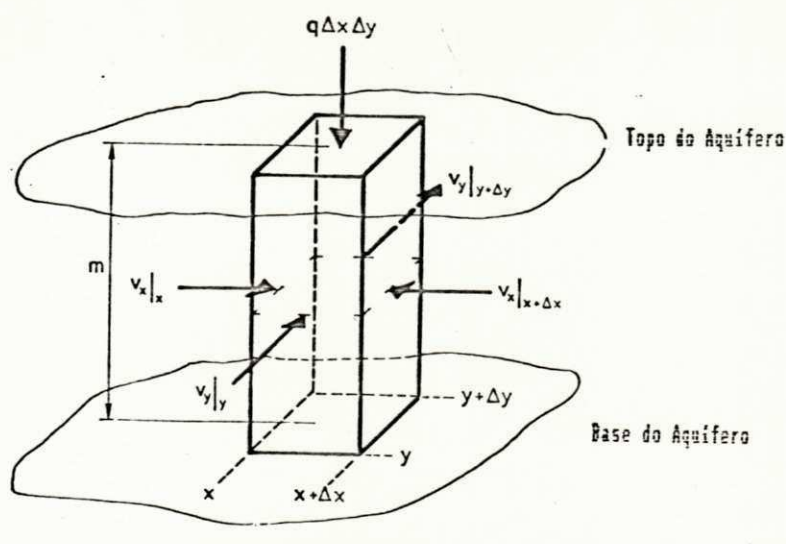


Figura 3.7 - Volume de controle para derivação da equação de fluxo bidimensional. (Kinzelbach, 1986)

Inserindo a Lei de Darcy, concede a equação de fluxo a

expressar-se em termos da variável h :

$$\vec{\nabla} (m k \vec{\nabla} h) + q = S \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.28)$$

ou

$$\vec{\nabla} (T \vec{\nabla} h) + q = S \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.29)$$

onde T é o tensor de transmissividade, $T = m k$.

Em se tratando de um aquífero freático, a equação acima adapta-se com apenas duas modificações; 1 - a transmissividade depende da variação h e não mais da espessura constante m da zona saturada e portanto $m = h - b$, onde b é a cota da elevação da base impermeável e 2 - no caso freático, como visto no capítulo 3.4.1.7, o coeficiente de armazenamento é normalmente tomado como a porosidade efetiva, n_{ef} . Desta forma, a equação de fluxo para aquífero freático pode ser expressa como:

$$\vec{\nabla} \left[(h - b) k \vec{\nabla} h \right] + q = n_{ef} \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.30)$$

As equações de fluxo acima citadas refletem a condição de fluxo não estacionário (regime não-permanente). Para condições estacionária (regime permanente), as equações são obtidas quando tomado para o coeficiente de armazenamento o valor igual a zero, impondo assim $\partial h / \partial t = 0$.

3.7.3 - Condições de Contorno

Todas as equações diferenciais precisam de uma definição de seus contornos físicos para a obtenção de uma solução única. Portanto, uma condição inicial deve ser estabelecida. A condição inicial tem a forma:

$$H = H(X, Y, Z, 0) \quad \text{no} \quad t = 0$$

Isso descreve a variação tridimensional da carga através do aquífero, quando o tempo for igual a zero na simulação. Como essa informação é frequentemente desconhecida, na prática usa-se uma carga constante média (H_0). Ou pode-se evitar o problema da condição inicial, trabalhando-se com o rebaixamento ao invés de carga ($s = 0$ em qualquer ponto no $t = 0$).

As três condições de contorno mais utilizadas nos problemas de fluxo de água subterrânea são:

1 - Primeiro tipo ou condição de Dirichlet. A carga é especificada no contorno, por exemplo: $H = H(Y, Z, t)$ em $X = 0$ e $X = X_0$. A carga pode ser constante ou uma função do espaço e / ou tempo. Os rios e lagos são exemplos comuns de condições de cargas constantes.

2 - Segundo tipo ou condição de Neumann. O fluxo de água subterrânea é especificado no contorno, por exemplo:

$$- Kx \frac{\partial H}{\partial X} = f(Y, Z, t) \quad \text{em} \quad X = 0 \quad \text{e} \quad X = X_0$$

Um caso especial de condição de contorno do segundo tipo é a condição sem fluxo que ocorre nos divisores d'água subterrânea e contornos impermeáveis, tais como embasamento cristalino não fraturado.

3 - Terceiro tipo ou condição mista. Essa condição é uma combinação dos tipos Dirichlet e Neumann, por exemplo:

$$-Kz \frac{\partial H}{\partial z} = \frac{K'}{b'} (H_0 - H)$$

Embora essa condição não seja tão comum como a do primeiro ou segundo tipo, ela é usada para modelar drenança semi-confinados ou leitos colmatados de rios.

3.7.4 - Discretização Espacial do Sistema

Discretização, em modelos numéricos, consiste em escolher uma quantidade finita de pontos de um todo, de modo que os parâmetros obtidos nestes pontos sejam representativos do todo. Deste modo, quanto maior o número de pontos, mais próximo da realidade estará o modelo. No caso dos modelos numéricos em diferenças finitas, busca-se o valor de carga em cada ponto.

A escolha destes pontos é aleatória, porém uma malha regular retangular ou quadrada, facilitará os cálculos. A figura

3.8 mostra uma discretização espacial de um sistema aquífero numa malha de pontos denominados nós, formando linhas e colunas. A locação dos nós podem ser no centro da malha de discretização ou na intersecção das linhas paralelas perpendiculares entre si. A origem do sistema é o vértice superior esquerdo.

Conceitualmente um nó representa um prisma de material perméavel denominado célula, na qual as propriedades hidráulicas são constantes. Desta forma, qualquer valor atribuído ao nó é relativo a toda extensão da célula.

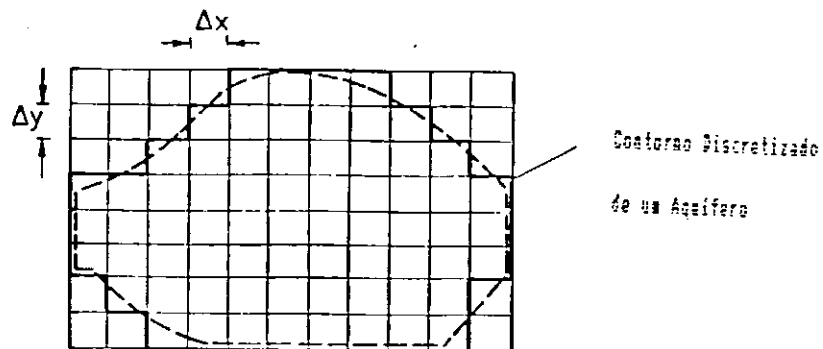


Figura - 3.8 Discretização de Um Sistema Aquífero
(Kinzelbach, 1986)

3.7.5 - O Método das Diferenças Finitas

Uma solução analítica para a equação de Laplace será uma

função contínua, que fornecerá um valor de carga em qualquer ponto do domínio do problema. O método das diferenças finitas fornecerá cargas em pontos pré-definidos, ou seja, há a necessidade de se discretizar a área a ser modelada. A figura 3.9 mostra, em duas dimensões, uma região discretizada.

O método das diferenças finitas procura aproximar as derivadas espaciais de carga pela diferença de cargas entre os nós adjacentes.

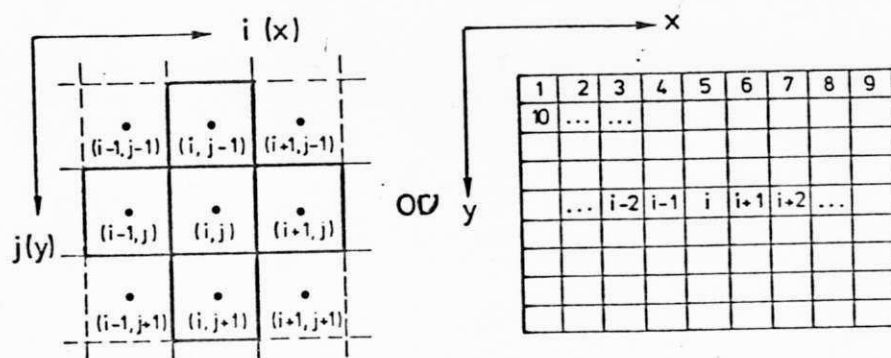


Figura - 3.9 Malha em Diferenças Finitas
(Kinzelbach, 1986)

Para avaliar a derivada espacial de segunda ordem da carga do nó (i, j) , avaliam-se inicialmente as derivadas de primeira ordem nos pontos médios entre os nós $(i-1, j)$ e (i, j) e entre os nós $(i+1, j)$ e (i, j) , ou seja, nos pontos $(x-\Delta x/2, j)$. A derivada de

segunda ordem no ponto central i,j , em relação a x , será aproximada pela variação das derivadas primeiras.

Resolvendo-se similarmente a derivada de segunda ordem da carga do nó central na direção y , e considerando $\Delta x = \Delta y$ a equação bidimensional de Laplace, para o estado permanente, pode ser escrita como segue:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = h_{i-j,j} + h_{i+1,j} + h_{i,j-1} + h_{i,j+1} + h_{i,j} + 1 - 4h_{i,j} = 0 \quad (3.31)$$

Analizando-se a figura 3.9, observa-se que para cada nó interno é definida uma equação 3.31, sendo necessário, portanto, se conhecer os valores de carga nos limites. Para o estado transitório a equação de Laplace fornece:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = \frac{S}{T} \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.32)$$

além das derivadas segundas da carga em relação ao espaço, têm-se também a derivada da carga em relação ao tempo. A aproximação em diferenças finitas deste termo se faz de dois modos:

1 - Aproximação explícita - No estado transitório, necessita-se aproximar a derivada de carga em relação ao tempo, por uma expressão em diferenças finitas. Assim, do mesmo modo que

é feito para as derivadas espaciais, discretiza-se o tempo. Isto é possível escolhendo um tempo $n+1$, que represente um "passo" de tempo a frente em relação ao tempo n atual, ou seja:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{h_{i,j}^{n+1} - h_{i,j}^n}{\Delta t} \quad (3.32)$$

o sobrescrito representa o índice de tempo e Δt o intervalo de tempo ("passo"). A equação 3.32 é chamada de aproximação explícita ("forward difference") com relação ao tempo n . A aproximação explícita se diz satisfatória quando a solução aproximada pelas diferenças finitas converge para a solução exata no nó considerado, e é dita estável se os erros não são ampliados no processo de resolução das equações.

2 - Aproximação implícita - Escolhendo-se um tempo $n-1$, que represente um "passo" atrás ao tempo n atual, têm-se a equação:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{h_{i,j}^n - h_{i,j}^{n-1}}{\Delta t} \quad (3.33)$$

que é chamada de aproximação implícita ("backward difference").

A aproximação implícita requer que as cargas no tempo considerado, sejam obtidas a partir da solução de um sistema de equações lineares, pois não há possibilidade de se calcular as

3.8 - SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EM SISTEMAS SUBTERRÂNEOS

3.8.1 - Generalidades

A simulação numérica de poluentes no sistema subterrâneo envolve a solução de duas equações diferenciais parciais. Uma é a de fluxo, que descreve a distribuição de cargas hidráulicas num determinado aquífero. Devido aos dados de distribuição das mesmas, o fluxo poderá ser calculado pela lei de Darcy. A outra equação diferencial é a do mecanismo ou fenômeno de transporte, que descreve a distribuição dos poluentes do sistema.

Os modelos matemáticos de transporte de soluto são destinados a prever o movimento de poluentes no aquífero. Os mesmos podem ser diferenciados pela ausência ou ocorrência das reações químicas e físicas. Mas comumente, estes modelos são utilizados para simular o movimento dos constituintes conservativos tais como sólidos, cloretos totais dissolvidos e outros, em meio homogêneo, isotrópico com fluxo uniforme. Em tais casos a suposição prática é que o soluto desloque-se a uma taxa média igual a velocidade média linear do fluxo e, que as reações químicas do mesmo não ocorram nem com os outros constituintes dissolvidos nem com a matriz sólida do aquífero.

Os modelos podem e têm sido desenvolvidos para simular o movimento dos constituintes não conservativos. Tais reações

químicas são incorporados ao modelo através do termo da equação de transporte, que representa matematicamente a situação governante da química. Neste caso, o deslocamento do soluto não mais se propagará a uma taxa igual a velocidade média linear do fluxo, uma vez que existirá um retardo do mesmo devido as reações físico-químicas.

Modelos de transporte de soluto poderão ser diferenciados pelo grau de entrelaçamento entre os processos de transporte e hidrodinâmico. Este intrelaçamento, ocorre devido aos efeitos das diferenças nas densidades dos fluidos resultantes da presença dos constituintes dissolvidos.

Para uma solução diluída, a densidade da água e do soluto não é essencialmente afetada pela concentração do soluto e, os processos de transportes hidrodinâmicos são completamente desacoplados. Nesta situação, modelos de fluxos subterrâneos e transporte podem ser desenvolvidos separadamente. Porém, o cálculo da velocidade subterrânea, baseada nos modelos hidráulicos, são usados como dados de entrada do modelo de transporte.

Para soluções com concentrações altas, as velocidades subterrâneas dependerão das variações espaciais da densidade do fluido - ocasionada pelas concentrações do soluto, e as equações da hidráulica e transporte devem ser resolvidas simultaneamente.

3.8.2 - Transporte de Contaminantes em Meio Poroso Saturado

Os contaminantes são transportados no aquífero através de dois processos básicos : o convectivo ou advectivo e o dispersivo.

O processo convectivo é o transporte do soluto através do movimento da água subterrânea onde o mesmo move-se de uma posição para outra do aquífero, a uma taxa de transporte igual a velocidade média linear do fluxo subterrâneo, de acordo com determinada trajetória no campo de velocidade dentro do aquífero. Assim sendo, o fluxo convectivo do poluente através de uma área infinitesimal (Figura 3.10), pode ser expressa por:

$$\vec{J}_{\text{conv}} = c \vec{u} \quad (3.34)$$

onde c é a concentração do poluente no volume de controle e u a velocidade de poros ($u = u_x, u_y, u_z$).

Em contraste, a dispersão é o processo pelo qual ocorre a mistura do poluente entre volumes elementares de água devido ao fenômeno denominado dispersão hidrodinâmica. Este fenômeno ocorre em decorrência da mistura mecânica do fluido durante o processo convectivo assim como, pela difusão molecular - causado pela energia cinética térmica das partículas do poluente (Figura 3.11).

O fluxo difusivo do poluente através da mesma área é dado pela Lei de Fick's, que diz que o fluxo é proporcional ao gradiente negativo de concentração normal à área:

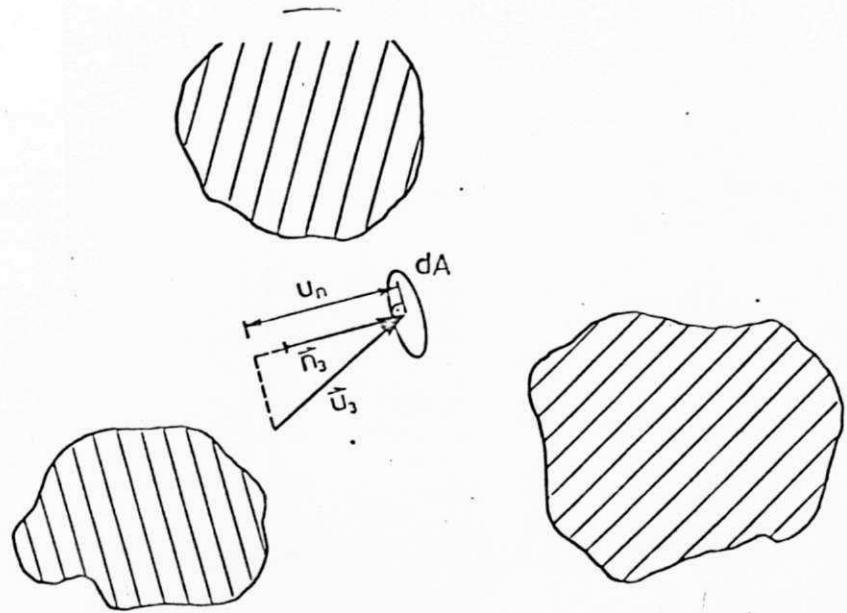


Figura 3.10 Nomenclatura para definição infinitesimal do fluxo convectivo do poluente (Kinzelbach, 1986)

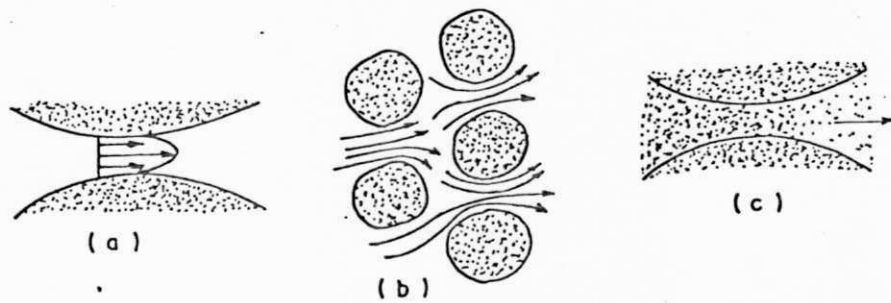


Figura 3.11 - Processos da Dispersão em Escala Microscópica
 a) Em poro individual; b) Caminhos entre partículas; c) Por Difusão Molecular.
 (Freeze e Cherry - 1979).

$$\vec{J}_{\text{dif}} = - D_m \vec{\nabla} c \quad (3.35)$$

onde D_m é o coeficiente molecular de difusão.

O fluxo dispersivo, em decorrência da variabilidade local da velocidade de poros e na área em questão, é dado por:

$$\vec{J}_{\text{disp}} = D \vec{\nabla} c \quad (3.36)$$

onde D é o Tensor de dispersão.

O fluxo total em cada ponto do espaço será então:

$$\vec{J} = \vec{J}_{\text{conv}} + \vec{J}_{\text{dif}} + \vec{J}_{\text{disp}} = \vec{u} c - D_m \vec{\nabla} c + D \vec{\nabla} c \quad (3.37a)$$

$$\vec{J} = \vec{u} c - (D_m + D) \vec{\nabla} c \quad (3.37b)$$

com $\vec{J} = (J_x, J_y, J_z)$ e $\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$

Considerando o efeito da porosidade efetiva, a equação 3.37b deverá ser modificada para:

$$\vec{J} = n_{\text{ef}} \vec{u} c - n_{\text{ef}} (D_m + D) \vec{\nabla} c \quad (3.38)$$

A equação de transporte é derivada pelo balanço de massa em torno do volume de controle (Figura 3.12).

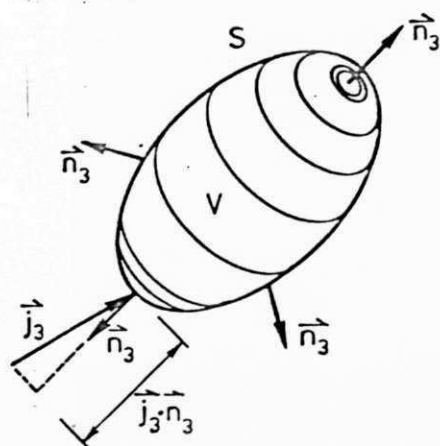


Figura 3.12 - Balanço de massa do poluente através de um volume de controle (Kinzelbach, 1986)

O fluxo total sobre a superfície "S" do controle e a taxa de acréscimo do poluente "c", dentro do volume de controle, são balanceadas pelo armazenamento do poluente dentro deste volume para um tempo unitário.

$$-\oint_S \vec{J} \cdot d\vec{S} + \int_V \sigma \, dV = \int_V \frac{\partial [cn_{ef}]}{\partial t} \, dV \quad (3.39)$$

De acordo com o teorema da integral de Gauss, a integral de superfície transforma-se em uma integral de volume:

$$\oint_S \vec{J} \cdot d\vec{S} = \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{J} \, dV \quad (3.40)$$

Inserindo a Eq 3.39 na equação 3.40, e impondo que a soma das três integrais seja zero, chega-se a equação tridimensional de transporte.

$$\frac{\partial [cn_{ef}]}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} - \sigma = \frac{\partial [cn_{ef}]}{\partial t} + \nabla \cdot (n_{ef} \vec{u}c)$$

$$- \nabla \cdot [n_{ef} (D_m + D) \nabla c] - \sigma = 0 \quad (3.41)$$

Considerando a porosidade efetiva como constante ao longo da profundidade, tomando-se a média sobre a profundidade, m , e levando-se em consideração a concentração injetada de poluente, obtêm-se, para duas dimensões, a Eq. 3.42 que é a equação de transporte de Bear:

$$\frac{\partial [cn_{ef}^m]}{\partial t} + \nabla \cdot (n_{ef}^m \vec{u}c) - \nabla \cdot (n_{ef}^m (D_m + D) \nabla c) - \sigma_m - q c_{in} = 0 \quad (3.42)$$

onde q é a taxa volumétrica por área unitária em direção vertical ao aquífero e c_{in} a concentração de poluente injetado.

Inserindo-se $h-b = m$, esta equação também é válida para aquíferos freáticos.

O tensor de dispersão é dado por:

$$D = \begin{vmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{zz} \end{vmatrix} \quad (3.43)$$

Transformando-se em uma forma diagonal, quando os eixos principais deste tensor estão alinhados com a direção do vetor \rightarrow velocidade u , e considerando a velocidade na direção do eixo X , recebe-se a forma:

$$D_x = \begin{vmatrix} D_L & 0 \\ 0 & D_T \end{vmatrix} \quad (3.44)$$

Onde os coeficientes D_L e D_T podem ser expressos pelo produto entre a velocidade e comprimento, chamado de dispersividade, definido como:.

$$D_L = \alpha_L u \quad (3.45)$$

$$D_T = \alpha_T u$$

$$\text{com } u = \begin{vmatrix} \rightarrow \\ u \end{vmatrix}$$

Os elementos do tensor numa orientação arbitrária são obtidos pela rotação:

$$D = [R]^T [D_x] [R] \quad (3.46)$$

com o angulo de rotaçãõ ϕ a matriz de rotaçãõ é dada por:

$$R = \begin{vmatrix} \cos\phi & \text{sen}\phi \\ -\text{sen}\phi & \cos\phi \end{vmatrix} \quad (3.47)$$

recebendo assim os componentes:

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{u_x^2}{u} + \alpha_T \frac{u_y^2}{u}$$

$$D_{yy} = \alpha_T \frac{u_x^2}{u} + \alpha_L \frac{u_y^2}{u} \quad (3.48)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{u_x u_y}{u}$$

Os valores das dispersividades são essenciais na aplicação de modelos numéricos; mas raramente são conhecidos a priori.

Em experimentos laboratoriais foram encontrados valores para a dispersividade longitudinal entre 0.01 e 10 cm para diferentes tipos de materiais granulares. Isto reflete a microdispersividade devido a interação entre o fluxo e os grãos.

Estes valores variam com a porosidade, diâmetros dos grãos, forma dos grãos e distribuição dos mesmos.

Dispersividades longitudinal encontradas em campo, através de traçadores, são geralmente muito grande (e.g. Lenda, Zuber, 1970). Isto ocorre devido a grande heterogeneidade dos materiais naturais. Maiores dispersividades são encontradas em transporte de poluentes regionais. Dependendo do comportamento escalar a da dispersão, valores para a dispersividade longitudinal podem, ocasionalmente, ser determinado. Na literatura valores entre 0.1 m e 500 m podem ser encontrados em aquíferos porosos (Figura 3.13).

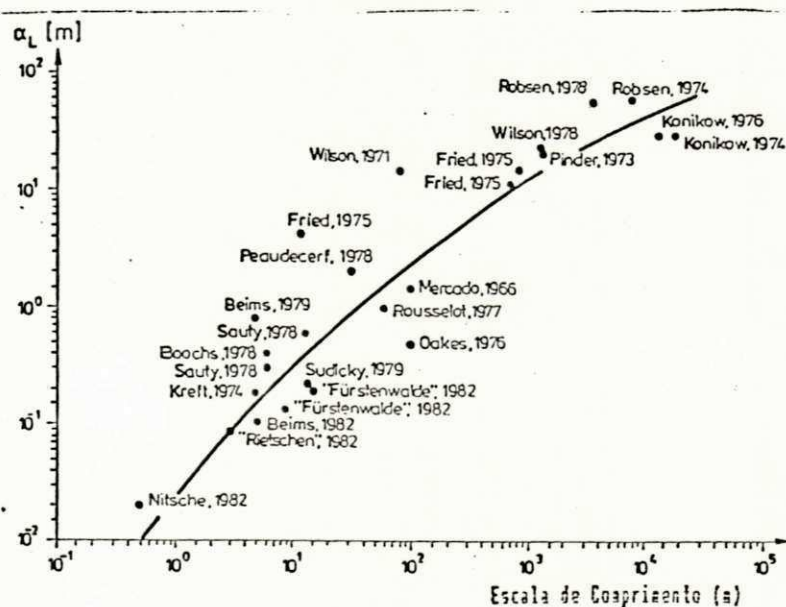


Figura 3.13 - Dependência escalar para a Dispersividade Longitudinal, (após Beims, 1982)

Desprezando o efeito da difusão molecular, em relação a dispersão ($D_m = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s} - 10^0\text{C}$), e assumindo que n_{ef} e m mostram uma grandeza espacial muito pequena, a equação 3.41 pode ser dividida por $m n_{ef}$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (u c) - \nabla \cdot (D \nabla c) - \frac{\sigma}{n_{ef}} - \frac{q}{n_{ef} m} c_{in} = 0 \quad (3.49a)$$

ou

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + u_x \frac{\partial c}{\partial x} + u_y \frac{\partial c}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) \\ - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) - \frac{\sigma}{n_{ef}} - \frac{q}{n_{ef} m} c_{in} = 0 \end{aligned} \quad (3.49b)$$

se u_x for paralelo a D_L

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_x \frac{\partial c}{\partial x} - D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - \frac{\sigma}{n_{ef}} - \frac{q}{n_{ef} m} c_{in} = 0 \quad (3.50)$$

Por definição, a taxa de acréscimo do poluente dentro do volume de controle, σ , transformada em uma respectiva taxa dentro da área de controle é:

$$\sigma = S_{int} / m \quad (3.51)$$

O termo convectivo pode ser transformado por meio da equação de continuidade do fluxo na seguinte expressão:

$$\vec{\nabla} \cdot (uc) = \vec{u} \cdot \vec{\nabla} c + c \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = \vec{u} \cdot \vec{\nabla} c + \frac{cq}{n_{ef}^m} - \frac{cS_{int}}{n_{ef}^m} \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.52)$$

Finalmente, a equação 3.49a pode ser escrita na forma completa como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} c - \vec{\nabla} \cdot (D \vec{\nabla} c) - \frac{q}{n_{ef}^m} (c_{in} - c) - \frac{S_{int}}{n_{ef}^m} - \frac{c}{n_{ef}^m} S \frac{\partial h}{\partial t} = 0 \quad 3.53a$$

ou

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_x \frac{\partial c}{\partial x} + u_y \frac{\partial c}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) - \frac{q}{n_{fe}^m} - \frac{S_{int}}{n_{ef}^m} = 0 \quad (3.53b)$$

Até o presente, o poluente foi considerado como conservativo ou seja, não será adsorvido (mecanismo de adsorção na

matriz) e não ocorrerá o processo de degradação - a Figura 3.14, mostra de forma esquemática os efeitos da advecção, dispersão, adsorção e degradação química no transporte de um poluente. Portanto, têm-se que adicionar mais dois termos na equação de transporte:

1 - Termo de Adsorção definido por:

$$R = 1 + \rho a_d (1 - n_{ef}) / n_{ef}$$

onde ρ é a densidade e a_d é o coeficiente de adsorção.

2 - Termo de Degradação que depende da concentração ou seja:

$$\frac{dc}{dt} = -\lambda c$$

onde λ é a constante de degradação.

Observa-se que a introdução da adsorção linear é essencialmente equivalente com o efeito do retardamento no processo de transporte, substituindo a velocidade de poros u pela velocidade de retardo u/R no termo advectivo e dispersivo. Portanto, a equação 3.53a escrita de forma abrangente toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\vec{u}}{R} \cdot \nabla c - \nabla \cdot \left(\frac{D}{R} \nabla c \right) + \lambda c - \frac{q}{n_{ef} m R} (c_{in} - c) \\
 & - \frac{S_{int}}{n_{ef} m R} - \frac{c}{n_{ef} m R} S - \frac{\partial h}{\partial t}
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

Esta é a equação de transporte para fluxo não-estacionário; para o caso estacionário, $\partial h / \partial t = 0$.

3.9.3 - Fluxo de Contaminantes em Meio Heterogêneo

As formações geológicas naturais são constituídas por materiais diversos, impondo assim ao meio uma característica heterogênea. Se não existisse a heterogeneidade, o prognóstico e a detecção de contaminantes no sistema de fluxo da água subterrânea seria mais facilmente resolvido.

Para ilustrar o efeito das variações estratigráficas sobre o padrão de transporte de contaminantes em uma área de recarga dos mesmos, num meio saturado e com estado de fluxo permanente, a figura 3.15 é utilizada, com uma simples camada heterogênea.

A figura 3.15a assume que o domínio é isotrópico, com uma determinada permeabilidade.

A figura 3.15b indica uma situação onde o domínio do fluxo é homogêneo e, portanto, a migração padrão do contaminante será simples e relativamente fácil de monitorar. As condições de fluxo

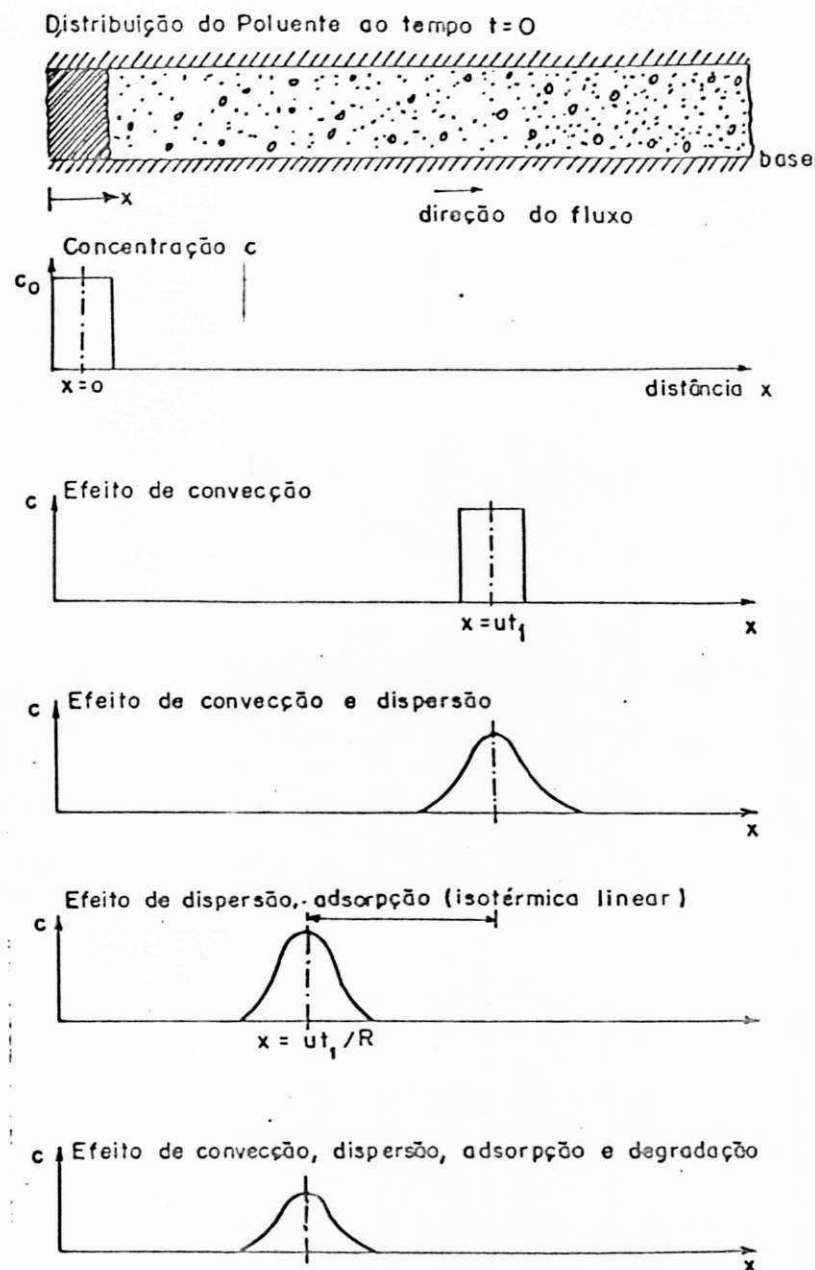


Figura 3.14 - Descrição esquemática dos efeitos da advecção, dispersão, adsorção e degradação.

(Kinzelbach, 1986).

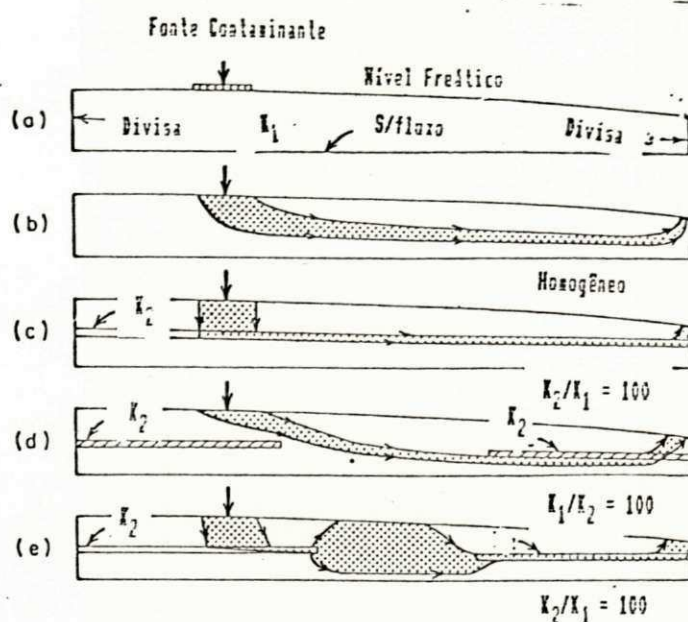


Figura 3.15 - Efeito de camadas e lentes sobre cominhos de fluxo num sistema subterrâneo. a) Condições de contorno; b) Caso homogêneo; c) Camada com alta condutividade; d) Duas lentes com baixa condutividade; e) Duas lentes com condutividade alta (Freeze e Cherry, 1979).

A Figura 3.16 ilustra em pequena escala, o efeito de dois tipos de heterogeneidade em um padrão de migração de um traçador ou contaminante em meio granular poroso.

Na Figura 3.16a o meio é homogêneo e a migração é regular como descrito na Figura 3.16b. A Figura 3.16b mostra um meio heterogêneo, com tipos de lentes avançando em forma de "dedos". Neste caso, o transporte do contaminante ocorre mais rapidamente nas lentes onde a condutividade hidráulica é maior.

Em se comparando com a situação real, os efeitos da estratificação ilustradas nas Figuras 3.15 e 3.16 são muito simples.

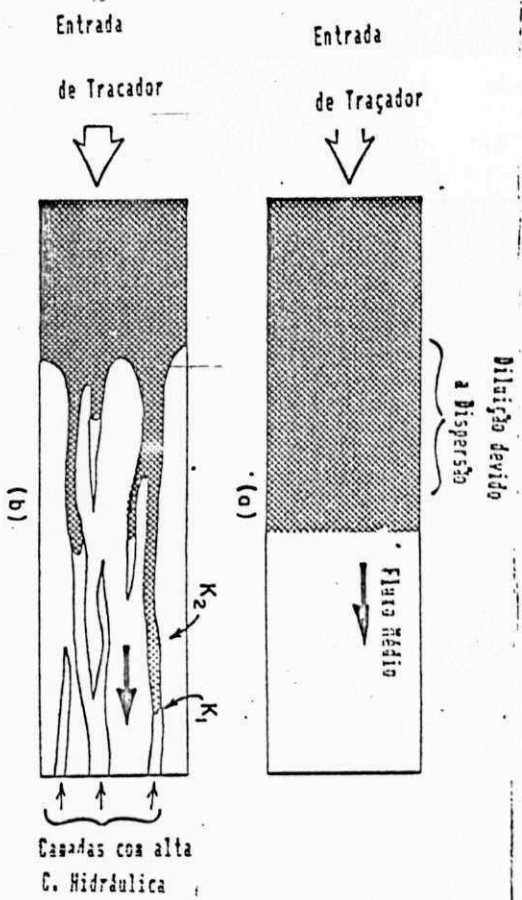


Figura 3.16 - Efeito de lentes no avanço de contaminantes.

a) Meio homogêneo ; b) Avanço na migração ocasionado por lentes (freeze e Cherry, 1979)

CAPÍTULO IV

4.0 - MÉTODOS UTILIZADOS PARA DESCONTAMINAÇÃO DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

Uma vez que a pluma de contaminantes tenha sido identificada num dado aquífero, e a ação remedial estabelecida, é obrigatório determinar a alternativa de descontaminação que melhor venha a se adaptar quando efetuado a análise custo /benefício.

Atualmente, o método mais comum para limpar um aquífero é aquele em que a água poluída é extraída através de poços. Após a redução da concentração do contaminante até um certo nível, a água ou é reinjetada no aquífero ou se for permitido, é desviada para um campo superficial.

Determinada a pluma dos contaminante e a distribuição das concentrações dos mesmos e, supondo, ainda, que a fonte de contaminação tenha sido eliminada, escolhe-se a alternativa menos despendiosa para a captura da pluma.

As questões mais importantes que devem ter respostas os projetos incluem:

- 1 - Qual é o número ideal de poços de bombeamento ?
- 2 - Onde serão localizados tais poços para que a água contaminada não escape entre os mesmos ?
- 3 - Qual é a taxa de bombeamento de cada poço ?
- 4 - Qual é o melhor método de tratamento da água ?
- 5 - Onde será infiltrada a água tratada?

Javandel, I. e Tsang, C. (1987), desenvolveram um método para prever o número ideal de poços de bombeamento, as etapas de

discargas e localização dos mesmos. Para tal a teoria complexa envolvendo potencias foi usada com o intuito de se obter as equações das linhas de fluxo que separa as zonas de captura de um, dois ou mais poços de bombeamento do resto do aquífero. As séries das curvas típicas apresentadas podem ser utilizadas como ferramenta para projetos de limpeza de aquíferos.

A finalidade do trabalho dos autores acima citados é introduzir um método simples para responder quatro das cinco perguntas de natureza hidráulica. Primeiramente desenvolve-se a teoria para se obter as curvas típicas as quais podem ser usadas como ferramenta para restauração do aquífero. Então o procedimento para utilização destas curvas será dado em resposta as questões colocadas.

No capítulo 8.0, maiores detalhes serão enfocados sobre o método em questão.

CAPITULO V

5.0 - CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO

5.1 - Localização da Área

O Estado de Alagoas posiciona-se no centro-leste do Nordeste brasileiro, com uma área de 27.371 km², correspondendo a 0.32% do território nacional e 1.8% da região do Nordeste.

A área de estudo compreende o Polo Cloroquímico de Alagoas-PCA, situado no tabuleiro do município de Marechal Deodoro-AL, entre as lagoas Mundaú e Manguaba, a sudoeste de Maceió, e delimitada pelos paralelos 9° 39' 09" e 9° 41' 39" S e os meridianos 35° 47' 3" e 35° 50' 25" W .

O acesso a referida área pode ser efetuado pelas rodovias pavimentadas; AL - 101 sul, BR - 316 e BR - 424, distando a mesma a 13 km da cidade de Maceió e 7 km da Salgema Indútrias Químicas S.A..

A figura 5.0 mostra o mapa de situação da área estudada.

5.2 - Caracterização Climática

5.2.1 - Generalidades

O clima, a geologia e a morfologia de uma região determinam o seu potencial hidrológico.

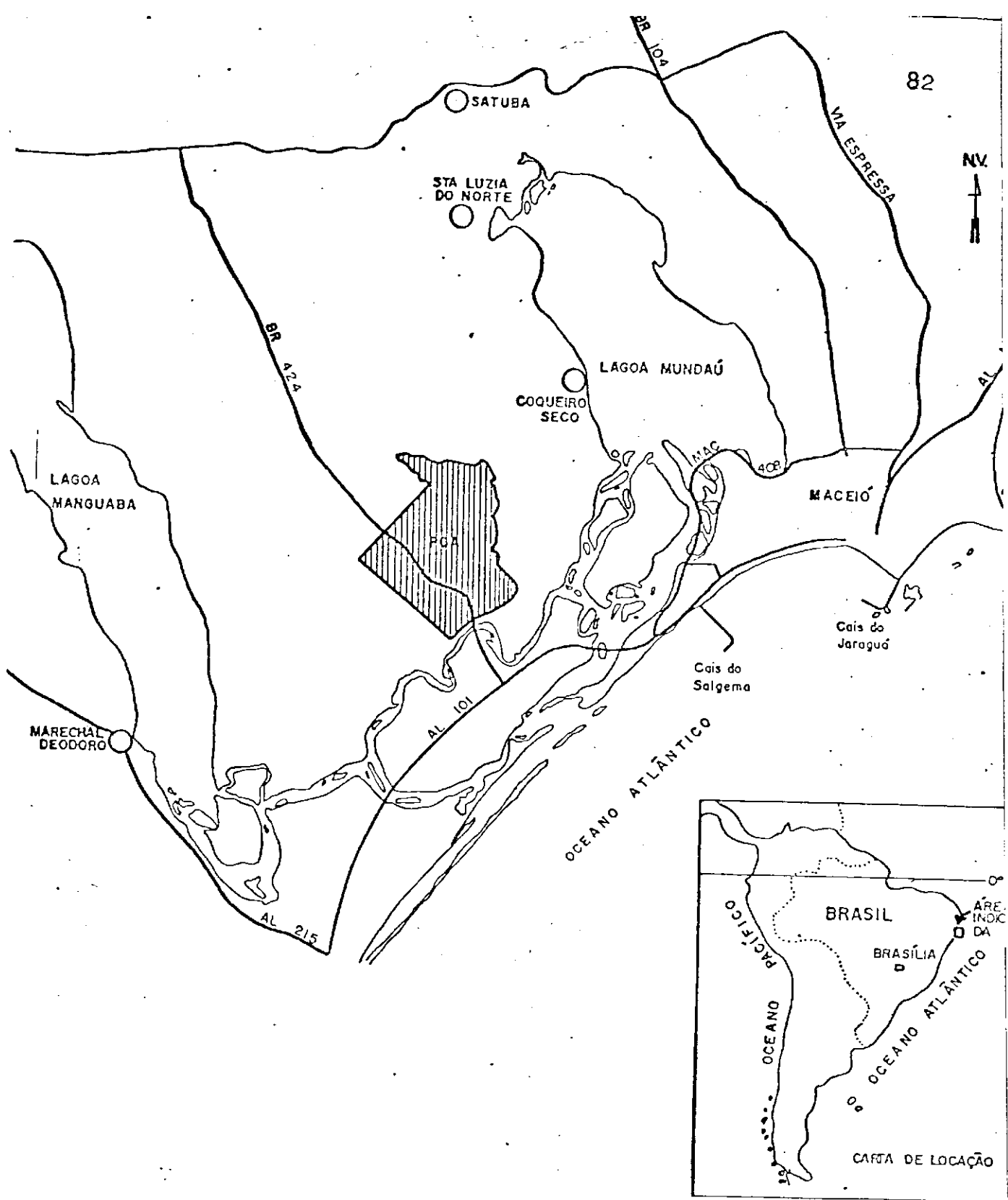



Figura 5.0 - MAPA DE SITUAÇÃO

 ÁREA ESTUDADA

ESCALA



A precipitação e a evapotranspiração são os fatores climáticos mais importantes para o estudo do regime hidrológico de uma região. Outros dados meteorológicos exercem influência sobre estes fatores climáticos tais como: temperatura, umidade e vento na atmosfera.

Enfoca-se a seguir esses fatores climáticos considerando as estações na proximidade da área de estudo.

5.2.2 - Pluviometria

A pluviometria foi determinada (Neto, J.V.F. et alli 1989) através do mapa de isoietas, Figura 5.1, construído a partir dos dados de precipitações médias anuais referente ao período 1963-1984 das estações existentes na proximidade da área: Macéió, Pilar, Rio Largo, Satuba e São Miguel dos Campos, onde se observa que a pluviometria situa-se em torno de 1600 mm, Figura 5.2.

As precipitações médias mensais, mostradas na tabela 1, apresentam uma certa regularidade, não ocorrendo longos períodos de elevadas precipitações, tão pouco de forte estiagem.

O regime de chuvas é muito uniforme ao longo do ano, verificando-se uma periodicidade marcante, com duas estações anuais bem definidas: uma estação chuvosa de abril a julho com precipitação média mensal em torno de 250 mm; e uma estação seca de outubro a fevereiro, com precipitação média mensal em torno de 50 mm.

