



Fabián Martín Vizcarra Campana

**Modelagem e Simulação do Transporte e
Remediação de Poluentes em Aquíferos**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada como requisito parcial
para obtenção do grau de Mestre pelo Programa
de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da
PUC-Rio.

Orientador: Prof. Arthur Martins Barbosa Braga
Co-Orientador: Eurípedes do Amaral Vargas Júnior

Rio de Janeiro
Junho de 2014



Fabián Martín Vizcarra Campana

Modelagem e Simulação do Transporte e Remediação de Poluentes em Aqüíferos

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Arthur Martins Barbosa Braga

Orientador

Departamento de Engenharia Mecânica – PUC-Rio

Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Jr.

Co-Orientador

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

Prof. Marcos Sebastião de Paula Gomes

Departamento de Engenharia Mecânica – PUC-Rio

Profa. Andrea Ferreira Borges

Departamento de Geologia – UFRJ

Prof. José Eugenio Leal

Coordenador Setorial do Centro

Técnico Científico – PUC Rio

Rio de Janeiro, 27 junho de 2014

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem a autorização da universidade, do autor e do orientador.

Fabián Martín Vizcarra Campana

Fabián Vizcarra é formado como Físico pela Universidad Nacional Mayor de San Marcos (UNMSM), Universidad del Perú, Decana de América, fundada el 12 de mayo de 1551. Seu trabalho de pesquisa é na linha da físicoquímica de fluidos em meios porosos geológicos e na física teórica.

Ficha Catalográfica

Vizcarra Campana, Fabián Martín

Modelagem e simulação do transporte e remediação de poluentes em aquíferos / Fabián Martín Vizcarra Campana ; orientador: Arthur Martins Barbosa Braga ; co-orientador: Eurípedes do Amaral Vargas Júnior. – 2014.

97 f. : il. (color.) ; 30 cm

Dissertação (mestrado)—Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica, 2014.

Inclui bibliografia

1. Engenharia mecânica – Teses. 2. Remediação de aquíferos. 3. Hidráulica dos solos. 4. Modelagem numérica de escoamento em meios porosos. I. Braga, Arthur Martins Barbosa. II. Vargas Júnior, Eurípedes do Amaral. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. IV. Título.

CDD: 621

Agradecimentos

Primeiramente muito agradecido com a PUC-Rio pela bolsa de isenção do curso.

Ao CNPq pelo auxílio financeiro concedido durante o mestrado.

Ao Brasil, país que me da oportunidade de desenvolver-me como Profissional e pesquisador. Infinitamente agradecido.

Ao meu orientador e co-orientador, os professores Arthur Braga e Eurípedes Vargas. Um honor pra me trabalhar com eles. Obrigado por tudo seu apoio e conselhos para o desenvolvimento de esta dissertação.

Resumo

Campana, Fabián Martín Vizcarra; Braga, Arthur Martins Barbosa. **Modelagem e Simulação do Transporte e Remediação de Poluentes em Aquíferos**. Rio de Janeiro, 2014. 97pp. Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Apresenta-se nesta dissertação um estudo dos principais mecanismos do modelo de fluxo subterrâneo e do modelo de transporte de poluentes em aquíferos. Os processos associados ao transporte de poluentes são estudados em detalhe: difusão, dispersão e retenção de contaminantes na matriz porosa do aquífero. Seguidamente é desenvolvido, com o apoio do software Visual MODFLOW v.2011.1, duas simulações numéricas com dados sintéticos do transporte e remediação de um poluente na zona saturada de um aquífero composto por três camadas. O objetivo primeiro da simulação computacional do modelo de fluxo subterrâneo e do modelo de transporte de poluentes é avaliar os modelos teóricos estudados e fornecer uma guia metodológica da simulação computacional da dinâmica de águas subterrâneas e da evolução das plumas poluentes sometidas a condiciones externas; como por exemplo: poços de bombeamento, poços de injeção, infiltrações, etc. Os dados empregados na simulação representam um aquífero sintético composto por três camadas com uma falha geológica no meio do sistema, o que permite conectar hidráulicamente a camada superficial, representada por um aquífero freático, com a camada representada por um aquífero confinado. O segundo objetivo é simular numericamente o processo de remediação de aquíferos poluídos, com a finalidade de estabelecer a efetividade do método. Particularmente foi escolhido o método de remediação Pump-and-Treat, um dos sistemas de tratamento de aquíferos mais utilizados para este fim, que consiste no bombeamento para a superfície das águas subterrâneas poluídas para posterior tratamento externo de remoção de contaminantes.

