

1

Introdução

As águas subterrâneas dos reservatórios aquíferos são as principais fontes disponíveis para o abastecimento de água doce em muitos lugares do mundo. Devido à escassez do recurso hídrico superficial, o recurso hídrico subterrâneo é uma reserva muito importante, sendo fundamental o desenvolvimento de modelos numéricos que simulem situações reais para possibilitar o planejamento e a gestão desses recursos hídricos subterrâneos, incluindo sua proteção e descontaminação.

A quantificação do fluxo subterrâneo e do transporte de contaminantes em águas subterrâneas é útil para a gestão e gerenciamento ambiental, proteção e descontaminação dos recursos hídricos subterrâneos. A quantificação feita por medidas de campo é precisa mais não muito utilizada com exclusividade, devido aos seus altos custos e aos longos prazos que necessita para caracterizar o comportamento dos modelos de transporte e fluxo, neste sentido, a quantificação por modelagem e simulação numérica é utilizada com maior frequência pelas empresas de consultoria ambiental e órgãos governamentais.

Os modelos matemáticos empregam uma equação ou, uma série de equações, que simulam e preveem respostas físico-químicas de um aquífero sujeito a perturbações, tais como poços de injeção e os poços de extração, ou a migração de um poluente tóxico (Batu, 2005). A modelagem matemática, em conjunto com as técnicas de simulação numérica, e, com sistemas de informações geográficos, podem ser uma ferramenta poderosa para os estudos

dos modelos de fluxo e transporte das águas subterrâneas. Alguns exemplos de estudos são:

- Elaboração de mapas de vulnerabilidade natural à poluição dos recursos hídricos subterrâneos.
- Determinação das zonas de captura das águas subterrâneas.
- Solução numérica bidimensional do transporte de poluentes de tipo reativo.
- Estudos de derramamento de gasolina nos solos.
- Verificação da adsorção e movimentação de metais pesados em solos e sua possível contaminação para águas subterrâneas.
- Processos de biodegradação de hidrocarbonetos e transporte de material radiativo em águas subterrâneas.

Segundo *Vedat Batu* (Batu, 2005), respeito aos métodos numéricos da simulação numérica do fluxo subterrâneo e do transporte de poluentes nas águas subterrâneas, o método das diferenças finitas é, maiormente utilizado, fazendo primeiramente uma malha de discretização espacial e temporal do modelo real. Esta malha é constituída de células organizadas em linhas, colunas e verticalmente em camadas. A malha representa o chamado modelo conceitual do aquífero, o qual representar as condições dos dados de campo como à topografia, hidrogeologia, hidrografia, geologia e as condições de contorno.

Para a simulação acoplada, por meio de modelos computacionais, do modelo de fluxo e transporte de poluentes em aquíferos é preciso construir primeiramente o modelo conceitual (Filho e Feitosa, 2002). Este modelo é descrito seguidamente.

1.1.

Modelos

Um modelo para as águas subterrâneas são representações matemáticas dos processos físico-químicos do fluxo subterrâneo e transporte de poluentes nos aquíferos. O modelo da dinâmica do fluxo subterrâneo junto com o modelo do fenômeno de transporte de poluentes é baseado na avaliação das informações da geologia, hidrologia de superfície e hidrologia subterrânea. Esta modelagem

envolve várias etapas sequenciadas que vão desde a definição dos objetivos até a apresentação dos resultados. Antes da construção do modelo conceitual é importante definir quais são os objetivos que se quer atingir, por exemplo: otimizar o gerenciamento dos recursos de água subterrânea, análise de fluxo, delimitação das áreas de proteção do aquífero devido às poluições, etc. Logo é definido o modelo conceitual, para isso é preciso fazer o análise do perfil estratigráfico fornecido pelos piezômetros e pelos poços instalados na zona de estudo; dos testes de bombeamento no aquífero; dos mapas potenciométricos; da precipitação; evapotranspiração; infiltração e das vazões dos cursos das águas superficiais. Nesta fase da modelagem deve-se determinar a geometria do reservatório, as condições iniciais e de fronteira, os parâmetros hidrodinâmicos, as condições de recarga, as vazões dos bombeamentos, e, finalmente, as interconexões hidráulicas com águas superficiais ou com outros sistemas aquíferos.

Depois da determinação do modelo conceitual a próxima fase é a escolha de um modelo numérico que expresse o modelo conceitual. Esta fase é desenvolvida com ajuda dos pacotes computacionais, particularmente nesta dissertação são selecionados os seguintes pacotes computacionais: o MODFLOW (Prommer, Barry e Zheng, 2003) e o MT3DMS (Zheng, 1990).