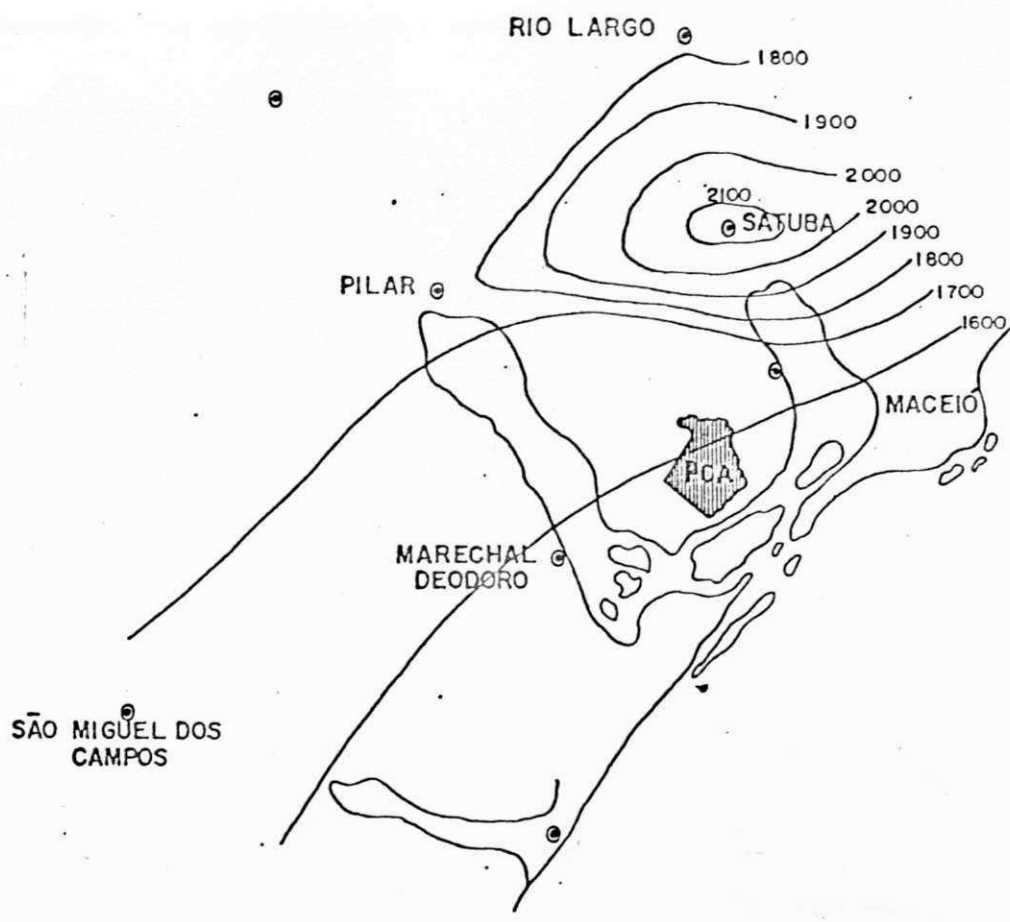
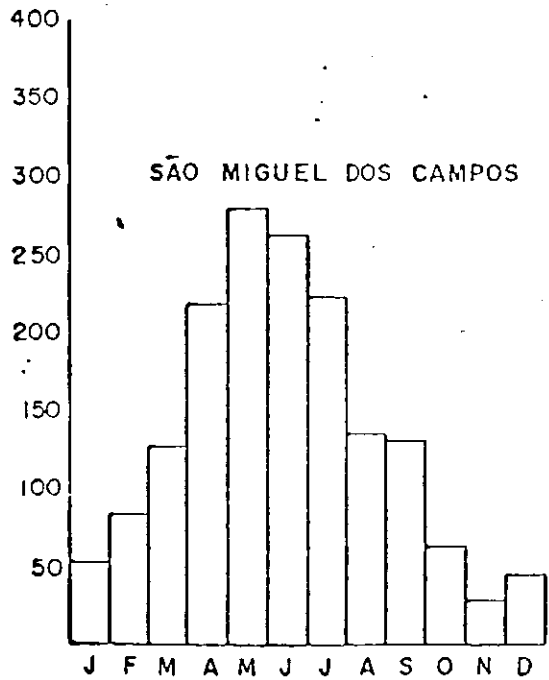
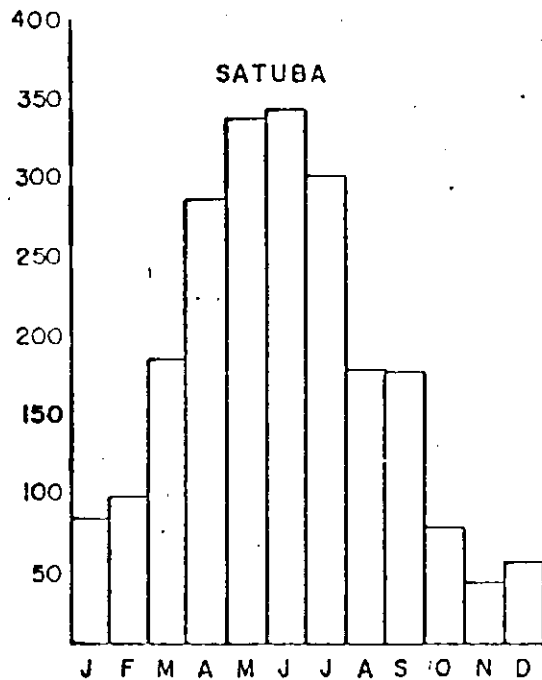
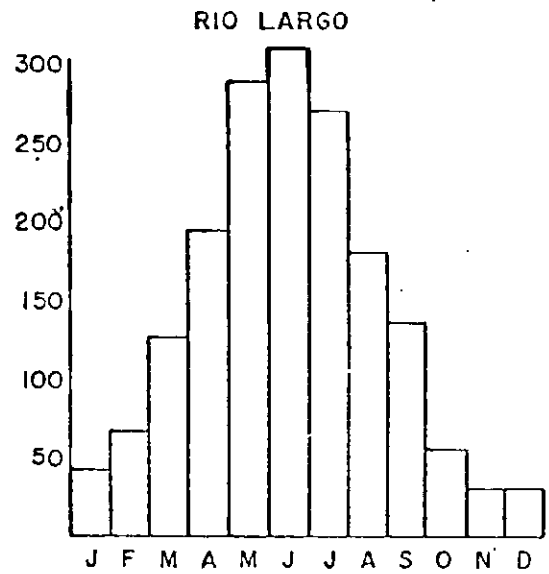
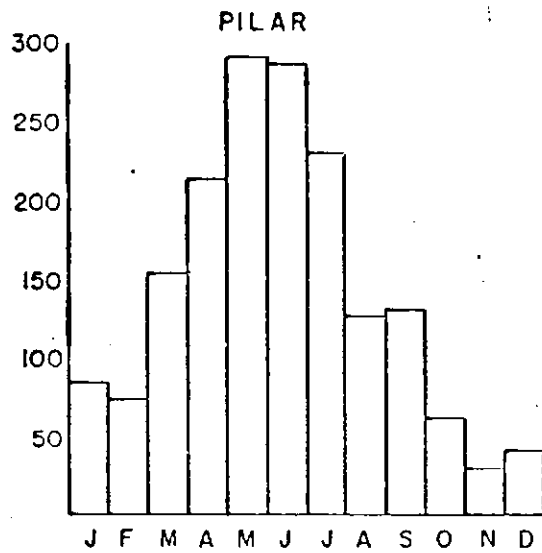
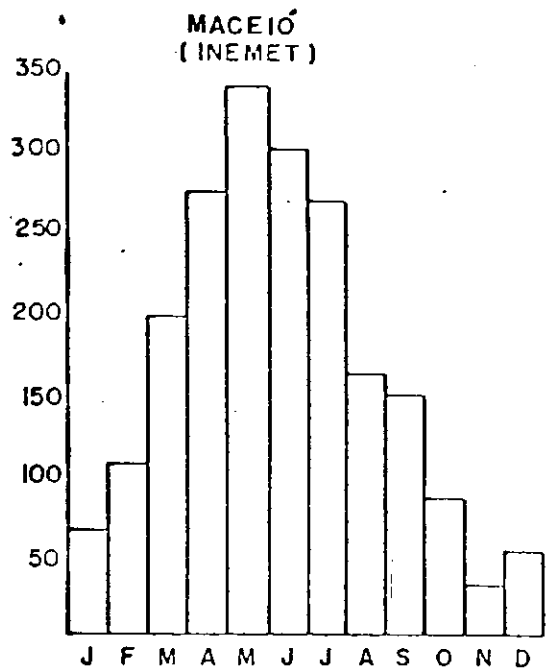
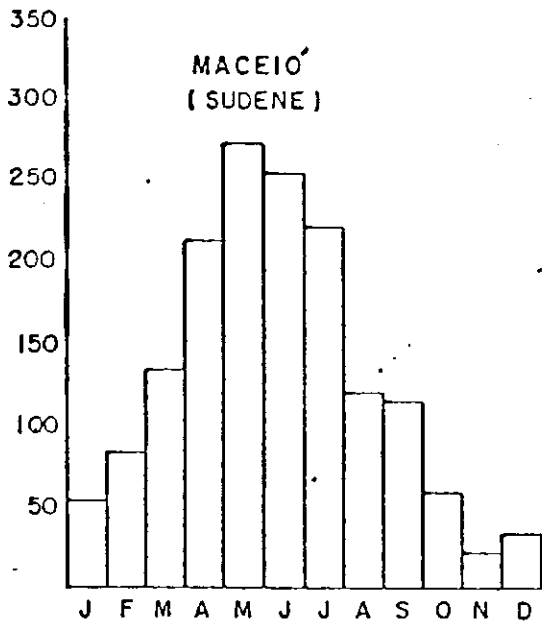


Figura 5.1 - MAPA DE ISOETAS (mm) PERÍODO 1963 - 1984
(Neto, J.V.F et alli, 1989)



FIG

Estação	JAN	FEV	MAR	ABR	MAY	JUN	JUL	AGO	SET	OUT	NOV	DEZ	Total Anual
Maceiô (Inemet)	68,8	106,9	199,1	278,3	346,3	305,7	271,8	163,5	149,1	85,7	31,8	52,4	2059,4
Maceiô (Sudene)	55,2	85,9	136,7	216,5	277,4	260,1	225,2	123,1	117,2	60,1	22,9	35,3	1615,6
Pilar	86,4	74,6	155,8	215,8	293,1	287,2	233,0	128,5	132,8	63,8	30,8	43,0	1744,8
Rio Largo	45,7	70,3	130,4	197,0	292,7	314,1	274,0	183,6	138,8	57,3	32,9	32,0	1768,8
Satuba	82,1	96,4	182,2	286,5	338,2	345,8	300,2	176,4	174,7	74,9	39,9	53,2	2150,5
S.M. dos Campos	52,6	84,1	127,7	218,9	280,3	263,0	222,9	135,9	131,0	62,2	28,9	44,2	1651,7

Tabela 1 - PRECIPITAÇÕES MÉDIAS MENSAS (mm) PERÍODO 1963 - 1984

(Neto, J.V.F. et alii, 1989)

5.2.3 - Evapotranspiração

A evapotranspiração é o conjunto dos fenômenos de natureza física que transformam em vapor a água da superfície do solo, dos cursos d'água, dos lagos, dos mares e dos reservatórios de acumulação, bem como devido a ação fisiológica dos vegetais.

A evapotranspiração local, para o período, foi determinada mensalmente, (Neto, J.V.F., op.cit), por métodos empíricos, em função dos dados obtidos nas estações meteorológicas de Maceió (SUDENE e INEMET) tais sejam: latitude, temperatura, umidade relativa, insolação, velocidade do vento, pressão atmosférica e evaporação. Além destes fatores, foram considerados os dados do PLANALSUCAR referentes aos coeficientes de evapotranspiração determinado mensalmente para a cana-de-açúcar que caracteriza a vegetação predominante da área do PCA.

Os métodos utilizados, assim como os dados obtidos encontram-se na tabela 2.

5.2.4 - Balanço Hídrico

O balanço hídrico calcula a disponibilidade de água no solo confrontando a precipitação com a evapotranspiração potencial, considerando a capacidade de armazenamento de água no solo ou seja, a máxima quantidade de água utilizável pelas plantas, que pode ser armazenada na sua zona radicular.

Método	E A. %	JAN	FEV	MAR	ABR	MAI	JUN	JUL	AGO	SET	OUT	NOV	DEZ
Blaney- Criddle adap- tada por Ca- margo	S	140	124	117	102	89	72	62	52	51	98	122	141
	I	138	117	114	99	88	68	59	51	51	100	131	141
Turc	S	144	142	125	112	98	92	94	106	120	139	145	147
	I	140	135	120	108	96	92	90	104	118	139	149	143
Penman	S	140	126	123	120	105	93	98	113	127	134	136	143
	I	137	121	120	116	103	90	95	110	124	133	138	140
Thornthwaite	S	146	130	140	127	116	98	95	97	102	121	129	143
	I	145	128	138	124	113	96	92	90	97	118	128	143
Média	S	143	131	126	115	102	89	87	92	100	123	133	144
	I	140	125	123	112	100	87	84	89	98	123	137	142
Média Geral		141	128	125	114	101	88	86	90	99	123	135	143

Totais S = 1.385,0 mm
I = 1.360,0 mm

Tabela 2.- ESTAÇÃO MACEIÓ (SUDENE) - EVAPOTRANSPIRAÇÃO POTENCIAL

(Neto, J.V.F. et alli, 1989)

Segundo Neto, J.V.F. et alli (1989) o cálculo do balanço hídrico foi estimado pelo método de THORNTHWITE-MATHER para as estações de Maceió (SUDENE e INEMET), e está apresentado nas tabelas 3 e 4.

A Figura 5.3 representa o Curso Anual Normal do Balanço Hídrico em Maceió, que apresenta uma pluviométrica anual semelhante a área em estudo, onde se obtém um percentual de 32.6% de escoamento em relação ao total anual precipitado.

A figura supra citada indica que o período de deficiência hídrica ocorre de meados de outubro a fins de março, quando ocorre o início da estação chuvosa. Corresponde também, ao início do período de reposição d'água no solo que se estende, aproximadamente, até o segundo dia do mês de maio. Apartir daí ocorre o período de excesso d'água no solo que só se completa em meados de outubro, quando tem início, outra vez, o período de deficiência e conseqüentemente retirada d'água do solo.

Os valores calculados referentes a estes períodos foram:

- Deficiência hídrica = 297 mm
- Excesso d'água = 527 mm

5.3 - Caracterização Geológica

5.3.1 - Generalidades

A Bacia Sedimentar Sergipe-Alagoas está localizada ao longo da costa e plataforma continental dos estados homônimos, no

Coluna	1	2	3	4	5		6	7	8	9	10
Mês	P	ETP	P - ETP	negativo acumulado	Armazenamento		ETR	DEF	EXC	ESC.	
					Valor	Alteração	1 + 161	ETP - ETR	(P-ETP)-ALT		
JAN	69	140	-71	-303	11	-8	77	63	0	6	
FEV	107	125	-18	-321	9	-2	109	16	0	3	
MAR	199	123	76	-46	85	+76	123	0	0	1	
ABR	278	112	166	0	125	+40	112	0	126	64	
MAI	346	100	246	0	125	0	100	0	246	155	
JUN	306	87	219	0	125	0	87	0	219	187	
JUL	272	84	188	0	125	0	84	0	188	187	
AGO	163	89	74	0	125	0	89	0	74	131	
SET	149	98	51	0	125	0	98	0	51	91	
OUT	86	123	-37	-37	92	-33	119	4	0	45	
NOV	32	137	-105	-142	39	-53	85	52	0	23	
DEZ	52	142	-90	-232	19	-20	72	70	0	11	
ANO	2.059	1.360	699	-	-	0	1.155	205	904	904	

$$\% \text{ de Esc} = 904/2.059 \times 100\% = 43.9\%$$

Tabela 3 - ESTAÇÃO MACEIÓ (SLIDENE)

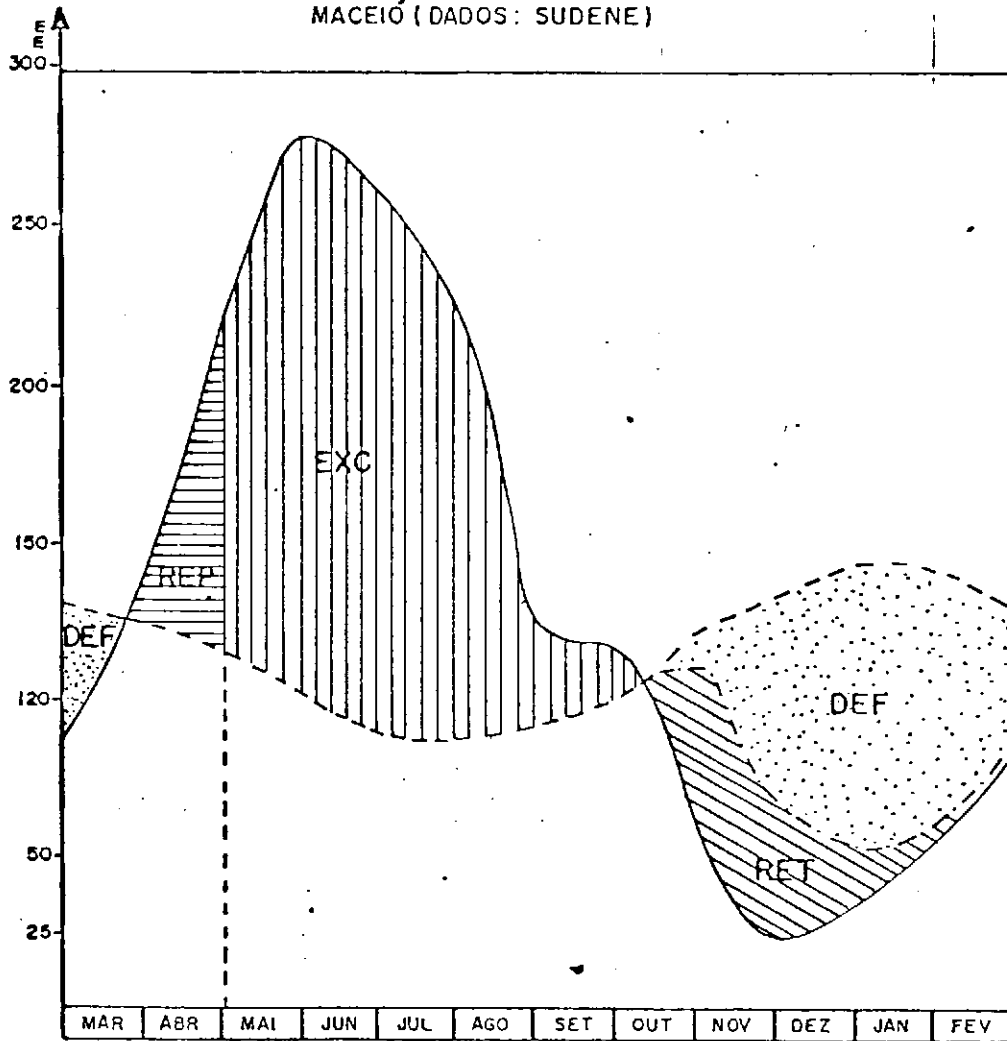
(Neto, J.V.F. et alii, 1989)

P = Precipitação (mm/mes); RTP = Evapotranspiração Potencial

ETR = Evapotranspiração Real; DEF = Deficiência Hídrica (mm)

EXC = Excesso Hídrico (mm); ESC = Escoamento (mm)

CURSO ANUAL NORMAL DO BALANÇO HÍDRICO
MÉTODO DE THORNTHWITE-MATHER
MACEIÓ (DADOS: SUDENE)



FONTE : Neto, J.V.F. et alli, 1989

LEGENDA

- CAPACIDADE DE ARMAZENAMENTO: 125 mm
- P = 1.615 mm
- - - ETP = 1.385 mm
- ETR = 1.088 mm
- ▤ DEFICIÊNCIA
- ▨ RETIRADA D'ÁGUA DO
- ▧ REPOSIÇÃO

Figura 5.3 - BALANÇO HÍDRICO

Nordeste do Brasil. Limita-se no continente por falhas normais e mar a dentro, pelo talude continental.

Apresenta uma área continental emersa de aproximadamente 11.000 km², com uma largura variável de 15 a 45 km, para uma extensão longitudinal de 300 km, cobrindo quase que totalmente a margem oriental atlântica dos estados de Sergipe e Alagoas.

As feições estruturais e as seqüências estratigráficas encontradas nessa bacia ajusta-se, dentro do conceito de tectônica das placas ou tectônica global, ao modelo evolutivo teórico de margem do tipo Atlântico, podendo ser identificada, segundo diversas classificações como "graben em plataforma estável" (Weeks, 1952), "trateogeossinclínio" (De-Wei e Bird, 1970) e "tipo V-intermediária-costeira de rompimento" (Klemme, 1971).

Esta bacia foi preenchida por sedimentos neopaleozóicos, mesozóicos e cenozóicos que mergulham suavemente e se espessa no sentido do oceano. É a mais completa das bacias sedimentares do Nordeste. São sedimentos de origem continental, de transição e marinha que correspondem às sucessivas fases de sua evolução histórica. A espessura do pacote sedimentar, em função do complexo arcabouço estrutural da bacia, varia de 300 a 500 metros nas plataformas rasas ou horsts inferiores e atingem mais de 7.000 metros nos grabens principais e secundários.

A área de estudo faz parte integrante da Bacia Sedimentar Sergipe-Alagoas, mais recentemente estudada por Schaller, 1969, Mabessone et alli, 1972, Cavalcante et alli, 1975, Saldanha et

alli, 1975, DNPM/PETROBRÁS, 1975, Silva et alli, 1979 e DNPM/SUDENE/EDRN-AL, 1986.

5.3.2 - Feições Litoestratigráfica da Área

O mapa geológico da bacia (figura 5.4), elaborado pela PETROBRÁS/DNPM, 1975, mostra a extensividade do Grupo Barreiras por toda a área de estudo. As formações pré-Barreiras não afloram na área, entretanto poços perfurados pela PETROBRÁS, nas adjacências do PCA, mostram as seguintes unidades geológicas:

a) Formação Muribeca

É constituída por intercalações de folhelhos betuminosos, calcários laminados, evaporitos, arenitos e conglomerados. De acordo com a maior ou menor frequência desses elementos litológicos, a unidade pode ser dividida em cinco membros dentre os quais o Carmópolis que representam a formação na área.

Membro Carmópolis - Fanglomerados em matriz de arcósio, arcósio conglomerático e arcósio. Os seixos e matacões são de intrusivas ácidas e gnaisses. Ocorre como subafloramento discordante do Grupo Barreiras, em grande extensão por quase toda borda oeste da bacia.

b) Formação Ponta Verde

Composta de folhelhos cinza esverdeados com acabamentos finos e laminados. Como subafloramento, abaixo do Grupo Barreiras,

ocorre numa estreita faixa perpendicular ao litoral.

c) Formação Coqueiro Seco

É constituída por alternância monótonas de arenitos, folhelhos e siltitos. O contato superior é discordante com o Grupo Barreiras e concordante com a Formação Ponta Verde. Em subsuperfície é uma unidade muito extensiva, que aflora nas encostas da área..

d) Formação Morro dos Chaves

São camadas de calcários coquinóide cinza-esbranquiçado, a creme. Seu contato inferior com a Formação Penedo é concordante e a superior com o Grupo Barreiras é discordante.

e) Formação Penedo

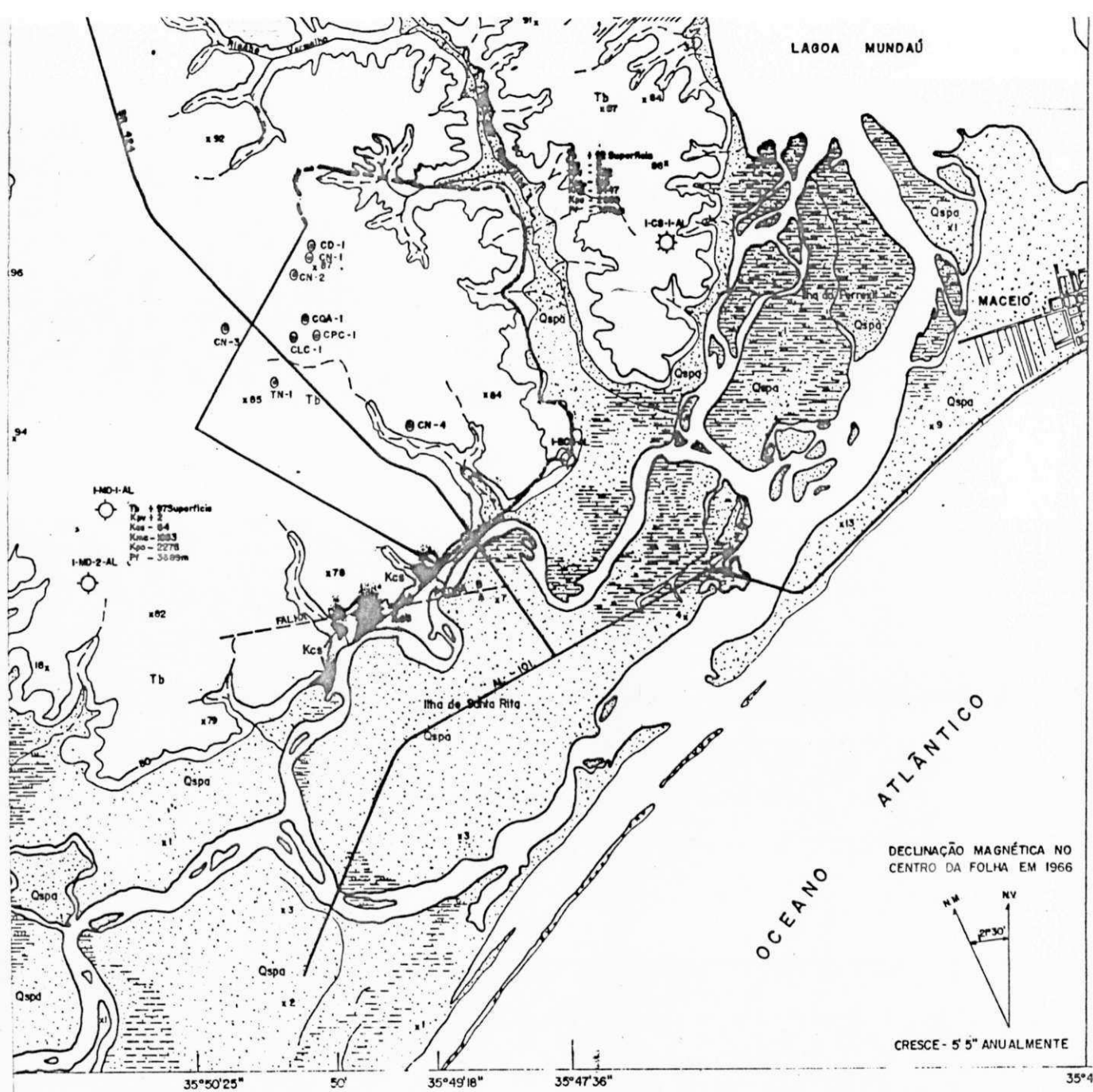
São camadas médias a espessas de arenitos cinza-esbranquiçada, granulação média, subangular, com intercalações de folhelho verde. Em subsuperfície é conhecida sua ocorrência discordantemente com o Grupo Barreiras.

A Figura 5.5 mostra a coluna estratigráfica da porção continental alagoana da Bacia sedimentar Sergipe-Alagoas.

5.3.2.1 - Grupo Barreiras

São clásticos continentais, regularmente compactados em acamamentos mal definidos, com cores variegadas.

A litologia é constituída por arenitos argilosos com intercalações subordinadas de argila e siltito.



-  Qspa - Sedimentos de praia e Aluvião
-  Tb - Grupo Barreiras
-  Kca - Formação Coqueiro Seco
-  Contato Geológico
-  Falha encoberta
-  Poços da Petrobrás
-  Poços Tubulares (água)
-  Ponto cotado
-  Curva de nível
-  Curso d'água permanente
-  Mangue ou pantano
-  Capital
-  Cidade
-  Rodovia pavimentada

MAPA BASE : Carta Geológica da Bacia
Sergipe / Alagoas

Figura 5.4 - MAPA GEOLÓGICO

ERA	PERÍODO		GRUPO	SUBGRUPO	BACIA SERGIPE / ALAGOAS FORMAÇÃO	
	ÉPOCA					
CENOZÓICO	QUATERNÁRIO		BARREIRAS		AREIAS E ARGILAS	
	TERCIÁRIO				GUARARAPES	
		MIOCENO			PLAÇABUCÚ	
MESOZÓICO	SUPERIOR				COTINGUIBA	
					HIACHUELO	
	CRÉTACEO				MURIDECA	
					PORTA VERDE	
					COQUEIRO SECO	
					MORRO DO CHAVES	
	JURÁSSICO				PENEDO	
					BARRA DE ITUBA	
	TRIASSEICO		BAIXO SÃO FRANCISCO			SERRARIA
			CORURIFE			SANANEIRA
					CANDEIRO	
					IGREJA NOVA	
PALEOZÓICO	PERMIANO				ARACARE	
	CARBONIFERO				BATINGA	
	DEVONIANO					
PRECAMBRIANO						
	SILURIANO					

Figura 5.5 COLUMNA ESTRATIGRÁFICA DA PORÇÃO CONTINENTAL ALAGOANA DA BACIA SEDIMENTAR SERGIPE - ALAGOAS.

O Grupo Barreiras apresenta uma grande variação de espessura, devido provavelmente, não somente ao arcabouço da Bacia, como também por causa das reativações póstumias, concomitantes e após terminada sua deposição.

De um modo geral, parece que sua espessura diminui nas proximidades da bordas da Bacia.

Saldanha et alli, 1975, destiguiram na região de Alagoas as unidades litoestratigráficas: formação Guararapes e Formação Serra dos Martins já encontradas por Mabessone et alli, 1972, em outros Estados do Nordeste.

Na área de estudo a Formação Guararapes encontra-se subjacente ao Polo Cloroquímico de Alagoas, apresentando-se horizontalizada, com uma espessura média de 85 metros, impondo assim uma feição morfológica de tabuleiro a região. Este tabuleiro é dissecado por vales, destacando-se o vale do rio dos Remédios que limita a área do PCA em sua parte este. A Figura 5.6 exhibe de forma esquemática, um corte em superfície na área do PCA.

Localmente os sedimentos da Formação Guararapes são pouco ou não consolidados, com estratificação predominantemente paralela e maciça. São constituídos por areias quartzosas, com textura variando de fina a grossa, com grãos angulosos a subangulosos, estando este pacote arenoso intercalado por camadas e lentes argilosas e silte-argilosas.

Esta unidade será melhor detalhada na abordagem sobre as características hidrogeológicas no próximo item.

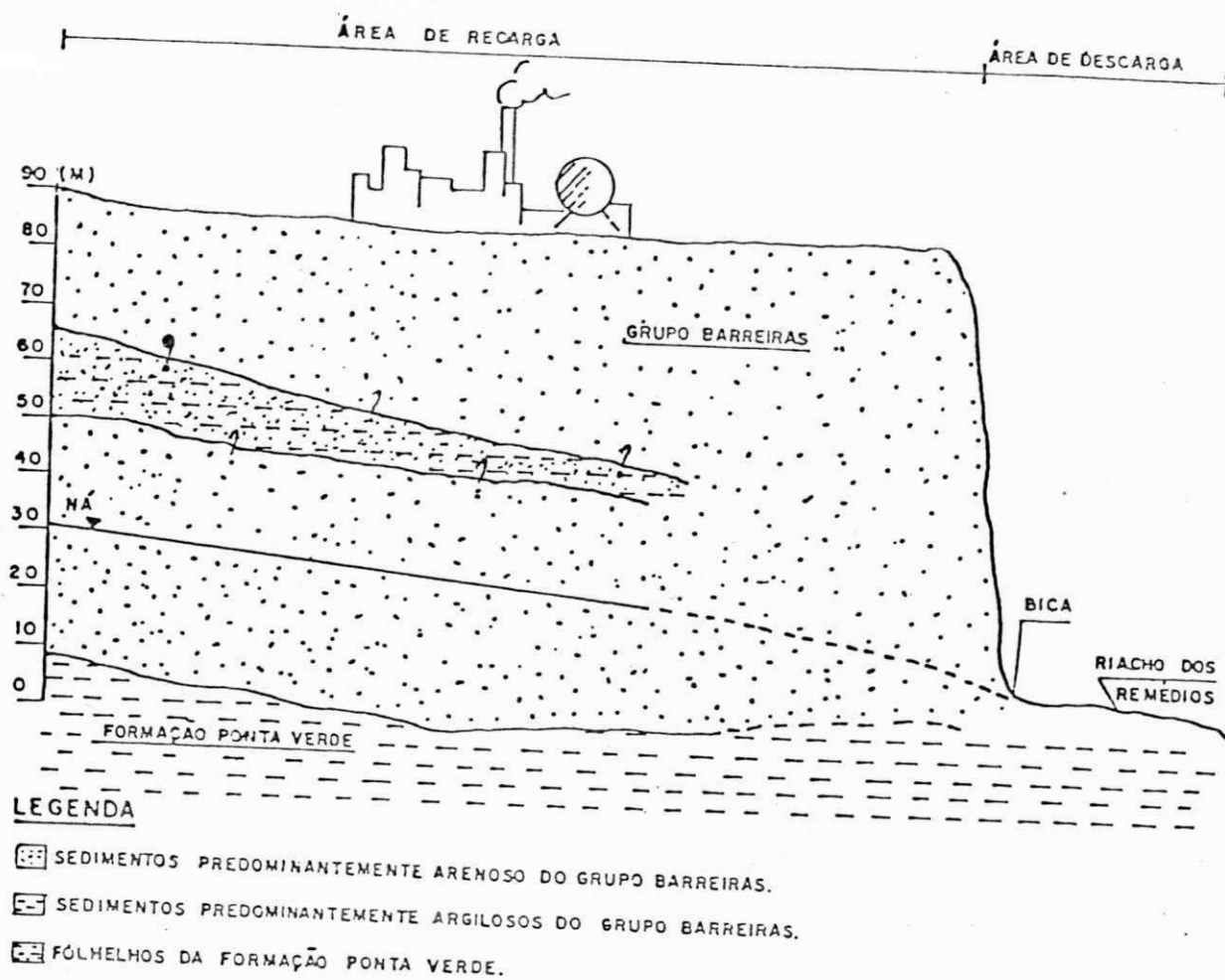


Figura 5.6 - Corte esquemático em superfície da área
do Polo Cloroquinico de Alagoas

5.4 - Caracterização Hidrogeológica

Das unidades litoestratigráficas acima descritas, somente o Grupo Barreiras (Formação Guararapes) é, atualmente, a única utilizada para captação de água subterrânea na área. Desta forma, as considerações serão direcionadas para tal unidade.

O Grupo Barreiras isoladamente constitui um complexo sistema hidrodinâmico, representado no local de estudo, por uma zona saturada com uma espessura média de 20 metros, constituída por material areno-argiloso onde as areias mostram uma granulometria variando de média a grossa, localmente fina, intercalado por níveis descontínuos de argila e silte. Esta caracteriza-se por uma zona livre superior estando limitada na base, por um leito de cor verde escura que são os folhelhos da formação Ponta Verde

A não continuidade horizontal dos níveis de argila e silte faz com que o potencial das águas subterrâneas seja totalmente comandada pela superfície potenciométrica da zona livre.

As figuras 5.7 , 5.8, 5.9 e 5.10 mostram respectivamente, a distribuição dos poços profundos de produção e monitoramento no PCA e três secções geológicas correlacionando os perfis dos mesmos.

Segundo a secção AA', englobando 7 perfis de poços e por isto mais representativa para a área, a sequência do topo para a base inicia-se com uma camada areno silte-argilosa com espessura média de 8 metros.

Abaixo desta camada pode-se definir um pacote de espessura média de 40 metros constituído de material areno-argiloso, onde as areias apresentam granulometria variando de fina a média, com predominância das últimas. Intercalando este pacote têm-se lentes de material argiloso e/ou siltoso, de cores variegadas, descontínuas, com espessuras variando entre 1.5 a 5.0 metros.

Sotoposto a este pacote e com uma espessura variando entre 15 e 30 metros, encontra-se um material formado por areias com grãos grosseiros e argila subordinada. Lentes de argila e/ou silte, descontínuas, porém com maior persistência na lateral, intercalam este nível com espessuras variando entre 1.0 a 6.0 metros.

Finalmente, areias de granulometria média a média grossa, com espessura entre 10 e 18 metros, definem a base da Formação Guararapes e conseqüentemente o contacto entre essa Formação e a Formação Ponta Verde.

Os níveis d'água, em alguns dos poços acima mencionados, foram aferidos numa campanha realizada em agosto de 1991. Os mesmos situam-se entre 60 e 64 metros, obtendo-se uma média de 63 m conforme demonstra a tabela 5.

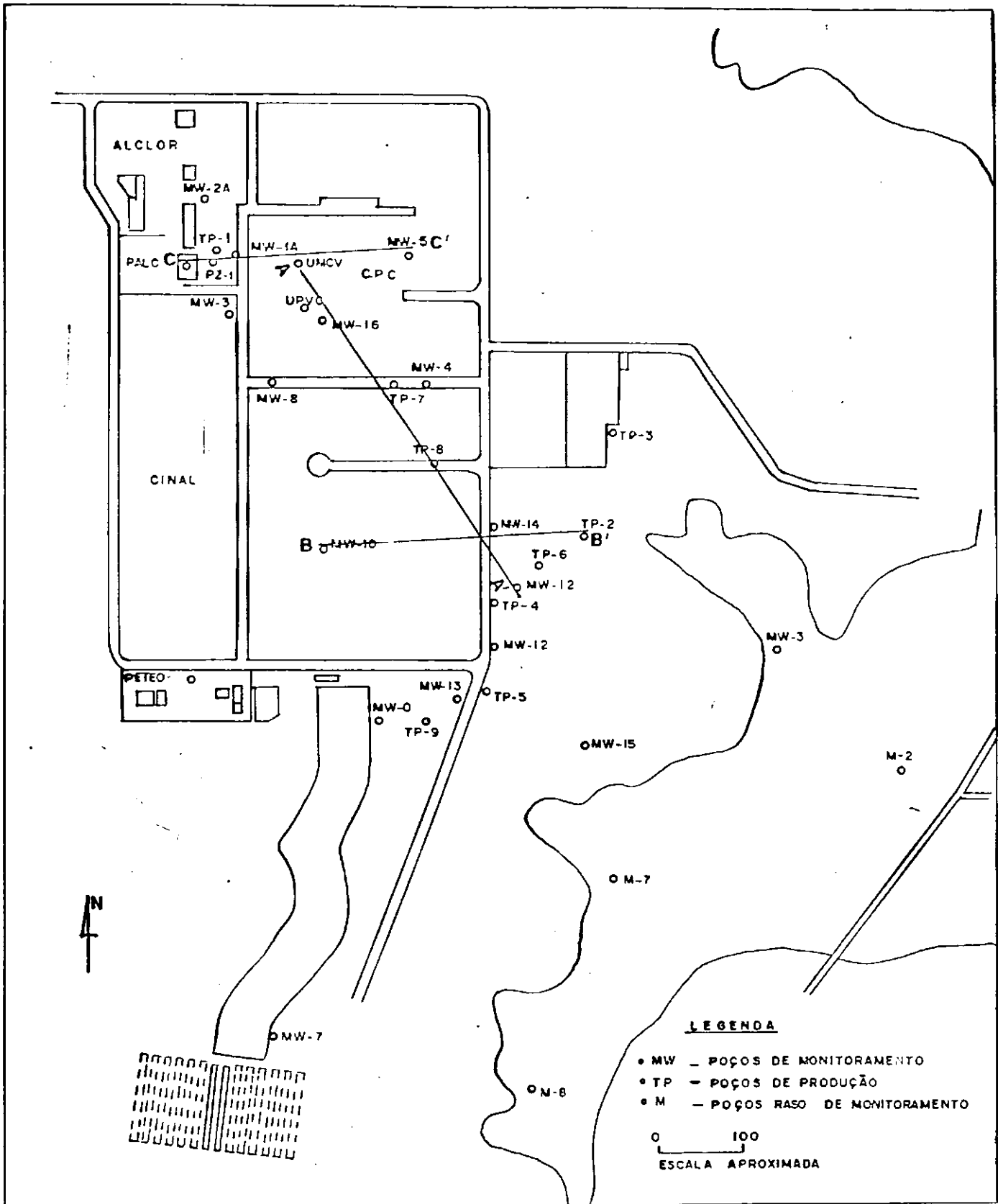


Figura 5.7 - POÇOS DE MONITORAMENTO NA ÁREA DO POLO CLOROQUÍMICO DE ALAGOAS. (Geomatrix, 1992)

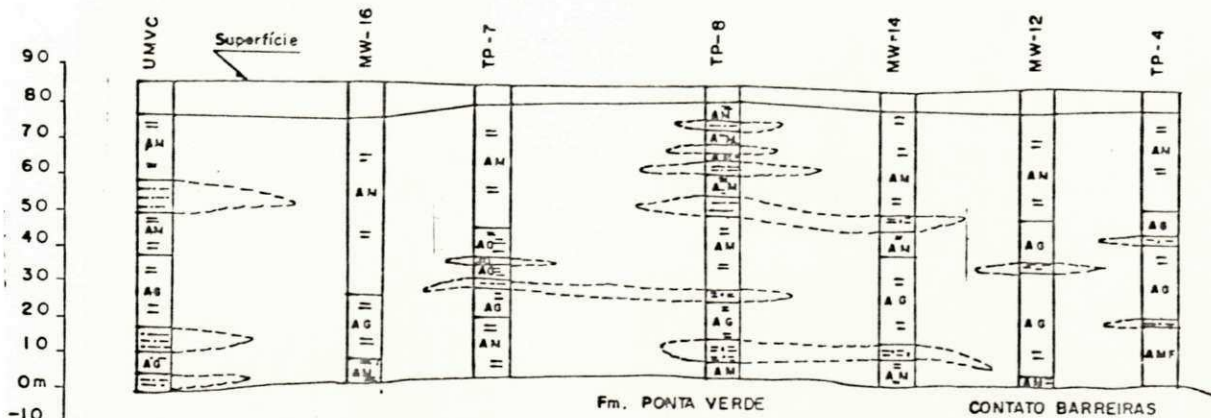


Figura 5.8 - Secção Geológica A-A'

LEGENDA

- Areno silte-argiloso
- Areno-argiloso
- Argiloso
- AN = Areia média c/ argila
- AG = Areia grossa c/ argila
- AMG = Areia muito grossa

Escalas: V=1/700
H=1/3500

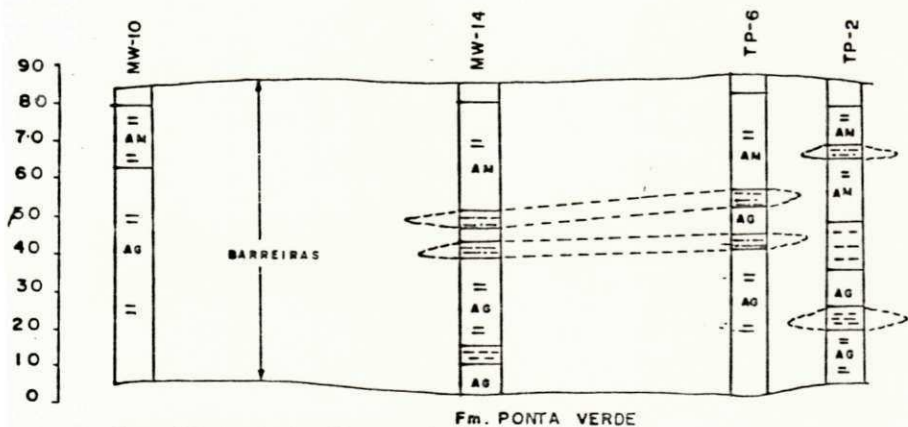


Figura 5.9 - Secção Geológica B-B'

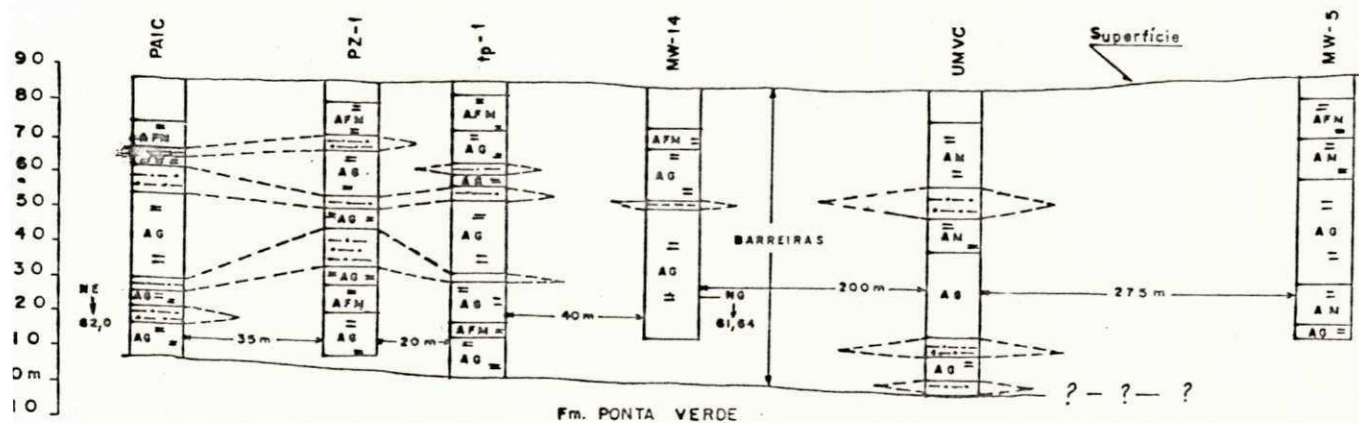


Figura 5.10 - Secção Geológica C-C'

Tabela 5 - NÍVEIS D'ÁGUA (08/1991)

POÇOS	NÍVEL D'ÁGUA (m)	COTA DO NÍVEL D'ÁGUA (m)
MW-1A	61.643	24.434
MW-2A	59.605	25.986
MW-3	60.609	223.977
MW-4	62.530	22.031
MW-5	64.124	22.852
MW-7	64.198	17.645
MW-8	61.056	22.890
TP-1	--	--
PZ-1	61.972	23.987
ALC	61.970	24.622
PVC	61.765	23.223
MVC	61.308	24.037

FONTE: Paranaguá - Engenharia e Consultoria Ltda.