Palavras-chave

Remediação de aquíferos; hidráulica dos solos; modelagem numérica de escoamento em meios porosos.

Abstract

Campana, Fabián Martín Vizcarra; Braga, Arthur Martins Barbosa. **Modeling and Simulation of Transport and Remediation of Polluants in Aquifers**. Rio de Janeiro, 2014. 97pp. MSc. Dissertation – Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

We present in this paper a study of the main mechanisms of the model groundwater flow and transport model of pollutants in aquifers. The processes associated with the transport of pollutants are studied in detail: diffusion, dispersion and retention of contaminants in the aquifer porous matrix. Is then developed with the support of Visual MODFLOW software v.2011.1, two numerical simulations with synthetic data transport and remediation of a pollutant in the saturated zone of an aquifer composed of three layers. The primary goal of numerical simulation of the groundwater flow model and transport of pollutants studied model is to evaluate the theoretical models and provide a methodological guide computer simulations of the dynamics of ground water and the evolution of pollutant plumes sometidas external condiciones; for example: pumping wells, injection wells, infiltration, etc.. The data used in the simulation represents a synthetic aquifer consists of three layers with a fault in the middle of the system, which allows for hydraulically connecting the surface layer represented by a water aquifer, with the layer represented by a confined aquifer. The second goal is to numerically simulate the process of remediation of polluted aquifers, in order to establish the effectiveness of the method. Particularly was chosen remediation method Pump-and-Treat, treatment of the aquifer most systems used for this purpose, which consists of pumping to the surface of the polluted groundwater for further treatment to remove external contaminants.

Keywords

Aquifer remediation; soil hydraulics; numerical simulation of flow in porous media.

Sumario

1. Introdução	14
2. Modelo de Fluxo Subterrâneo	23
3. Modelo de Transporte	33
4. Simulação Numérica do Fluxo e Transporte	47
5. Simulação Numérica da Técnica <i>Pump-and-Treat</i>	78
6. Conclusões e Sugestões.....	88
7. Referências Bibliográficas	90
Apêndice	92

Lista de Figuras

Figura 1 Mapa potenciométrico do modelo	21
Figura 2 Mapa de concentração de poluentes do modelo MT3DMS	22
Figura 3 Experimento da lei de Darcy	27
Figura 4 Elemento de volume diferencial	29
Figura 5 Efeito dos processos do transporte para uma fonte continua	39
Figura 6 Efeito dos processos do transporte para uma fonte de tipo pontual	40
Figura 7 Expressão logarítmica de Freundlich (Alfaro, 2005)	44
Figura 8 Modelo linear de sorção (Alfaro, 2005)	44
Figura 9 Efeito da biodegradação para uma fonte do poluente continua	45
Figura 10 Efeito da biodegradação para uma fonte do poluente de tipo pontual	46
Figura 11 Plano representativo do modelo conceitual	52
Figura 12 Distribuição e tipos de aquíferos do modelo do reservatório	52
Figura 13 Malha do modelo da zona de estudo	54
Figura 14 Pontos das mostras de campo para a extrapolação	56
Figura 15 Interpolação da estratigrafia real do modelo	57
Figura 16 Condutividades hidráulicas	58
Figura 17 Escala das cargas hidráulicas em metros	59
Figura 18 Mapa potenciométrico do aquífero livre	61
Figura 19 Mapa potenciométrico do aquítarde	62
Figura 20 Mapa potenciométrico do aquífero confinado	62
Figura 21 Mapa potenciométrico na zona da descontinuidade geológica	63
Figura 22 Campo de velocidades (camada 1)	64
Figura 23 Campo de velocidades (camada 2)	64