A modelagem numérica é esquematizada sob a determinação das seguintes tarefas:

- Equações diferenciais que representativas dos modelos de fluxo subterrâneo e transporte de poluentes.
- Geometria do modelo (forma, topo e base do aquífero).
- Discretização da área modelada.
- Parâmetros hidrodinâmicos.
- Condições de fronteira que definam as entradas no sistema aquífero: como a recarga (precipitação e infiltração) e as saídas por descargas (poços de bombeamentos, fontes, e evapotranspiração).
- Condições iniciais do estado do reservatório aquífero com a ajuda das informações descritas anteriormente.

- Intervalo do tempo total da simulação e os tempos discretos para as saídas dos resultados.

Desenvolvidas às tarefas anteriores é possível construir o modelo numérico computacional seguidamente da fase de calibração. Nesta fase são comparados os resultados da simulação do modelo com os dados de campo. Segundo Feitosa e Filho (Filho e Feitosa, 2002) na fase de calibração deve-se procurar ajustar os parâmetros do modelo para que os resultados obtidos se aproximem da melhor forma possível com os dados medidos em campo, assim é possível que o modelo fique validado para analisar o problema em estudo.

Depois da construção dos processos de calibração-validação é estabelecida a previsão. O processo de previsão é a resposta da simulação do reservatório aquífero às alternativas de planejamento e gerenciamento dos recursos de água subterrânea e controle da poluição. Finalmente é importante estabelecer o processo de verificação em longo prazo, fazendo que as imprecisões da modelagem sejam corrigidas se as simulações forem repetidas sistematicamente ao longo do tempo, e na medida em que novos dados de campo sejam incorporados ou substituídos no modelo simulado.

1.2.

Pacote Computacional

Os modelos numéricos são utilizados para descrever os modelos de fluxo e transporte de poluentes nos reservatórios aquíferos, sendo suportados por programas computacionais. Dos diversos pacotes computacionais orientados para a modelagem da dinâmica das águas subterrâneas e para simulação da dinâmica da migração de poluentes em aquíferos, destacam-se os seguintes, por serem mais amplamente documentados e largamente utilizados com computadores pessoais: *Femwater*; *Groundwater Vistas*; *Micro-Fem*; *Modflow*; *Modpath*; *Feflow*; *MT3DMS*; *RT3D*; *Visual MODFLOW*.

1.2.1.

Pacote do Modelo de Fluxo MODFLOW

O pacote utilizado nesta dissertação para o modelo de fluxo é o MODFLOW, que é um modelo tridimensional em diferenças finitas para simulação do escoamento em regimes estacionário e transiente, desenvolvido por *Mc Donald* e *Harbaugh* em 1988 para a USGS (*United States Geological Survey*). Apresenta uma estrutura modular com um programa principal e várias sub-rotinas independentes, o que favorece o seu aprimoramento uma vez que novos módulos podem ser adicionados sem a necessidade de alteração daqueles existentes. As vantagens observadas nestes programas em relação a outros disponíveis no meio técnico são: a rapidez e facilidade para simular diferentes cenários após da definição do modelo conceitual; a boa interação com o usuário; atualização constante do programa, e o grau de compatibilidade com um grande número de outros softwares. A principal limitação do programa refere-se à consideração somente do fluxo em zona saturada.

1.2.3.

Pacote do Modelo do Transporte de Poluentes

O *Visual MODFLOW v.2001.1* é um pacote computacional comercial que integra o modelo MODFLOW para o modelo de fluxo com outros modelos numéricos para simular a migração de poluentes. Os principais pacotes de transporte de contaminantes acoplados ao MODFLOW são o MT3DMS (*Modular 3-Dimensional Transport Model*), o RT3D (*Reactive Multi-species Transporte in 3-Dimensional*) e o PHT3D (*Reactive Multicomponent Transport Model for Saturated Porous Media*).

1.2.3.1.