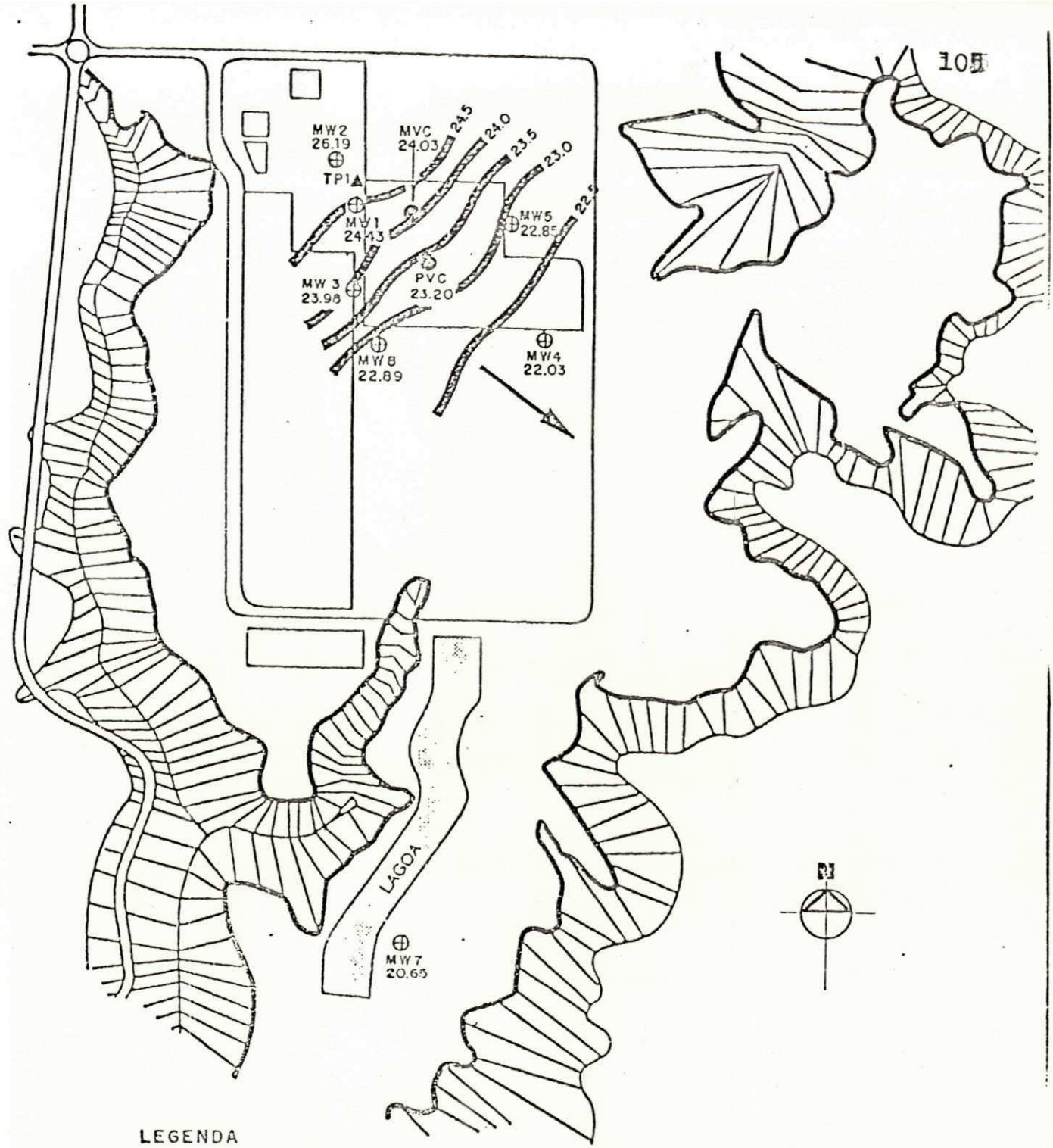
Com os dados relativo a tabela V foi traçado (em planta) as curvas de iso-elevações (iso-potenciométricas), que estão representadas na figura 5.11. Como resultado das curvas citadas, obteve-se o valor para o gradiente hidráulico (i) para a região do PCA que foi de 0.0058 ou para efeito de cálculos posteriores 0.006.

Tabela 5 - NÍVEIS D'ÁGUA (08/1991)

POÇOS	NÍVEL D'ÁGUA (m)	COTA DO NÍVEL D'ÁGUA (m)
MW-1A	61.643	24.434
MW-2A	59.605	25.986
MW-3	60.609	223.977
MW-4	62.530	22.031
MW-5	64.124	22.852
MW-7	64.198	17.645
MW-8	61.056	22.890
TP-1	--	--
PZ-1	61.972	23.987
ALC	61.970	24.622
PVC	61.765	23.223
MVC	61.308	24.037

FONTE: Paranaguá - Engenharia e Consultoria Ltda.

Com os dados relativo a tabela V foi traçado (em planta) as curvas de iso-elevações (iso-potenciométricas), que estão representadas na figura 5.11. Como resultado das curvas citadas, obteve-se o valor para o gradiente hidráulico (i) para a região do PCA que foi de 0.0058 ou para efeito de cálculos posteriores 0.006.



LEGENDA

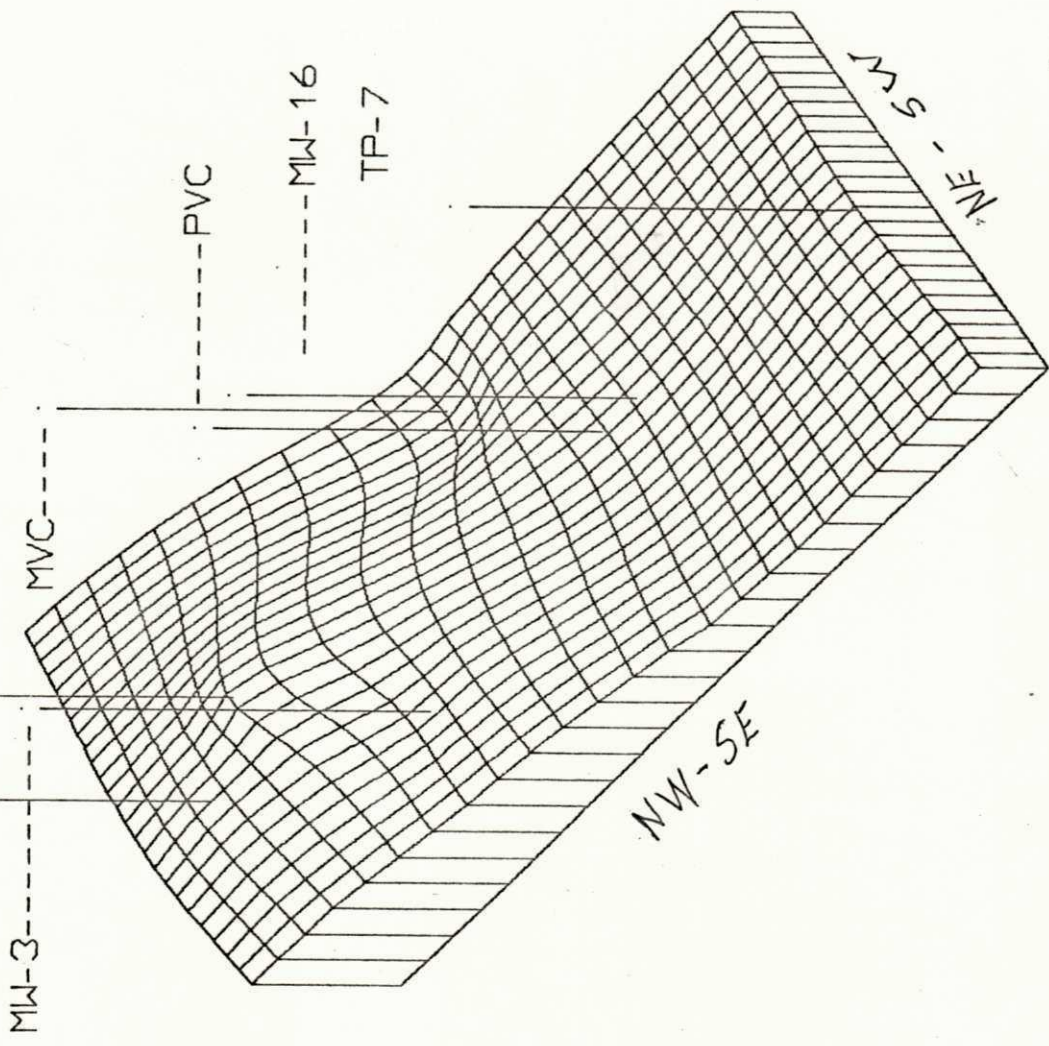
- ⊕ LOCALIZAÇÃO E IDENTIFICAÇÃO DE POÇOS DE MONITORAMENTO (MW)
- ⊙ POÇO EXISTENTE (PVC) (MVC)
- △ POÇO DE PRODUÇÃO (TP)
- CONTORNO DA ELEVACÃO DO NÍVEL D'ÁGUA (EM METROS)
- ↘ DIREÇÃO APROXIMADA DO FLUXO NO AQUIFERO

Figura 5.11 - Curvas Isopotenciométricas
(Paranaguá, 1991)

A tabela VI abaixo, mostra dados de poços selecionados na área para a plotagem tridimensional da base e espessura da zona saturada (aquífero Barreiras) as quais encontram-se nas figuras 5.12 e 5.13.

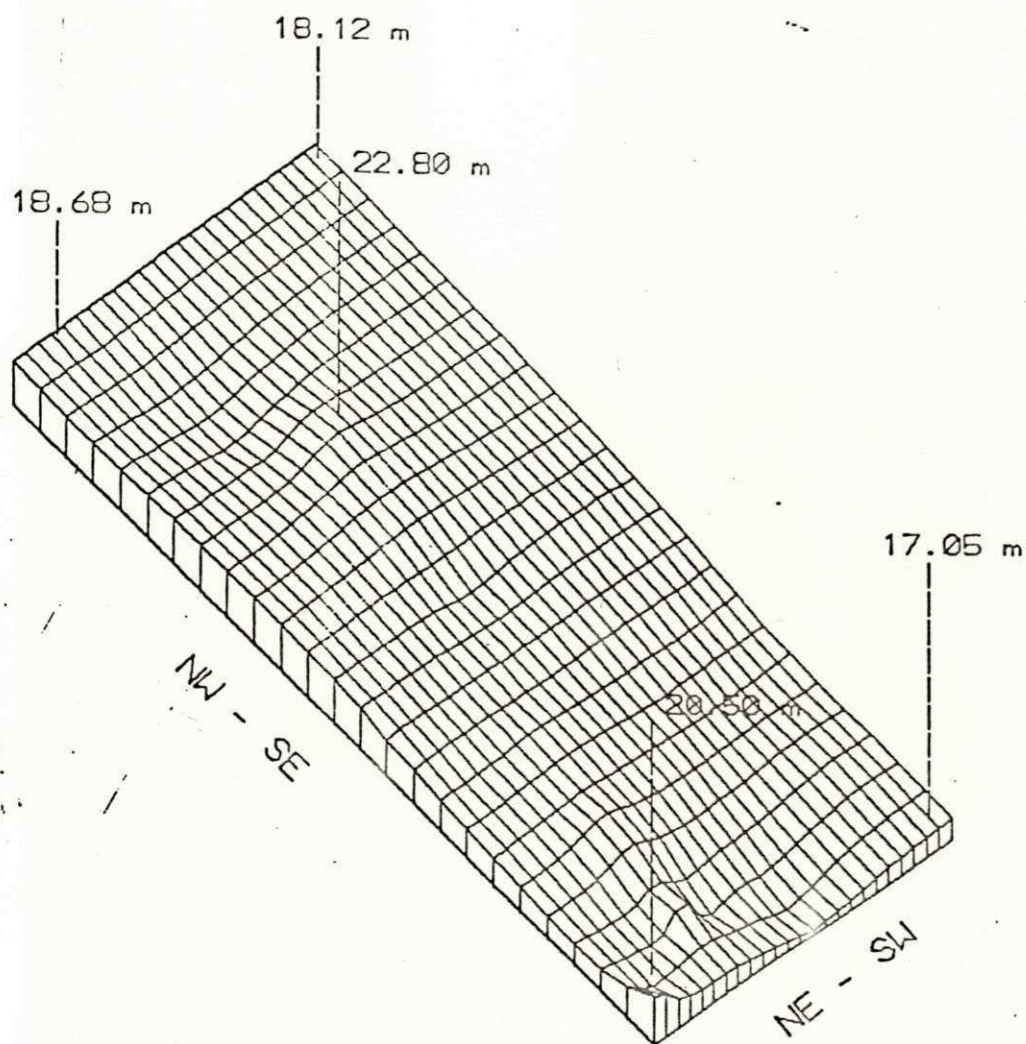
Tabela 6 - Dados de Poços para Plotagem das Figuras 5.12 e 5.13

POÇO	COTA NA SUPRÍCIE (m)	NÍVEL DO NE (m)	CONTATO GRUPO B. Fm.P.V	COTA DA BASE (m)	ESPESSURA (m)
TP-1	85.979	61.26	79.26	6.72	18.00
TP-2	86.035	69.65	83.00	3.00	13.35
TP-3	86.818	68,94	85.99	0.83	17.05
TP-4	85.572	68.36	83.00	2.57	14.67
TP-5	84.696	64.50	85.00	-0.30	20.50
TP-6	86.722	71.83	85.00	1.72	13.17
TP-7	85.096	64.15	83.00	2.10	18.85
TP-8	83.928	64.27	83.00	0.93	18.73
MW-3	84.561	60.61	80.81	3.75	20.00
MW-11	85.624	66.70	82.00	3.62	15.30
MW-12	85.876	69.42	84.00	1.88	14.58
MW-14	84.602	63.69	83.00	1.60	19.31
MW-16	85.00	62.30	84.60	0.40	22.30
UMVC	85.345	61.31	86.20	-0.85	24.89
PVC	84.969	61.77	84.56	0.41	23.19
PALC	86.592	61.97	80.61	5.98	18.64



REPRESENTAÇÃO TRIDIMENSIONAL DA BASE DO AQUIFERO BARREIRAS NO POLO CLOROQUIMICO DE ALAGOAS.

Figura - 5.12



REPRESENTAÇÃO TRIDIMENSIONAL DA ESPESSURA
DO AQUIFERO BARREIRAS NO POLO CLOROQUÍMICO
NO ESTADO DE ALAGOAS

Figura 5.13

Apesar do Grupo Barreiras se tratar de uma unidade geológica extensiva no Norte e Nordeste do país, são raros os dados sobre suas características hidrodinâmicas.

Beltrão (1970), para a área de Fortaleza, estado do Ceará, encontrou os parâmetros:

Coeficiente de Transmissividade (T)....	$4.0 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$
Condutividade Hidráulica (K).....	$4.0 \times 10^{-4} \text{ m/s}$
Porosidade Efetiva (n_{ef}).....	7.0×10^{-2}

A ACQUA-PLAN (1971), efetuando cálculo das reservas permanentes para a unidade em questão na cidade de Maceió, utiliza uma porosidade efetiva de 5.0×10^{-2} .

Cavalcante (1978), para a área de Maceió encontrou:

Coeficiente de Transmissividade	$\begin{bmatrix} 1.35 \times 10^{-2} \text{ m}^2/\text{s} \\ 1.61 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s} \end{bmatrix}$
Condutividade Hidráulica	$\begin{bmatrix} 2.56 \times 10^{-4} \text{ m/s} \\ 8.05 \times 10^{-6} \text{ m/s} \end{bmatrix}$
Porosidade Efetiva.....	5.0×10^{-2}

Cavalcante (1990), atualizando os cálculos sobre as reservas permanentes desta unidade, reutiliza o valor da porosidade efetiva de 5×10^{-2} não encontrando diferença significativa entre os resultados obtidos.

Anjos, C.A.M. (1992), determinou a porosidade total para o material areno-argiloso das encostas pertencentes ao Grupo Barreiras, na cidade de Maceió, em 0.50. Segundo Custodio e Llamas (1976), citando Johnson (1969), Schoeller (1962), Muskat (1937) e Meinzer (1923), este tipo de material com uma porosidade total de 0.50, tende a uma porosidade efetiva entre 0.01 e 0.20, atribuindo um valor médio de 0.07.

Cavalcante et alli (1992), efetuando análise estatística sobre poços perfurados no Barreiras, na área de Maceió, concluem que 87% dos poços apresentam transmissividade entre 10^{-5} e 10^{-2} m^2/s e 100% deles mostram uma permeabilidade maior que 10^{-5} m/s.

Mas especificamente na área do Polo Cloroquímico de Alagoas, Wanderley et alli (1990), calcularam para o Grupo Barreiras valores de transmissividade entre 4.06×10^{-3} m^2/s e 8.1×10^{-3} m^2/s e para o coeficiente de permeabilidade valores variando entre 1.3×10^{-4} m/s e 2.7×10^{-4} m/s.

A PARANAGUÁ (1991), obteve, para a mesma unidade acima mencionada, valores de 1.9×10^{-3} m^2/s e 1.9×10^{-2} m^2/s para a transmissividade e 6.2×10^{-5} m/s e 4.3×10^{-4} m/s para o coeficiente de permeabilidade, estimando uma espessura saturada de 30m, em um poço de monitoramento e em um piezômetro instalados

durante o bombeamento de um poço de produção.

No próximo capítulo, um maior enfoque será dado aos procedimentos e aos valores obtidos no trabalho realizado pela PARANAGUÁ *op cit.*

CAPITULO VI

6.0 - MODELAÇÃO MATEMÁTICA DO FLUXO DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS NO POLO CLOROQUÍMICO DO ESTADO DE ALAGOAS

6.1 - Generalidades

Como foi visto no capítulo 3.6, os modelos matemáticos são de grande valia para compreender e prever fenômenos de fluxo em sistemas de aquíferos heterogêneos, anisotrópicos e estratificados. Entretanto, o grau de compreensão e previsão destes fenômenos estão correlacionados diretamente com a escolha apropriada do modelo a ser aplicado e a seleção dos dados que alimentarão o mesmo.

Todo aquífero possui seu conjunto particular de "caracteres". Em duas dimensões, os aquíferos livres são principalmente caracterizados por suas distribuições da condutividade hidráulica e da porosidade efetiva.

Depois de selecionar um modelo matemático apropriado, deve-se calibrá-lo com dados de campo que neste caso consistem de cargas observadas em diferentes locais da área e em diferentes tempos. O modelador ajusta os parâmetros num modelo até que os dados observados sejam reproduzidos. Isto pode ser feito manualmente ou automaticamente, usando critérios de ajustamento tal como o de minimização dos erros quadráticos acumulados. O processo é conhecido como o problema inverso, uma vez que a

variável geralmente prevista, a carga hidráulica, já é conhecida.

Uma excelente calibração, em que o modelo reproduz os dados observados, não garante que o modelo esteja correto. Quando o modelo está calibrado e o modelador prever a distribuição da carga hidráulica para um tempo futuro, sem ajustar os parâmetros do aquífero (estes são considerados como propriedades constantes do aquífero), e os resultados mostram uma coincidência aproximada com os dados da época o modelo é considerado verificado.

Ao contrário das águas superficiais, as águas subterrâneas movem-se tão devagar, e, além disso, sem serem vistas, que são poucas as agências do governo ou companhias privadas que destinam recursos a um projeto que certamente durará anos. Desta forma, são raros bons bancos de dados coletados durante anos o que significa que a maioria das modelações, que comparam as previsões do modelo aos dados observados de campo, só incluem a fase de calibração.

6.2 - Modelo de Fluxo Adotado

O fluxo de água subterrânea na área de estudo, foi modelado através do método das diferenças finitas usando o algoritmo de IADI (Kinzelbach, 1986 p. 76-90), Anexo 4.

Trata-se de um modelo bidimensional, podendo ser aplicado a aquífero confinado ou livre, ambos em meio homogêneo ou heterogêneo, isotrópico ou anisotrópico com fluxo em estado permanente ou transitório.

Escrito em linguagem BASIC o programa tem sua estrutura subdividida para maior comodidade do modelador: um programa auxiliar é providenciado com a finalidade de armazenar os dados de entrada que serão posteriormente processados por um programa principal. A estrutura do modelo é mostrada, de forma esquemática, na Figura 6.0.

O modelo requer, basicamente, os seguintes dados de entrada:

- Tipo de aquífero: Confinado ou Livre, em meio Isotrópico ou Anisotrópico.
- Rede Discretizada: Número de nós nas direções X e Y e os espaçamentos entre os mesmos em suas respectivas direções.
- Número de intervalos durante a dis(re)carga.
- Número de poços dis(re)carga.
- Coordenada(s) do(s) poço(s) na rede.
- Taxa(s) de dis(re)carga(s)
- Cargas iniciais, $H_0(i,j)$.
- Transmissividade(s) ou Condutividade Hidráulica(s)
- Coeficiente de Armazenamento, ou Porosidade Efetiva.
- Taxa de Difusidade para re(dis)carga.
- Fator de Drenança.
- Nível das águas superficiais.
- Nível de base das águas superficiais.

- Nível de base do aquífero.

Essas informações devem ser especificadas em cada um dos nós da rede, com exceção dos poços, drenança em rios, drenança de aquíferos sotopostos e recarga distribuída que serão especificado no caso de existência. Além disso, as condições de contorno devem ser especificadas em todos os nós externos.

O modelo foi desenvolvido de tal forma que o modelador ao introduzir os dados paramétricos, como por exemplo a permeabilidade, surge uma mensagem indagando se o valor é homogêneo. Caso contrário, aproveitando as capacidades gráficas dos monitores de computador, a área física discretizada aparece na tela e os novos valores são facilmente alocados. Isto, além de significar uma maior interação entre o modelador e o computador, possibilita a caracterização do meio quanto a sua homogêneidade ou heterogêneidade.

As condições de contorno de cargas ou de fluxos constantes são também rapidamente introduzidas. Para isso, é suficiente assumir altos valores para o coeficiente de armazenamento (e.g. $S(i,j) = 10^{20}$) para todas as cargas pré-estabelecidas no contorno, garantindo, assim, que o nó não vai "secar" e a carga permanecerá constante ou $k_{ij} = 0$ para fluxos constantes - fronteiras impermeáveis. Caso o modelo seja aplicado para uma situação de fluxo permanente, $S(i,j) = 0$, com exceção nas cargas limites.

O programa principal ler os dados de entrada, processa-os, através do método IADI, e cria um arquivo de saída com a variável

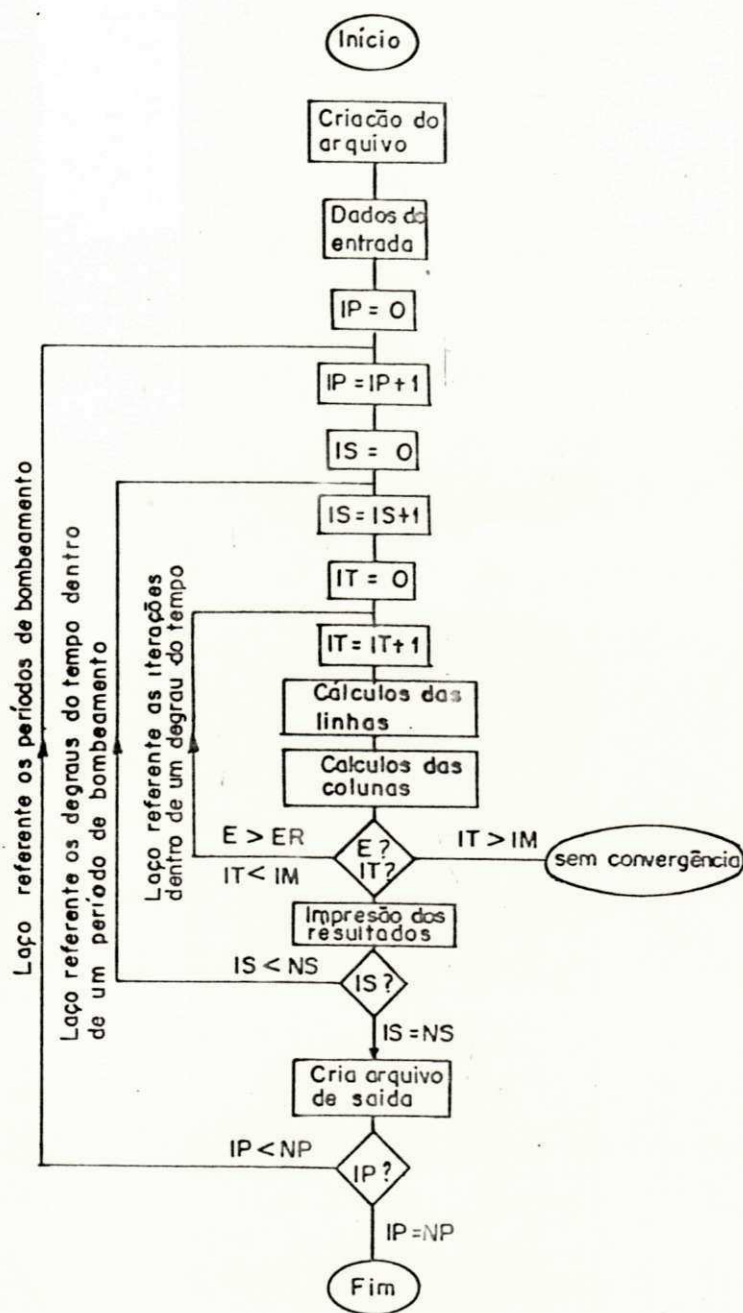


Figura 6.0 - Fluxograma Esquemático do Modelo de Fluxo Adaptado
(Kinzelbach, 1986)

dependente, isto é, a carga potenciométrica, em todos os nós, correspondente a situação simulada.

6.3 - Calibragem Hdráulica/Hidrodinâmica do Modelo

Com Dados de Campo

Com intuito de se obter informações a cerca dos parâmetros hidrodinâmicos do aquífero Barreiras na região do Polo Cloroquímico de Alagoas, a Paranaguá (op.cit) construiu, inicialmente, um poço de produção (TP-1), um poço de observação (PZ-1) e um poço de monitoramento (MW-1A).

O poço TP-1, foi bombeado por 6:30 hs a uma taxa constante de $40 \text{ m}^3/\text{h}$ onde, no decorrer do processo os poços TP-1, MW-1A e PZ-1 foram monitorados. Com os resultados calcularam-se as transmissividades através do método de Hantush-Jacob. Segundo relatório da empresa supra citada, o poço TP-1 atingiu o estado de equilíbrio durante o bombeamento e, dentre as transmissividades o valor obtido para o PZ-1 pode ser considerado o mais representativo em consequência de uma maior correlação entre os dados de ensaio. A tabela 7 resume o processo acima efetuado.

Os dados da tabela 7 foram utilizados para aferir os parâmetros hidrodinâmicos do aquífero e consequentemente a calibragem do modelo.

TABELA - 7

Poço Bombeado	Poço Observado	Distância (m)	Rebaixamento (m)	Transmissividade (m ² /s
	TP-1	0.00	15.75	-----
TP-1	PZ-1	25.00	0.38	0.00188
	MW-1A	40.50	0.24	0.0107

FONTE: PARANAUA LTDA, (1991)

As informações básicas que alimentaram o modelo foram:

- O Aquífero foi tratado como livre, em meio heterogêneo e isotrópico.

- A rede de discretização com nós centrados no cruzamento de colunas e linhas (nós centrados em rede), com 9 nós na direção X e 9 nós na direção Y (9x9), com 8 espaçamentos entre os mesmos de 20m cada ou seja, $\Delta x = \Delta y = 20m$.

- Um poço de produção (TP-1), no centro da rede, com uma taxa de bombeamento de 40 m³/h, durante 0.25 dias (admitindo o estado de equilíbrio alcançado) e dois poços de observação PZ-1 e MW-1A conforme mostra a Figura 6.1.

- Em todos os nós foram assumidas cargas iniciais de 25m, tomando como referência a cota do nível do mar ao sul da área. A razão para tal é a inexistência de dados de campo e, sendo assim, a simulação será efetuada com relação ao rebaixamento e não relativa as cargas uma vez que os mesmos no tempo inicial (t_0)

serão zero.

- As condições de contorno impostas ao modelo foram a de cargas especificadas em todos os nós extremos da rede, garantindo a constância das mesmas ao tomar-se o coeficiente de armazenamento (no caso do aquífero livre a porosidade efetiva) como $S = 10^{-20}$.

- A espessura saturada no local de dezoito metros.

A calibração do modelo foi efetuada de modo mecânico ou seja, a cada simulação valores para a condutividade hidráulica e porosidade efetiva são alocados obtendo-se os rebaixamentos nos respectivos poços de observação.

O exemplo mais simples de estimativas de parâmetros de um aquífero, a partir de cargas observadas por meio de um modelo, é o teste de bombeamento. O poço testado é bombeado a uma taxa constante Q e tempo inicial $t_0 = 0$. Durante o teste, a carga ϕ ou rebaixamento s , são registrados a diferentes distâncias r , e tempos t , do poço.

Com a finalidade de se obter um valor médio de K e n_{ef} para a área e conseqüentemente utilizá-los como entrada inicial no modelo de fluxo, aplicou-se um programa intitulado "Estimativa de Parâmetros" (Kinzelbach, 1986 p. 146-151).

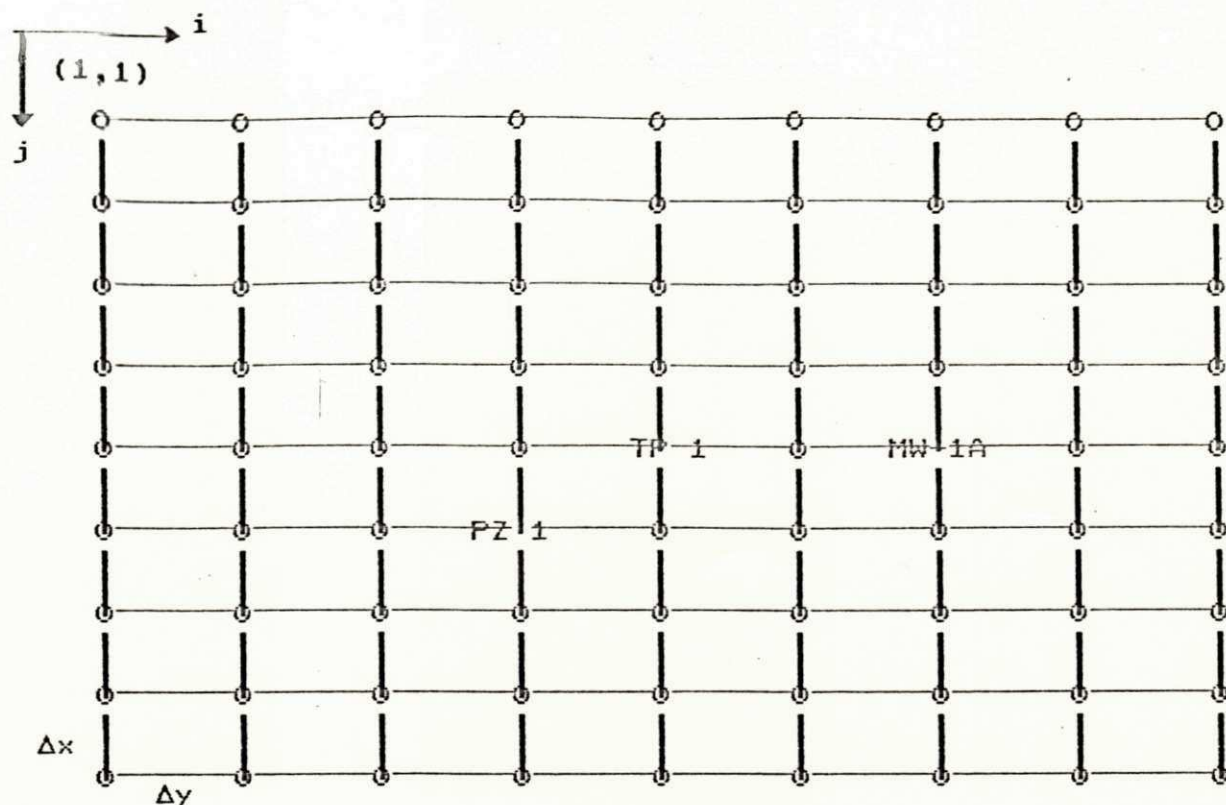


Figura 6.1 - Rede de diferenças finitas para simulação de fluxo de água subterrânea na área do Polo Cloroquímico de Alagoas, mostrando a disposição dos poços de monitorados.

O programa lineariza a função $s(S,T)$ em torno de valores inicialmente supostos S_0 , T_0 através do método iterativo de Gauss-Newton (e.g Draper, Smith, 1965).

Os dados de entrada no programa foram:

- : Vazão no poço TP-1, $Q = 0.011 \text{ m}^3/\text{s}$
- : Distância para o poço de monitoramento PZ-1 = 25m
- : Distância para o poço de monitoramento MW-1A = 40m

- : Tempo de observação $T = 23400s$
- : Rebaixamento em PZ - 1 (s_1) = 0.38m
- : Rebaixamento em MW - 1A (s_2) = 0.24m
- : Aquífero Livre
- : $K_o = 0.00006$ m/s
- : $n_{ef_o} = 0.05$
- : Espessura saturada é de 18m

Os resultados de saída encontram-se na tabela 8.

TABELA 8 - ESTIMATIVA DE PARAMETROS

PARAMETROS	RESULTADOS OBTIDOS
K (m/s)	$3.125 * 10^{-5}$
n_{ef}	0.046

K = Condutividade Hidráulica

n_{ef} = Poresidade efetiva

O resultado da simulação quando os parâmetros estimados são alocados no modelo, de modo homogêneo, mostra um rebaixamento no poço central de 9.5m e 0.10m nos poços observados (tabela 9).

Durante as simulações posteriores, detectou-se que o modelo não poderia ser calibrado atribuindo-se valores para K e n_{ef} de modo conservador.

TABELA 9 - CARGAS POTENCIOMÉTRICAS

TEMPO - 0.25 DIAS

25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	24.9	25	25	25	25
25	25	25	24.9	24.4	24.9	25	25	25
25	25	24.9	24.4	15.5	24.4	24.9	25	25
25	25	25	24.9	24.4	24.9	25	25	25
25	25	25	25	24.9	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25

Desta forma, com $K = 7.2 * 10^{-5}$ m/s , distribuído para toda área, exceto nos poços de observação ($K_{pz-1} = 1.6 * 10^{-5}$ m/s e $K_{mw-1A} = 4.92 * 10^{-5}$ m/s) e $n_{ef} = 0.0485$ com $n_{ef_{pz-1}} = 0.0361$ e $n_{ef_{mw-1A}} = 0.043$ os rebaixamentos obtidos foram: TP-1 = 15,75m, PZ-1 = 0.38m e MW-1A = 0.24m conforme exibido na tabela 10.

Dentre os dados observados em campo e aferidos pelo modelo, (Tabela 11) encontra-se um rebaixamento excessivo para o poço de produção. Isto pode significar que o rebaixamento medido seja maior que o rebaixamento que se deveria observar. A razão para tal fato são as perdas de cargas que originam-se devido a vários fatores entre os quais pode-se citar: perdas no aquífero, perdas em consequência da forma não linear da lei de Darcy nas proximidades do poço, perdas devido as ranhuras do filtro, perdas ascensionais no poço, perdas na entrada da bomba e outras.

TABELA 10 - CARGAS POTENCIOMÉTRICAS (m)

TEMPO - 0.25 DIAS

25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	24.9	24.8	24.9	25	25	25
25	25	24.9	24.6	23.7	24.6	24.9	25	25
25	25	24.8	23.7	9.25	23.7	24.76	25	25
25	25	24.9	24.62	23.7	24.6	24.9	25	25
25	25	25	24.9	24.8	24.9	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25

Este rebaixamento em excesso cresce com o aumento da vazão e, conhecendo-se várias vazões e seus rebaixamentos correspondentes, pode-se traçar a curva característica do poço como também a sua equação geral.

TABELA 11 - PARAMETROS RESULTANTES

POÇO	REBAIXAMENTO OBSERVADO (m)	REBAIXAMENTO OBTIDO (m)	K (m/s)	n_{ef}	RAIO DE INFL. (m)
TP-1	15.75	15.75	0.000016	0.0361	66.00
PZ-1	0.38	0.38	0.000049	0.0485	---
MW-1A	0.24	0.24	0.000072	0.0430	---

Assim sendo, foram efetuadas, no modelo de fluxo devidamente calibrado, simulações cujos valores de vazões atribuído ao TP-1 e seus respectivos rebaixamentos encontram-se na

tabela 12.

TABELA 12 - Q VERSU s

Q^3 Q (m ³ /h)	10.00	20.00	30.00	40.00
s (m)	2.50	8.00	13.00	15.75

O gráfico, Q/s versus s mostrada na figura 6.2a, quando comparada com o tipo de curva da figura 6.2b, perdas não lineares no poço, (Custodio e Llamas, 1976), apresenta uma nítida semelhança.

Segundo Rorabaugh (1953), o rebaixamento total em um poço pode ser expresso em função das componentes S_f e S_w como:

$$S_t = S_f + S_w = C_f Q + C_w Q^n \quad (6.1)$$

onde S_f e C_f representam os coeficientes de perdas do rebaixamento pertencente a formação, e S_w e C_w o coeficiente de perdas pertencente ao poço. Em aquífero livre, devido a progressiva redução da espessura saturada próximo ao poço, n varia habitualmente entre 2 e 3 podendo chegar a 3.5 (Lennox, 1960).

Com a equação (6.1) e os dados da tabela 12, obteve-se os valores de $n = 2.274$, $C_f = 0.2825$ e $C_w = 0.001012$. Desta modo a equação geral do poço toma a forma:

$$S_t = 0.2825 Q + 0.001012 Q^{2.274} \quad (6.2)$$

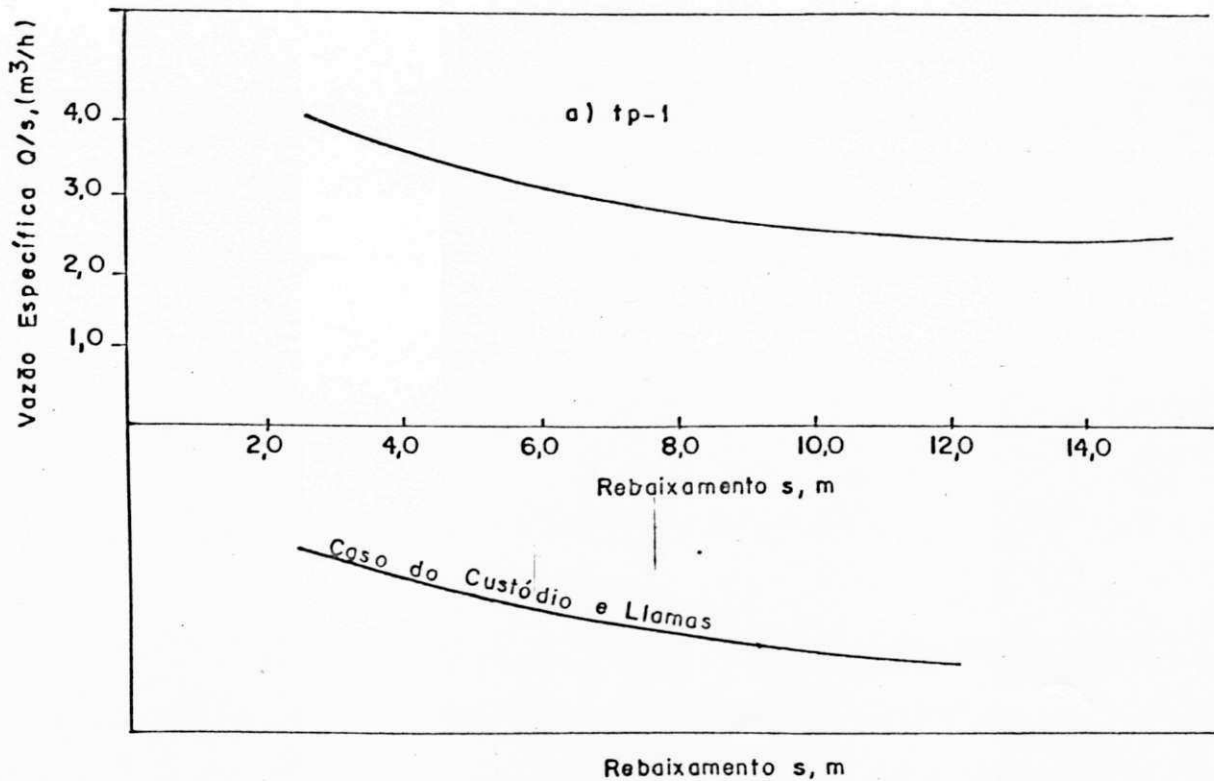


Figura 6.2 - a) Curva característica do poço mostrando a não linearidade entre Vazão Específica, Q/s , e o rebaixamento para a) Poço TP - 1, b) O caso de Custódio e Llamas, (1976).

Tomando-se a vazão de $40 \text{ m}^3/\text{h}$ a equação (6.2) fornece um rebaixamento total $s_t = S_t + S_f = 11.30 + 4.45 = 15.75\text{m}$ ou seja, 28 % do rebaixamento observado em campo deve-se a perdas ocasionadas no poço acarretando, desta forma, uma eficiência de 72%.

Com estes resultados houve a necessidade de uma nova calibração do modelo de fluxo, tendo-se, agora, um rebaixamento de 11.30m no TP-1.

Com estes resultados houve a necessidade de uma nova calibração do modelo de fluxo, tendo-se, agora, um rebaixamento de 11.30m no TP-1.

A figura 6.3 ilustra, de maneira esquemática, as duas situações.

Os dados de entrada para a nova calibração foram os mesmos, com exceção dos valores da condutividade hidráulica e da porosidade efetiva que assumiram: $K = 6.6294 * 10^{-5}$ m/s, distribuído para a área, $K_{pz-1} = 3.2 * 10^{-5}$ m/s, $K_{mw-1A} = 5.39 * 10^{-5}$ m/s e $n_{ef} = 0.0486$ de modo homogêneo. A tabela 13 mostra, o resultado final da simulação com o modelo de fluxo.

TABELA 13 - CARGAS POTENCIOMÉTRICAS (m)

TEMPO - 0.25 DIAS

25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	24.9	24.7	24.9	25	25	25
25	25	24.9	24.5	23.5	24.5	24.9	25	25
25	25	24.7	23.4	13.7	23.4	24.76	25	25
25	25	24.9	24.62	23.4	24.5	24.9	25	25
25	25	25	24.9	24.7	24.9	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25

A veracidade do modelo foi comprovada com os rebaixamentos obtidos pela calibragem (Tabela 14), que coincidiram exatamente

com os observados no campo, empregando-se para tal valores diferenciados para a condutividade hidráulica.

TABELA 14 - PARÂMETROS RESULTANTES

POÇO	REBAIXAMENTO OBSERVADO (m)	REBAIXAMENTO OBTIDO (m)	K (m/s)	n _{ef}	RAIO DE INFL. (m)
TP-1	11.30	11.30	0.000063	0.0486	65.00
PZ-1	0.38	0.38	0.000032	0.0486	---
MW-1A	0.24	0.24	0.000054	0.0486	---

6.4 - Velocidade de Propagação de Fluxo

A velocidade real, V_R , também chamada de velocidade de poros foi determinada através da velocidade de Darcy associada a porosidade efetiva, equação(3.8), que recapitulando-se têm-se:

$$V_R = V_D / n_{ef} = k i / n_{ef}$$

O modelo de fluxo foi calibrado assumindo o meio como heterogêneo. Entretanto, o valor de K e n_{ef} mais sugestivo para o cálculo da velocidade de fluxo no aquífero são aqueles distribuídos por toda a área simulada e não os pontuais como no caso de K_{pz-1} e K_{mw-1A} ou seja, as características locais refletem, neste caso, as características regionais do aquífero.