Figura 24 Campo de velocidades (camada 3).....	65
Figura 25 Campo de velocidades no modelo bidimensional vertical na zona dos poços de bombeamento.....	65
Figura 26 Rastreamento de partículas (camada 1)	66
Figura 27 Rastreamento de partículas (camada 2)	67
Figura 28 Rastreamento de partículas (camada 3)	67
Figura 29 Rastreamento de partículas (Modelo bidimensional vertical)	68
Figura 30 Cenário do transporte	69
Figura 31 Escala de concentração de poluentes.....	69
Figura 32 Dados da concentração do poluente fornecidos pelos	72
Figura 33 Pluma contaminante no aquífero livre (730 dias).....	73
Figura 34 Pluma contaminante no aquífero livre (1460 dias)	74
Figura 35 Pluma contaminante no aquífero livre (7300 dias)	74
Figura 36 Modelo bidimensional vertical da pluma contaminante	75
Figura 37 Pluma contaminante no aquífero (7300 dias)	75
Figura 38 Evolução espaciotemporal da pluma poluente, do tempo T2 até o tempo T7 (camada 1).....	76
Figura 39 Evolução espaciotemporal da pluma poluente, do tempo T2 até o tempo T7 (camada 2).....	77
Figura 40 Evolução espaciotemporal da pluma poluente, do tempo T2 até o tempo T7	78
Figura 41 Evolução temporal da pluma poluente, do tempo T4 até o tempo T7	79
Figura 42 Modelo de tratamento Pump-and-Treat fundamentado na interceptação hidráulica da pluma poluente	82
Figura 43 Características operacionais dos poços.....	83
Figura 44 Distribuição 3D dos poços (cenário 1).....	84
Figura 45 Distribuição 3D dos poços (cenário 2).....	84
Figura 46 Concentração (camada 1).....	85
Figura 47 Concentração (camada 2).....	85

Figura 48 Concentração (camada 3).....	86
Figura 49 Concentração antes do tratamento	86
Figura 50 Concentração depois do tratamento	87
Figura 51 Concentração (camada 1).....	88
Figura 52 Concentração (camada 2).....	88
Figura 53 Concentração (camada 3).....	89
Figura 54 Concentração depois do tratamento (cenário 2)	89
Figura 55 Volume de controle com dimensões $D_x \times D_y \times D_z$	94

Lista de Tabelas

Tabela 1 Poços de bombeamento 53

Tabela 2 Domínio do modelo 55

Tabela 3 Data da carga hidráulica 56

Tabela 4 Condutividade hidráulica das camadas 57

Lista de Símbolos

- A - Área da secção transversal [L^2]
 b - espessura do aquífero [L]
 C_s - Concentração da fonte [ML^{-3}].
 C - Concentração do soluto dissolvido na água subterrânea [ML^{-3}].
 C^* - Massa de poluente adsorvido por unidade de peso da fase sólida [%].
 D^* - Coeficiente de difusão em meios porosos [L^2T^{-1}].
 D - Coeficiente de difusão em água livre [L^2T^{-1}].
 D_{ij} - Tensor de dispersão hidrodinâmica [L^2T^{-1}].
 D_{mx} - Coeficiente de macrodispersão no sentido do fluxo subterrâneo [L^2T^{-1}].
 F - volume de fluido por diferencial de tempo e por unidade de volume [$ML^{-2}T^{-1}$].
 g - Aceleração da gravidade [LT^{-2}]
 q_s - Taxa de fluxo de água por unidade de área normal à direção do fluxo [LT^{-1}].
 q - Velocidade de Darcy [LT^{-1}]
 Q - Vazão do fluxo subterrâneo [L^3T^{-1}]
 K - Condutividade hidráulica ou permeabilidade [LT^{-1}].
 k - Permeabilidade intrínseca do meio poroso [L^2].
 K_d - Coeficiente de distribuição [-]
 n - Porosidade [%]
 r - Termo de efeitos de adsorção e reação química [$ML^{-3}T^{-1}$].
 T^* - Tortuosidade [-].
 T - Transmissividade [L^2T^{-1}],
 S_0 - Coeficiente de armazenamento específico [L^{-1}],
 v_i - Velocidade de transporte na direção i [LT^{-1}].
 V_s - Volume da parte sólida [L^3].
 V_v - Volume de vacíos [L^3].
 V_t - Volume total [L^3].
 z é a altura da água [L].

θ - Porosidade efetiva ou eficaz [%].

ρ - Massa específica [ML⁻³].

ϕ - Potencial hidráulico [L].

γ é o peso específico [ML⁻³].

α - Dispersividade [L²T⁻¹].

i - Gradiente hidráulica [-].

ρ_a - Densidade aparente do solo [ML⁻³].

σ - Razão entre o volume de água contida no solo e volume da matriz porosa [-].

r_f - Fator de retardamento [-].