Desta forma, usando $i = 0.006$ (capítulo 5.4), $K = 6.3 * 10^{-5}$ m/s e $n_{ef} = 0.0486$ a equação (3.8) a cima fornece uma velocidade média de propagação na matriz de $7.78 * 10^{-6}$ m/s ou 0.672 m/dia com direção NW-SE e sentido SE.

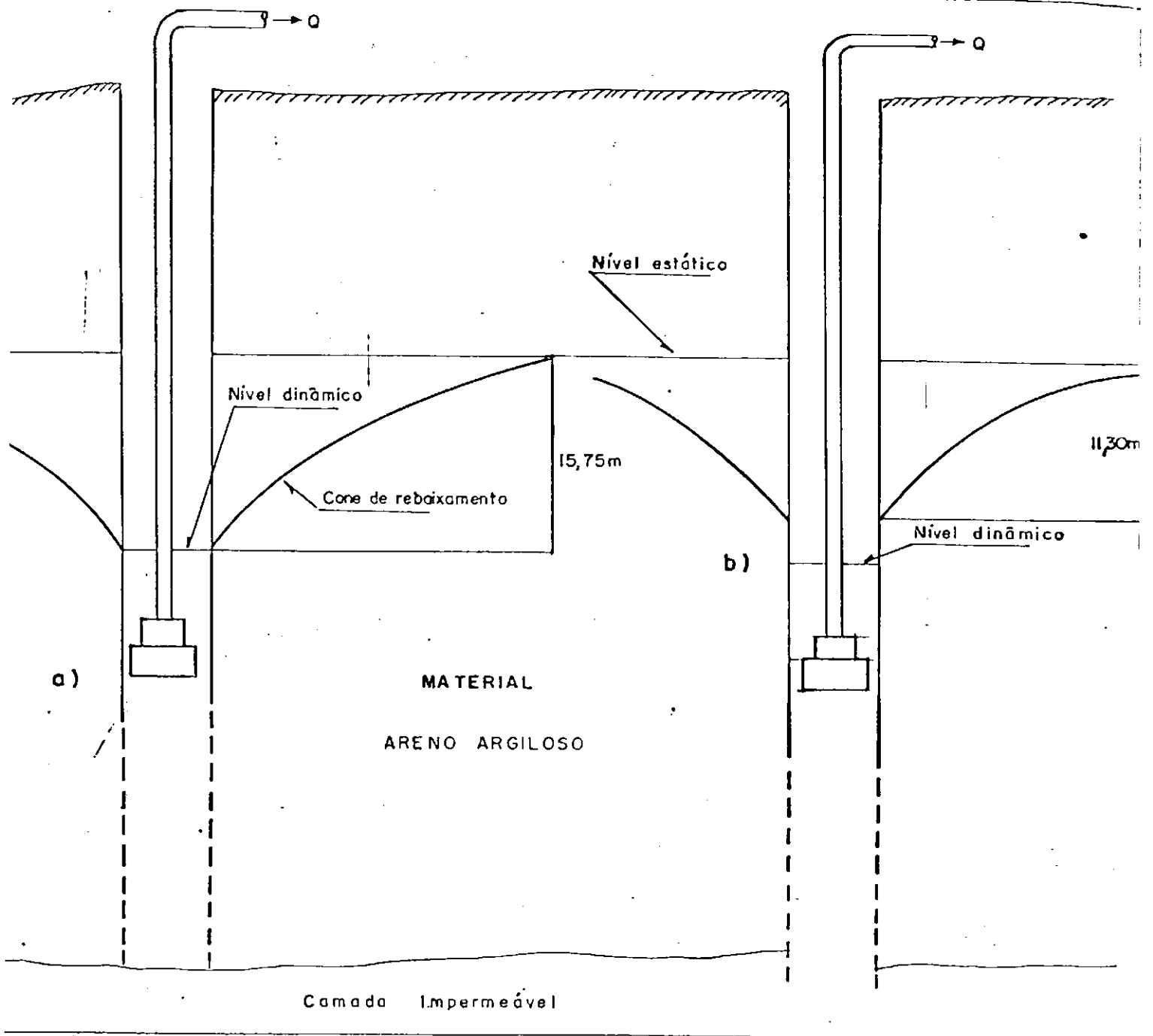


Figura 6.3 Esquema mostrando: a) Rebaixamento tomado para a simulação inicial sem perdas localizadas e b) Rebaixamento para a simulação final, tratando as componentes das perdas.

6.5 - Comentários

Os perfis dos poços perfurados mostram de forma clara e inequívoca uma descontinuidade horizontal dos leitos de argila e/ou silte que intercalam o pacote areno-argiloso quer na zona saturada ou não saturada.

Na zona saturada o potencial das águas subterrâneas é totalmente controlado pela superfície potenciométrica da zona livre. Isto significa que trata-se de um aquífero livre e não localmente confinado ou semi-confinado.

A equação geral para o poço de produção além de confirmar que o aquífero comporta-se como livre - através do valor encontrado para o expoente n , indica uma baixa eficiência para o mesmo provavelmente devido a problemas construtivos.

Os valores aferidos pelo modelo para a condutividade hidráulica num raio de 65 m comprovam e indicam:

- A heterogeneidade do meio.
- A sensibilidade do modelo
- A mesma ordem de grandeza dos valores obtidos em trabalhos mais recentes para a área de Maceió.
- A proximidade com valores calculados na própria área de estudo, se tomada uma única espessura média para o aquífero

A porosidade efetiva, aferida pelo modelo de fluxo, retrata de maneira categórica as feições litológicas do Grupo Barreiras,

assim como coincide com o valor utilizado com maior frequência nos trabalhos publicados para a área de Maceió.

A velocidade média, linear, de propagação do fluxo no aquífero amolda-se a complexidade hidrogeológica do meio.

O modelo adotado é facilmente manuseado, versátil e portanto, adequado para simulações de fluxo bidimensionais em locais desprovidos de dados.

As proximidades entre os valores dos parâmetros aferidos na modelação, os calculados anteriormente na área de estudo e na grande Maceió, assim como o obtido pelo modelo analítico denominado "Estimativo de Parâmetros", corroboram com a veracidade do modelo utilizado.

CAPÍTULO VII

7.0 - SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES NA ÁREA DO POLO CLOROQUÍMICO NO ESTADO DE ALAGOAS

7.1 - Generalidades

Para resolver equação de transporte de poluentes vista no capítulo 3.9 (Equação 3.54), especificações adicionais relacionadas com o problema de transporte são necessárias, tais como: definição do domínio da solução, parâmetros do aquífero, fontes e/ou sumidouros de soluto e condições iniciais de contorno.

O domínio da solução envolve o universo espacial e temporal dentro do qual o problema deve ser resolvido.

Os parâmetros do aquífero incluem: porosidade efetiva, distribuição da velocidade no domínio de fluxo, espessura do aquífero e dispersividade.

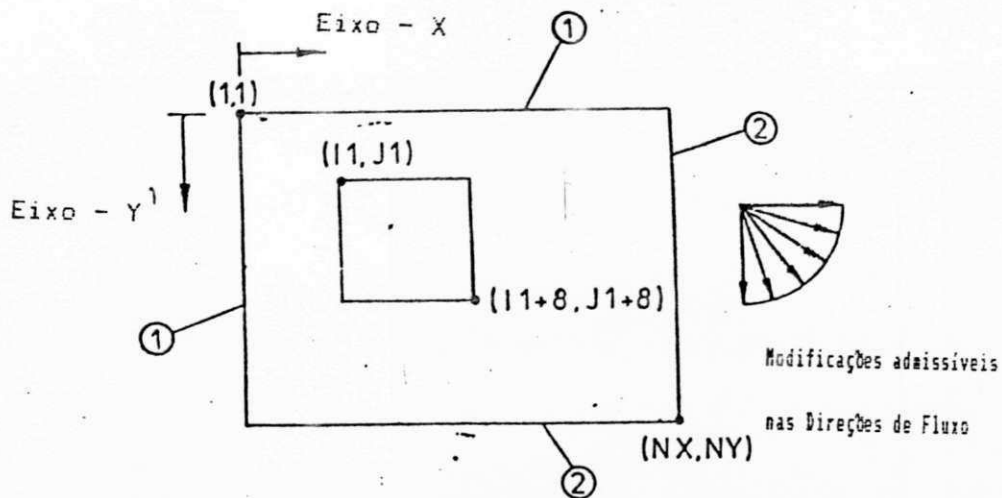
Os problemas referentes as condições iniciais de contorno são mais facilmente resolvidos quando se opta pelo contorno especificado de concentração. Neste caso, as concentrações são especificadas sobre o domínio do fluxo no início do tempo. Tais concentrações às vezes são obtidas pelos mapas que mostram contornos de iguais concentrações, baseados em análises químicas de amostras d'água retiradas dos poços. Porém, é conveniente e apropriado assumir igual concentração sobre o domínio do fluxo.

7.2 - Modelo de Transporte Adotado

As plumas de contaminantes no aquífero Barreiras, no complexo industrial do Polo Cloroquímico de Alagoas, foram modeladas utilizando-se o método explícito de diferenças finitas (Kinzelbach, 1986, p. 258-274), conforme mostrado na anexo 3.

Trata-se de um modelo, bidimensional, com fluxo constante e paralelo, em meio homogêneo e isotrópico, podendo processar os compostos como conservativo ou não, apresentando, como alternativa, a escolha da pesagem do espaçamento do esquema entre "upwind" ou central. A distribuição inicial das concentrações é pressuposta como zero em todos os pontos da rede e todas as fontes são consideradas com injeções permanentes de potenciais constantes começando no tempo t_0 . A injeção do contaminante não influenciará o campo de fluxo.

A figura 7.1, exibe como podem ser definidas os eixos das coordenadas, as margens e as direções admissíveis de fluxo. Ambas as velocidades V_x e V_y devem ser positivas, sendo que para V_x maior que zero a margem para leste funciona como margem de transmissão e $V_x = 0$ as margens ao sul e norte são supostamente impermeáveis. Com V_y maior que zero a margem ao sul é a margem de transmissão e $V_y = 0$ as margens leste-oeste são supostamente impermeáveis.



- 1 - Concentração - Prédefinida ou Margem Impermeável
- 2 - Margem Impeneável ou de Transmissão

Figura 7.1 - Definição de coordenadas e margens no programa utilizado, (Kinzelbach, 1986)

Escrito em linguagem BASIC, o programa requer os seguintes dados de entrada:

- Discretização da área: NX, NY e Δx e Δy (m).
- Número de fontes contaminante(s)
- Dispersividade Longitudnal (m)
- Dispersividade Transversal (m)
- Velocidade nos Poros, V_x , V_y (m/d)
- Espessura do Aquífero (m)

- Porosidade Efetiva
- Constante de Decaimento do contaminante (1/d)
- Tempo Máximo de Simulação (d)
- Tipo de Esquema Utilizado para o Termo Advectivo:
Se 1 "upwind", se 2 Central.
- Localização das Fonte(s)
- Intensidade de injeção na fonte(s) (g/d)

Os dados de saída são:

- Tempo (d)
- Distribuição das concentrações, $C(i,j)$, no tempo t

Os dados requeridos para o processamento do programa serão detalhados posteriormente.

7.3 - As Substâncias Químicas Envolvidas no Processo

A contaminação das zonas saturada e não saturada na área de estudo foi ocasionada por vazamento de substâncias que fazem parte do grupo denominado de xenobióticas - incomun nos ambientes naturais, que são os orgão clorados (hidrocarbonetos clorados).

A maior parte dos trabalhos realizados com essas substâncias, sobre os efeitos de sua toxicidade, baseia-se em testes de laboratórios com ratos e lebres, para se determinar os efeitos agudos, deixando de prever, entretanto, os efeitos crônicos e possível dano a biota, pelo sinergismo com outros poluentes e com fatores ambientais como: temperatura, salinidade, pH e dureza da

água. As pesquisas até então realizadas sobre a ação dos organo clorados, têm como objetos principalmente, aqueles produtos comercializados e utilizados na agricultura (Aubin e Johasen, 1969; Shanes, 1950; Narahashi & Haras, 1967; Koch, 1969; in Le Campion, 1989). Policloridinados bifenis (PCB) (Harvey et alli, 1971, Isono, UI in N.A.S. 1971).

Os organos clorados apresentam, geralmente, um caráter lipofílico, acumulando-se nos tecidos adiposos, sendo depois absorvidos, onde vão sendo gradativamente concentrados. O 1,2 Dicloroetano (1,2 DCE) parece não atingir altas concentrações, pois é metabolizado pelo fígado, associando-se a outras moléculas orgânicas ou eliminando do organismo, porém seu efeito tóxico é acentuado. Entretanto, pesquisas têm demonstrado que muitos organos clorados tem sido encontrados em tecidos de organismos aquáticos, inclusive o 1,2 DCE, que foi encontrado em moluscos. Análises realizadas em tecidos gordurosos de peixes do rio Reno demonstraram que os hidrocarbonetos clorados são as substâncias mais abundantes, com valores máximos de 350 ppm (Falleberg, 1980). Ainda, segundo o autor, a metabolização das gorduras nos animais e no homem podem levar a sérias intoxicações, pois são liberadas, neste caso, em pouco tempo, grandes quantidades de organo clorados.

A toxicidade de uma substância organo clorada advem, principalmente, de sua ação sobre o sistema enzimático, notadamente, sobre as ATPases - enzimas que compõem a estrutura

das membranas celulares. Nos animais aquáticos essas enzimas são importantes carregadoras da célula e do organismo como um todo. Dada a origem artificial dessas substâncias, os organismos têm dificuldades em degradá-las. Contaminantes orgânicos clorados podem alterar, substancialmente, a configuração da membrana celular causando alterações no transporte de íons na membrana e conseqüentemente, prejudicando a osmoregulação de vários animais aquáticos (Wells, Phillips & Murphy, 1979, in Gilles, 1980).

Os orgânicos clorados de baixo ponto de ebulição têm fácil acesso à atmosfera e, conseqüentemente, podem ser transportados a grandes distâncias, contaminando outros ambientes muito além da área onde são produzidos. O 1,2 DCE, entre outros, é um líquido volátil, todos os poluentes desta categoria são encontrados na atmosfera, na fase gasosa ou aderidos às superfícies de partículas. A sua precipitação para o ambiente aquático, se dá pela chuva, por precipitação seca e na fase de dissolução gasosa entre a água e a atmosfera. Muitos são persistentes e podem provocar sérios danos à biota costeira e estuarina (Goldemberg et alii, 1971).

7.3.1 - Transporte e Distribuição dos Compostos Orgânicos em Sistemas Subsuperficiais

Os contaminantes orgânicos podem alcançar a água subterrânea dissolvidos em água ou em fase líquida orgânica que pode ser imiscível em água.

O transporte em sistemas subterrâneos destas substâncias, quando da fase imiscível, é governado por um conjunto de fatores diferentes dos contaminantes dissolvidos. Entretanto, alguns destes compostos podem ser dissolvidos na água subterrânea.

Quando a água subterrânea está contaminada por solventes orgânicos halogenados, existem interações (adsorção), afetando significativamente o percurso dos mesmos. Isto deve-se a dois fatores: a hidrofobia dos contaminantes (rejeição a dissolução) e a fração sólida da amostra orgânica na matriz. Toda via, em aquíferos tomados como homogêneos, a adsorção será constante no espaço e tempo.

Robert et alli (1982), mostra que pode ser esperado uma variação de quatro ordens de grandeza - 1 a 10000, para o fator de retardo dos contaminantes orgânicos hidrófobos. Entre os mais comuns contaminantes orgânicos das águas subterrâneas encontram-se os hidrocarbonetos clorados: 1,1,1 - Tricloroetano (TCA), Tricloroetileno (TCE) e o Tetracloroetileno (PCE). O fator de retardo para estes compostos pode variar entre 1 e 10. Assim, em aquíferos, a taxa de migração esperada para os mesmos podem variar entre 10% e 100% da velocidade linear, média, de fluxo.

Com raras exceções, as densidades dos líquidos orgânicos, diferem da água em mais de 1%. Estes orgânicos, em consequência da maior densidade, migram quase que verticalmente, na fase imiscível, através da zona saturada. Parte deste líquido é retido pelas forças capilares nos poros do material do aquífero. Se o

contaminante apresenta baixa solubilidade na água, a pluma desenvolver-se-á por dissolução do líquido orgânico retido tão bem quanto a desenvolvida pela parte que reside no fundo do aquífero. O formato da pluma pode apresentar uma forma complexa, dependendo da velocidade descendente do líquido orgânico e da quantidade retida nos poros.

A figura 7.2, mostra uma fonte com líquido orgânico contaminante S (e.g. TCE), em um aquífero livre, constituído por um material arenoso e considerado como homogêneo estando o mesmo limitado na parte basal por uma camada de argila. Três poços de monitoramento foram instalados com diferentes profundidades. Nota-se que dos três poços, dois deles, os de maior profundidade, detectam a pluma, mostrando exclusivamente as concentrações referentes a parte dissolvida ou seja, concentrações bem inferiores ao total residente no aquífero.

7.3.2 - Dos Organo Clorados

Dentre uma gama de organo clorados presentes no aquífero Barreiras, destacam-se aqueles que notoriamente são manipulados no Polo em maior volume e assim apresentam-se em maiores concentrações.

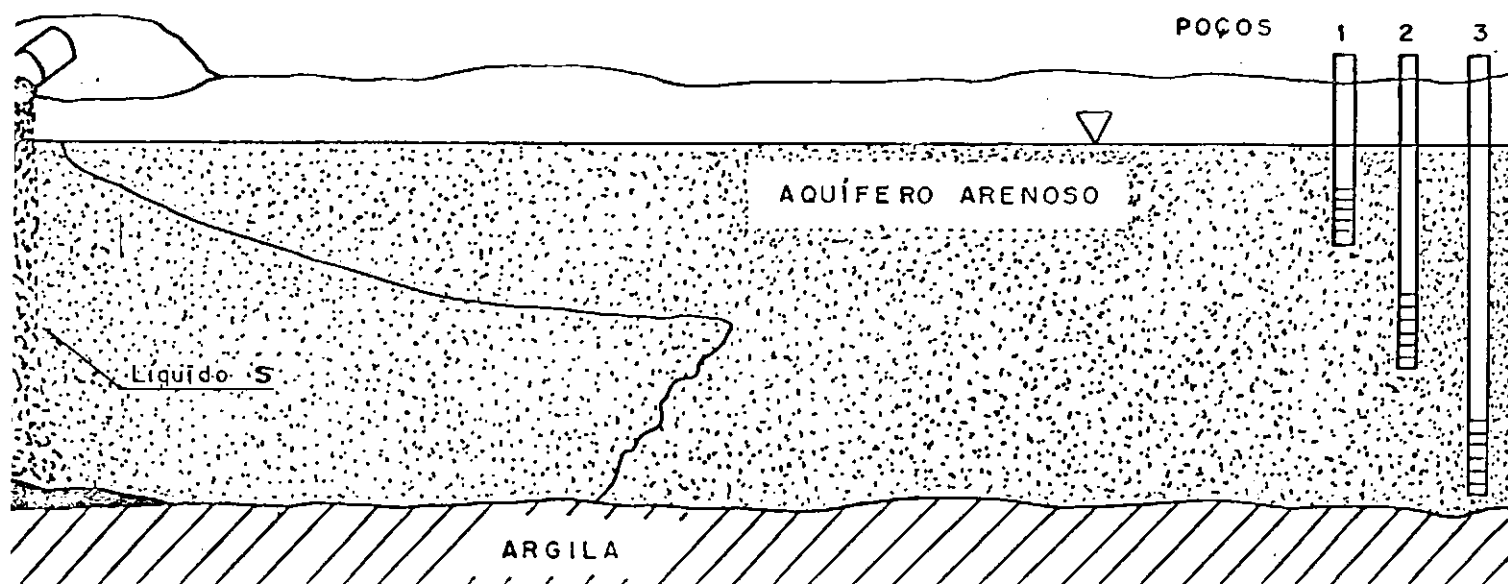


Figura 7.2 - Contaminação de um aquífero livre por líquido orgânico S (e.g. TCE)

(Mackay e Cherry, 1984)

Para o propósito da presente análise os produtos alvos são: o 1,2 Dicloroetano (1,2-DCE), o 1,2 Dicloropropano (1,2-DCP) e o 1,2,3 Tricloropropano (1,2,3-TCE), cujas características são:

1,2 Dicloroetano - 1,2 DCE ($\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$)

Produzido industrialmente em 1960, o Dicloroetano é solúvel em solvente orgânico e pouco solúvel em água; uma parte do DCE dissolve-se em 120 partes de água. Possui um peso molecular de 96.97, densidade de 1281 Kg/m^3 . É um líquido incolor, volátil, ponto de ebulição 83°C , inflamável, usado largamente na produção de cloreto de vinil, em aditivo para gasolina, solvente de limpeza e aditivo industriais.

1,2 Dicloropropano - 1,2 DCP ($\text{CH}_3\text{CHClCH}_2\text{Cl}$)

Utilizado como intermediário em síntese orgânica, solvente para óleos, borrachas, ceras e resinas para limpeza de metais. Líquido oleoso, ponto de ebulição $96,4^\circ\text{C}$, inflamável, insolúvel em água, solúvel em ethanol, eter e benzeno. Peso molecular 112.99 e densidade de 1156 Kg/m^3 .

1,2,3 Tricloropropano - 1,2,3 TCP ($\text{CH}_2\text{ClCHClCH}_2\text{Cl}$)

Usado como solvente para tintas, vernizes e graxas. Líquido incolor, ponto de ebulição 156.6°C , inflamável, pouco solúvel em água e solúvel em álcool, acetona, éter e benzeno. Peso molecular 247.44 e densidade de 1387 Kg/m^3 .

As concentrações para estes produtos foram obtidas através

de análises cromatográficas em amostras d'água provenientes dos poços de monitoramento (figura 7.3) instalados pela empresa Paranaguá (op.cit.) na área do PCA, numa campanha realizada em agosto de 1991. Os resultados encontram-se na tabela 15.

Segundo a empresa supra citada, a precisão das análises efetuadas pela CINAL foi avaliada através da comparação com aquelas obtidas pelo laboratório americano - Industrial & Environmental Analyse, Inc. (IEA) em amostras duplicatas. Os resultados obtidos são então comparados utilizando o cálculo de Diferença Percentual Relativa (DPR%).

Uma DPR% entre 20% e 30% é considerado satisfatório, segundo os padrões americanos (Paranaguá op.cit).

Os resultados da comparação estão a seguir:

"Os valores da CINAL para concentrações de 1,2 - DCE apresentaram uma comparação satisfatória com aquelas obtidas no laboratório americano, com todos os resultados de DPR% inferiores a 23%.

A comparação com os resultados originário dos dois laboratórios mostrou-se mais desfavorável para o 1,2 - DCP, quando três das quatro análises efetuadas excederam ao critério de DPR% .

Apenas uma amostra de 1,2,3 - TCP apresentou DPR% excessivo em relação aos padrões".

As concentrações obtidas para o composto 1,2 - DCP, revelam uma disparidade analítica entre os laboratórios. No poço MW-1A,

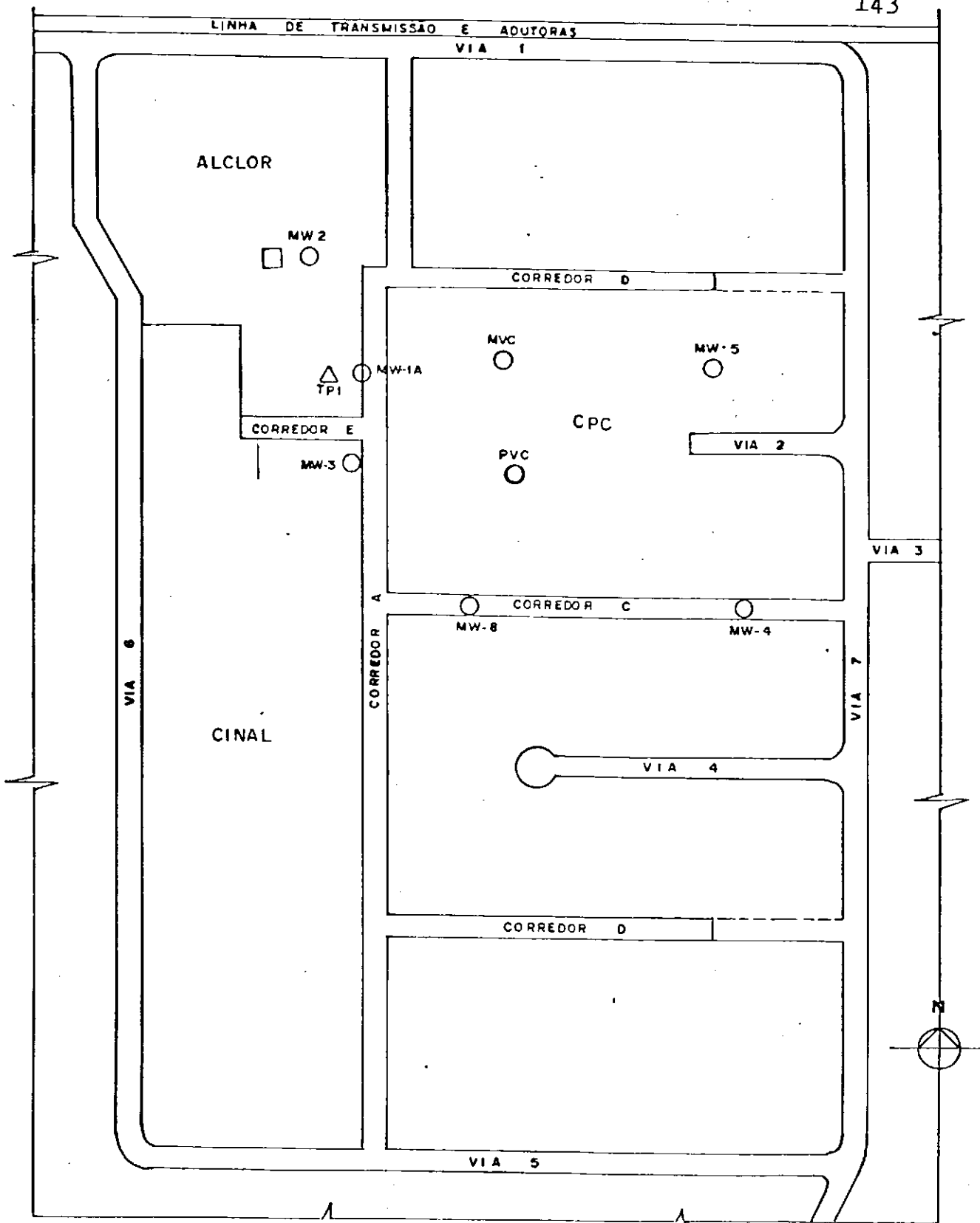


Figura 7.3 - POÇOS MONITORADOS NO POLO CLOROQUÍMICO DE ALAGOAS (Parangua, 1991)

○ TP-1- Poços de produção ○ MW-1- Poços de Monitoramento □ Fonte

por exemplo, concentrações variando entre 6.9 e 12.4 ppm foram determinadas pela CINAL, enquanto, para uma mesma amostra, coletada na mesma hora a uma idêntica profundidade, o IEA obteve 3.4 ppm (Tabela 15). Portanto, seria um erro grosseiro tomar a média dessas concentrações como representativa para os poços de monitoramento.

Face ao exposto, conclui-se que ou se opta pelos valores do IEA, apesar de bem mais baixos, ou por uma média entre as concentrações obtidas no laboratório da CINAL.

As concentrações representativas para os poços de monitoramento que serão aferidas pelo modelo de transporte, foram tomadas, neste estudo, como sendo as obtidas pelo laboratório americano (IEA).

Ns Figuras 7.4, 7.5 e 7.6 estão representadas, em blocos diagramas, as concentrações para os compostos estudados.

7.4 - O Processo de Simulação das Plumas de Organo Clorados

7.4.1 - Calibragem do Modelo de Transporte de Contaminantes

Como visto no item 2 do capítulo em questão, os dados de entrada requerido pelo modelo de transporte podem ser agrupados da seguinte forma:

- 1^o - Domínio da solução; o universo espacial

POÇO	DATA DA AMOSTRAGEM	LABORATORIO	MVC (1)	CLOROFORMIO (2)	CCL4 (2)	1,2-DCE (3)	1,2 DCP (4)	PCE (5)	1,2,3 TCP (6)	EPI (7)	METANO (8)	NI (9)	CLORETO (9)
NW-1A	05/08/91	CINAL	ND	0,271	0,034	0,347	7,111	1,028	1,782	0,245	1,157	5,993	NA
			ND	0,094	ND	0,373	6,965	0,096	1,071	0,399	0,525	2,616	602
			ND	0,199	0,046	0,461	12,437	ND	1,125	0,474	0,484	7,479	NA
		IEA	ND(10)	0,130	ND	0,440	3,400	ND	1,300	ND	ND	ND	500
NW-2A	03/08/91	CINAL	ND	ND	ND	0,343	1,156	ND	0,462	0,134	0,248	1,356	NA
			0,010	0,193	0,012	1,128	6,134	ND	1,913	0,378	0,556	14,659	52,4
			0,010	0,208	0,022	1,252	6,429	ND	2,097	0,454	0,543	15,944	NA
		IEA	ND	0,130	ND	1,400	5,200	ND	2,300	ND	ND	ND	49
NW-3	20/08/91	SCA	ND	0,025	ND	0,022	0,023	ND	0,017	ND	ND	ND	360
NW-4	12/08/91	CINAL	ND	0,167	ND	0,575	8,514	ND	1,831	ND	0,360	3,724	119
			IEA	ND	0,150	ND	0,830	3,000	ND	2,400	ND	ND	ND
	14/08/91	CINAL	ND	0,139	ND	0,449	4,012	ND	1,024	ND	0,461	2,016	NA

LEGENDA:

- (1): MVC -----> MONOCLOROETO DE VINILA
- (2): CCL4 -----> TETRACLOROETO DE CARBONO
- (3): 1,2 DCE -----> 1,2 DICLOROETANO
- (4): 1,2 DCP -----> 1,2 DICLOROPROPANO
- (5): PCE -----> TETRACLOROETANO
- (6): 1,2,3 TCP -----> 1,2,3 TRICLOROPROPANO
- (7): EPI -----> EPICLORIDRINA
- (8): NI -----> COMPOSTOS QUIMICOS NAO IDENTIFICADOS
- (9): ND -----> RESULTADOS ANALITICOS ABAIXO DO LIMITE DE DETECCAO
- (10): NA -----> RESULTADOS ANALITICOS NAO ANALISADOS
- (11): -----> LABORATORIO NAO PODE ANALISAR A AMOSTRA

Tabela 15 - Dosagens para organo clorados nos poços monitorados no PCA (Paranaguá, 1991)

POÇO	DATA DA AMOSTRAGEM	LABORATORIO	MVC (1)	CLOROFORMIO (2)	CCL4 (3)	1,2 DCE (4)	1,2 DCP (5)	PCE (6)	1,2,3 TCP (7)	EPI (8)	METANO (9)	NI (10)	CLORETO (11)
RW-5	19/08/91	CINAL	ND	ND	ND	0,065	ND	ND	ND	ND	ND	0,229	31,6
		BCA	0,005	ND	ND	0,029	ND	ND	ND	ND	ND	ND	26
RW-7	14/08/91	BCA	0,004	0,003	ND	0,022	0,004	ND	0,002	ND	ND	ND	4000
		CINAL	<0,010	ND	ND	0,050	ND	ND	ND	ND	0,543	0,080	3941,0
RW-8	15/08/91	CINAL	ND	ND	ND	ND	ND	0,129	ND	ND	1,698	2,063	258
		BCA	ND	0,014	ND	0,022	0,020	ND	0,019	ND	ND	ND	260
MVC	05/08/91	CINAL	ND	1,133	0,030	0,346	14,454	ND	5,198	0,187	1,504	3,604	NA
		IEA	ND	2,500	ND	0,430	6,200	ND	3,600	ND	ND	ND	670
	12/08/91	CINAL	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

LEGENDA:

- (1): MVC -----> MONOCLOROETO DE VINILA
- (2): CCL4 -----> TETRACLOROETO DE CARBONO
- (3): 1,2 DCE -----> 1,2 DICLOROETANO
- (4): 1,2 DCP -----> 1,2 DICLOROPROPANO
- (5): PCE -----> TETRACLOROETANO
- (6): 1,2,3 TCP -----> 1,2,3 TRICLOROPROPANO
- (7): EPI -----> EPICLORIDRINA
- (8): NI -----> COMPOSTOS QUIMICOS NAO IDENTIFICADOS
- (9): ND -----> RESULTADOS ANALITICOS ABAIXO DO LIMITE DE DETECCAO
- (10): NA -----> RESULTADOS ANALITICOS NAO ANALISADOS
- (11): --- -----> LABORATORIO NAO PODE ANALISAR A AMOSTRA

Tabela 15 - Dosagens para orgaos clorados nos poços monitorados no PCA (Paranaguá, 1991)

POÇO	DATA DA AMOSTRAGEM	LABORATORIO	MVC (1)	CLOROFORMIO (2)	CCL4 (2)	1,2 DCE (3)	1,2 DCP (4)	PCE (5)	1,2,3 TCP (6)	EPI (7)	METANO (8)	NI (9)	CLORETO (10)
PVC	05/08/91	CINAL	ND	0.068	ND	0.342	5.397	ND	1.875	ND	3.299	3.299	126
			ND	0.186	ND	0.426	5.557	0.546	1.231	ND	1147.352	4.152	558
		IEA	ND	0.160	ND	0.530	2.500	ND	1.300	ND	ND	ND	96
ALCLOR	22/06/91	CINAL	ND	0.365	ND	0.199	0.103	ND	0.234	ND	5.670	1.109	1324
			ND	0.247	ND	0.221	0.115	ND	0.181	ND	5.407	0.699	NA
	23/08/91	SCA	ND	0.160	ND	0.270	0.250	ND	0.160	ND	ND	ND	1500

LEGENDA:

- (1): MVC -----> MONOCLORETO DE VINILA
(2): CCL4 -----> TETRA-CLORETO DE CARBONO
(3): 1,2 DCE -----> 1,2 DICLOROETANO
(4): 1,2 DCP -----> 1,2 DICLOROPROPANO
(5): PCE -----> TETRA-CLORETO
(6): 1,2,3 TCP -----> 1,2,3 TRICLOROPROPANO
(7): EPI -----> EPICLORIDRINA
(8): NI -----> COMPOSTOS QUIMICOS NAO IDENTIFICADOS
(9): ND -----> RESULTADOS ANALITICOS ABAIXO DO LIMITE DE DETECCAO
(10): NA -----> RESULTADOS ANALITICOS NAO ANALISADOS
(11): ____ -----> LABORATORIO NAO FOGE ANALISAR A AMOSTRA

Tabela 15 - Dosagens para organo clorados nos poços monitorados no PCA (Paranaguá, 1991)

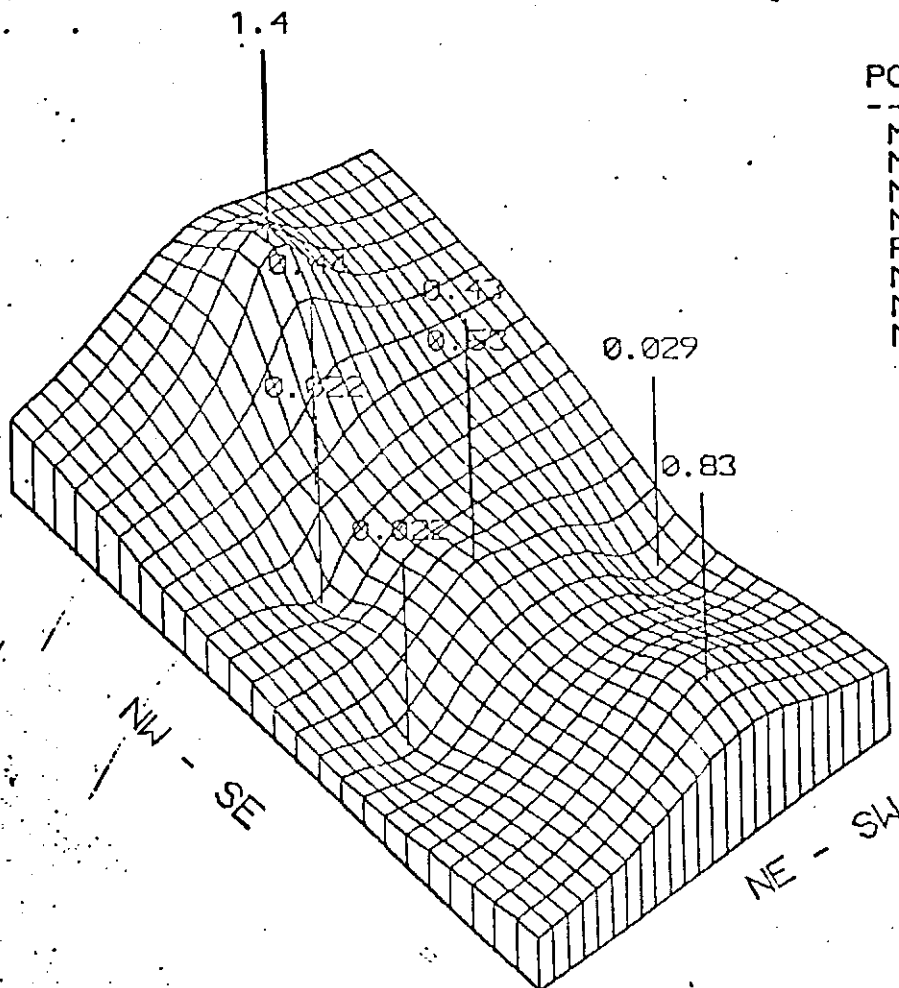
RESULTADOS DO MONITORAMENTO DO POÇO TP-1 (PPM)

DATA	IND. DA AMOSTRA	HORA	MVC	ICLOROFORMIO	1,2 DCE	1,2 DCP	PCE	1,2,3 TCP	EPI	METANO	NI	CLORETO
:	:	:	(1)	:	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	:	(7)	:
21/08/91	035	09:38	ND(9)	0.053	0.096	0.150	ND	0.076	ND(9)	ND	ND	NA
	036	10:20	ND	0.029	0.079	0.160	ND	0.090	ND	ND	ND	NA
	037	11:25	ND	0.026	0.080	0.160	ND	0.092	ND	ND	ND	NA
	038	13:10	ND	0.020	0.067	0.140	ND	0.073	ND	ND	ND	NA
22/08/91	039	13:45	ND	0.020	0.087	0.170	ND	0.092	ND	ND	ND	NA

LEGENDA:

- (1): MVC -----> MONOCLORETO DE VINILA
- (2): 1,2 DCE -----> 1,2 DICLORACETANO
- (3): 1,2 DCP -----> 1,2 DICLOROPROPANO
- (4): PCE -----> TETRACLOROETANO
- (5): 1,2,3 TCP -----> 1,2,3 TRICLOROPROPANO
- (6): EPI -----> EPICLORIDRINA
- (7): NI -----> COMPOSTOS QUIMICOS NAO IDENTIFICADOS
- (8): NA -----> RESULTADOS ANALITICOS NAO ANALISADOS
- (9): ND -----> RESULTADOS ANALITICOS ABAIXO DO LIMITE DE DETECCAO

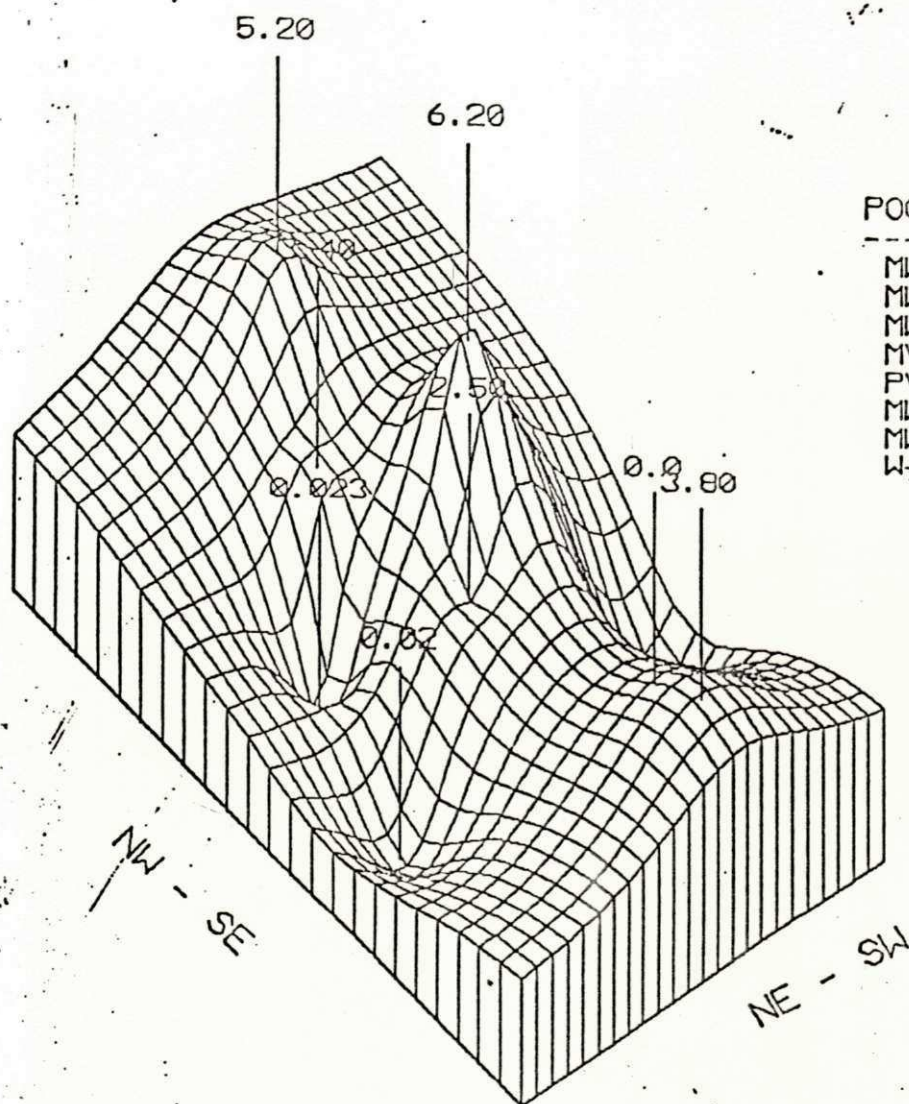
Tabela 15 - Dosagens para organo clorados nos poços monitorados no PCA (Paranaguá, 1991)



POÇOS	CONCENTRAÇÕES (ppm)
MW-2A	1.4
MW-1A	0.44
MW-3	0.022
MVC	0.43
PVC	0.53
MW-5	0.029
MW-8	0.022
MW-4	0.83

BLOCO DIAGRAMA INDICANDO A DISTRIBUIÇÃO DAS
 CONCENTRAÇÕES (ppm) PARA 0 1,2.- DICLOROETANO
 NOS POÇOS DE MONITORAMENTO NO AQUIFERO BARREIRAS

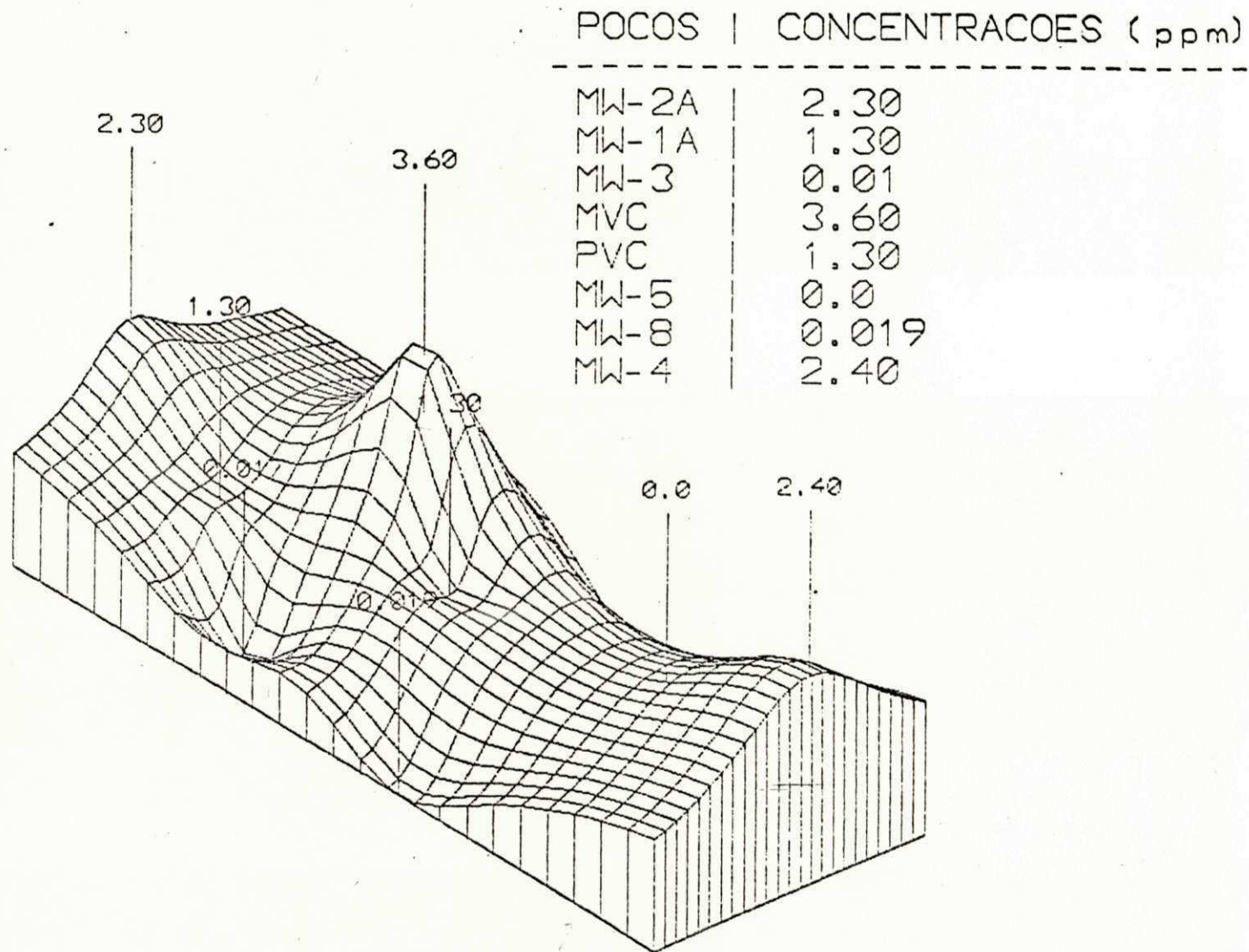
Figura 7.4



POCOS.	CONCENTRACOES (ppm)
MW-2A	5.20
MW-1A	3.40
MW-3	0.023
MVC	6.20
PVC	2.50
MW-5	0.0
MW-8	0.02
W-4	3.80

BLOCO DIAGRAMA INDICANDO A DISTRIBUICAO DAS CONCENTRACOES (ppm) PARA O 1,2 - DICLOROPROPANO NOS POCOS DE MONITORAMENTO NO AQUIFERO BARREIRAS

Figura 7.5



BLOCO DIAGRAMA INDICANDO A DISTRIBUICAO DAS CONCENTRACOES (ppm) PARA O 1,2,3 - TRICLOROPROPANO NOS POCOS DE MONITORAMENTO NO AQUIFERO BARREIRAS.

Figura 7.6

proposto para avaliar o problema está representado na figura 7.7. Trata-se de uma rede retangular com 1050m de comprimento por 280m de largura, com 16 nós na direção X e 17 nós na direção Y, cujos espaçamento entre eles são $\Delta x = 70m$ e $\Delta y = 35m$.

2^o - Parâmetros do aquífero; a espessura saturada, a velocidade de propagação de fluxo e a porosidade efetiva são os parâmetros utilizados e obtidos através do modelo de fluxo. As dispersividades longitudinal e transversal são propriedades da estrutura da matriz e, como tal valores representativos são obtidos durante as simulações.

3^o - Fonte de contaminação - dentro deste grupo destacam-se a localização e a intensidade de injeção da fonte e o tempo de contaminação; segundo relatórios das firmas de consultoria, contratadas pela Salgema e indústrias do PCA, a região mais atingida por contaminações de produtos orgânicos clorados foi a área da ALCLOR, onde se pode distinguir as seguintes fontes distintas de contaminação:

- Tanque de recuperação de Hidrocarbonetos Clorados
- Pit de drenagem da área de Epicloridina

Além dessas fontes comprovadas de contaminação, existem outras dispersas, próprias de processos industriais que manipulam, estocam ou transportam produtos orgânicos clorados, principalmente em áreas de estocagem ou em unidades enterradas (Paranaguá, 1991).

Nas proximidades do tanque de Hidrocarbonetos Clorados foram registradas concentrações na ordem de 27 ppm de orgânicos

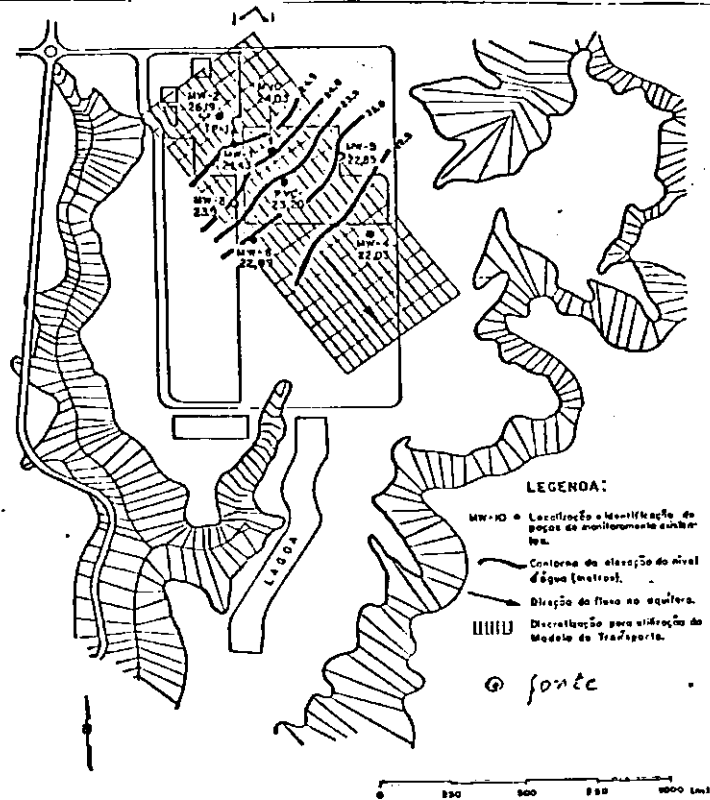
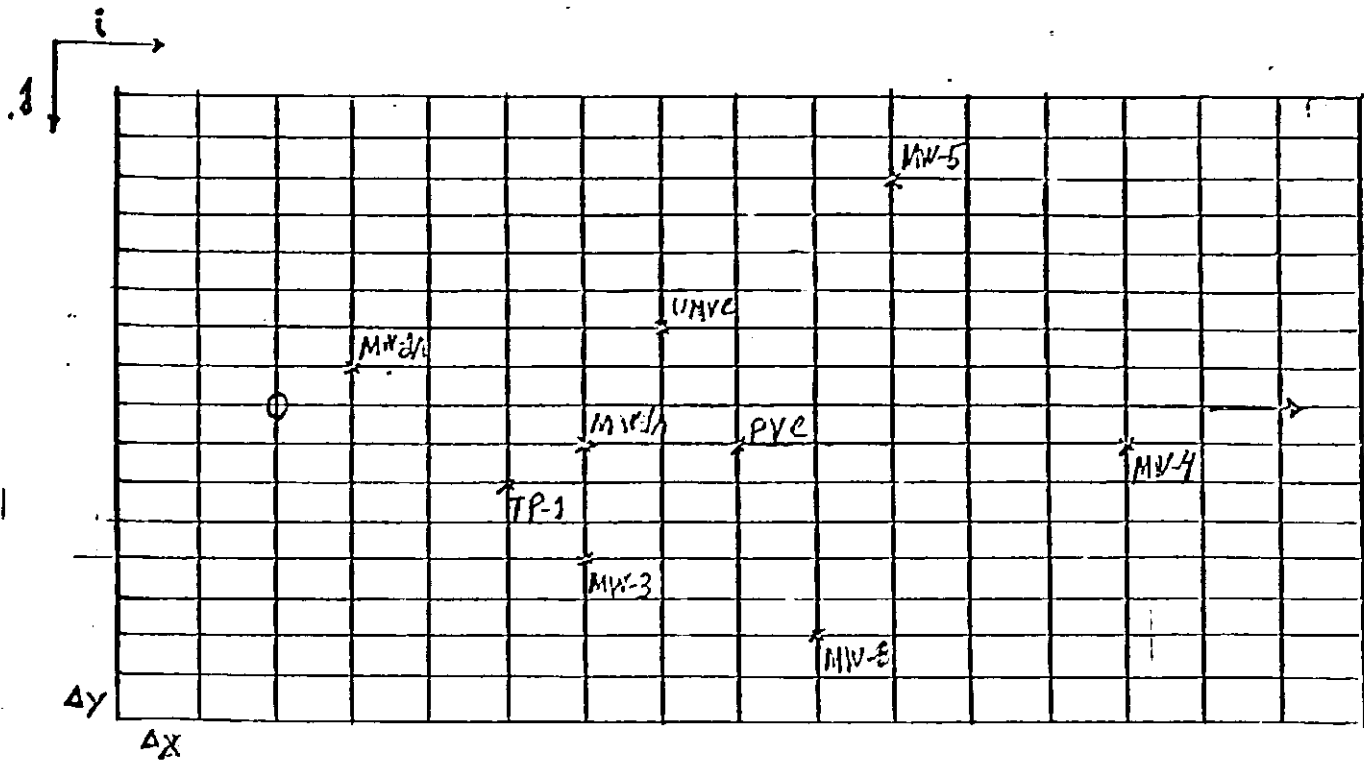


Figura 7.7 - a) Rede para simulação das plumas de 1,2 -DCE, 1,2-DCP e 1,2,3-TCP. b) Distribuição espacial da rede na área de estudo.

totais, podendo-se, assim, considerá-la como a principal fonte de contaminação.

Detectado as fontes de contaminação, indaga-se:

Quando ocorreu o vazamento?

Quantas toneladas de orgão clorados foram injetadas na zona saturada?

Partindo do princípio que a ALCLOR começou a operar em agosto de 1988 e supondo-se que as fontes tenham cessado de poluir em agosto de 1991 têm-se, portanto, um intervalo de tempo máximo de três anos para que tenha ocorrido o vazamento.

Quanto a segunda indagação, pairam dúvidas.

Observa-se, que dentre os dados solicitados pelo modelo têm-se, de concreto, a fonte - admitida como o tanque subterrâneo de processamento dos Hidrocarbonetos Clorados, e os parâmetros obtidos pelo modelo de fluxo.

Os demais parâmetros serão determinados pelo modelo durante o processo de simulação que, em termos práticos, consiste em responder ao modelador o seguinte questionamento:

- Quais seriam as concentrações obtidas ao se injetar uma determinada quantidade de poluente, durante um intervalo de tempo Δt , em um aquífero com dispersividades longitudinal e transversal "X" e "Y" respectivamente?

Como resposta obtém-se, para esta simulação, concentrações $C(i,j)$ que serão comparadas com as dos pontos da rede que representam os poços de monitoramento. Evidentemente, o

resultado de cada simulação é função dos parâmetros "flutuantes" dispersividade, injeção e tempo - uma vez que os demais são fixos. Portanto, o aferimento do modelo - concentrações obtidas próximas às analisadas, requer um intenso trabalho de simulação para o refinamento dos parâmetros "flutuantes".

7.5 - Obtenção das Plumas de Organo Clorados

No início de fevereiro de 1990, durante o monitoramento do poço PVC, análises solicitadas pela Salgema e Alclor mostravam que já se fazia presente concentrações na ordem de 0.7 ppm do composto 1,2 - Dicloropropano (Ambiterria, 1991). Isto significa que entre agosto de 1988 e fevereiro de 1990 ocorrera o vazamento. Neste caso, qual seria os valores assumidos pelos parâmetros "flutuantes", para que em 16/02/1990 (data da Análise) o poço em questão indicasse tal concentração?

Segundo Guswa, J.H. et. alli (1984), a dispersividade longitudinal pode ser estimada como 10% da distância entre a fonte e o ponto de observação. Como o poço PVC dista 360m da fonte, iniciou-se as simulações com uma dispersividade longitudinal (D_L) de 36m e uma dispersividade transversal de (D_T) de 0.36m. A concentração de 0.7 ppm para o 1,2 - Dicloropropano no PVC foi obtida com os seguintes dados de entrada:

Rede de 16 X 17 nós, com $\Delta x = 70m$, $\Delta y = 35m$, uma única fonte, injetando permanentemente 544.30 g/d de

contaminante conservativo durante 435 dias. O aquífero com 20m de espessura, porosidade efetiva (n_{ef}) de 0.0486, $D_L = 50m$, $D_T = 5m$, $V_x = 0.67m/d$ e $V_y = 0$ (fluxo paralelo ao eixo X da rede).

O aferimento do modelo para este valor implica em dizer que o mesmo estima para o início do ano de 1989 o acidente que ocasionou a contaminação ou seja, apenas 5 meses após ao funcionamento da ALCLOR.

Os dados de entrada foram conservados e projetados para a data das análises efetuadas pelo laboratório americano (I.E.A.) nos poços de monitoramentos, isto é agosto de 1991 (914 dias de injeção permanente).

Os resultados obtidos com tal simulação, expostos na tabela 16, mostra que o modelo reproduz as concentrações que foram analisadas pelo I.E.A. nos poços PVC e MW-1A. Os demais apresentam uma distorção significativa, principalmente no MW-4. O valor para o poços MW-8 aproxima-se de maneira surpreendente com o resultado analisado, na mesma data, pelo laboratório B.C.A.(tabela 15). É evidente que uma maior concordância dificilmente se conseguiria uma vez que o modelo de transporte concebido durante a pesquisa trata o meio como homogêneo e o poluente como conservativo.

Tabela 16 - Analogia entre as concentrações observadas com aquelas obtidas através do modelo para o 1,2 DCP

POÇOS	RESULTADOS	RESULTADOS
	OBSERVADOS (ppm)	CALCULADOS (ppm)
MW-2A	5.20	3.44
TP-1	-----	1.48
MW-1A	3.40	3.41
MW-3	-----	0.20
MVC	6.20	1.55
PVC	2.50	2.54
MW-5	-----	0.019
MW-8	-----	0.02
MW-4	3.80	0.94

O efeito da dispersividade transversal sobre os valores calculados pelo modelo para as concentrações e expostos na tabela 16 pode ser visto na tabela 17.

Tabela 17 - Efeito da dispersividade transversal sobre os valores calculados pelo modelo na tabela 17

POÇO	RESULTADOS OBTIDOS (ppm)		
	$D_T = 0.01 D_L$	$D_T = 0.1 D_L$	$D_T = 0.2 D_L$
MW-2A	1.14	3.44	3.45
TP-1	0.09	1.48	1.72
MW-1A	1.52	3.45	3.0
PVC	1.49	2.54	2.0
MVC	0.12	1.55	1.72
MW-4	0.64	0.94	0.72

Com $D_L = 50m$;

D_L = Dispersividade Longitudinal (m)

D_T = Dispersividade Transversal (m).

A figura 7.8 mostra, a título de exemplo, o efeito advectivo - dispersivo para o composto 1,2 Dicloropropano simulado pelo modelo de transporte adotado; enquanto que a figura 7.9 ilustra a propagação da pluma para o mesmo composto.

O mesmo processo foi efetuado para o composto 1,2 - DCE, só que tomando-se por base o valor de 0.14 ppm obtido no início de março de 1990 (Ambiterria, 1991). Esta concentração foi calculada pelo modelo utilizando-se uma injeção permanente de 116 g/d, durante 435 dias e conservando-se os demais parâmetros. As concentrações obtidas, quando projetado para 914 dias de injeção permanente, encontram-se na tabela 18.

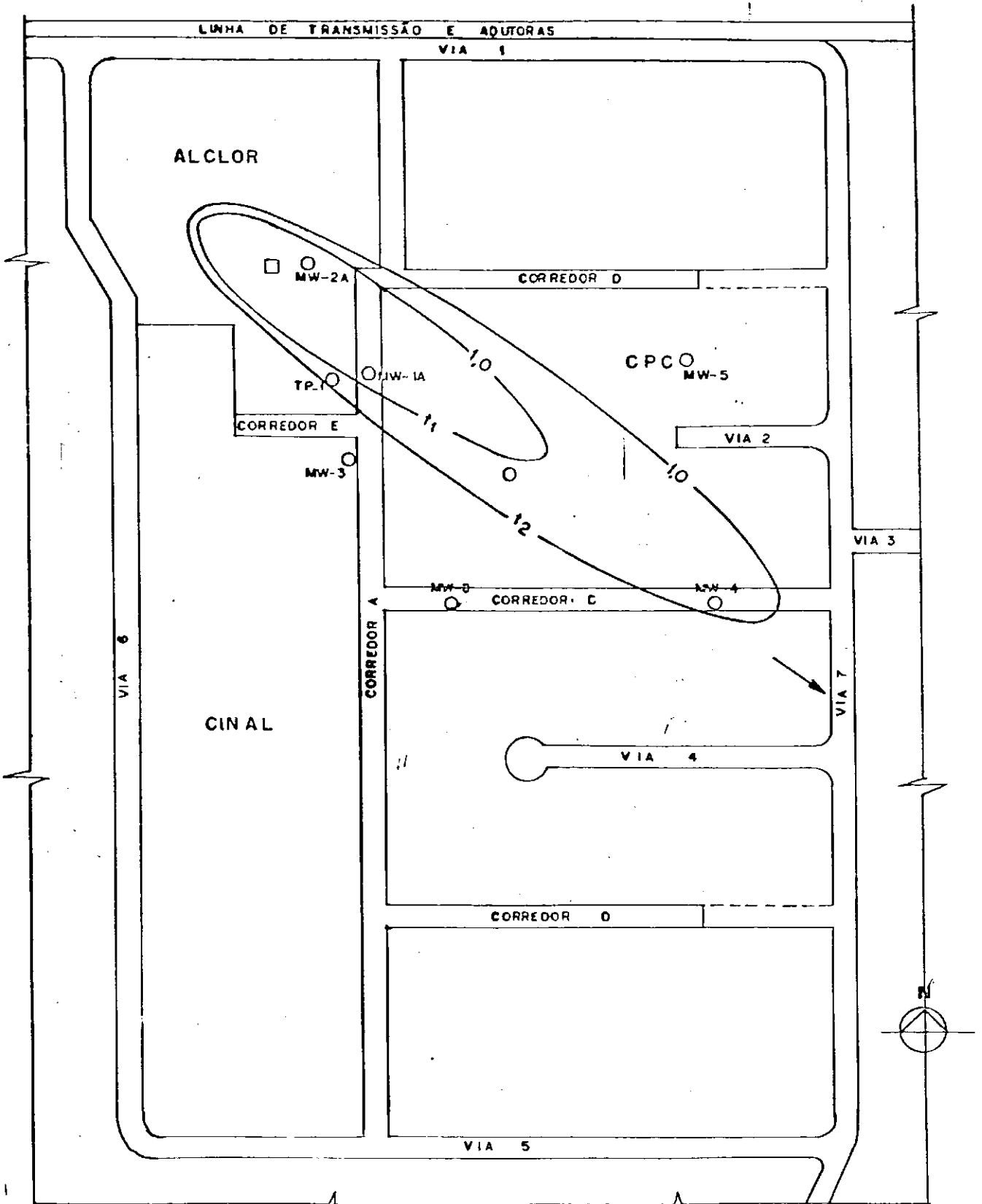


Figura 7, 8 - Processo advectivo-dispersivo simulado para o composto 1, 2 DCP

○ MW-Poços monitorados ○ TP-Poço de produção □ Fonte
 → Direção de fluxo 0 70m $t_1 = 420$ dias $t_2 = 900$ dias ~ 1,0ppm
 ESCALA

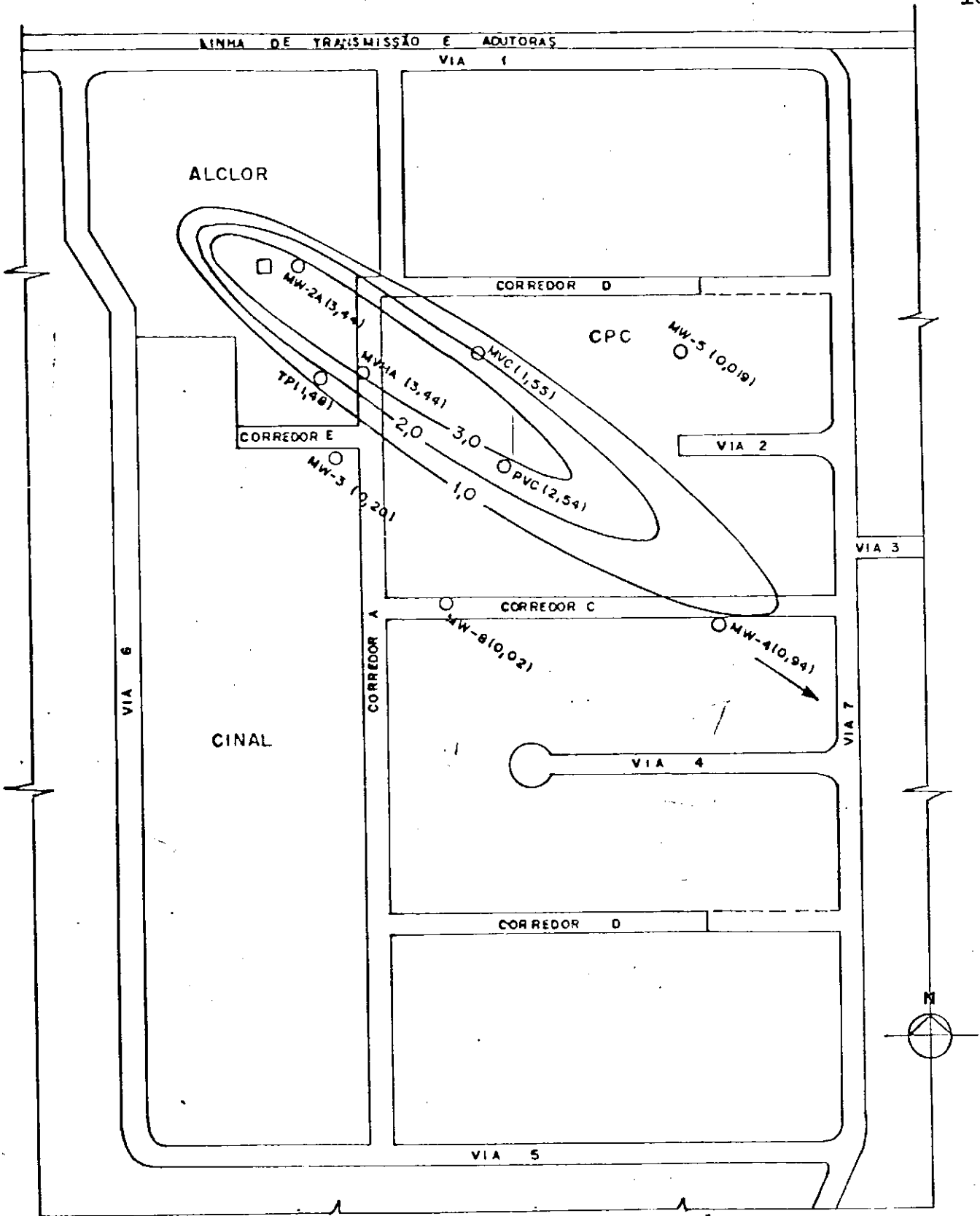


Figura 7.9 — Pluma simulada para o composto 1, 2 — DCP.

- MW — Poço de monitoramento
- MW(†) — Concentração (ppm)
- Fonte
- TP — Poço de produção
- Direção de fluxo
- 0 — 70 m
- ESCALA

Tabela 18 - Confronto entre os resultados calculados pelo modelo e os observados para o 1,2 -DCE

POÇOS	RESULTADOS	RESULTADOS
	OBSERVADOS (ppm)	CALCULADOS (ppm)
MW-2A	1.40	0.73
TP-1	-----	0.31
MW-1A	0.44	0.72
MW-3	-----	0.04
MVC	0.43	0.32
PVC	0.53	0.53
MW-5	-----	0.004
MW-8	-----	0.037
MW-4	0.83	0.32

Os resultados obtidos para 914 dias, contidos na tabela 18 acima, mostram que o único ponto de coincidência recai sobre a concentração do PVC. Os demais valores, inclusive aqueles detectados pelo B.C.A., apresentam total desencontro.

Com uma injeção de 283.50 g/d, único parâmetro de entrada que difere dos processos acima efetuados, o modelo assegura uma concentração de 1.32 ppm para o produto 1,2,3 - TCP contra 1.30 ppm detectado em análise efetuada pelo I.E.A em agosto de 1991 no

poço PVC, como indicado na tabela 19.

Tabela 19 - Resultados calculados pelo modelo versus observado para o composto 1, 2, 3 - T C P

POÇOS	RESULTADOS DAS ANÁLISES (ppm)	RESULTADOS OBTIDOS (ppm)
MW-2A	2.30	1.89
TP-1	-----	0.77
MW-1A	1.30	1.89
MW-3	-----	0.10
MVC	3.60	0.81
PVC	1.30	1.32
MW-5	-----	0.01
MW-8	-----	0.01
MW-4	2.40	0.49

As figuras 7.10 e 7.11 mostram o efeito advectivo-dispersivo para os compostos 1,2-DCE e 1,2,3 - TCP.

A distribuição espacial das concentrações analisadas para os compostos estudados mostra, pelo menos, dois fatos curiosos:

- As concentrações observadas no poço MVC são as maiores, mesmo não havendo fonte na área da CPC.

- O último poço monitorado, MW-4, apresenta concentrações observadas sempre superiores e guardando uma relação

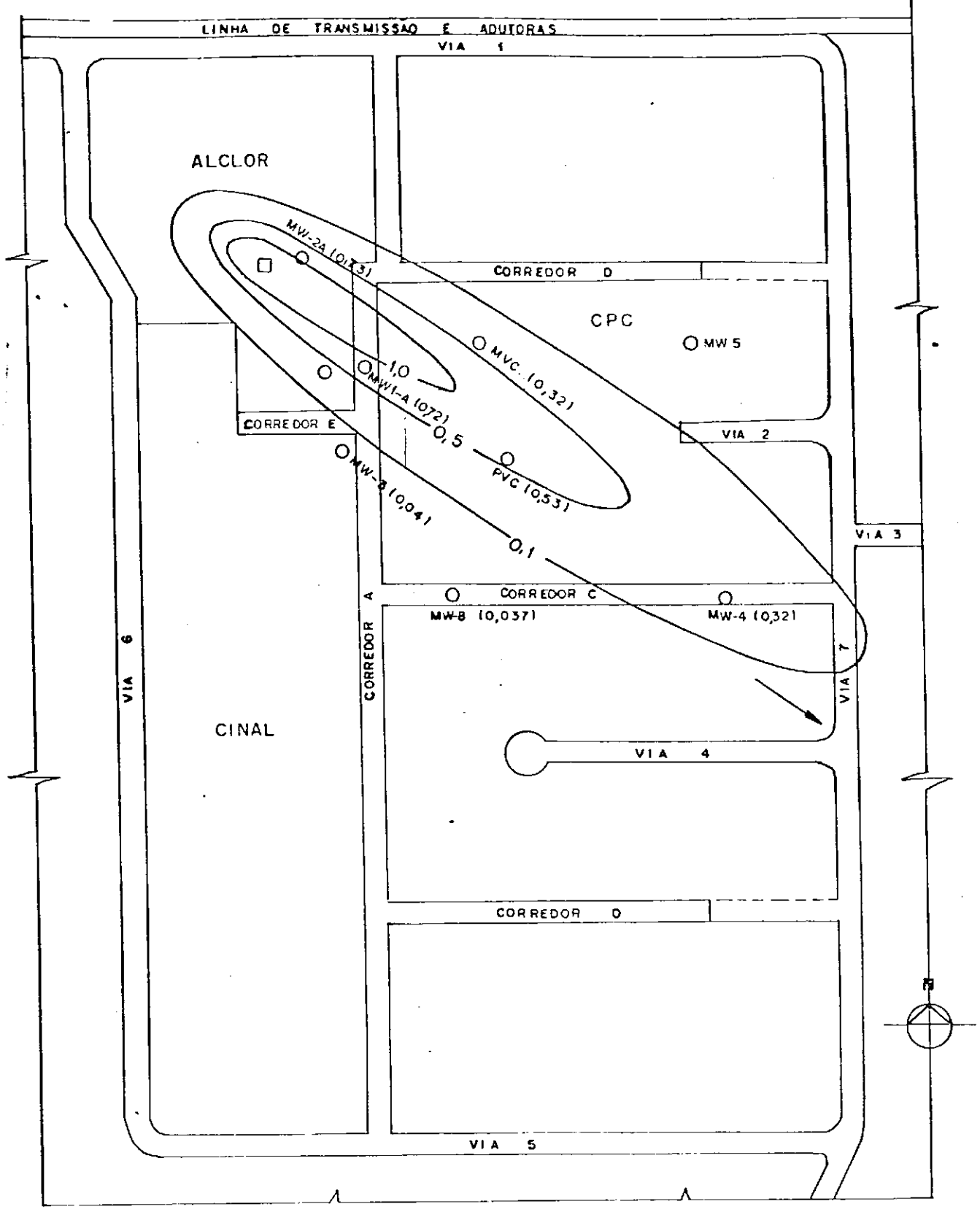


Figura 7.10— Pluma simulada para o composto 1, 2 – DCE.

- MW- Poço de monitoramento
- MW(♯) - Concentração (ppm)
- Fonte
- TP- Poço de produção
- Direção de fluxo
- 0 — 10m
ESCALA

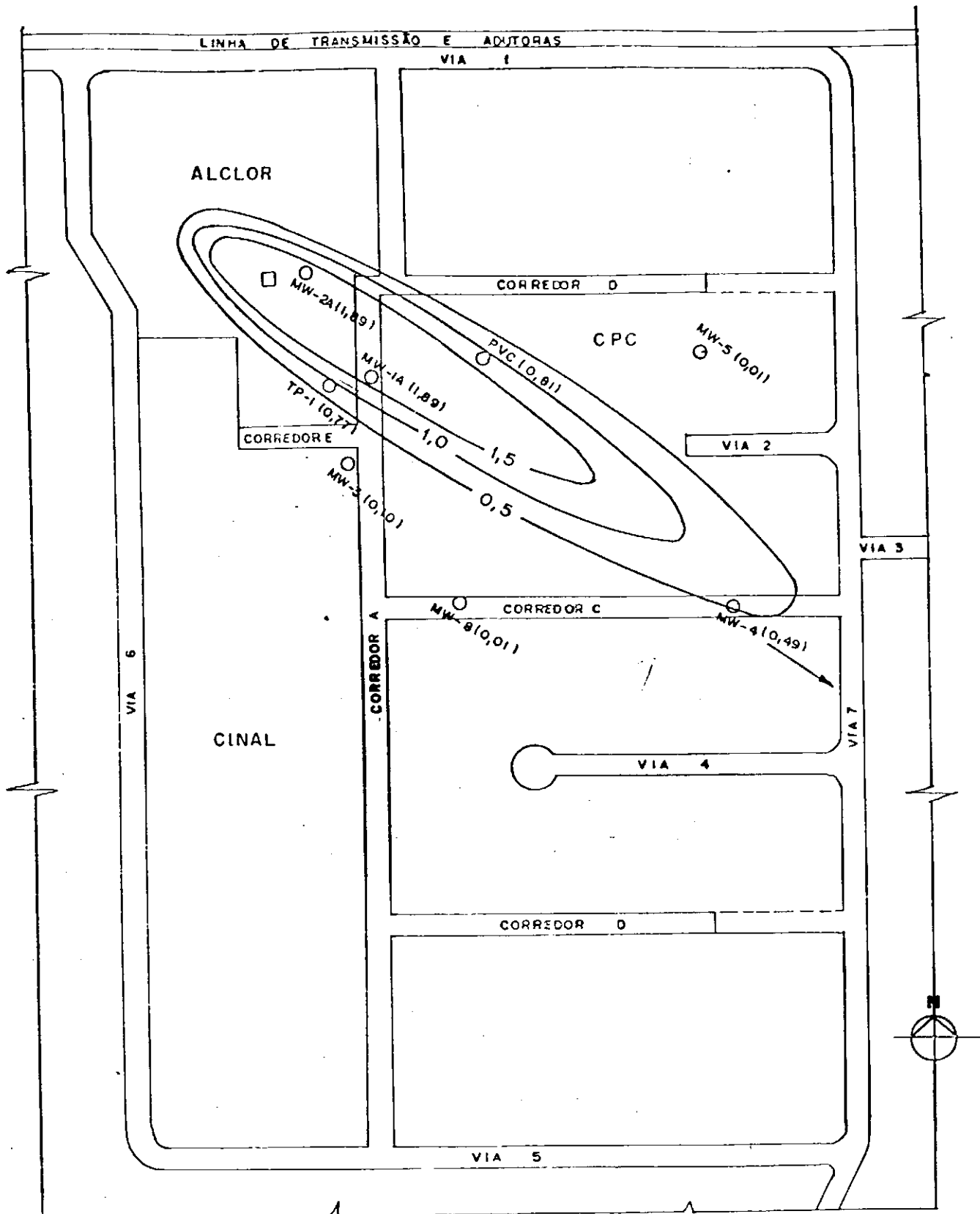


Figura 7.11 - Pluma simulada para o composto 1,2,3-TCP

○ MW - Poço de monitoramento ○ MW(⌘) - Concentração (ppm) □ Fonte ○ TP - Poço de produção
 → Direção de fluxo 0 70 m
 ESCALA

de 1.56 para o 1,2-DCE, 1.52 para o 1,2-DCP e 1.8 para o 1,2,3-TCP com as concentrações do poço antecedente e mais próximo, ou seja o PVC.

Segundo Freeze e Cherry (1979), um aumento da condutividade hidráulica na ordem de 100 vezes, pode traduzir em um incremento de 1 a 5 vezes nas concentrações. O corte da figura 5.8 induz a um aumento na condutividade hidráulica entre os poços PVC e MW-4, fato este que pode ser comprovado pelo maior espaçamento entre as isopotenciométricas da figura 5.11. Caso comprovado tal argumento, jamais o modelo detectará pois o mesmo trata o meio como homogêneo.

- A figura 5.12 representa a base do aquífero tridimensionalmente. Observa-se que o poço MVC encontra-se numa depressão. Como os orgânicos clorados são mais densos, naturalmente a tendência é um acúmulo dos mesmos neste local e por assim sendo, aliado ao fato do poço ser totalmente penetrante, uma maior concentração será aí detectada em análise. Desta forma, mais uma vez tal enfoque não será absorvido pelo modelo, pois a espessura do meio é tomada como uniforme pelo mesmo.

- Ainda com respeito a figura 5.12, o Poço TP-1, também totalmente penetrante, encontra-se sobre um "divisor" e evidentemente baixíssimas concentrações serão detectadas em análises. O modelo não detectará tal suposição e assim suas concentrações simuladas jamais se aproximarão das analisadas.

A contaminação se deu através de um vazamento localizado a 60m acima da superfície freática. O modelo processa os dados de injeção supondo que a fonte posiciona-se sobre o aquífero. Desta forma, as concentrações analisadas para o MW-2A, dificilmente serão aferidas pelo modelo devido a suposta proximidade.

Conforme o acima exposto, as simulações efetuadas pelo modelo são direcionadas à uma fração de poluentes que interceptaram a superfície freática em pontos próximos a fonte e conservativamente espalharam-se em um aquífero homogêneo, isotrópico sob efeito advectivo-dispersivo.

O laboratório da CINAL, em agosto de 1991, realizou dosagem para os orgânicos clorados totais no aquífero. As simulações efetuadas através do modelo, para este caso, tomou como referência as concentrações no poço PVC e utilizou uma rede de 25 nós por 17 nós, com o mesmo espaçamento adotado anteriormente e uma injeção permanente de 3336 g/d durante 914 dias. Os resultados obtidos, dentro do que propõe o modelo, mostraram-se satisfatórios de acordo com o que está exposto na tabela 20. A figura 7.12 mostra a propagação das plumas de orgânicos clorados totais.

Segundo a projeção do modelo, em agosto de 1991 o aquífero estava contaminado com 3,050 toneladas de orgânicos clorados totais. Salienta-se entretanto, que essa massa poluente representa a concentração diluída detectada pelos poços de monitoramento, não computando a parte de orgânicos clorados que está aderida a matriz do aquífero. Portanto, a massa poluente infiltrada no solo só poderá

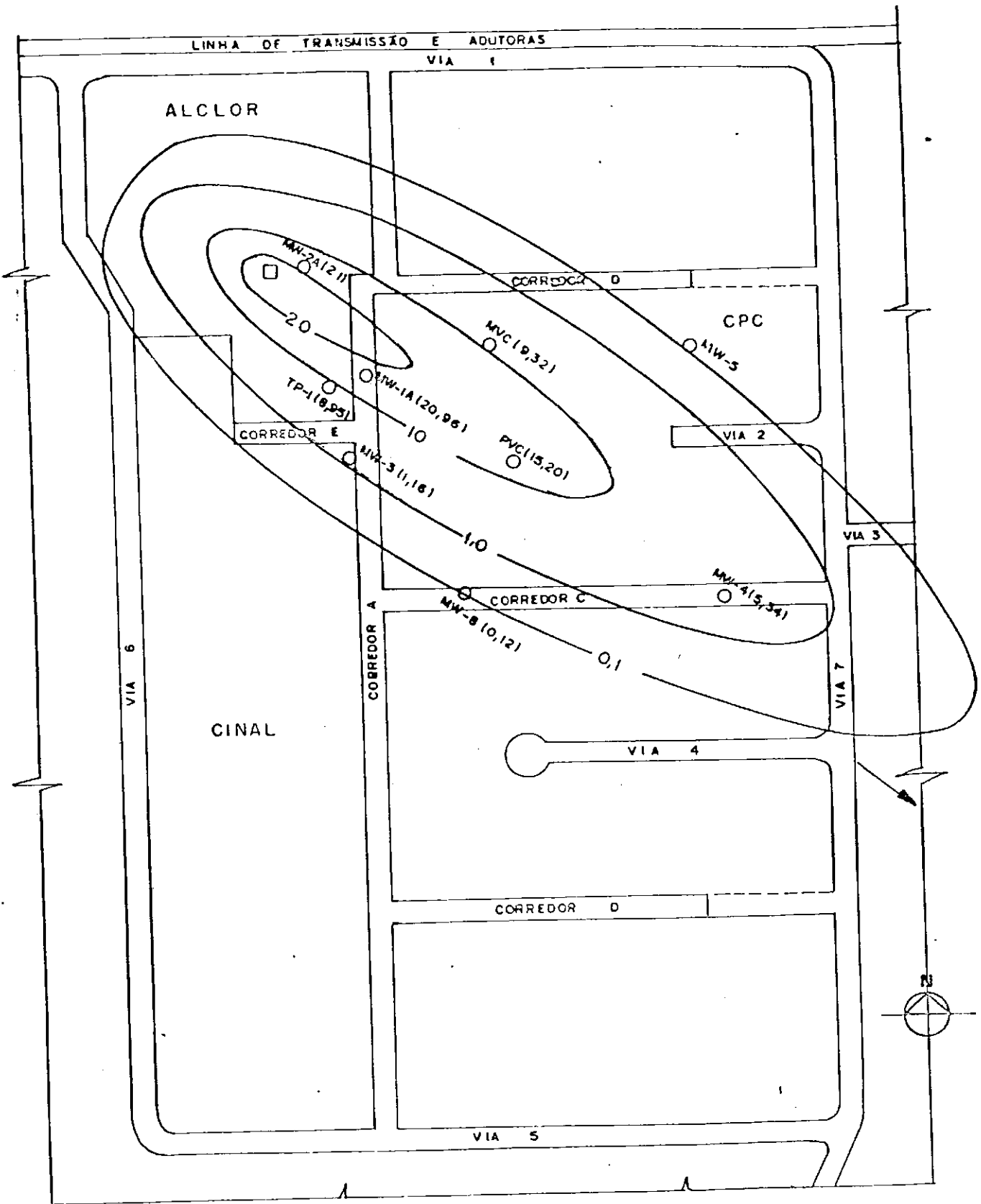


Figura 7.12 - Pluma simulada para os organos totais.

- MW - Poço de monitoramento
 - MW(*) - Concentração (ppm)
 - Fonte
 - TP - Poço de produção
 - Direção de fluxo
- 0 ——— 70m
 ESCALA

ser estimada através de um balanço entre o que foi produzido pela ALCLOR e a que foi efetivamente enviada à CINAL para incineração.

De acordo com os números levantados pela a ALCLOR, faltam 218 ton para fechar o balanço entre o que foi produzido e o que foi enviado à CINAL. Reconhecendo que "alguma" quantidade se infiltrou no solo, A ALCLOR solicitou, no final de 1992, que a GEOMATRIX - firma americana consorciada a PARANAGUÁ, fizesse um balanço do que estava presente no aquífero e conforme informações, 35 ton tinha sido extraídas até outubro de 1992 por uma bateria de poços projetados para tal e outras 35 ton permanecia no aquífero. Entretanto, as 70 ton calculadas referem-se a porção diluída o que deduz-se que a massa poluente ultrapassa o especulado.

Qualquer que venha a ser a quantia instalada no aquífero, esta deverá ser subtraída das 218 ton, considerando que o balanço esteja correto, para que seja determinado quanto existe na zona não saturada. É bom lembrar que o meio insaturado, desde que contaminado, comporta-se como uma fonte permanente.

7.6 - Comentários

A parte essencial do modelo de transporte é o modelo de fluxo. Os demais parâmetros requeridos pelo programa tais como dispersividade, intensidade da fonte, concentrações iniciais e outros são estimados durante a calibração do modelo.

Geralmente os modelos de transporte não traduzem na íntegra o movimento de contaminantes no meio poroso e saturado. Isto deve-se a vários fatores, que na prática não comportam-se de maneira tão simples como concebidos na modelagem.

O complexo sistema hidrodinâmico da área estudada aliado ao fato da existência de uma zona não saturada com espessura de 60 metros e que o vazamento tenha ocorrido praticamente à superfície, ratifica o parágrafo anterior.

O modelo adotado além de tratar o meio saturado como homogêneo, concebe os poluentes conservativamente e considera a fonte no mesmo nível da superfície freática ou seja, despreza todo o processo migratório dos poluentes na zona não saturada.

As dificuldades para aferir o modelo com os dados observados, intensificam-se quando os poços monitorados são parcialmente penetrantes, como é o caso dos poços MWs na área. Os resultados dos modelos de transporte bidimensionais devem ser comparados com os valores médios provenientes de diversas profundidades nos poços de monitoramento. Nos Poços de monitoramento não penetrantes, tais médias não são representativas e as concentrações podem ser consideradas, apenas como pontos referênciais.

As plumas na realidade apresentam-se de forma irregulares em consequência da heterogeneidade do meio. Os modelos, portanto, simulam as plumas com os valores médios da estrutura local.

Desta forma e considerando-se que os poços de monitoramento são incompletos - com exceção do TP - PVC e MVC , que as análises efetuadas provêm de amostras retiradas a uma profundidade média de 70m - portanto de uma mesma profundidade - e que as simulações são direcionadas a fração poluente que intercepta a superfície freática em pontos próximos a fonte, pode-se afirmar que:

- os poços de monitoramento MWS, servem apenas como pontos referênciais.
- Os poços de monitoramento mais representativos para a área são os TP-1, PVC e MVC.
- O modelo apresenta um melhor aferimento para com os dados observados para a pluma de 1,2 Dicloropropano.
- As plumas do 1,2,3 Tricloropropano, dos organo clorados totais e do 1,2 - DCE , estão representadas de forma satisfatória.

Tabela 20 - Resultados das simulações do modelo para concentrações de orgânico clorados totais, confrontados com os observados.

POÇOS	RESULTADOS	
	OBSERVADOS (ppm)	CALCULADOS (ppm)
MW-2A	26.40	21.00
TP-1	-----	8.95
MW-1A	23.00	20.96
MW-3	0.10	1.16
MVC	27.60	9.32
PVC	15.20	15.20
MW-5	0.30	0.10
MW-8	2.20	0.12
MW-4	15.30	5.34

CAPITULO VIII

8.0 - PROPOSTA DE UM PROJETO CONCEITUAL PARA DESCONTAMINAÇÃO DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS NA ÁREA DO POLO CLOROQUÍMICO DE ALAGOAS

8.1 - Generalidades

Como abordado no capítulo 4.0, o método mais comum de limpeza de aquífero é de extrair a água contaminada removendo seus constituintes. A solução usada para este tipo de problema pode ser muito complexa e depende do local. Porém, o processo de descontaminação proposto por Javandel, I. & Tsang, C. (1987), mencionado no capítulo supra citado, pode ser útil na maioria dos casos, evitando os erros comuns tais como: local dos poços de bombeamento, distância entre os mesmos e taxa de bombeamento de cada poço.

A proposta de descontaminação para a área de estudo fundamenta-se na teoria proposta pelos autores acima mencionados; "Curvas Típicas de Zona de Captura, uma Ferramenta para Limpeza de Aquíferos", em consequência de sua simplicidade e praticidade na técnica resolutiva.

8.2 - O Método Utilizado

O trabalho de Javandel & Tsang (op. cit) tem por objetivo determinar o número ideal de poços para extração d'água

contaminada, a distribuição espacial dos mesmos - assegurando que a água contaminada não escape entre eles - e suas respectivas taxas de bombeamento.

O método considera um aquífero homogêneo e isotrópico, de espessura uniforme B . O fluxo regional permanente e uniforme, com velocidade de Darcy U , paralela na direção negativa do eixo X . Supõe, ainda, que n seja o número de poços de bombeamento, totalmente penetrantes em B e localizados no eixo Y , que serão usados para extrair a água contaminada. Para $n > 1$ deve-se encontrar a distância máxima entre quaisquer dois poços, de tal maneira que não seja permitido fluxo entre os mesmos. Uma vez tal distância seja estabelecida, o interesse é de separar zonas de capturas de tais poços, do resto do aquífero.

O desenvolvimento a seguir é baseado na aplicação da teoria complexas dos potenciais (Milne - Thompson, 1986). Neste caso, para fins de simplicidade sem perder as generalidades, supor que $n = 1$ e que o poço de bombeamento está localizado na origem do sistema de coordenadas. A equação que descreve a divisa das linhas de fluxo que separam as zonas de capturas deste poço do resto do aquífero é dado pela Equação 8.0.

$$y = \pm \frac{Q}{2BU} - \frac{Q}{2\pi BU} \tan^{-1} \frac{y}{x} \quad (8.0)$$

onde, B é a espessura (m), Q a vazão do poço (m^3/s) e U a velocidade do fluxo regional (m/s).

Observa-se que o único parâmetro da equação 8.0, é a razão Q/BU , o que tem a dimensão de comprimento. A Figura 8.0a ilustra as séries de curvas típicas para cinco valores do parâmetro (Q/BU). Para cada valor de Q/BU , todas as partículas d'água dentro da curva típica correspondente eventualmente alcança o poço. A Figura 8.0b ilustra caminhos de algumas das partículas dentro da zona de captura para $Q/BU = 2000$, que alcançam o poço de bombeamento na origem.

A intersecção de cada curva da Figura 8.0b e o eixo X mostra a posição do ponto de estagnação cuja a distância do poço é de $Q/2BU$. De fato, a equação 8.0 pode ser reescrita na forma adimensional como a equação 8.1.

$$y_D = \pm \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi} \tan^{-1} \frac{y_D}{x_D} \quad (8.1)$$

onde $y_D = BUy / Q$ (adimensional) e $x_D = BUx / Q$ (adimensional)

Como foi discutido anteriormente o método comum de limpeza de aquífero é de extrair água poluída removendo seus constituintes. Naturalmente o custo de tal operação é uma condição da extensão da limpeza, porém o ponto importante é que uma vez que o nível máximo permitido do contaminante químico é dado pelo procedimento da limpeza o projeto deve ser de tal maneira que:

TIPOS DE CURVAS PARA ZONA DE CAPTURA COM UM POÇO.

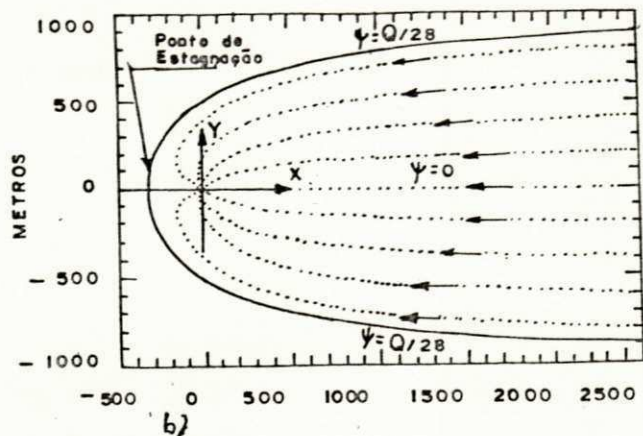
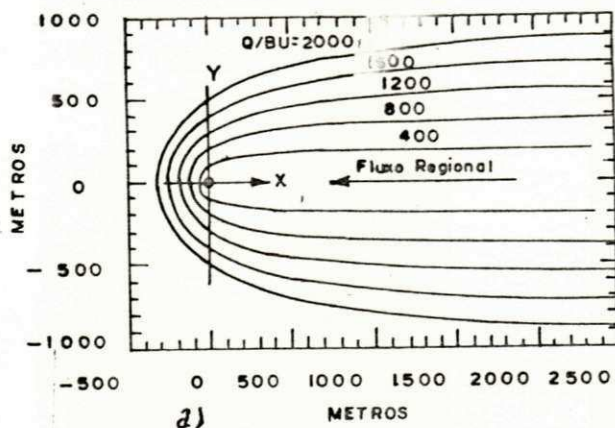


Figura 8.0 - a) Curvas mostrando zonas de captura para um poço de bombeamento localizado na origem para vários valores de Q/BU . b) Caminhos das partículas d'água dentro da zona de captura com $Q/BU = 2000$ (Javandel e Tsang, 1987)

TIPOS DE CURVAS PARA ZONA DE CAPTURA COM TRÊS POÇOS.

TIPOS DE CURVAS PARA ZONA DE CAPTURA COM DOIS POÇOS.

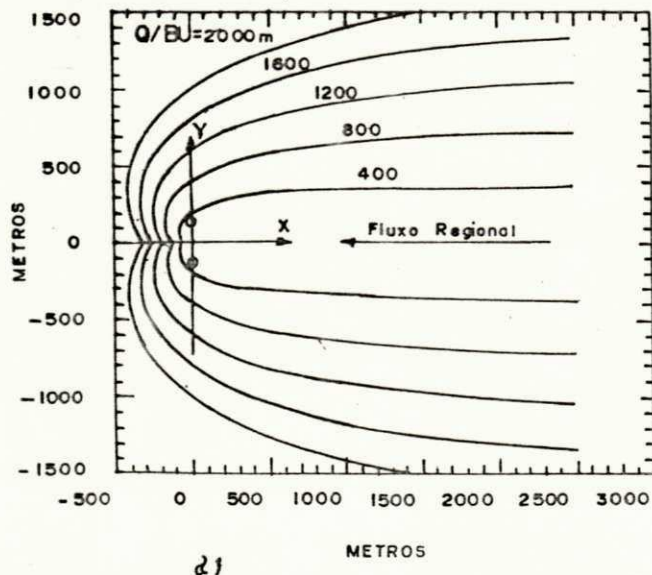
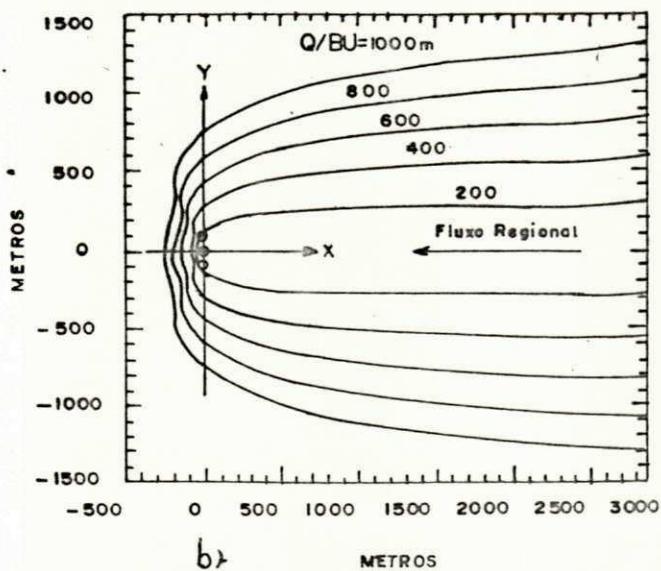


Figura 8.1 - Conjunto de curvas mostrando zonas de captura para para vários valores de Q/BU , com: a) dois poços de bombeamento; b) três poços de bombeamento (Javandel e Tsang, 1987).

- O custo seja mínimo
- A concentração máxima do contaminante no aquífero, no final da operação não exceda o valor dado
- O tempo de operação seja mínimo.

Para assegurar que estas condições sejam satisfeitas as questões mencionadas devem ser respondidas adequadamente.

O procedimento seguinte pode ser útil. O critério que deve ser seguido é que até certo limite, somente aquelas partículas de água contaminada que cabem dentro do contorno especificado devam caber na zona de captura dos poços de bombeamento.

Supondo que a pluma de contaminantes tenha sido identificada em um dado aquífero, que a distribuição das concentrações químicas tenham sido determinadas, e a direção e grandeza do campo de fluxo regional seja conhecida e, ainda supondo-se que as fontes de contaminação tenham sido removidas. A última suposição não é pré-requisito desta técnica, entretanto remover fontes de contaminação antes do procedimento de limpeza é adequado. O seguinte procedimento responderia as perguntas:

- Prepara-se um mapa usando a mesma escala das curvas típicas. Este mapa deve indicar a direção de fluxo do local. Outrossim, o contorno da concentração máxima permitida de dado contaminante deve ser indicado e por seguinte será chamado de linha de contorno da pluma.

- Assegurar que a direção do fluxo do pluma coincida com a padrão da Figura 8.0. Movimentando-se a linha de cotorno da

pluma na direção da cunha da cuva de captura e ler o valor de Q/BU da curva particular e completamente envolvida pela linha de contorna da pluma.

- Caso o poço não seja capaz de produzir certa taxa de bombeamento, então deve seguir o mesmo procedimento usando as curvas características de 2 poços de bombeamento (Figura 8.1a). Após identificar a curva típica apropriada e calcular a taxa de vazão para cada poço, tem-se que identificar a capacidade do aquífero suportar tais vazões através de ambos os poços. Um ponto importante a ser observado é que devido a existência de sobreposição da zona de influência dos dois poços não é possível obter a mesma taxa de bombeamento de um único poço bombeante.

Caso o aquífero seja capaz de aguentar as taxas de bombeamento dos dois poços, então o número ideal de poços será em número de dois e suas posições podem ser traçadas diretamente das curvas típicas. Nota-se que a distância exata entre cada par de poços depende da escolha da curva típica e deve ser calculada nas equações apropriadas. Porém, caso o aquífero não possua potencial para aguentar taxas de descargas de cada poço, deve-se usar curvas de 3 poços (Figura 8.1b). Este procedimento pode ser seguido até se obter uma solução correta para os poços.

A tabela 21 mostra, resumidamente, o procedimento para construção das linhas Q/BU para um, dois e três poços de bombeamento.

Tabela 21 - Distâncias Características em Regime de Fluxo para Um, Dois e Três Poços de Bombeamento em Fluxo Regional Uniforme.

N ^o DE POÇOS DE BOMBEAMENTO	DISTANCIA ENTRE OS POÇOS	DISTANCIA ENTRE AS LINHAS NO EIXO Y	DISTANCIA ENTRE AS LINHAS NO EIXO X
UM	--	$Q/2BU$	Q/BU
DOIS	Q/BU	Q/BU	$2Q/BU$
TRÊS	$2^{1/3} Q/BU$	$3Q/2BU$	$3Q/BU$

Caso o técnico decida reinjetar a água tratada no aquífero então , a estratégia pode ser a injeção no local da fonte. Este procedimento substancialmente encurtaria o tempo total de limpeza do aquífero.

Para se obter a locação apropriada dos poços de reinjeção usa-se a mesma técnica que foi introduzida para localização dos poços de extração, desprezando a interferência dos poços de extração. Aqui a linha de cotorno da pluma deve ser casada com as curvas típicas de uma maneira em que a direção regional de fluxo do mapa de cotorno se torne paralela e na direção oposta do fluxo regional das curvas típicas.

Assim feito, assegura-se que todas as partículas da água injetada permaneça dentro da posição atual da linha de contorno da pluma e forçará a água contaminada na direção dos poços de extração. A única lacuna desta técnica é que um pequeno volume de água contaminada localizada a jusante da pluma (no ponto final da mesma) cairá dentro da zona de velocidade relativamente pequena e permanecerá lá por um tempo indefinido. Isto pode ser superado pela movimentação dos poços de recarga mais para montante até meia distância entre o ponto final da pluma e a locação calculada.

8.3 - O Projeto Proposto de Descontaminação

Segundo a teoria proposta, deve-se estabelecer o nível máximo permitido do contaminante químico. O Governo do Estado de Alagoas através do Decreto Nº 6200 de 01 de março de 1985 "ESTABELECE MEDIDAS DE PROTEÇÃO AMBIENTAL NA ÁREA DE IMPLANTAÇÃO DO POLO CLOROQUÍMICO DE ALAGOAS". O mesmo fixa padrões de emissão para os efluentes líquidos das indústrias que após tratamento, terão o oceano como destinação final. Para os compostos organo clorados, o menor padrão de emissão determinado é de 0.05 ppm, concentração esta tomada como a máxima permitida para os organos clorados totais no projeto em pauta.

O contorno para esta pluma (Figura 8.2) foi obtida através de simulação com o modelo de transporte calibrado par os organo clorados totais.



Figura 8.2 - Pluma Simulada de Organo
Totais para 0.05 ppm. ■

Inicialmente se construiu curvas de zonas de captura para 5 poços de bombeamento (Figura 8.3). Nesta situação, e de acordo com o processo de superposição dos mapas, a pluma de 0.05 ppm acha-se totalmente envolta pela curva $Q/BU = 50$ m. Assim, com $B = 20$ m e $U = 7.75 * 10^{-6}$ m/s a vazão será de $0.0078 \text{ m}^3/\text{s}$ por poço estandoos mesmos equidistantes de 20 m.

O rebaixamento ocasionado pelo bombeamento dos cinco poços no aquífero foi calculado pelo modelo de fluxo devidamente calibrado. Os dados que alimentaram o modelo diferem daqueles usados no capítulo 6.0 por serem cinco poços alocados numa rede de 11×11 com $\Delta x = \Delta y = 20$ m e $Q = 0.0078 \text{ m}^3/\text{s}$ por poço e espessura saturada de 20 m. A tabela 22, que exhibe os rebaixamentos obtidos pelo modelo, indica que o rebaixamento máximo foi de 8.4 m ou seja 42% da espessura saturada.

Partindo do princípio de que um dos objetivos do método é minimizar custos, acrescido ao fato de que o limite máximo aconselhável para o rebaixamento da espessura saturada em aquíferos livres é de 65%, foram contruídas curvas de zonas de capturas para 4 e 3 poços de bombeamento. Evidentemente que valores de Q/BU maiores que 50 m serão obtidos e assim maiores vazões e consequentemente um maior rebaixamento.

Com quatro poços (Figura 8.4), a pluma acha-se envolta pela curva $Q/BU = 60$ m impondo assim uma vazão individual de $33.5 \text{ m}^3/\text{h}$ e um rebaixamento máximo de 9.8 m (Tabela 23).

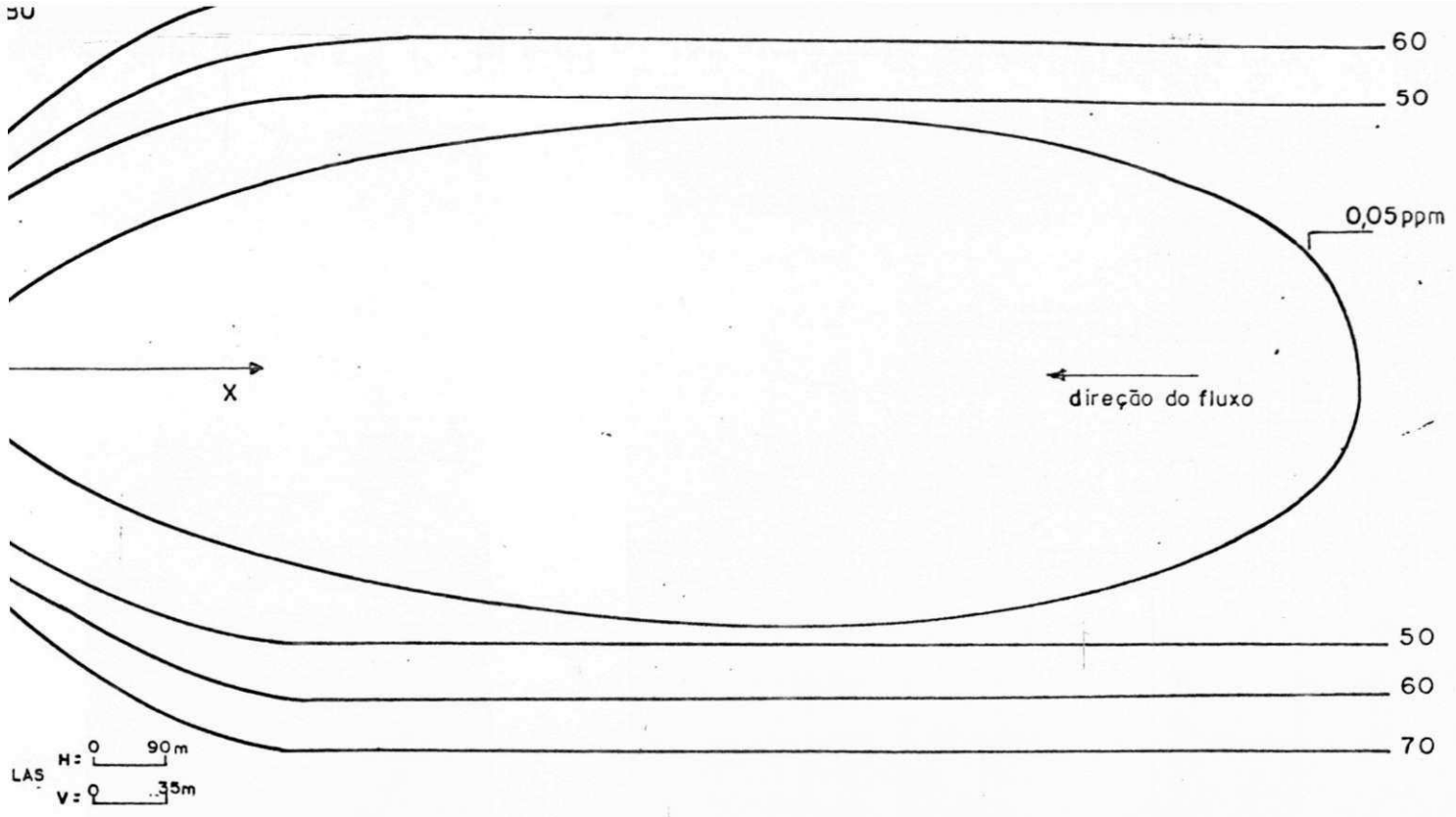


Figura 8.3 - Curvas Típicas de Zona de Captura com 5 Poços de Bombeamento

Tabela 22 - Rebaixamentos (m) Simulados pelo Modelo de Fluxo com 5 Poços de Bombeamento

25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	24.9	24.9	24.9	25	25	25	25
25	25	25	24.9	24.7	24.0	24.7	24.9	25	25	25
25	25	25	24.9	24.0	16.7	23.9	24.8	25	25	25
25	25	25	24.9	24.1	16.6	23.8	24.8	25	25	25
25	25	25	24.9	24.1	16.6	23.8	24.8	25	25	25
25	25	25	24.9	24.1	16.6	23.8	24.8	25	25	25
25	25	25	24.9	24.2	16.7	23.9	24.8	25	25	25
25	25	25	25	24.8	24	24.7	24.9	25	25	25
25	25	25	25	25	24.9	24.9	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25

Rebaixamento Máximo - 8.4 m.

Com quatro poços de bombeamento (Figura 8.4), distanciados entre si em 24 m, a pluma acha-se envolta pela curva $Q/BU = 60$ m impondo assim uma vazão individual de $33.5 \text{ m}^3/\text{h}$ e um rebaixamento máximo de 9.8 m (Tabela 23).

Um rebaixamento máximo de 13 m (Tabela 24), 65% da espessura saturada, foi obtido quando da construção das curvas Q/BU para três poços de bombeamento (Figura 8.5). Observa-se que o contorno da pluma encontra-se totalmente englobada pelo valor de $Q/BU = 80$ m. A equidistância entre os poços foi calculada em 32 m e a vazão para cada poço $Q = 0.0124 \text{ m}^3/\text{s}$ perfazendo, assim, uma descarga total para os três poços em regime de bombeamento contínuo de $3.211,20 \text{ m}^3/\text{d}$.

O volume d'água contaminada que está incluso na pluma de 0.05 ppm e que deverá ser extraída foi calculado em $5.871.328 \text{ m}^3$. Desta forma, os três poços de bombeamento levará nada mais que 5 (cinco) anos para efetuar tal operação.

A veracidade do método proposto por Javandel & Tsang (op.cit), foi devidamente comprovada quando aplicado o modelo analítico proposto por Kinzelbach, 1986, denominado de "Fathlines". O mesmo representa graficamente o movimento de poluentes em um campo de fluxo, em função da zona de captura dos poços de bombeamento.

O modelo além de solicitar dados de entrada a respeito dos parâmetros do aquífero, requer informações sobre o número de poços de extração, a distância entre os mesmos, suas descargas assim

como o raio de influência de cada poço. O N^o de poços ideal, segundo o método proposto, foi de três e o raio de influência adotado foi aquele calibrado pelo modelo de fluxo, ou seja 65 m.

A figura 8.6 mostra o resultado da simulação. Observa-se que todo o contorno da pluma encontra-se dentro da zona de captura dos três poços de bombeamento ou seja, todo o volume interior ao contorno será "dragado" pelos poços de bombeamento.

8.4 - Comentários

Conforme exposto no capítulo 7.0, subitem 8, a ALCLOR solicitou, no final de 1992, ao consórcio PARANAGUÁ - GEOMATRIX o cálculo da massa poluente presente na zona saturada. Segundo informações, as empresas chegaram a 70 toneladas. Desta forma, deduz-se que 70 toneladas de organo totais contaminavam o aquífero em agosto de 1991.

Por outro lado, o modelo de transporte calibrado para os organo totais estima que, na mesma data, 3.0 toneladas de contaminantes permaneciam no aquífero de forma diluída ou seja, 67 toneladas encontravam-se impregnada na matriz.

As 3.0 toneladas projetadas pelo modelo é fruto de uma injeção permanente simulada durante 2,5 anos. Portanto, de acordo com esses dados, houve uma diluição da massa impregnada em

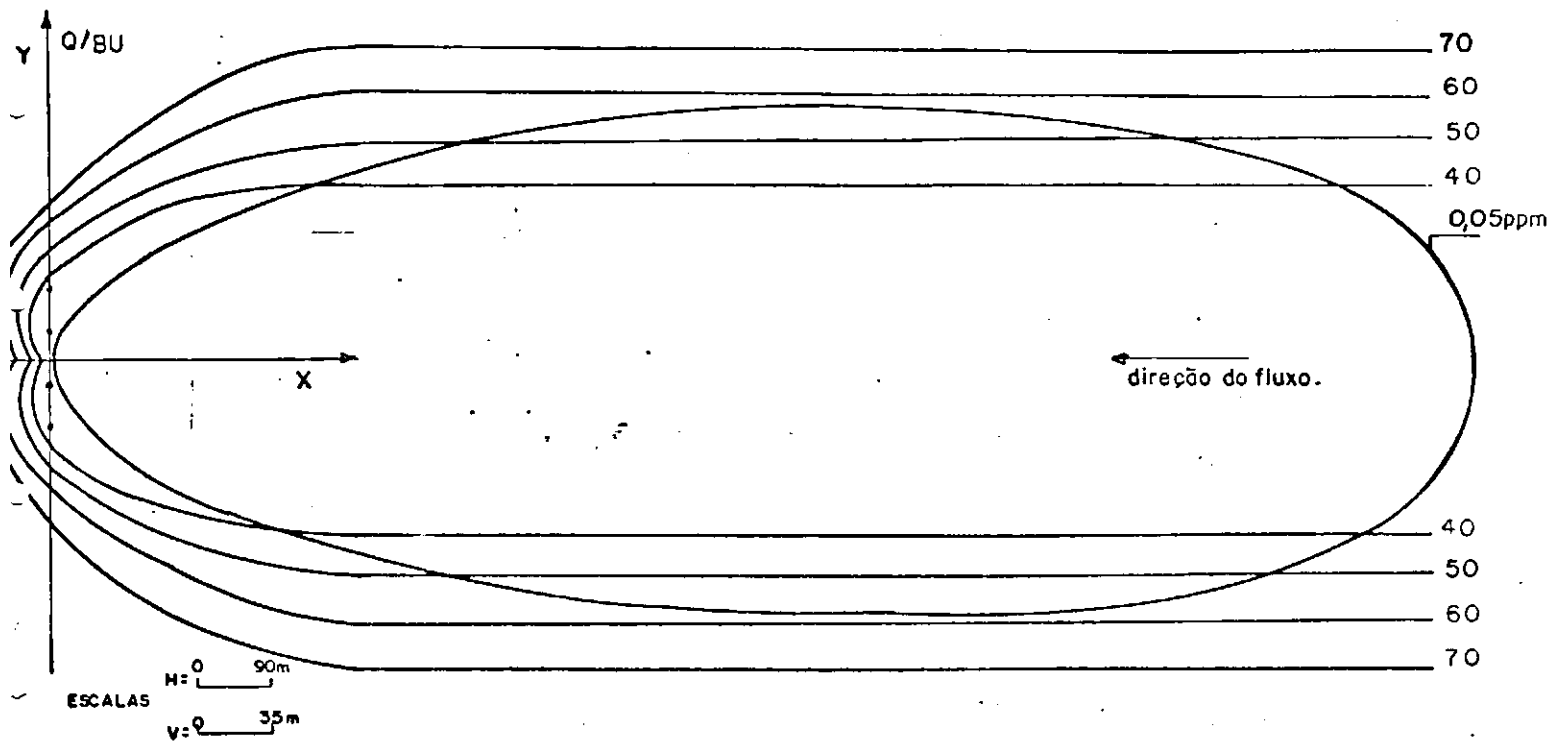


Figura 8.4 - Curvas Típicas de Zona de Captura com 4 Poços de Bombeamento

Tabela 23 - Rebaixamentos (m) Simulados pelo Modelo de Fluxo com 4 Poços de Bombeamento

25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	24.9	24.8	24.9	25	25	25	25
25	25	25	24.9	24.7	23.8	24.7	24.9	25	25	25
25	25	25	24.8	23.7	15.4	23.6	24.8	25	25	25
25	25	25	24.9	23.8	15.2	23.5	24.8	25	25	25
25	25	25	24.9	23.8	15.2	23.5	24.8	25	25	25
25	25	25	24.9	23.9	15.4	23.6	24.8	25	25	25
25	25	25	25	24.8	23.7	24.7	24.9	25	25	25
25	25	25	25	25	24.8	24.9	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25

Rebaixamento Máximo - 9.8 m.

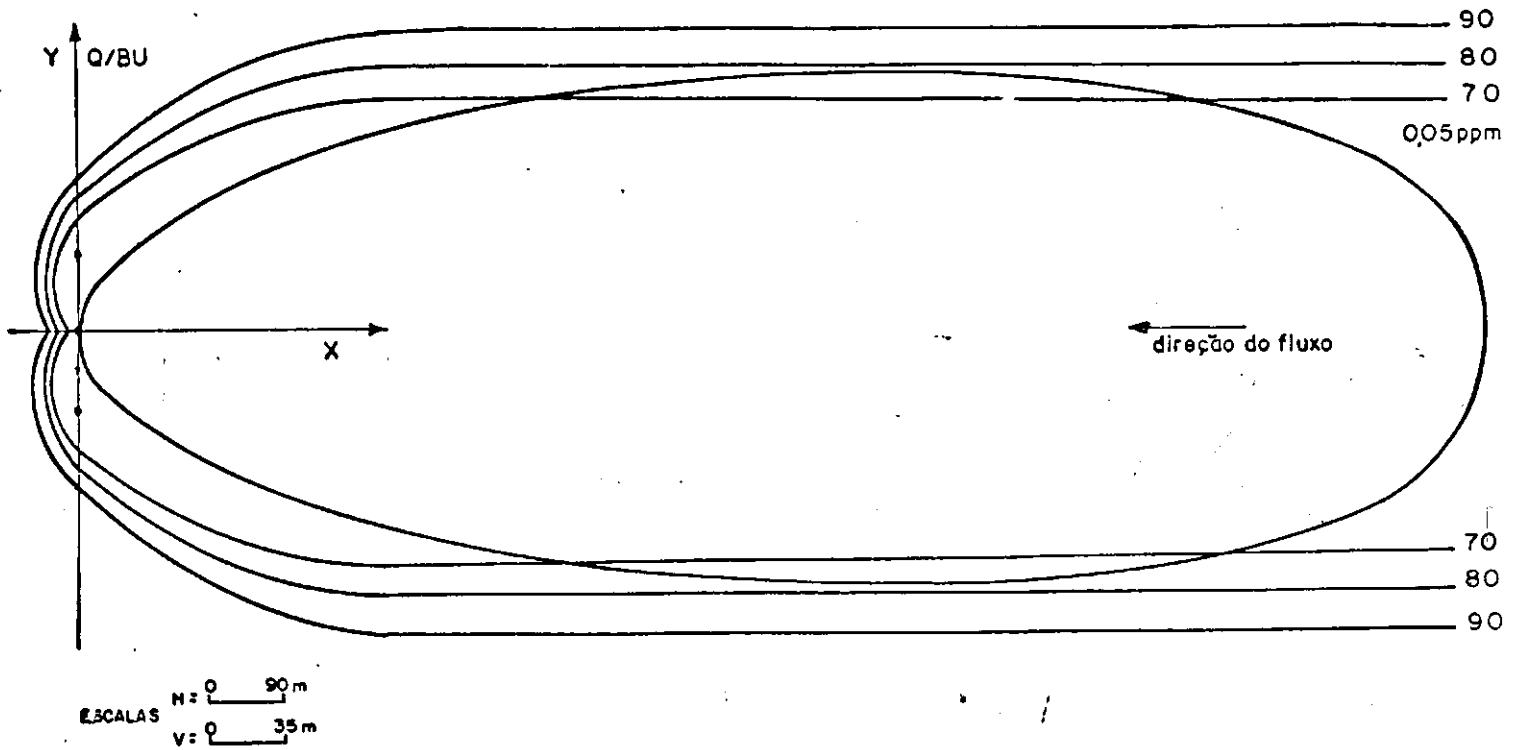


Figura 8.5 - Curvas Típicas de Zona de Captura com 3 Poços de Bombeamento

Tabela 24 - Rebaixamentos (m) Simulados pelo Modelo de Fluxo com 3 Poços de Bombeamento

25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	25	24.9	25	25	25	25	25
25	25	25	25	24.9	24.7	24.9	25	25	25	25
25	25	25	24.9	24.4	23.1	24.4	24.9	25	25	25
25	25	24.9	24.7	22.9	12.3	22.8	24.6	24.9	25	25
25	25	24.9	24.7	23.1	12	22.6	24.6	24.9	25	25
25	25	25	24.8	23.3	12.2	22.8	24.6	24.9	25	25
25	25	25	24.9	24.6	23	24.4	24.9	25	25	25
25	25	25	25	24.9	24.7	24.9	25	25	25	25
25	25	25	25	25	24.9	25	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25

Rebaixamento Máximo - 13. m.

CAPÍTULO IX

9.0 - CONCLUSÕES

A contaminação do aquífero Barreiras por orgão clorados ocorrido no Polo Cloroquímico de Alagoas foi tratado como um dos problemas ambientais de maior gravidade já acontecido no Estado de Alagoas. Dentre os principais orgão clorados identificados como contaminantes do aquífero Barreiras, destacam-se - por apresentarem maiores concentrações - o 1,2 - Dicloretano (1,2-DCE), 1,2 - Dicloropropano (1,2-DCP) e o 1,2,3 - Tricloropropano (1,2,3-TCP).

O Grupo Barreiras - na área estudada - apresenta, em diversos níveis, uma descontinuidade horizontal de leitos argilosos e ou areno-argilosos que intercalam o pacote arenoso quer na zona não saturada ou na zona saturada. Na zona saturada, aquífero Barreiras, o potencial das águas subterrâneas é totalmente controlado pela superfície potenciométrica da zona livre. Isto significa que trata-se de um aquífero livre.

O modelo de fluxo de água subterrânea de Kinzelbach, 1987, que foi adotado no presente estudo, ao aferir os valores para a condutividade hidráulica e porosidade efetiva, retrata, de maneira categórica, a complexidade hidrogeológica do meio poroso.

As proximidades entre os valores dos parâmetros aferidos pelo modelo de fluxo e os valores para os mesmos utilizados com maior frequência nos trabalhos publicados para o aquífero Barreiras na região de Maceió, corroboram com a veracidade do modelo aplicado.

As concentrações observadas nos poços de monitoramento MWS não podem ser tomadas como representativas, uma vez que os mesmos são parcialmente penetrantes. Partindo deste princípio, apenas as concentrações no PVC, no TP-1 e no MVC estão aptas para tal.

O modelo de transporte proposto por Kinzelbach, 1987, e utilizado para prever a propagação das plumas dos compostos acima mencionados no aquífero, comprova sua veracidade na calibração da pluma do organo clorado 1,2 - DCP.

As plumas do 1,2 - DCE , 1,2,3 - TCP e dos organos totais, estão representadas de forma satisfatória.

De acordo com os dois últimos parágrafos, evidencia-se uma melhor calibração do modelo para concentrações intermediárias.

O modelo de transporte, não podendo detectar a massa poluente empregada na matriz do aquífero, estima que em agosto de 1991 havia 3.050 ton de organo clorados totais de forma diluída no

aquífero e que sua contaminação tenha ocorrido no início de 1989.

A zona não saturada encontra-se contaminada e conseqüentemente o aquífero sofre constante recarga dos compostos químicos aí instalados.

De acordo com as plumas de orgão clorados totais, em 1991 concentrações na ordem de 0.1 ppm permaneciam no platô , não atingindo as águas surgentes nas imediações do rio dos Remédios.

CAPITULO X

10.0 - RECOMENDAÇÕES

A contaminação de aquíferos por orgão clorados e outras substâncias químicas é um dos problemas ambientais mais sérios da atualidade.

A ocorrência de um problema de tal magnitude no Estado de Alagoas, demonstra a responsabilidade que devem ter as instituições que atuam na área de controle ambiental de atividades industriais.

O Instituto do Meio Ambiente do Estado de Alagoas - IMA, órgão incubido de promover a preservação e a recuperação ambiental, através de sistemática ação fiscalizadora, só tomou conhecimento da contaminação do aquífero na área do PCA um ano após o fato ter sido consumado, o que denota, com clareza, o seu despreparo momentâneo para cumprir com as suas atribuições legais.

É mister frisar que o presente trabalho de pesquisa não pretendeu, e nem poderia pretender, ser instrumento bastante e suficiente para estudar a contaminação do aquífero Barreiras por orgão clorados objeto desta Dissertação de Mestrado. É apenas um trabalho inicial e, por conseguinte, tem como mérito maior o enfoque científico do problema denotado pela aplicação de modelos matemáticos com intuito de se obter os parâmetros hidrodinâmicos do aquífero e a propagação das plumas dos contaminantes através do mesmo.

Abaixo algumas recomendações aqui entendidas como indispensáveis:

Torna-se imperativo dotar, adequadamente, o Instituto de Meio Ambiente dos equipamentos e demais recursos necessários ao seu eficiente funcionamento.

Por se tratar de um problema de extrema gravidade, sua investigação deve ser objeto de ampla apreciação, não apenas pelos órgãos ambientais, mas principalmente pela comunidade científica e pela sociedade civil.

Que a ALCLOR contabilize, de maneira inequívoca, a massa de poluente que infiltrou-se no solo.

Que inicie-se a descontaminação da zona não saturada pois a mesma comporta-se como uma fonte de recarga permanente para a zona saturada.

Construção de novos poços de monitoramento, projetados de tal forma que:

- Atravessem toda a espessura do aquífero Barreiras e que as amostras d'água aí tomadas sejam retiradas de diversas profundidades, com o intuito de analisar, única e exclusivamente, a água da formação Ponta Verde.

- Detectem se a base do aquífero, em toda extensão da área, é formada pelos folhelhos da formação Ponta Verde ou se os arenitos mal selecionados da formação Coqueiro Seco acham-se presente. Caso ocorra os arenitos da formação Coqueiro Seco, amostrar e analisar para orgão totais a água da mesma.

Estimado a massa poluente que cotaminou o aquífero e delimitada a pluma cuja concentração encontra-se nos níveis exigidos pela atual legislação, recomenda-se a aplicação da teoria proposta por Javandel e Tsang, 1987; "Curvas Típicas de Zona de Captura, uma Ferramenta para Limpeza de Aquíferos", que tem por objetivo determinar o número ideal de poços para extração d'água contaminada, a distribuição espacial dos mesmos - assegurando que a água contaminada não escape entre eles - e suas respectivas taxas de bombeamento.

Determinado o melhor método de tratamento para a água contaminada extraída, e se viável, reinjeta-la no aquífero, a montante da fonte poluente, com o intuito de diminuir o tempo de descontaminação e naturalmente minimizar os custos do processo.

Buscar métodos adequados que tratem os efeitos da estratificação do aquífero sobre a propagação dos contaminantes.

Introduzir efeitos da densidade do contaminante sobre a difusão vertical dos mesmos, assim tratando a dispersão nas direções y e z.

CAPÍTULO XI

11- BIBLIOGRAFIA

Amus, H.E. & Porto, R., Classificação das Bacias Sedimentares Brasileiras segundo a Tectônica de Placas - In Anais do XXVI Congresso Brasileiro de Geologia, 1972. Vol. 2. pp. 67-90. Belém.

Anderson, M.R., Johnson, R.L., Pankov, J.F., Dissolution of Dense Chlorinated Solvents into Ground Water: Dissolution from a Well-Defined Residual Source. Ground Water, VOL. 30, N^o 2 - March-April, pp. 250- 256, 1992.

Anderson, M.P. e Woessner, W.W., Applied Groundwater Modeling - Simulation of Flow and advective Transporte. Academic Press, Inc 1992.. ISBN 0-12-059485-4.

Anjos, C.A.M., Estudo da Estabilidade de Encostas em Maceió. Dissertação de Mestrado. UFPB- CCT, Campina Grande /Pb - Brasil, Dez. 1992.

Aravin, V.I. and Numerov, S.N., Theory of Fluid Flow in Undeformable Porous Media. Israel Program for Scientific Translations, Jerusalém, 1965.

Abdel-aziz & Ismael Kashef; Ground Water Engineering ; McGrawHill 1986..ISBN 0-07-033489-7.

Barroso, C.M.R., Sarma, S.V.K., Hans, D.S., Propagação da Pluma do contaminante 1,2 - Dicloroetano no polo cloroquímico de Alagoas. X Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos, 7 a 12 de Nov. 1993, Gramado, RS. pp. 482-491 Anais Volume 4

Bear, J., Hydraulics of Groundwater, MacGraw-Hill, New York 1979.

Bear, J & Verrujit, Modelling of Groundwater & Pollution 1987; pp.1-414 Reidel Publ. Co. Dordrecht/Boston ISBN 1-55608-015-8 TATP2

Beltrão, A.E.A, Inventário Hidrogeológico Básico do Nordeste. Folha Nº 6. Fortaleza. Recife, Sudene - Div. Documentação, 1970, pp. 141.

Bouwer, H., GroundWater Hydrology, 1978, McGraw-Hill, p. 480.

Brasil, Aqua-Plan, Prestação de serviços de Consultoria para o planejamento de esgotos sanitários e abastecimento d'água da cidade de Maceió - Alagoas 1972.

Cantor, L.W. & Knox, R.C. Groundwater Pollution Control 1985; Water, Underground-Pollution Lewis Publications Inc., 121 South Main St. Chelsea, Michigan, 48118 ISBN 0-87371-014-2.

Carslaw, H. S. & Jaeger, J.C., Conduction of heat in Solids 2nd Ed. Oxford Univ. Press London 1959.

Cavalcante, A.T., Recursos Hídricos Subterrâneos da área de Maceió. Dissertação de Mestrado - UFPe, Recife/ Pe - Brasil, 1978.

Cavalcante, A.T., Potencialidade das Águas Subterrâneas na área de Maceió. II Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas, 1982, Salvador Ba; pp. 43-52.

Cavalcante, A.T., Barroso, C.M.R., Neto, J.V.F., Wanderley, P.R.M., Lima, R.C., Ramalho, W.M., Estudo Analítico dos Poços da Bacia Sedimentar de Alagoas. 7^o Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas, Belo Horizonte, MG, de 1 a 4 de Dezembro - pp. 80-83, 1992.

CETESB, Construção, operação e manutenção de poços - Curso por Correspondência (Diversos Autores), São Paulo, 1984.

Cleary, R.W., Águas Subterrâneas em Engenharia Hidrológica. Coleção ABRH de Recursos Hídricos. Rio de Janeiro, 1989.

Cleary, R.W., (Ambiterria Ltda), Groundwater Contamination at the Chlorochemical Pole in the State of Alagoas, São Paulo. Outubro, 1990.

Codeal - Companhia de Desenvolvimento de Alagoas. Diagnóstico Preliminar das Possibilidades de Aproveitamento das Reservas D'água Subterrâneas, de Fontes e do rio dos Remédios, na área do

Polo Cloroquímico de Alagoas, 1978.

Costa, J.A. y Moreno, E.F., Manual de metodos cuantitativos en el estudio de aguas subterraneas - Centro Regional de Ayuda Tecnica Mexico y Agencia para el Desarrollo Internacional (A.I.D.), 2^a ed. en espanol, 1966, p. 105.

Costa, W.D. & Santos M.A.V., Estudo Hidrgeológico do Aquífero Terciário na área do rio do Reginaldo, Alagoas. IV Simpósio de Geologia do Nordeste, 1974.

Courant R, Frierichs K. Lewy, H. Math. Ann 100, 32, 1928. Milne Thompson L. M. Calculus of Finite Differences London 1933.

Custodio, E. e Llamas, M.R., Hidrología Subterránea, Ediciones Omega, S.A., Barcelona, 1976, 2 t.

DNAEE (Departamento Nacional de Águas e Energia Eletrica) na Ação Regional do DNAEE na Área de Recursos - Julho de 1984.

Dupuit, J., E'tudes The'oriques et Pratiques sur le Mouvement de Eaux Dans les Canaux Decouverts et a Travers les Terrains Perméables. Dunod, Paris, 2nd ed. 1896.

Ernst , L.F., Grondwaterstromingen in de Verzadigde zone in hum
Berekening Bij de Aanwezigheid van Horizontale Evenwijdge opem
Leidingen. Verslag. Landbouk. Onderzoek, 1962.

Forchheimer, P., Hydraulic. Teubner Verlagsgesellschaft,
Stuttgart, 3rd ed. 1930, p. 542.

Franciss, F.O., Hidráulica de Meios Permeáveis. Ed.
Interciência.São Paulo. 1980, p.169.

Fried, J.J., Groundwater Pollution. Development in Water Science
VOL. 4, Elsevier New York pp. 1-330.

Freeze, R.A., and Cherry, J.A., GroundWater. Prentice-Hall, Inc.,
Englewood Cliffs, N.J., 1979.

Fundação Cargill "Processos de Transferência no Sistema
Solo-Planta-Atmosfera" Klaus Reichardt 1985 pp 1-466.

Fundamentals of Transport Phenomenon in Porous Media -IAHR,
DEVELOPMENTS IN SOIL SCIENCE 2 ELSEVIER 1972; ISBN
0-444-99897-7.

Galya, P.D., A Horizontal Plane Source Model for Ground-Water
Transport. Ground Water, VOL. 25, N^o 6 - November-December, 1987
Gelhar, L.W., Stochastic Analysis of Flow in Aquifers, American
Water Resources Association, Minnesota, USA, 1976 , in "Advances

in GR Water Hydrology Proceedings", pp 57-71.

Goldemberg, E.D., Fluxes of Material to the Marine Environment. Marine Environ. Quality. Nat. Acad. Science. Washington, Dc, 1971.

Ground Water Manual, 1981, U.S.D.I., Denver, EUA, p. 480.

Haar, M. E., Groundwater and Seepage. Mc Graw-Hill Book Co, Inc. ...cont 1962, p. 315.

Hantush, S.M., Hidraulicof Wells 1964. In Advanicesin Hidrosciense. Academic Press Inc. New York, p. 282 -430.

Hoeks, J., Analytical Solutions for transport of conservation ... GR Water Systems, Wageningen, 16, 3, 1981, pp 339-350.

Hund-Der Yeh and Hung-Yuang Han., Numerical Identification of Parameters in Leaky aquifers. Ground Water, VOL. 27, N^o 5 - Setember-October, pp. 655-663, 1989.

Souza, I. A., Estudo do Comportamento Bi e Tridimensional do Fluxo em um Aquífero Aluvial adjacente ao Rio Paraíba na M.R.H. Agropastoril do baixo Paraíba. Dissertação de Mestrado na UFPb - CCT, Capina Grande, Pb, Brasil - 1991.

Javandel, I. and Tsang, Chin-Fu., Capture-Zone Type Curves: A Toll for Aquifer Cleanup. Ground Water, VOL. 24 N^o 5, Setember -

October, 1986.

Kashef, Ismael ; Ground Water Engineering ; McGrawHill; Hamburg
- 1986.

Kinzelbach, W., Groundwater Modelling, An Introduction with Sample
Programs in Basic, Development in Water Sciences, 26 - Elsevier,
Amsterdam, 1986.

Konietzko, H., Chloriated Ethanes: Source Distribution,
Environmental Impact and Health Efects; Hazard Assessment of
Chemicals: Current Developments, VOL. 3, Acad. Press Inc, 1984.

Lennox, D.H., Analysis and Application of step-drawdown test 1966.
J. Hydraul. Div., Proc. Am. Soc. Civ. Eng, p 172-174.

Linsley, R.K. e Franzini, J.B., Engenharia de Recursos Hídricos,
Ed. McGraw-Hill, São Paulo, 1987, pp. 99-135.

Mackay, D.M. and Cherry, J.A., Transport of Organic Contaminants in
Groundwater - Distribution and Fate of Chemicals in Sand Gravel
Aquifers. Environ. Sci. Technol., Vol. 19, n^o 5, 1985.

Machuca, M.M. y Casas, G.G., Aguas Subterráneas, II Curso
Internacional de Ingeniería de Regadíos - Programa Nacional de
Regadíos del Brasil (PRONI), 1987, p. 303.

Marino, M.A., Dynamic Response of Aquifers Systems to Localized Recharge, Water Resources Bull, Vol. 12, n. 1, Feb. 1976, pp 113- 129.

Mills, W.B., Liu, S., Fong, F.K., Literature Review and Model (COMET) for Colloid/Metals Transport in Porous Media. Ground Water, VOL. 29, N^o 2 - March-April 1991.

Moura, M.N.P., - Noções Básicas de Hidrologia, Hidrogeologia do Polígono das Sêcas e Métodos de Perfuração de Poços -Curso de Reciclagem para Engenheiros do PIASS, Montes Claros, Minas Gerais, 1979.

Moura, P.G.T., Efeitos de Fronteiras sobre a Vazão em Aquíferos Livres. Tese de Mestrado. UFPB-CCT, Campina Grande/Pb - Brasil. 1983, p. 69.

Muskat, U., The Flow of Homogeneous Fluids Through Porous Media. J. Inc. Ann. Arbor, Mich. 1946, p. 763.

Newman, S.P., Calibration of Distributed Parameter Groundwater Flow Models viewed as a multiple objective decision Processes under Uncertainty. Water resources Research VOL. 9 (4) pp. 1006-1021.

Newsom, J.M. and Wilson, J.L., Flow of Ground Water to a Well Near a Stream Effect of Ambient Ground Water Flow Direction. Ground Water, VOL. 26, N^o 6 - November- December, 1988.

Noyes Data Corporation ; Mill Road. Park Ridge, New Jersey, 07656
Library of Congress Cataloging in Publication Data
Decontamination Techniques for Buildings, Structure and Equipment/1987: MP Esposito, JL McArdle, AH Crone and JS Greber; 1987

Noyes Data Corporation ; Mill Road. Park Ridge, New Jersey, 07656
Library of Congress Cataloging in Publication Data GroundWater Contamination & Emergency Response Guide JH Guswa, WJ Lyman, AS Doningan, TYR Lo & EW Shenohan - 1984.

Oki, S.D. and Giambelluca, T.W., DBCP, EDB, and TCP Contamination of Ground Water in Hawaii. Ground Water, VOL. 25, N^o 6 - November-December, pp. 693-702, 1987.

Palacios, Vélez O., Uso de la Analogia Electrica para el Estudio del Movimiento de Aguas Subterranas. Escola Nacional de Agricultura - Chapingo, México - 1973, p. 46.

Peter S.Huyakorn & George F.Pinder; Computational Methods in Subsurface Flow - Academic Press, New York, 1983 ISBN 0-12-363480-6.

Kochina, P.Y. Polubarinova, Theory of Groundwater Movement. Translated by J.M. Roger de Wiest. Princeton, N. J. 1962 (Original Russo).

Prickett, T.A., Modeling Techniques for Groundwater Evaluation in Advances in Hydroscience, ed. por V.T.Chow, Academic Press. New York. 1975, pp 1-128.

Rebouças, A.C., Técnicas de Modelação Matemática de Uso Conjunto Superficial e Água Subterrânea, I Curso de Métodos Avançados Hidrologia Aplicada, Campina Grande, 1987, p. 30.

Rebouças, Aldo de Cunha de, Instituto de Geociências da USP, São Paulo "Palestra dada no dia 16 de outubro de 1990 no Seminário sobre Métodos e Conteudos no Ensino de Hidrologia e Recursos Hídricos no Nordeste do Brasil"

Recuperação de área Contaminada com Vazamento Acidentais de Produtos Químicos, no Polo Cloroquímico de Alagoas. Relatório Final, Paranaguá, Dezembro de 1991.

Relatórios da Ambiterra - Tecnologia de Meio Ambiente, 1990.

Remson I, Hornberger GM & Molz, FJ Numerical Methods in Subsurface Hydrology ; Wiley Inter Sciece; NEW YORK.

Rhuston, K.R. and Holt, S.M., Estimating Aquifer Parameters for Wells, GROUND WATER, vol. 19, pp 505-509.

Robins, G.A., Influence of Using Purged and Partially Penetrating Monitoring Wells on Contaminant Detection, Mapping, and Modeling. Ground Water, VOL. 27, N^o 2 - March-April, pp.155-162, 1989.

Saldanha, L.A.R.; Cavalcante, A.T., Wanderley, P.R.M., Rocha, F.C., Grupo Barreiras, Contribuição ao Conhecimento no estado de Alagoas. VII Simpósio de Geologia do Nordeste, 1975. Atas pp. 113-119.

Sarma, S.V.K., Drawdowns in Well Fields due to Simultaneous Pumping in Semi Arid NE Brasil by Finite Diference Method, International Conference on Grondwater & Environment, Kaulalumpur, Malayasia, 22-26, June, 1987.

Sarma, S.V.K., Mathematical modelling of Aquifer System of Irragated Perimeter of DNOCS, Sume, Pb, XII Congresso latino Americano de Hidráulica, São Paulo, pp 250-259.

Sarma, S.V.K., Velocidades e Vazões Espaciais A Partir de Cargas Hidráulicas, IX Congresso Latino Americano e Iberico sobre Métodos Computacionais em Engenharia, MECOM, Cordoba, Argentina, 8-11, Nov. 1988.

Sarma, S.V.K. e Alves, I.S., Distribuição Bi-dimensional das Cargas num Aquífero adjacente ao Rio na Micro-Região Homogênea N^o 99, Paraíba, ABRH, São Paulo, IX Simpósio de recursos Hídricos, 9-14, Nov. 1991, Rio de Janeiro.

Sarma, S.V.K. e Figueiredo, J.W.G., Investigação de Águas Subterrâneas no Semi-Árido Paraibano na MRH de Catolé do Rocha, Simpósio Internacional sobre Métodos e Instrumentos para Uso em Água Subterrânea, Holanda, 1983, pp. 232-242.

Sarma, S.V.K. e Alves, I.S., Spatial Velocities in Aquifers with 2-Dimensional Behavior. International Conference on Environmental Management - Geo-Water & Engineering Aspects, 8-11, Fev. 1993, Univ. Of Wollongong, Australia.

Sarma, S.V.K. e Singh, V.P., Variational Method for Earth Dam Breach Analysis, Geo-Mechanics & Water Engineering in Environmental Management, Univ. de Wologong, Australia. Editora: A.A. Balkema, Rotterdam, June, 1992, pp 71-102.

Sarma, S.V.K. e Silva, T.C., Uso de Elementos Finitos em Modelos de Resistores Capacitores de Barragem de Terra, VI Conf. Internacional de Elementos Finitos em Recursos Hídricos, Lisboa, 1985, pp. 325-336.

Sarma, S.V.K. e Silva, T.C., Perdas da Água em Solos Extratificados, XII Congresso Latino Americano de Hidráulica, São Paulo, pp. 434-442.

Sarma, S.V.K. e Silva, T.C., Resposta Hidráulica do Aquífero ao Bombeamento, ABAS, n. 11, 1987, pp 26-32.

Shaw, J., Reverse Phatline Calculation of Time- Related Capture Zones in Nonuniforme Flow. Ground Water, Vol. 25 N^o 3, May-june, 1987.

Scheiddegar, A.E., The physics of flow through porous media 2nd Ed.

Silva, R.B.G., As Águas Subterrâneas: um valioso recurso que requer proteção, Lima, 1986, p. 25.

Souza, I. A., Estudo do Comportamento Bi e Tridimensional do Fluxo em um Aquífero Aluvial adjacente ao Rio Paraíba na M.R.H. Agropastoril do baixo Paraíba. Dissertação de Mestrado na UFPb - CCT, Capina Grande, Pb, Brasil - 1991.

Strack, D L Otto, Ground Water Mechanics, Printice Hall, New Jersey, 1989.

SUDENE, Águas Subterrâneas do Nordeste, Conhecimento e Uso, 10^o Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas, Recife, 1980, p. 6.

Sunada, D., Turbulent flow through porous media Water Resources Center No. 103 Univ. of Berkeley 1965.

Theis, C.V., The Relation Between the Lowering of the Piezometric Surface and the Rate and Duration Discharge of a Well Using Groundwater Storage. Am. Geophys. Union Trans. Vol. 16, 1935, pp. 519-524.

Theim, A., Hydrologist Methoden, Gebardt, Leipzig, 1906.

Todd, D.K., Groundwater Hydrology. New York, NY. John Wiley and Sons, 1980.

Todd, D.K. and J. Bear. Seepage Through Layered Anisotropic Porous Media. J. Hydraulics. Div. Am. Soc. Civil Eng. n. 87 (Hy 3), 1961, pp 31-57.

U.S. Environmental Protection Agency. Model Assessment for Delineating Wellhead Protection Areas. Office of Groundwater Protection, Washington, D.C. 1988.

Unep, Programa das Nações Unidas para a Proteção do Meio Ambiente.

Varljen, M.D. and Shafer, J.M., Assessment of Uncertainty in Time-Related Capture Zones Using Conditional Simulation of

Hidralic Conductivity. Ground Water, VOL. 29, N^o 5 -
September-October, pp. 737-748, 1991.

Verruijt, A., Theory of Groundwater Flow, 2nd ed, Macmillan,
London, 1982.(1850-6030).

Vrba, J & E. Romijn, Impact of Agricultural Activities on Ground
Water Flow International Assn. of Hydrogeologist.

Wanderley, P.R., Lima, R.C. de, Neto, J.V.F., Rocha, D.V., Estudo
Hidrogeológico Preliminar da área do Polo Cloroquímico de Alagoas.
Revista de Geociências da UFAL, Maceió / AL, n^o 03, pp. 01-13,
1990.

Wang, A., Introduction to Groundwater Modelling, Finite
Difference and Finite Element Method, Freeman and Co. S.
Francisco, 1982.

Zimbelmann, Ruprecht, Burgbacher, Gunter: Resistence of Normal
Concrete to Chlorinnated Hydrocarbons; Beton Stahlbeton, VOL. 85,
N^o 1, Jan. pp. 5-9, 1990.

ANEXOS

ANEXO I - DADOS DE ENTRADA PARA CALIBRAÇÃO DO MODELO DE FLUXO

CALIBRAÇÃO INICIAL SEM PERDAS LOCALIZADAS NO POÇO DE PRODUÇÃO

GRIDPARAMETERS :
=====

TYPE OF MODEL :
CONFINED AQUIFER = 0
PHREATIC AQUIFER = 1 :? 1
ISOTROPIC AQUIFER = 0
ANISOTROPIC AQUIFER = 1 :? 0
NUMBER OF NODES X-DIRECTION :? 9
NUMBER OF NODES Y-DIRECTION :? 9
INCREMENT X-DIRECTION (M) :? 20
INCREMENT Y-DIRECTION (M) :? 20

CORRECT ? (Y/N) : ? Y

TIMEPARAMETERS AND ITERATIONPARAMETERS
=====

NUMBER OF PUMPING INTERVALS (>0) : ? 1
NUMBER OF TIMESTEPS WITHIN
ONE PUMPING INTERVAL (>0) : ? 4
MULTIPLIER FOR TIMESTEPS WITHIN
ONE PUMPING INTERVAL : ? 4
NUMBER OF TIME-VARYING
DIS(RE)CHARGES : ? 1
MAXIMUM NUMBER OF ITERATIONS : ? 100
MAXIMUM NODAL ERROR (M) : ? 0.01

CORRECT ? (Y/N) : ? Y

TIME SCHEDULE OF PUMPING INTERVALS
=====

PUMPING PERIOD NR. 1 LENGTH (DAYS) :? 0.25

CORRECT ? (Y/N) : ? Y

RECHARGE/DISCHARGE WELLS
=====

(DISCHARGE <0, RECHARGE >0)

WELL NR. : 1

X-INDEX OF NODE : ? 5

Y-INDEX OF NODE : ? 5

RATE (M³/S) IN PUMPING PERIOD

NR. 1 : ? -0.011

CORRECT ? (Y/N) : ? Y

INPUT OF DISTRIBUTED DATA
=====

EXIT FROM MENUE (0)

INITIAL PIEZOMETERHEADS (1)

PERMEABILITIES KFXX (2)

STORAGE COEFFICIENTS (3)

DIFFUSE RE(DIS)CHARGE (4)

LEAKAGE COEFFICIENTS (5)

WATERLEVELS SURFACE WATERS (6)

BOTTOMLEVELS SURFACE WATERS (7)

BOTTOM OF AQUIFER (8)

CHOICE : ? 1

INITIAL PIEZOMETERHEADS (M)
=====

DEFAULT VALUE : ? 25

HOMOGENEOUS DISTRIBUTION ? (Y/N) : ? Y

PERMEABILITY KFXX (M/SEC)

=====

DEFAULT VALUE : ? 0.000072

HOMOGENEOUS DISTRIBUTION ? (Y/N) : ? N

123456789

- 1.....
- 2.....
- 3.....
- 4.....
- 5.....*
- 6...*.....
- 7.....
- 8.....
- 9.....

STORAGE COEFFICIENTS

=====

DEFAULT VALUE : ? 0.0485

HOMOGENEOUS DISTRIBUTION ? (Y/N) : ? N

123456789

- 1.....
- 2.....
- 3.....
- 4.....
- 5.....*
- 6...*.....
- 7.....
- 8.....
- 9.....

AQUIFERBOTTOM (M)

=====

DEFAULT VALUE : ? 18

HOMOGENEOUS DISTRIBUTION ? (Y/N) : ? Y

GROUNDWATER FLOW MODEL
FOR CONFINED, PHREATIC AND LEAKY AQUIFERS

BY THE IADI METHOD

SAM 6 - 2.

PIEZOMETER HEADS (M)

TIME = .25 DAYS

25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	24.9	24.8	24.9	25	25	25
25	25	24.9	24.6	23.7	24.6	24.9	25	25
25	24.9	24.8	23.7	9.3	23.7	24.8	24.9	25
25	25	24.9	24.6	23.7	24.6	24.9	25	25
25	25	25	24.9	24.8	24.9	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25

?H(5,5)		?H(6,4)		?H(5,7)
TP-1 - 9.25		PZ-1 - 24.62		MW-2 - 24.76

CALIBRAÇÃO FINAL TOMANDO-SE AS COMPONENTES DAS PERDAS NO POÇO DE
PRODUÇÃO

GRIDPARAMETERS :

=====

TYPE OF MODEL :

CONFINED AQUIFER = 0
PHREATIC AQUIFER = 1 :? 1
ISOTROPIC AQUIFER = 0
ANISOTROPIC AQUIFER = 1 :? 0
NUMBER OF NODES X-DIRECTION :? 9
NUMBER OF NODES Y-DIRECTION :? 9
INCREMENT X-DIRECTION (M) :? 20
INCREMENT Y-DIRECTION (M) :? 20

CORRECT ? (Y/N) : ? Y

TIMEPARAMETERS AND ITERATIONPARAMETERS

=====

NUMBER OF PUMPING INTERVALS (>0) : ? 1
NUMBER OF TIMESTEPS WITHIN
ONE PUMPING INTERVAL (>0) : ? 4
MULTIPLIER FOR TIMESTEPS WITHIN
ONE PUMPING INTERVAL : ? 4
NUMBER OF TIME-VARYING
DIS(RE)CHARGES : ? 1
MAXIMUM NUMBER OF ITERATIONS : ? 100
MAXIMUM NODAL ERROR (M) : ? 0.01

CORRECT ? (Y/N) : ? Y

TIME SCHEDULE OF PUMPING INTERVALS

=====

PUMPING PERIOD NR. 1 LENGTH (DAYS) :? 0.25

CORRECT ? (Y/N) : ? Y

RECHARGE/DISCHARGE WELLS

=====

(DISCHARGE <0, RECHARGE >0)

WELL NR. : 1

X-INDEX OF NODE : ? 5

Y-INDEX OF NODE : ? 5

RATE (M³/S) IN PUMPING PERIOD

NR. 1 : ? -0.011

CORRECT ? (Y/N) : ? Y

INPUT OF DISTRIBUTED DATA

=====

EXIT FROM MENUE (0)

INITIAL PIEZOMETERHEADS (1)

PERMEABILITIES KFXX (2)

STORAGE COEFFICIENTS (3)

DIFFUSE RE(DIS)CHARGE (4)

LEAKAGE COEFFICIENTS (5)

WATERLEVELS SURFACE WATERS (6)

BOTTOMLEVELS SURFACE WATERS (7)

BOTTOM OF AQUIFER (8)

CHOICE : ? 1

INITIAL PIEZOMETERHEADS (M)

=====

DEFAULT VALUE : ? 25

HOMOGENEOUS DISTRIBUTION ? (Y/N) : ? Y

PERMEABILITY KFXX (M/SEC)

=====
DEFAULT VALUE : ? 0.000066294
HOMOGENEOUS DISTRIBUTION ? (Y/N) : ? N

123456789
1.....
2.....
3.....
4.....
5.....*..
6...*.....
7.....
8.....
9.....

STORAGE COEFFICIENTS

=====
DEFAULT VALUE : ? 0.0486
HOMOGENEOUS DISTRIBUTION ? (Y/N) : ? N

123456789
1*.....*
2*.....*
3*.....*
4*.....*
5*.....*
6*.....*
7*.....*
8*.....*
9*.....*

AQUIFERBOTTOM (M)

=====

DEFAULT VALUE : ? 18

HOMOGENEOUS DISTRIBUTION ? (Y/N) : ? Y

GROUNDWATER FLOW MODEL
FOR CONFINED, PHREATIC AND LEAKY AQUIFERS

BY THE IADI METHOD

SAM 6 - 2.

PIEZOMETER HEADS (M)

TIME = .25 DAYS

25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	24.9	25	25	25	25
25	25	25	24.9	24.7	24.9	25	25	25
25	25	24.9	24.5	23.4	24.5	24.9	25	25
25	24.9	24.7	23.4	13.7	23.4	24.7	24.9	25
25	25	24.9	24.6	23.4	24.5	24.9	25	25
25	25	25	24.9	24.7	24.9	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25
25	25	25	25	25	25	25	25	25

?H(5,5) ; ?H(6,4) ; ?H(5,7)
TP-1 - 13.70 ; PZ-1 - 24.62 ; MW-2A - 24.76

ANEXO II - DADOS DE ENTRADA PARA CALIBRAÇÃO DO MODELO DE
- TRANSPORTE E CONCENTRAÇÕES SIMULADAS

DADOS DE ENTRADA PARA CALIBRAÇÃO DO MODELO DE TRANSPORTE
PARA O COMPOSTO 1,2 - DCE

DATA

GRIDPARAMETERS (DX, DY, IN M)

DATA 16, 17, 70, 35

NUMBER OF SOURCES

DATA 1

DISPERSIVITIES (AL, AQ, IN M)

DATA 50, 5

VELOCITIES (U_x , U_y IN M/D)

DATA 0.67, 0

THICKNESS OF FLOW (M)

EFFECTIVE POROSITY (-)

DECAY CONSTANT (1/D)

DATA 20, 0.04866, 0

MAXIMUM SIMULATION TIME (D)

DATA 914

DIFERENCE SCHEME (UPWIND 1 OU CENTERED 2)

DATA 1

SOURCES (SOURCE STRENGTH IN G/D)

DATA 3, 9, 116

CONCENTRAÇÕES SIMULADAS PARA O 1,2 DCE EM G/M³

0
1.227812E-05
3.423313E-05
6.678646E-05
1.082031E-04
1.537836E-04
1.966263E-04
2.293148E-04
2.45962E-04
2.438647E-04
2.241639E-04
1.913076E-04
1.51568E-04
1.111471E-04
7.435593E-05
4.198104E-05
0
5.020081E-05
1.394367E-04
2.704719E-04
4.352791E-04
6.146323E-04
7.817237E-04
9.087469E-04
9.742139E-04
9.685121E-04
8.958998E-04
7.724641E-04
6.209435E-04
4.641258E-04
3.183248E-04
1.873137E-04
0
2.216272E-04
6.115976E-04
1.174328E-03
1.866949E-03
2.60336E-03
3.273287E-03
3.769457E-03
4.014064E-03
3.976624E-03
3.678453E-03 - MW - 5
3.183397E-03
2.578437E-03
1.949887E-03
1.359811E-03
8.235377E-04
0

9.168141E-04
2.503038E-03
4.722514E-03
7.351214E-03
1.003084E-02
1.235912E-02
.0139849
1.468372E-02
1.439792E-02
1.323505E-02
1.142881E-02
9.274869E-03
7.057139E-03
4.975874E-03
3.077031E-03
0
3.597999E-03
9.662686E-03
1.769443E-02
2.658481E-02
3.500499E-02
4.173581E-02
4.589559E-02
4.706257E-02
4.529788E-02
4.107949E-02
3.516687E-02
.0284253
2.164084E-02
1.534214E-02
9.616077E-03
0
1.373481E-02
3.610359E-02
6.277253E-02
8.886874E-02
.1105188
.1252309
.1318644
.1304639
.1220357
.1082725
9.123114E-02
.0729846
5.527641E-02
3.918158E-02
2.471038E-02
0
5.234916E-02
.1358402
.2145388
.2745351
.312044
.3277486
.3242742 - MVC

.305145
.2743493
.2360727
.1944099
.1530096
.1146673
8.084547E-02
5.095891E-02
0
.1995554
.5491068
.7378518 - MW - 2A
.7484614
.7530255
.7106683
.6474477
.5718867
.4899568
.4065209
.325829
.2514525
.1858954
.1299419
8.147681E-02
0
.6745446
2.675356
2.048126
1.626492
1.327671
1.102244
.9208591
.7665986
.630448
.5084087
.3994703
.3040435
.2226516
.1546584
9.652102E-02
0
.1995554
.5491068
.7078518
.7104614
.717055
.7206683 - MW - 1A
.6474477
.5318867 - PVC
.4899568
.4065209
.3805829
.3614525
.3208954 - MW - 4
.1299419

8.147681E-02
0
5.234917E-02
.1358402
.2145388
.2745351
.3156441 - TP - 1
.3177486
.3242742
.305145
.2743493
.2360727
.1944099
.1530096
.1146673
8.084547E-02
5.095891E-02
0
1.373481E-02
3.610359E-02
6.277253E-02
8.886874E-02
.1105188
.1252309
.1318644
.1304639
.1220357
.1082725
9.123114E-02
.0729846
.0552764
3.918157E-02
2.471038E-02
0
3.597999E-03
9.662686E-03
1.769443E-02
2.658481E-02
3.500499E-02
4.173581E-02 - MW - 3
4.589559E-02
4.706257E-02
4.529788E-02
4.107949E-02
3.516687E-02
.0284253
2.164084E-02
1.534214E-02
9.616076E-03
0
9.168141E-04
2.503038E-03
4.722514E-03
7.351214E-03
1.003084E-02

1.235912E-02
.0139849
1.468372E-02
1.439792E-02
1.323505E-02
1.142881E-02
9.274869E-03
7.057139E-03
4.975874E-03
3.077031E-03
0
2.216272E-04
6.115976E-04
1.174328E-03
1.866949E-03
2.60336E-03
3.273287E-03
3.769457E-03
4.014064E-03
3.976623E-03 - MW - 8
3.678453E-03
3.183397E-03
2.578437E-03
1.949887E-03
1.359811E-03
8.235378E-04
0
5.020081E-05
1.394367E-04
2.704719E-04
4.352791E-04
6.146323E-04
7.817237E-04
9.087469E-04
9.742139E-04
9.685121E-04
8.958998E-04
7.724641E-04
6.209436E-04
4.641258E-04
3.183248E-04
1.873137E-04
0
1.227812E-05
3.423313E-05
6.678645E-05
1.082031E-04
1.537836E-04
1.966263E-04
2.293148E-04
2.45962E-04
2.438647E-04
2.241639E-04
1.913076E-04
1.51568E-04

1.111471E-04
7.435593E-05
4.198104E-05

DADOS DE ENTRADA PARA CALIBRAÇÃO DO MODELO DE TRANSPORTE
PARA O COMPOSTO 1,2 - DCP

DATA

GRIDPARAMETERS (DX, DY, IN M)

DATA 16, 17, 70, 35

NUMBER OF SOURCES

DATA 1

DISPERSIVITIES (AL, AQ, IN M)

DATA 50, 5

VELOCITIES (U_x , U_y IN M/D)

DATA 0.67, 0

THICKNESS OF FLOW (M)

EFFECTIVE POROSITY (-)

DECAY CONSTANT (1/D)

DATA 20, 0.04866, 0

MAXIMUM SIMULATION TIME (D)

DATA 914

DIFERENCE SCHEME (UPWIND 1 OU CENTERED 2)

DATA 1

SOURCES (SOURCE STRENGTH IN G/D)

DATA 3, 9, 435

CONCENTRAÇÕES SIMULADAS PARA 1,2 DCP EM G/M³

0
5.74534E-05
1.601882E-04
3.125161E-04
5.063183E-04
7.196046E-04
9.200801E-04
1.07304E-03
1.150938E-03
1.141124E-03
1.048938E-03
8.951918E-04
7.092371E-04
5.200942E-04
3.479362E-04
1.964433E-04
0
2.349063E-04
6.524707E-04
1.265628E-03
2.036816E-03
2.876069E-03
3.657946E-03
4.25233E-03
4.558672E-03
4.531991E-03
4.192214E-03
3.614617E-03
2.905602E-03
2.171799E-03
1.489548E-03
8.765034E-04
0
1.037067E-03
2.861869E-03
5.495074E-03
8.736074E-03
1.218199E-02
.0153168
1.763855E-02
1.878314E-02
1.860794E-02
.0178127 - MW - 5
1.489617E-02
1.206537E-02
9.124172E-03
6.363007E-03
3.853608E-03
0
4.290079E-03

1.171255E-02
2.209821E-02
3.439878E-02
4.693765E-02
5.783242E-02
6.543998E-02
6.871003E-02
6.737266E-02
6.193119E-02
5.347923E-02
.0434002
.0330227
2.328377E-02
1.439845E-02
0
1.683624E-02
4.521493E-02
8.279813E-02
.1243992
.1638
.1952958
.2147607
.2202214
.2119639
.1922246
.1645575
.1330115
.1012647
7.179096E-02
4.499682E-02
0
6.426974E-02
.1689407
.2937336
.4158464
.5171541
.585997
.6170373
.6104841
.5710458
.506643
.4269009
.3415192
.2586567
.1833436
.1156281
0
.2449592
.6356414
1.003899
1.284641
1.460158
1.563645
1.547387 - MVC
1.427875

1.283771
1.104663
.9097086
.7159828
.5365665
.3783028
.2384537
0
.933786
2.569454
3.312274
3.448452 - MW - 2A
3.523657
3.325454
3.029623
2.676048
2.292671
1.902246
1.524663
1.176632
.8698667
.6080413
.3812571
0
3.156418
12.51888
9.583861
7.610895
6.212614
5.157767
4.309006
3.58717
2.950076
2.379013
1.869255
1.422721
1.041861
.723698
.451654
0
.933786
2.569454
3.312274
3.558452
3.523657
3.425454 - MW - 1A
3.029623
2.506048 - PVC
2.292671
1.902246
1.524663
1.17663
.9388667 - MW - 4
.6080413
.3812571

0

.2449592
.6356414
1.003899
1.284641
1.460158
1.483645 - TP - 1
1.517387
1.427875
1.283772
1.104663
.9097087
.7159828
.5365665
.3783028
.2384537

0

6.426974E-02
.1689407
.2937336
.4158465
.5171541
.585997
.6170374
.6104842
.5710458
.506643
.4269009
.3415192
.2586567
.1833436
.1156281

0

1.683624E-02
4.521493E-02
8.279813E-02
.1243992
.1638
.1952958 - MW - 3
.2147607
.2202214
.2119639
.1922246
.1645575
.1330115
.1012647
7.179096E-02
4.499682E-02

0

4.290079E-03
1.171255E-02
2.209821E-02
3.439878E-02
4.693766E-02
5.783242E-02

6.543998E-02
6.871003E-02
6.737266E-02
6.193119E-02
5.347923E-02
.0434002
3.302271E-02
2.328377E-02
1.439845E-02
0
1.037068E-03
2.861869E-03
5.495074E-03
8.736074E-03
1.218199E-02
.0153168
1.763855E-02
1.878314E-02
1.910794E-02 - MW - 8
.0172127
1.489617E-02
1.206537E-02
9.124172E-03
6.363007E-03
3.853608E-03
0
2.349063E-04
6.524707E-04
1.265628E-03
2.036816E-03
2.87607E-03
3.657946E-03
4.25233E-03
4.558672E-03
4.531991E-03
4.192214E-03
3.614617E-03
2.905602E-03
2.171799E-03
1.489548E-03
8.765034E-04
0
5.74534E-05
1.601882E-04
3.125161E-04
5.063183E-04
7.196047E-04
9.200802E-04
1.07304E-03
1.150938E-03
1.141124E-03
1.048938E-03
8.951918E-04
7.092371E-04
5.200942E-04

3.479362E-04
1.964433E-04

DADOS DE ENTRADA PARA CALIBRAÇÃO DO MODELO DE TRANSPORTE
PARA O COMPOSTO 1,2,3 - TCP

DATA

GRIDPARAMETERS (DX, DY, IN M)

DATA 16, 17, 70, 35

NUMBER OF SOURCES

DATA 1

DISPERSIVITIES (AL, AQ, IN M)

DATA 50, 5

VELOCITIES (U_x , U_y IN M/D)

DATA 0.67, 0

THICKNESS OF FLOW (M)

EFFECTIVE POROSITY (-)

DECAY CONSTANT (1/D)

DATA 20, 0.04866, 0

MAXIMUM SIMULATION TIME (D)

DATA 914

DIFERENCE SCHEME (UPWIND 1 OU CENTERED 2)

DATA 1

SOURCES (SOURCE STRENGTH IN G/D)

DATA 3, 9, 283.5

CONCENTRAÇÕES SIMULADAS PARA O 1,2,3 - TCP EM G/M³

0

3.061085E-05

8.534739E-05

1.665068E-04

2.697636E-04

3.834013E-04

4.902136E-04

5.717098E-04

6.132134E-04

6.079847E-04

5.588681E-04

4.769532E-04

3.778776E-04

2.771033E-04

1.853785E-04

1.046639E-04

0

1.251568E-04

3.476328E-04

6.743195E-04

1.085204E-03

1.532354E-03

1.948933E-03

2.265617E-03

2.428835E-03

2.414619E-03

2.233588E-03

1.925848E-03

1.548088E-03

1.157122E-03

7.936228E-04

4.669961E-04

0

5.525438E-04

1.524788E-03

2.927745E-03

4.654532E-03

6.490494E-03

8.160706E-03

9.397718E-03

1.000755E-02

9.914208E-03

9.170832E-03 - MW - 5

7.936597E-03

6.42836E-03

4.861308E-03

3.390174E-03

2.053181E-03

0
2.28573E-03
6.24038E-03
.0117738
1.832748E-02
2.500812E-02
3.081279E-02
3.486606E-02
3.660832E-02
3.589578E-02
3.299659E-02
2.849343E-02
2.312338E-02
1.759431E-02
1.240546E-02
7.671416E-03
0
8.970252E-03
2.409026E-02
4.411438E-02
.0662792
8.727174E-02
.1040525
.1144233
.1173327
.1129332
.1024162
8.767531E-02
7.086776E-02
5.395326E-02
3.824983E-02
2.397406E-02
0
3.424256E-02
9.001068E-02
.1564996
.2215607
.2755368
.3122159
.3287541
.3252626
.30425
.2699365
.2274504
.1819595
.1378108
9.768445E-02
.061606
0
.1305129
.3386662
.5348715
.6844497
.7779641
.8171173 - MVC

.8084553
.7607638
.6839863
.5885581
.4846877
.3814716
.2858796
.2015576
.1270468

0

.497516
1.368991
1.894761 - MW - 2A
1.885923
1.877385
1.771783
1.614166
1.425783
1.221522
1.013506
.8123316
.6269019
.4634601
.3239611
.2031317

0

1.681722
6.669989
5.106228
4.055043
3.310046
2.74803
2.295815
1.911224
1.571784
1.267525
.9959284
.7580177
.5550978
.3855823
.2406388

0

.497516
1.368991
1.764761
1.895923
1.977385
1.895983 - MW - 1A
1.484166
1.371783
1.327182 - PVC
1.013506
.8823316
.6669019
.5434601

.49239611 - MW - 4

.2031317

0

.1305129

.3386662

.5348715

.6844497

7771741 - TP - 1

.7971174

.8084553

.7607638

.6839863

.5885581

.4846877

.3814716

.2858796

.2015576

.1270468

0

3.424256E-02

9.001068E-02

.1564996

.2215607

.2755368

.3122159

.3287541

.3252626

.30425

.2699365

.2274504

.1819595

.1378108

9.768445E-02

.061606

0

8.970252E-03

2.409026E-02

4.411438E-02

.0662792

9.727174E-02 - MW - 3

.1040525

.1144233

.1173327

.1129332

.1024162

8.767531E-02

7.086776E-02

5.395327E-02

3.824983E-02

2.397406E-02

0

2.28573E-03

6.24038E-03

.0117738

1.832748E-02

2.500812E-02
3.081279E-02
3.486605E-02
3.660832E-02
3.589578E-02
3.299659E-02
2.849343E-02
2.312338E-02
1.759431E-02
1.240546E-02
7.671415E-03
0
5.525438E-04
1.524788E-03
2.927745E-03
4.654532E-03
6.490494E-03
8.160706E-03
9.397718E-03
1.000755E-02
9.914208E-03
9.170832E-03
7.936597E-03
6.42836E-03
4.861308E-03
3.390174E-03
2.053181E-03
0
1.251568E-04
3.476328E-04
6.743195E-04
1.085204E-03
1.532354E-03
1.948933E-03
2.265617E-03
2.428835E-03
2.414619E-03
2.233588E-03
1.925847E-03
1.548088E-03
1.157122E-03
7.936228E-04
4.669961E-04
0
3.061085E-05
8.534739E-05
1.665068E-04
2.697636E-04
3.834013E-04
4.902135E-04
5.717098E-04
6.132134E-04
6.079847E-04
5.588681E-04
4.769532E-04

3.778776E-04
2.771033E-04
1.853785E-04
1.046639E-04

DADOS DE ENTRADA PARA CALIBRAÇÃO DO MODELO DE TRANSPORTE
PARA OS ORGANOS TOTAIS

DATA

GRIDPARAMETERS (DX, DY, IN M)

DATA 25, 17, 70, 35

NUMBER OF SOURCES

DATA 1

DISPERSIVITIES (AL, AQ, IN M)

DATA 50, 5

VELOCITIES (U_x , U_y IN M/D)

DATA 0.67, 0

THICKNESS OF FLOW (M)

EFFECTIVE POROSITY (-)

DECAY CONSTANT (1/D)

DATA 20, 0.04866, 0

MAXIMUM SIMULATION TIME (D)

DATA 914

DIFERENCE SCHEME (UPWIND 1 OU CENTERED 2)

DATA 1

SOURCES (SOURCE STRENGTH IN G/D)

DATA 3, 9, 3336

CONCENTRAÇÕES SIMULADAS PARA ORGANO TOTAIS EM G/M³

0

1.702183E-04
4.935329E-04
1.024009E-03
1.796232E-03
2.800582E-03
3.964625E-03
5.152569E-03
6.188304E-03
6.897321E-03
7.153795E-03
6.915896E-03
6.236408E-03
5.245291E-03
4.111608E-03
2.999235E-03
2.031429E-03
1.273754E-03
7.365205E-04
3.908221E-04
1.891484E-04
8.284918E-05
3.25094E-05
1.117855E-05
2.423588E-06

0

6.841298E-04
1.985383E-03
4.122337E-03
7.228906E-03
1.125088E-02
1.587937E-02
.0205654
2.462417E-02
2.739874E-02
.0284293
2.757106E-02
.0250229
2.126127E-02
1.690622E-02
1.256732E-02
8.717972E-03
5.62995E-03
3.373873E-03
1.868728E-03
9.518904E-04
4.431459E-04
1.870042E-04
7.008143E-05
1.739275E-05

0
2.930203E-03
8.515474E-03
1.769704E-02
3.099814E-02
4.804552E-02
6.735799E-02
8.653453E-02
.1027755
.1135548
.1172294
.1134081
.1029849 - MW - 5
8.785109E-02
.0703929
5.293838E-02
3.731119E-02
2.459385E-02
1.511974E-02
8.639742E-03
4.569392E-03
2.225117E-03
9.907376E-04
3.95541E-04
1.085156E-04
0
.011504
3.353015E-02
6.983927E-02
.1221328
.1878591
.2601088
.3292056
.3850723
.4195538
.4281176
.4105999
.3709177
.3159155
.2537104
.191998
.1367365
9.147173E-02
5.733808E-02
3.357658E-02
1.830069E-02
9.242564E-03
4.299027E-03
1.807188E-03
5.383115E-04
0
4.132072E-02
.1212579
.2541917
.4442258

.674212
.9131064
1.126276
1.283875
1.366216
1.366214
1.289232
1.150764
.972622
.7784631
.589619
.422067
.2850201
.1811547
.1080657
6.030408E-02
3.135463E-02
1.510685E-02
6.621784E-03
2.109742E-03
0
.135964
.4053457
.8649408
1.519726
2.250639
2.92986
3.460218
3.783977
3.880583
3.760791
3.45941
3.027126
2.521698
1.9993
1.507151
1.078609
.7313769
.4687721
.2832265
.1608019
8.547592E-02
4.232338E-02
1.917211E-02
6.444849E-03
0
.405492
1.252202
2.798622
5.063759
7.11551
8.604504
9.449494
9.687531
9.326338 - MVC

8.715397
7.733094
6.578738
5.364849
4.189021
3.126593
2.22601
1.508156
.9698108
.5902042
.3388654
.1829066
9.236109E-02
.0428638
1.500059E-02
0
1.044138
3.468595
8.677468
17.66781
20.25005
21.08759 - MW - 2A
22.01854
20.5252
18.49638
16.17271
13.72383
11.28535
8.971792
6.876469
5.066338
3.577289
2.413341
1.550758
.9461414
.5462943
.2974514
.1519971
7.162118E-02
2.572506E-02
0
1.95774
7.418708
23.77761
75.31541
58.00928
46.22835
37.75664
31.27755
26.01548
21.5283
17.58316
14.07721
10.98285
8.307658

6.065333
4.256805
2.86115
1.835205
1.119478
.6471897
.3533128
.181261
8.587121E-02
3.114079E-02
0
1.044138
3.468595
8.677468
17.66781
21.55005
22.58759
22.01854
20.9602 - MW - 1A
18.49638
15.22271 - PVC
14.22383
11.22535
8.971792
6.876469
5.346338 - MW - 4
3.577289
2.413341
1.550758
.9461414
.5462943
.2974514
.1519971
7.162116E-02
2.572506E-02
0
.4054919
1.252202
2.798622
4.063759
6.11551
7.604504
8.049493
8.953531 - TP - 1
9.406338
8.715397
7.733094
6.578738
5.364849
4.189021
3.126593
2.22601
1.508156
.9698108
.5902042

.3388654
.1829066
9.236109E-02
.0428638
1.500059E-02
0
.135964
.4053457
.8649408
1.519726
2.250639
2.92986
3.460218
3.783977
3.880583
3.760791
3.45941
3.027126
2.521698
1.9993
1.507151
1.078609
.7313769
.4687721
.2832265
.1608019
8.547592E-02
4.232338E-02
1.917211E-02
6.444849E-03
0
4.132072E-02
.1212579
.2541917
.4442258
.674212
.9131064
1.126276
1.163875 - MW - 3
1.366216
1.366214
1.289232
1.150764
.9726221
.7784631
.589619
.422067
.2850201
.1811547
.1080657
6.030408E-02
3.135463E-02
1.510685E-02
6.621784E-03
2.109742E-03

0

.011504
3.353015E-02
6.983927E-02
.1221328
.1878591
.2601088
.3292056
.3850723
.4195538
.4281176
.4105999
.3709177
.3159155
.2537104
.191998
.1367365
9.147173E-02
5.733808E-02
3.357658E-02
1.830069E-02
9.242562E-03
4.299027E-03
1.807188E-03
5.383115E-04

0

2.930203E-03
8.515474E-03
1.769704E-02
3.099814E-02
4.804552E-02
6.735799E-02
8.653453E-02
.1027755
.1135548
.1172294
.1234081 - MW - B
.1029849
8.785109E-02
.0703929
5.293838E-02
.0373112
2.459385E-02
1.511974E-02
8.639742E-03
4.569391E-03
2.225117E-03
9.907376E-04
3.95541E-04
1.085156E-04
0
6.841298E-04
1.985383E-03
4.122337E-03
7.228907E-03

1.125088E-02
1.587937E-02
.0205654
2.462417E-02
2.739874E-02
.0284293
2.757106E-02
.0250229
2.126127E-02
1.690622E-02
1.256732E-02
8.717972E-03
5.62995E-03
3.373873E-03
1.868727E-03
9.518903E-04
4.431458E-04
1.870042E-04
7.008142E-05
1.739274E-05
0
1.702183E-04
4.93533E-04
1.024009E-03
1.796232E-03
2.800582E-03
3.964625E-03
5.152569E-03
6.188304E-03
6.897321E-03
7.153795E-03
6.915896E-03
6.236408E-03
5.245292E-03
4.111608E-03
2.999235E-03
2.031429E-03
1.273754E-03
7.365204E-04
3.90822E-04
1.891484E-04
8.284918E-05
3.25094E-05
1.117855E-05
2.423588E-06

ANEXO III - OS OPERADORES : GRADIENTE E DIVERGENTE

ANEXO III - OS OPERADORES: GRADIENTE E DIVERGENTE.

Neste anexo, pretende-se dar ao leitor os fundamentos básicos dos operadores "gradiente" e "divergente". Assume-se que o leitor tenha conhecimento sobre grandezas escalares e vetoriais e também a respeito das operações fundamentais com estas grandezas, como produto escalar, soma vetorial e produto vetorial.

No sistema cartesiano, todo vetor u pode ser decomposto em três componentes ortogonais:

$$u = u_x \vec{i} + u_y \vec{j} + u_z \vec{k}$$

onde u_x , u_y e u_z são os módulos das componentes; i , j e k , vetores unitários de direções x , y e z , respectivamente.

O operador ∇ é um operador vetorial, que decomposto nas direções x , y e z , pode ser simbolizado por:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$$

quando o operador ∇ opera sobre uma grandeza escalar, o resultado é o gradiente. seja por exemplo, T = temperatura. Então ∇T é o gradiente de temperatura ($\nabla T = \text{grad } T$).

Para efetuar a operação, basta operar ∇ sobre T, isto é:

$$\nabla T = \frac{\partial T}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial T}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial T}{\partial z} \vec{k} = \text{vetor}$$

Vê-se, então, que o gradiente é o resultado da operação de ∇ sobre uma grandeza escalar e o resultado é uma grandeza vetorial. Não é possível obter-se o gradiente de uma grandeza vetorial. No exemplo visto, a temperatura é grandeza escalar e o gradiente de temperatura é uma grandeza vetorial, com módulo, direção e sentido..

O potencial de água do solo ψ é escalar (energia). Seu gradiente $\nabla \psi$ é o vetor (força).

Muitas vezes, para simplificar a notação, não se indicam os vetores unitários, mesmo porque seus módulos são unitários. Frequentemente, também se deseja o gradiente de uma direção apenas.

A equação de Darcy pode, então, ser apresentadas nas seguintes formas:

$$q = -k \frac{\partial \psi}{\partial x} = -k \text{ grad } \psi = -k \nabla \psi$$

Quando o operador ∇ opera sobre um vetor na forma de produto escalar de vetores, o resultado é o divergente da

velocidade. Seja por exemplo, \vec{v} = velocidade. Então $\nabla \cdot \vec{v}$ é o divergente da velocidade.

$$\nabla \cdot \vec{v} = \text{div } \vec{v}$$

onde o ponto \cdot indica produto escalar de dois vetores.

Para efetuar a operação, basta efetuar o produto escalar de ∇ e \vec{v} . assim:

$$\nabla \cdot \vec{v} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \right) \cdot \vec{v} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} \cdot v_x \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} \cdot v_y \vec{j} + \dots$$

com $\vec{i} \cdot \vec{i} = \vec{j} \cdot \vec{j} = \vec{k} \cdot \vec{k} = 1$ (produto de vetores de mesmo sentido e direção), e com $\vec{i} \cdot \vec{j} = \vec{i} \cdot \vec{k} = \vec{k} \cdot \vec{j} = 0$ (produto de vetores perpendiculares), o resultado é:

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$$

Vê-se, então, que o divergente é o resultado da operação de ∇ sobre uma grandeza vetorial e é uma grandeza escalar. Para o

exemplo da velocidade, o seu divergente é uma medida da soma das variações de suas componentes ao longo das direções x, y e z.

Como o gradiente de um escalar é um vetor, pode-se obter o divergente do gradiente de um escalar. Por exemplo:

$T = \text{escalar}$

$\text{grad } T = \text{vetor}$

$\text{div} (\text{grad } T) = \text{escalar}$

Seguindo o mesmo raciocínio, $\nabla \cdot \nabla$ será:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \nabla^2 = \text{Laplaciano}$$

A equação da continuidade aplicada ao caso de fluxo em meio saturado, pode ser então escrita nas seguintes formas equivalentes:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \text{div} (\text{grad } \psi) = \nabla^2 \psi = 0$$

ANEXO IV - ABORDAGEM NUMÉRICA DO MODELO DE FLUXO ADOPTADO

Kinzelbach, 1986.

Os modelos numéricos, baseados no método das diferenças finitas, como foi visto no capítulo 3.6, discretiza no espaço e no tempo a equação parcial diferencial de fluxo.

As diferentes equações resultantes do processo de discretização podem ser obtidas aplicando-se o princípio da continuidade e a lei de Darcy para todas as células em um intervalo de tempo de comprimento Δt , assumindo que o fluxo somente ocorrerá entre a célula de referência e as 4 células vizinhas, e uma possível recarga/descarga de superfície, na direção vertical, conforme a figura A4.1.

De acordo com o princípio da continuidade:

$$\Delta t (Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q) = [h_0(t + \Delta t) - h_0(t)] S_0 \Delta x \Delta y \quad (A4.0)$$

onde dh/dt é a variação do nível potenciométrico durante o intervalo Δt .

Usando a lei de Darcy (3.15), obtêm-se:

$$\begin{aligned} Q_1 &= \Delta x T_{10} \left[h_1(t') - h_0(t') \right] / \Delta y \\ Q_2 &= \Delta y T_{20} \left[h_2(t') - h_0(t') \right] / \Delta x \\ Q_3 &= \Delta x T_{30} \left[h_3(t') - h_0(t') \right] / \Delta y \\ Q_4 &= \Delta y T_{40} \left[h_4(t') - h_0(t') \right] / \Delta x \end{aligned} \quad (A4.1)$$

Os sinais de fluxo são definidos da seguinte forma: os fluxos positivos entram e os fluxos negativos saem da célula unitária. T_{10} , T_{20} , T_{30} e T_{40} são valores médios da transmissividade entre os nós da células vizinhas $0 \rightarrow 1$, $0 \rightarrow 2$, $0 \rightarrow 3$, $0 \rightarrow 4$ respectivamente.

A obtenção do valor médio da transmissividade entre os nós, é calculado pela média aritmética da seguinte forma:

$$T_{10} = (T_1 + T_0) / 2 \quad (A4.2)$$

onde T_i são as transmissividades locais ao redor do nó i . A média harmônica se mostra superior à média aritmética, pois permite a incorporação dos contornos impermeáveis de uma maneira simples.

$$T_{10} = 2 T_1 T_0 / (T_1 + T_0) \quad (A4.3)$$

Substituindo (A4.1) em (A4.0) e dividindo-se por $\Delta x \Delta y \Delta t$ obtém-se a equação de nó:

$$T_{10} \left[h_1(t') - h_0(t') \right] / \Delta y^2 + T_{20} \left[h_2(t') - h_0(t') \right] / \Delta x^2 + q_0 + T_{30} \left[h_3(t') - h_0(t') \right] / \Delta y^2 + T_{40} \left[h_4(t') - h_0(t') \right] / \Delta x^2 = (S_0 / \Delta t) \left[h_0(t + \Delta t) - h_0(t') \right] \quad (A4.4)$$

com $q_0 = Q / (\Delta x \Delta y)$

O fluxo externo q_0 independe da carga potenciométrica h e representa as taxas de recarga/descarga através do bombeamento, evaporação, precipitação e infiltração dos poços.

Conforme as figuras A4.2a e A4.2b, a transferência entre a nomenclatura local e global dos nós vizinhos para os níveis potenciométricos é feita da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
 h_0 & \rightarrow h_{i,j} \\
 h_1 & \rightarrow h_{i,j-1} \\
 h_2 & \rightarrow h_{i+1,j} \\
 h_3 & \rightarrow h_{i,j+1} \\
 h_4 & \rightarrow h_{i-1,j}
 \end{aligned}
 \tag{A4.5}$$

e as transmissividades na direções x e y:

$$\begin{aligned}
 T_{10} & \rightarrow T_{J_{i,j-1}} \\
 T_{20} & \rightarrow T_{I_{i,j}} \\
 T_{30} & \rightarrow T_{J_{i,j}} \\
 T_{40} & \rightarrow T_{I_{i-1,j}}
 \end{aligned}
 \tag{A4.6}$$

e finalmente:

$$\begin{aligned}
 S_0 & \rightarrow S_{i,j} \\
 q_0 & \rightarrow q_{i,j}
 \end{aligned}
 \tag{A4.7}$$

Depois da substituição em cada nó (i,j), adquire-se N equações para N valores desconhecidos de cargas potenciométricas $h_{ij}(t + \Delta t)$:

$$\begin{aligned}
 & T_{J_{i,j-1}} (h_{i,j-1}(t') - h_{i,j}(t')) / \Delta y^2 + \\
 & T_{I_{i,j}} (h_{i+1,j}(t') - h_{i,j}(t')) / \Delta x^2 + q_{i,j} \\
 & T_{J_{i,j}} (h_{i,j+1}(t') - h_{i,j}(t')) / \Delta y^2 + \\
 & T_{I_{i-1,j}} (h_{i-1,j}(t') - h_{i,j}(t')) / \Delta x^2 = \\
 & (S_{i,j} / \Delta t) (h_{i,j}(t+\Delta t) - h_{i,j}(t))
 \end{aligned}
 \tag{A4.8}$$

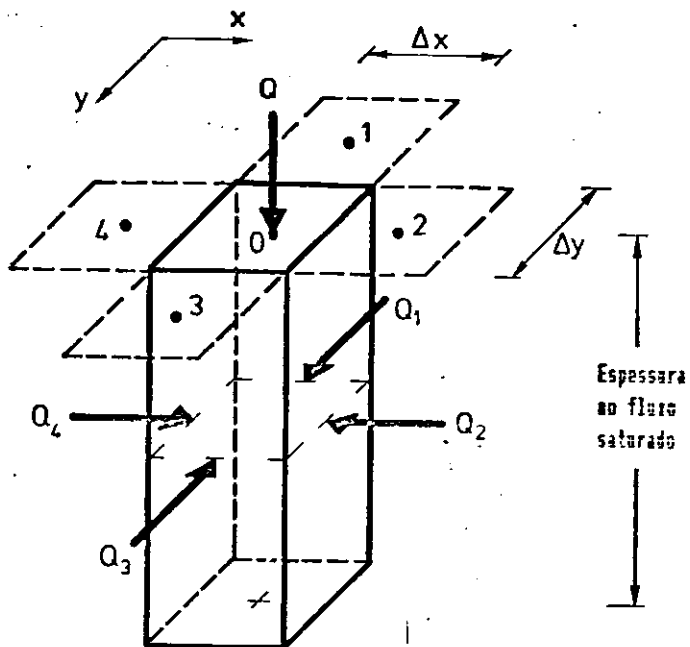


Figura A4.1 - Balanço d'água ao redor de uma célula nodal, (Kinzelbach, 1986)

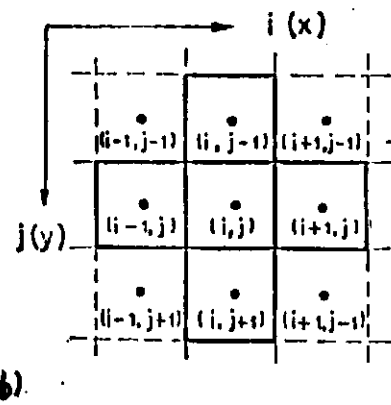
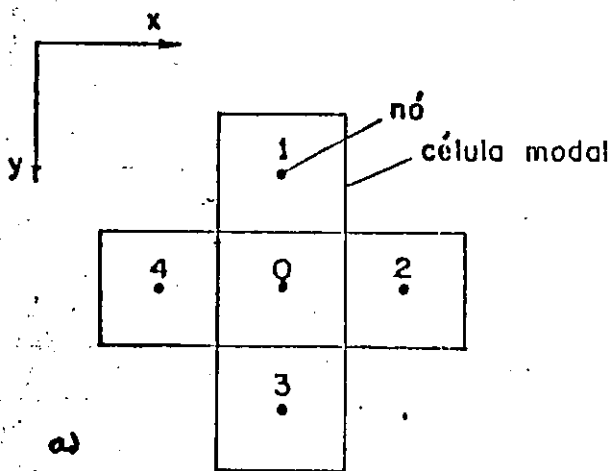


Figura A4.2 - a) Nomenclatura local; b) Nomenclatura global dos nós (Kinzelbach, 1986)

Entre os processos disponíveis para resolver a equação (A4.8) são os mais conhecidos, o método explícito e o método implícito. O último se divide em métodos diretos e iterativos. Dentre os iterativos, destacam-se como os mais usuais: método de Jacobi, Gauss-Seidel, Iterative Alternating Direction Implicit (IADI).

O método popular para resolver as equações nodais iterativamente é o IADI. Este, presta-se para solucionar as equações e procedimentos iterativos, visto que nas equações nodais da coluna i do gride, a equação (A4.9) obtida através do reordenamento da equação (A4.8), existem NY equações envolvendo NY cargas na coluna i a esquerda e NY cargas a direita da coluna.

$$\begin{aligned}
 & h_{i-1,j} (t+\Delta t) TI_{i-1,j} / \Delta x^2 + h_{i,j-1} (t+\Delta t) TJ_{i,j-1} / \Delta y^2 + \\
 & h_{i,j} (t+\Delta t) \left[-TI_{i-1,j} / \Delta x^2 - TI_{ij} / \Delta x^2 - TJ_{i,j-1} / \Delta y^2 - \right. \quad (A4.9) \\
 & \left. TJ_{ij} / \Delta y^2 - S_{ij} / \Delta t \right] + h_{i+1,j} (t+\Delta t) TI_{ij} / \Delta x^2 + \\
 & h_{i,j+1} (t+\Delta t) TJ_{i,j+1} / \Delta y^2 = -q_{ij} - h_{ij}(t) S_{ij} / \Delta t - h_{i+1,j} (t+\Delta t) TI_{i,j} / \Delta y^2
 \end{aligned}$$

com $j = 1..NY$

Similarmente, pode-se escrever os sistemas de equações para todos os nós na linha J , assim:.

$$\begin{aligned}
 & h_{i-1,j} (t+\Delta t) TI_{i-1,j} / \Delta x^2 + \\
 & h_{ij} (t+\Delta t) \left[-TI_{i-1,j} / \Delta x^2 - TI_{ij} / \Delta x^2 - TJ_{i,j-1} / \Delta y^2 - \right. \\
 & \left. TJ_{ij} / \Delta y^2 - S_{ij} / \Delta t \right] + h_{i+1,j} (t+\Delta t) TI_{ij} / \Delta x^2 = \\
 & -q_{ij} - h_{ij}(t) S_{ij} / \Delta t - h_{i,j-1} (t+\Delta t) TJ_{i,j-1} / \Delta y^2 - \\
 & h_{i,j+1} (t+\Delta t) TJ_{i,j+1} / \Delta y^2 \quad (A4.10)
 \end{aligned}$$

para $i = 1..NX$

Caso todas as cargas potenciométricas aparecendo no lado direito das equações (A4.9) e (A4.10), sejam conhecidas ou por estimativa ou pelo cálculo já efetuado, então ambas as equações podem ser resolvidas, não de forma simplificada mas exige menor esforço.

O sistema (A4.9) é da forma:

$$A_j h_{i,j-1}(t+\Delta t) + B_j h_{ij}(t+\Delta t) + C_j h_{i,j+1}(t+\Delta t) = D_j \quad (A4.11)$$

para $j = 1$ a NY

O sistema (A4.10) é da forma:

$$A_i h_{i-1,j}(t+\Delta t) + B_i h_{ij}(t+\Delta t) + C_i h_{i+1,j}(t+\Delta t) = D_i \quad (A4.12)$$

para $i = 1$ a NX

Estes sistemas são tridiagonais e a solução deles podem ser obtido através da forma simplificada do algoritmo de Gauss-Jordan, isto é algoritmo de Thomas (e.g. Ames, 1966).

A discretização da equação de fluxo acima foi concebida para aquífero confinado. Entretanto, se as variações espaciais e temporais do nível freático são pequenas em relação à espessura saturada inicial, o mesmo processo pode ser efetuado para aquífero livre (Kinzelbach, 1986).

Assim sendo, a equação do nó é obtida basicamente através de modificações na equação (A4.4). As transmissividades são, agora, funções das cargas potenciométricas as quais coincidem com

a superfície freática. Chamando a elevação do fundo do aquífero no nó (i,j) b_{ij} , define-se a transmissividade local T_{ij} por:

$$T_{ij} = KF_{ij} (h_{ij} - b_{ij}) \quad (A4.13)$$

onde KF é a condutividade hidráulica.

T_I e T_J são obtidos pela multiplicação da média harmônica das condutividades hidráulicas com a média geométrica da espessura saturada ao longo das direções x e y , respectivamente (Butler, 1957).

$$T_{I_{ij}} = KFI_{ij} \left(h_{i+1,j} - b_{i+1,j} \right)^{1/2} \left(h_{ij} - b_{ij} \right)^{1/2} \quad (A4.14)$$

$$T_{J_{ij}} = KFJ_{ij} \left(h_{i,j+1} - b_{i,j+1} \right)^{1/2} \left(h_{ij} - b_{ij} \right)^{1/2} \quad (A4.15)$$

onde KFI_{ij} e KFJ_{ij} são as condutividades hidráulicas entre os nós (i,j) e (i+1,j) e (i,j) e (i,j+1), respectivamente, e

$$KFI_{ij} = \frac{2KF_{ij} \cdot KF_{i+1,j}}{KF_{ij} + KF_{i+1,j}} \quad (A4.16)$$

$$KFJ_{ij} = \frac{2KF_{ij} \cdot KF_{i,j+1}}{KF_{ij} + KF_{i,j+1}} \quad (A4.17)$$

O método IADI pode, agora, ser descrito como segue: começando com valores aleatórios para as cargas iniciais $h_{ij}(t+\Delta t)$ soluciona-se os sistemas de equações das linhas, linha por linha. Para valores de carga da linha vizinha utiliza-se os resultados disponíveis dos últimos cálculos (caso não exista

resultado anteriores usa-se os aleatórios iniciais). Após NY (equações para linhas), passa-se através da rede à coluna, uma por uma, usando de novo os últimos cálculos e resultados disponíveis. Quando resolvido todas as linhas e todas as colunas uma etapa de iteração é completada.

A próxima entrada de iterações resolverá, de novo, todas as linhas, linha por linha e todas as colunas, coluna por coluna. As iterações continuam alternadamente entre cálculos de linhas e colunas até que uma convergência seja alcançada, e, então, um espaço de tempo Δt é completado.

O procedimento é incondicionalmente estável. O uso das aproximações disponíveis simultaneamente para valores de linhas e colunas vizinhas é garantida, caso seja armazenado os resultados de todas as iterações numa matriz $h_{ij}(t+\Delta t)$ dos valores antigos sobrepostos ao mais recentes.

ANEXO V - ABORDAGEM NUMÉRICA DO MODELO DE TRANSPORTE
DE CONTAMINANTES ADOPTADO

ANEXO V - Abordagem Numérica do Modelo de Transporte Adotado

Kinzelbach, 1986.

Como no caso da equação de fluxo, equações de transporte podem ser obtidas ou pela substituição das derivadas, por diferentes aproximações na rede, ou pelo balanço de massa do contaminante em cada célula da rede. O último procedimento é o preferido. O balanço de massa sobre a célula (i,j) da Figura A3.1 requer que durante um intervalo de tempo $(t+\Delta t)$, as entradas e saídas devido ao armazenamento, advecção, dispersão, difusão e reações somem em zero.

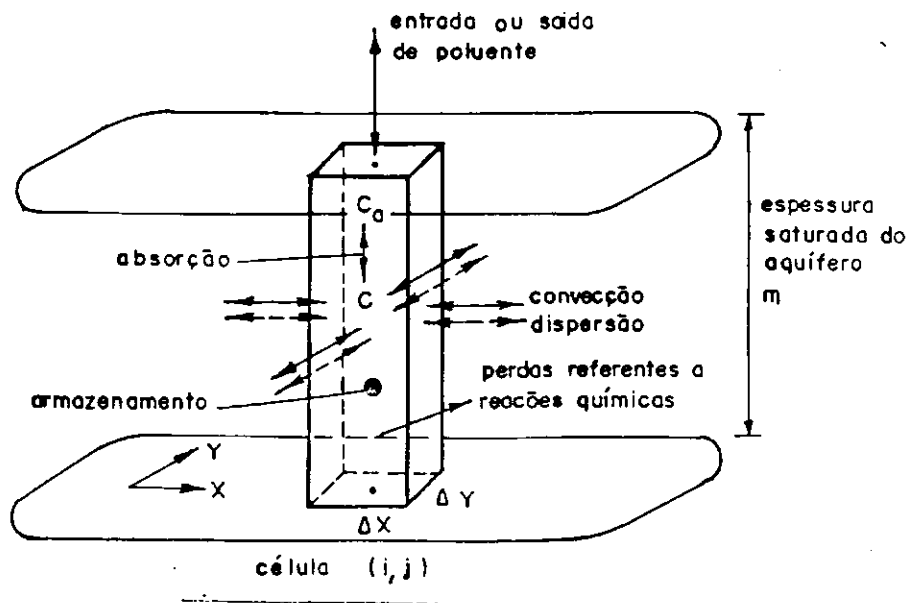


Figura A5.1. - Balanço de massa poluente sobre uma célula nodal

(Kinzelbach, 1986)

Quando computada a importação da massa à célula por advecção, a velocidade combina-se com a concentração a qual pode ser aproximada pelo peso médio das concentrações das células adjacentes. No caso do transporte ser dominado pela advecção o peso é escolhido no lado a montante da célula, onde o procedimento é chamado "Upwinding". Quando o transporte é dominado pela dispersão a pesagem simétrica é preferível.

As entradas advectivas à célula (i,j) ao longo do intervalo (t+Δt) são as seguintes:

$$\begin{aligned}
 & u_{x,i-1,j} (\alpha c_{i-1,j} + (1-\alpha)c_{ij}) \Delta y (m_{i-1,j} + m_{ij}) n_{ef} \Delta t/2 \\
 & - u_{x,ij} (\beta c_{ij} + (1-\beta)c_{i+1,j}) \Delta y (m_{ij} + m_{i+1,j}) n_{ef} \Delta t/2 \\
 & + u_{y,i,j-1} (\gamma c_{i,j-1} + (1-\gamma)c_{ij}) \Delta x (m_{i,j-1} + m_{ij}) n_{ef} \Delta t/2 \\
 & - u_{y,ij} (\delta c_{ij} + (1-\delta)c_{i,j+1}) \Delta x (m_{ij} + m_{i,j+1}) n_{ef} \Delta t/2
 \end{aligned} \tag{A5.1}$$

onde m_{ij} é a espessura saturada do fluxo do nó i,j.

Os pesos "Upwinding" podem ser escritos na forma condensada como:

$$\begin{aligned}
 \alpha &= (1 + \text{sign}(u_{x,i-1,j}))/2 & \beta &= (1 + \text{sign}(u_{x,ij}))/2 \\
 \gamma &= (1 + \text{sign}(u_{y,i,j-1}))/2 & \delta &= (1 + \text{sign}(u_{y,ij}))/2
 \end{aligned}$$

enquanto a pesagem simétrica é dada por:

$$\alpha = \beta = \gamma = \delta = 0.5$$

Para enfocar o fluxo dispersivo, consideremos primeiramente o caso em que o fluxo é paralelo a um dos eixos, e.g. o eixo X. Assim, a entrada líquida na célula por dispersão na direção X pode ser calculada das concentrações $c_{i-1,j}$, c_{ij} e $c_{i+1,j}$. A entrada líquida é a diferença das entradas dispersivas à margem entre as células (i,j) e (i-1,j) e entre (i,j) e (i+1,j). Na direção Y os cálculos podem ser efetuados de forma semelhante.

A entrada dispersiva é dada por:

$$\begin{aligned} & D_{xx,i-1,j} (c_{i-1,j} - c_{ij}) (\Delta y / \Delta x) (m_{i-1,j} + m_{ij}) n_{ef} \Delta t / 2 \\ & - D_{xx,ij} (c_{ij} - c_{i+1,j}) (\Delta y / \Delta x) (m_{ij} + m_{i+1,j}) n_{ef} \Delta t / 2 \\ & + D_{yy,i,j-1} (c_{i,j-1} - c_{ij}) (\Delta x / \Delta y) (m_{i,j-1} + m_{ij}) n_{ef} \Delta t / 2 \\ & - D_{yy,ij} (c_{ij} - c_{i,j+1}) (\Delta x / \Delta y) (m_{ij} + m_{i,j+1}) n_{ef} \Delta t / 2 \end{aligned} \quad (A5.2)$$

Caso o fluxo não seja paralelo a nenhuma das coordenadas dos eixos, as concentrações nas quatro células adjacentes não são suficientes para calcular o fluxo dispersivo que entra na célula i,j. Uma das possibilidades é a formulação de dois termos adicionais os quais envolvem elementos não diagonais do tensor da dispersão (figura A5.2).

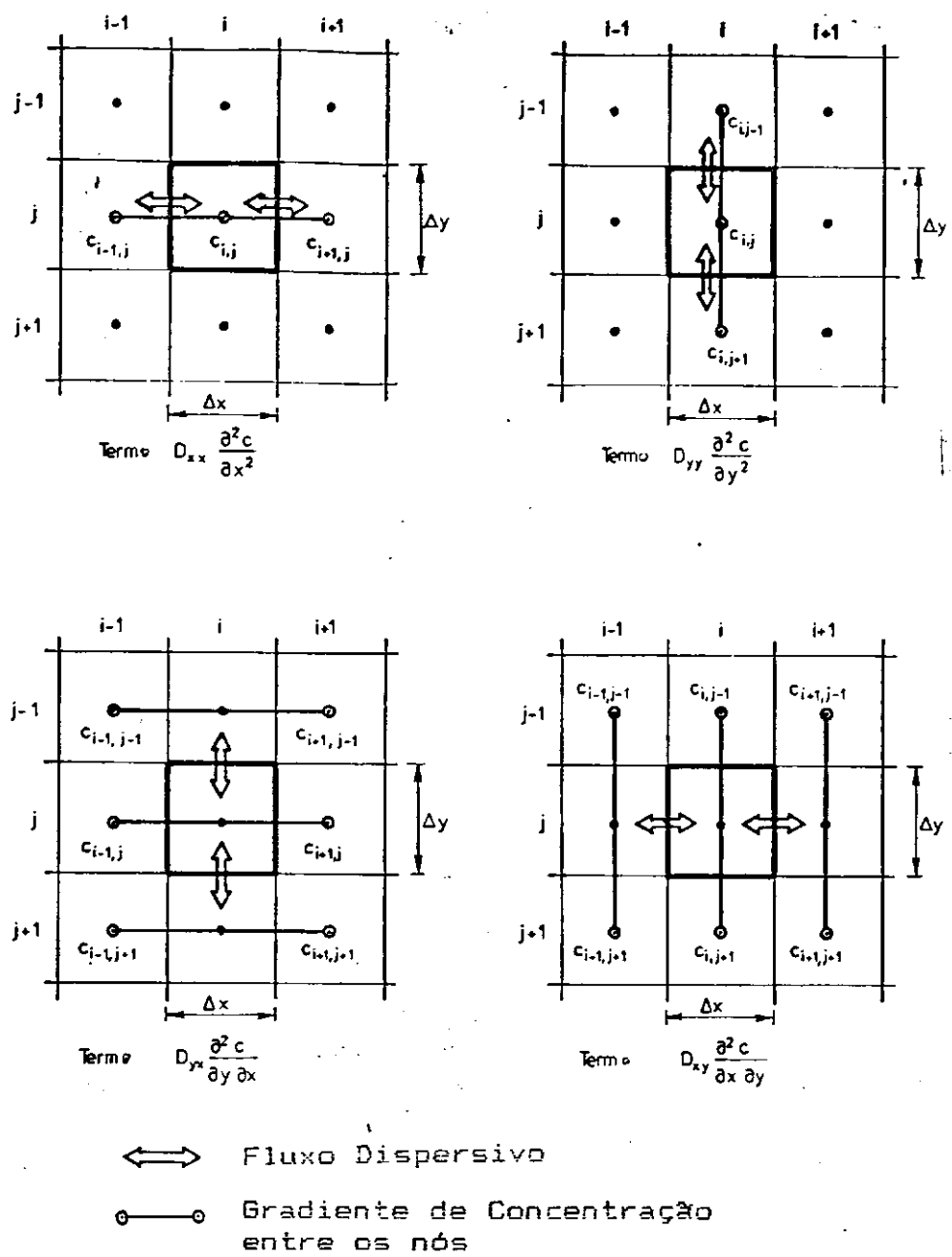


Figura A5.2 - Cálculo da entrada dispersiva na célula (i,j)

(Kinzebach, 1986)

A entrada dispersiva na direção X, devido ao gradiente de concentração na direção Y, é dado pela equação A5.3.

$$D_{xy,ij} (c_{i,j+1} - c_{i,j-1} + c_{i+1,j+1} - c_{i+1,j-1}) (m_{ij} + m_{i+1,j}) n_{ef} \Delta t / 8 \quad (A5.3)$$

$$- D_{xy,i-1,j} (c_{i-1,j+1} - c_{i-1,j-1} + c_{i,j+1} - c_{i,j-1}) (m_{i-1,j} + m_{ij}) n_{ef} \Delta t / 8$$

A entrada dispersiva na direção Y, devido ao gradiente de concentração na direção X, é dada por:

$$D_{yx,ij} (c_{i+1,j} - c_{i-1,j} + c_{i+1,j+1} - c_{i-1,j+1}) (m_{ij} + m_{i,j+1}) n_{ef} \Delta t / 8 \quad (A5.4)$$

$$- D_{yx,i,j-1} (c_{i+1,j-1} - c_{i-1,j-1} + c_{i+1,j} - c_{i-1,j}) (m_{i,j-1} + m_{ij}) n_{ef} \Delta t / 8$$

No cálculo dos coeficientes de dispersão na rede, as velocidades entre os nós, ou a média entre eles, serão usadas. O cálculo dos coeficientes $D_{xx,ij}$ e $D_{xy,ij}$ por transporte dispersivo entre as células (i,j) e (i+1,j) por exemplo, requer velocidades representativas U_x e U_y entre os nós acima citados. Para U_x , pode-se tomar a velocidade internodal $u_{x,ij}$. Para U_y , usa-se a média simétrica sobre as quatro mais próximas velocidades internodal (figura A3.3). Os coeficientes de dispersão, na direção X, pode ser obtida através da equação de Scheidegger (1961).

$$D_{xx,ij} = (\alpha_L U_x^2 + \alpha_T U_y^2) / U \quad (A5.5)$$

$$D_{xy,ij} = (\alpha_L - \alpha_T) U_x U_y / U$$

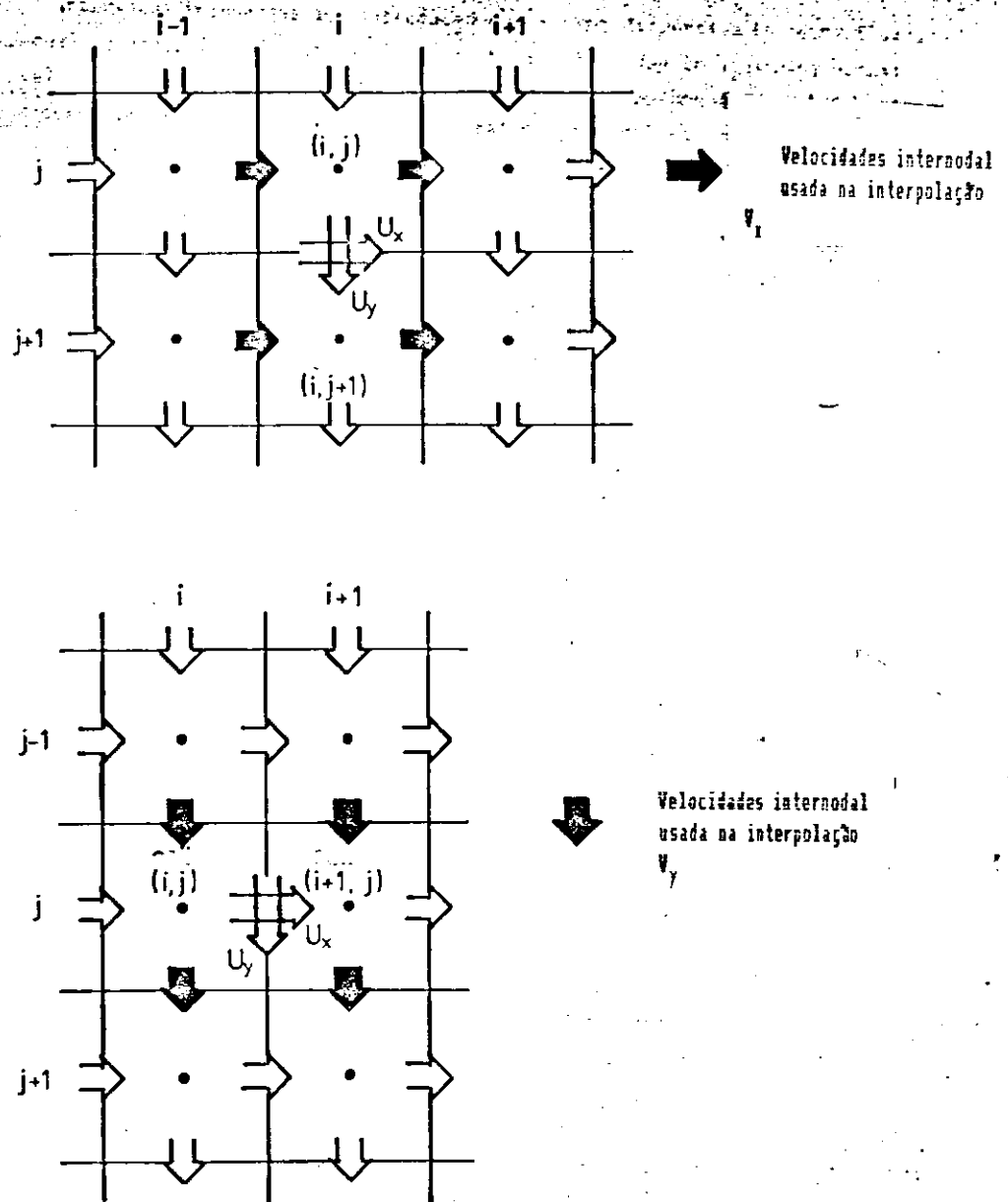


Figura A5.3 - Interpolação das velocidades no cálculo dos coeficientes de dispersão.

(Kinzelbach, 1986)

Com

$$U_x = u_{x,ij}$$

$$U_y = (u_{y,ij} + u_{y,i+1,j} + u_{y,i,j-1} + u_{y,i+1,j-1}) / 4$$

$$U = \left(U_x^2 + U_y^2 \right)^{1/2}$$

Os coeficientes D_{yx} e D_{yy} para o transporte dispersivo entre as células (i,j) e $(i,j+1)$ são definidos análogamente.

O termo da reação para reações de primeira ordem e outros termos para fontes e sumidouros não contêm derivadas. Elas convertem diretamente os valores discretos da rede

A entrada ou perdas de fontes ou sumidouros é dado por:

$$- n_{ef} \lambda \Delta x \Delta y m_{ij} c_{ij} \Delta t + q_{ij} \Delta x \Delta y c_{in,ij} \Delta t + S_{int,ij} \Delta x \Delta y \Delta t \quad (A5.6)$$

O termo de armazenamento é mostrado por:

$$n_{ef} \Delta x \Delta y m_{ij} (c_{ij}(t + \Delta t) - c_{ij}(t)) \quad (A5.7)$$

que é a massa armazenada do contaminante.

A adsorção, de acordo com o processo linear isotermal, pode ser tratada como a razão entre a velocidade de poros e o fator de

retardamento R. Assim, não a consideraremos, explicitamente, a partir de agora.

Somando-se as contribuições (A5.1), (A5.2), (A5.2) e (A5.4) e igualando-se a (A5.5), para cada célula i,j , têm-se o sistema de equações lineares para as concentrações $c_{ij}(t + \Delta t)$. Estas só serão completas, caso as condições iniciais de contorno sejam especificadas. Outrossim, deve-se definir o tempo no qual as concentrações aparecem nas expressões (A5.1), (A5.2), (A5.3) e (A5.4). Atribuindo

$$c_{ij} = \theta c_{ij}(t + \Delta t) + (1-\theta) c_{ij}(t) \quad (A5.8)$$

em toda o campo, obtêm-se equações implícitas para $\theta = 1$, explícitas para $\theta = 0$ e, ainda, equações de tendência central no tempo para $\theta = 0.5$ no esquema de Crank-Nicholson.

As condições iniciais não criam problemas. As concentrações nas margens prescritas levam a equações nodais triviais:

$$c_{ij}(t + \Delta t) = f(t + \Delta t) \quad (A5.9)$$

Margens impermeáveis são introduzidas pela suposição que os fluxos dispersivos nas margens igualem-se a zero. O fluxo advectivo será zero devido a componente normal de velocidade ser zero. Os problemas surgem quando nas margens existam fluxos dispersivos, uma vez que o gradiente de concentração nas margens é

geralmente icógnito. Neste caso, ou escolhe-se o domínio modelado tão grande que as concentrações nas margens não serão influenciadas pela pluma do contaminante do interior - a margem será tratada como margem prescrita com concentração zero, ou despreza-se o fluxo dispersivo nas margens, o que é uma suposição razoável quando o fluxo advectivo for maior que o dispersivo.

Escolhendo-se o modelo das equações explícitas ($\theta=0$), condições de estabilidade devem ser satisfeitas. Primeiramente, o critério advectivo exige:

$$Co_x = |\Delta t u_x / \Delta x| \leq 1 \quad (A5.10)$$

$$Co_y = |\Delta t u_y / \Delta y| \leq 1$$

ou $Co_x + Co_y \leq 1$ no caso das diferenças upwind.

Co é chamado número de Courant. Em termos físicos o critério diz que a massa contaminante que sai da célula por advecção durante o intervalo de tempo $(t + \Delta t)$ não ultrapasse o que estava dentro da célula no início do tempo t .

O segundo critério, o de Neumann, leva em consideração que os gradientes de concentração não podem ser revertidos somente pelo fluxo dispersivo-difusivo.

$$D_{xx} \Delta t / \Delta x^2 + D_{yy} \Delta t / \Delta y^2 \leq 0.5 \quad (A5.11)$$

A equação (A5.10) é aplicável caso uma das coordenadas do

eixo seja paralela ao fluxo (Redeel, Sunada, 1970).

O terceiro critério exige que nos nós de fontes e sumidouros, a massa contaminante que entra ou sai da célula, dentro do intervalo de tempo, não pode ultrapassar aquela contida na mesma inicialmente. Neste requerimento, surge uma nova restrição:

$$\Delta t \leq n_{ef} m_{ij} / q_{ij} = n_{ef} m_{ij} \Delta x \Delta y / Q_{ij} \quad (A5.12)$$

A combinação das restrições (A5.9) e (A5.10), decide o intervalo de tempo máximo que pode ser usado. Na presença de termos de reação, o critério para a estabilidade se aplica.

As equações do esquema explícito podem ser resolvidos uma por uma, enquanto no esquema implícito o sistema de equações devem ser resolvidos simultaneamente.

Esquemas implícitos são incondicionalmente estáveis. O sistema de equações são da forma:

$$\begin{aligned} & A_{ij} c_{i-1,j-1}(t+\Delta t) + B_{ij} c_{i-1,j}(t+\Delta t) + C_{ij} c_{i,j-1}(t+\Delta t) \\ & + D_{ij} c_{ij}(t+\Delta t) + E_{ij} c_{i+1,j}(t+\Delta t) + F_{ij} c_{i,j+1}(t+\Delta t) \\ & + G_{ij} c_{i+1,j+1}(t+\Delta t) + R_{ij} c_{i-1,j+1}(t + \Delta t) \\ & + S_{ij} c_{i+1,j-1}(t + \Delta t) = H_{ij} \end{aligned} \quad (A5.13)$$

com $i = 1, \dots, NX$ e $j = 1, \dots, NY$, onde o lado direito é função da concentração e tempo t .

O sistema pode ser resolvido pelo método de Gauss-Jordan. O método iterativo que pode ser aplicado com sucesso é o procedimento I.A.D.I. (Procedimento Iterativo Implícito em Direção Alternada) descrito no anexo IV.

Embora a estabilidade seja satisfeita de modo incondicional nos esquemas implícitos, a precisão dos resultados ainda depende (como nos esquemas explícitos) da discretização efetuada. Dois tipos de problemas numéricos são comuns: o primeiro é o overshoot ou undershoot (crescer rapidamente para cima ou para baixo, (Figura A5.4) e o segundo a dispersão numérica (figura A5.5).

Os esquemas de maior precisão usam diferenças centrais no espaço e tempo. Porém, os mesmos tendem a oscilar o que pode ser evitado por uma discretização extremamente fina. Diferenças do tipo upwind introduzem em torno a dispersão artificial suavizando assim, estas oscilações.

O fenômeno da dispersão numérica pode ser discutido sob o ponto de vista puramente da equação advectiva de transporte. Supondo-se que o fluxo é paralelo ao eixo X e uma fonte de concentração tipo cunha, que começa do nó i, j , progride, ao longo do intervalo $\Delta t < \Delta x / u_x$, para uma posição em algum lugar entre os nós i, j e $i+1, j$ (figura A5.5a). Devido a discretização, a massa do contaminante entre os dois nós é espalhada para fora deste espaço. Isto significa que embora a frente não tenha alcançado o nó

$i+1,j$, o nó apresenta um incremento na concentração, como se já existisse uma dispersividade longitudinal.

Caso o fluxo não seja paralelo ao eixo, ocorre a dispersão numérica angular além da dispersão relacionada com a distância. O pulso procedente com ângulo $0 < \alpha < \pi/2$, do nó i,j , mostraria reações nos nós $(i+1,j)$ e $(i,j-1)$ na formulação do fluxo advectivo (figura A5.5b). Isto quer dizer que o pulso foi alargado dispersivamente, uma vez que a direção verdadeira não dá para ser representada na rede de discretização.

O caminho mais rigoroso da análise da dispersão numérica é visar o mesmo como um erro de interrupção (e.g. Holly, 1975). No fluxo paralelo ao eixo X, o termo advectivo $u_x \partial c / \partial x$ é substituído pela diferença da primeira ordem, significando que a expansão de Taylor é interrompida após o termo de primeira ordem. O segundo termo da expansão de Taylor é dado por:

$$u_x \frac{\partial c}{\partial x} = u_x \frac{c_{ij} - c_{i-1,j}}{\Delta x} + \frac{u_x \Delta x}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (\text{A5.14})$$

Pode-se ver que o uso do termo advectivo $u_x (c_{ij} - c_{i-1,j}) / \Delta x$ é equivalente ao termo usado

$$u_x \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{u_x \Delta t}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

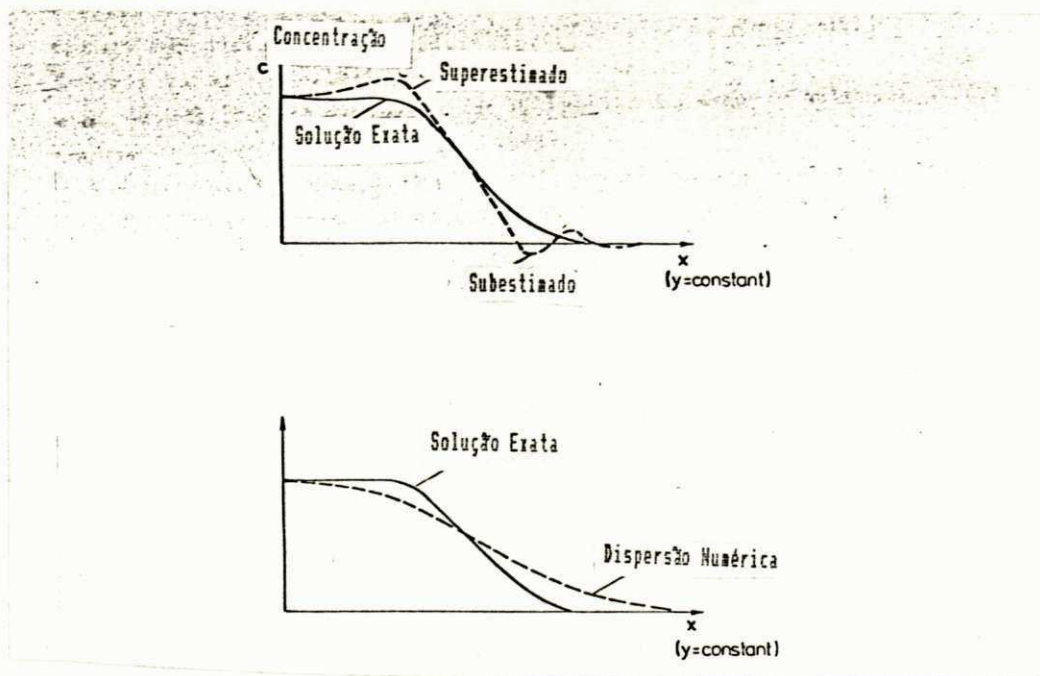


Figura A5.4 - Problemas da dispersão numérica
(Kinzelbach, 1986)

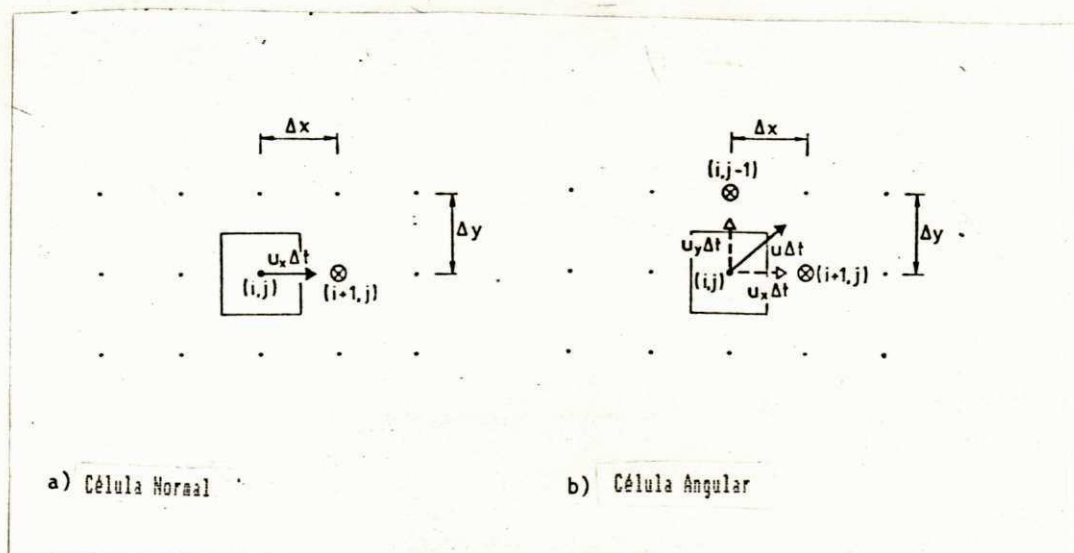


Figura A5.5 - Representação esquemática das causas da dispersão numérica (kinzelbach, 1986)

na equação original. Adotando-se o mesmo procedimento para a derivada do tempo, obtêm-se o termo da dispersão artificial global na equação de transporte com:

$$\left(\frac{u_x \Delta t}{2} - \frac{u_x^2 \Delta t}{2} \right) \frac{\partial^2 c}{\Delta x^2}$$

Este termo é desprezível quando o valor é pequeno comparado ao termo da dispersão física. Pode-se escolher Δx de tal modo que:

$$u_x \Delta x / 2 < D_{xx} \quad (A5.15)$$

e aderindo ao critério de Courant, a dispersão numérica pode ser controlada.

Em fluxo bidimensional, critério análogo para a precisão pode ser encontrado. Por conviniência o número da rede de Peclet pode ser definido como:

$$\begin{aligned} Pe_x &= (u_x \Delta x) / D_{xx} \\ Pe_y &= (u_y \Delta y) / D_{yy} \end{aligned} \quad (A5.16)$$

A recomendação geral para evitar problemas numéricos e para produzir resultados úteis poderá ser encontrada através do controle do número de Courant, menor que 1 em ambas as direções, e do

número da rede de Peclet - menor que 2 em todos os pontos (e.g. Frind, 1982).

Infelizmente, isto nem sempre é possível devido as restrições de armazenamento dos computadores. Outrossim, para grandes razões de α_L/α_T (maior que 10) os critérios acima para precisão não serão suficientes e devem ser suplementados pelo terceiro critério, que exige uma discretização baseada na ordem de grandeza da dispersividade transversal (Kinzelbach, 1985).