Modelo MT3DMS

Em particular o modelo MT3DMS, desenvolvido por *C. Zheng* e *S.S. Papadopoulos* (Zheng, 1990), é um modelo tridimensional para a simulação da advecção, da dispersão, da sorção e das reações químicas de um determinado poluente dissolvido nas águas subterrâneas. O MT3DMS pode ser acoplado com os modelos de fluxo, e é desenvolvido pelo método de volumes finitos e

diferencias finitas. O MT3DMS simula reações químicas como a sorção linear, a sorção não linear e o decaimento de primeira ordem para a biodegradação e para o decaimento de material radiativo. Estas reações acontecem com os solutos poluentes dissolvidos nas águas subterrâneas, ou quando estes solutos são adsorvidos pela matriz porosa sólida do aquífero. Algumas versões deste modelo é o RT3D, orientado na simulação da advecção, dispersão, sorção e reações químicas de multi-espécies dissolvidas nas águas subterrâneas. Possui um número predefinido de pacotes de reação, como a reação do decaimento aeróbio dos BTEXs e os modelos de degradação aeróbios e anaeróbios (Prommer, Barry e Davis, 1999).

As entradas e saídas da água subterrânea dentro da equação de transporte de massa, devido às fontes e bombeamentos, geram uma diminuição na concentração de solutos na água (diluição). Esta redução deve ser considerada na equação de transporte, gerando que o balanço de massa seja estabelecido como:

$$\text{Variação total} = \text{variação por advecção} + \text{variação por dispersão} + \text{reação} \\ \text{adsorção} + \text{fontes/extração}$$

Assim, segundo Zheng (Zheng, 1990) a equação diferencial tridimensional que representa a descrição conceitual da migração sem atenuação de contaminantes em meios porosos saturados é (estuda no capítulo 4):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial(v_i C)}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] \pm q_s \frac{C_s}{\theta} \quad (1-1)$$

em que:

- C = concentração do soluto dissolvido na água subterrânea [ML^{-3}].
- t = tempo [T].
- D_{ij} = tensor de dispersão hidrodinâmica [L^2T^{-1}].
- v_i = velocidade de transporte na direção i [LT^{-1}].
- q_s = taxa de fluxo de água por unidade de área normal à direção do fluxo [LT^{-1}].

- θ = porosidade efetiva [%].
- C_s = concentração da fonte [ML^{-3}].

1.3.

Organização da Dissertação

O capítulo primeiro faz uma introdução à modelagem e simulação numérica do fluxo e transporte em sistemas aquíferos. O capítulo dois apresenta o modelo de fluxo subterrâneo, aonde se vão estudar primeiramente os parâmetros hidrogeológicos de um sistema aquífero. Seguidamente vai-se apresentar a lei de Darcy, assim, com esta lei em mão, é desenvolvida a equação de fluxo subterrâneo, fazendo um balanço de massa num elemento infinitesimal do meio poroso representativo de um aquífero. O capítulo três estuda os processos do fluxo subterrâneo transporte de massa de contaminantes em meios porosos saturados como o caso dos aquíferos: processos:

- Processo de difusão molecular.
- Processo de dispersão mecânica.
- Processo de advecção.

Os processos de reação também são estudados em este capítulo, logo, uma vez feito os estudos descritos anteriormente é estabelecida a equação geral do transporte de poluentes em sistemas aquíferos. No capítulo quatro vai-se simular computacionalmente o modelo de fluxo subterrâneo e do modelo de transporte de poluentes. Finalmente no capítulo cinco vai-se simular numericamente o processo de remediação de aquíferos poluídos. Particularmente foi escolhido o método de remediação *Pump-and-Treat*.

1.4.

Objetivos

A proposta da pesquisa é simular numericamente o modelo do fluxo subterrâneo e o modelo de transporte de poluentes em sistemas aquíferos. A simulação é construída com a aplicação dos programas computacionais MODFLOW e MT3DMS. Estes programas computacionais vão simular, do modo acoplado, o

avanço de uma frente de contaminação de um poluente nos fluxos das águas subterrâneas que escoem num aquífero composto por três camadas. Esta simulação vai permitir fazer uma abordagem de um estudo dos parâmetros que controlam os modelos do fluxo e do transporte.

Os programas computacionais: *Modular 3D Finite Difference Groundwater Flow Model* (MODFLOW) e o *Modular 3D Finite Difference Mass Transport Model* (MT3DMS) proposto por Zheng (Zheng, 1990), são integrados dentro de um pacote computacional do tipo comercial. Este pacote é o *Visual MODFLOW*. Para esta dissertação vai-se trabalhar com o pacote *Visual MODFLOW* na versão *2011.1 Premium*. Exemplos dos resultados das simulações feitas sob o pacote computacional descrito são mostrados na Figura 1 e na Figura 2. Os exemplos mostram as saídas gráficas do modelo de fluxo MODFLOW e do modelo de transporte MT3DMS.

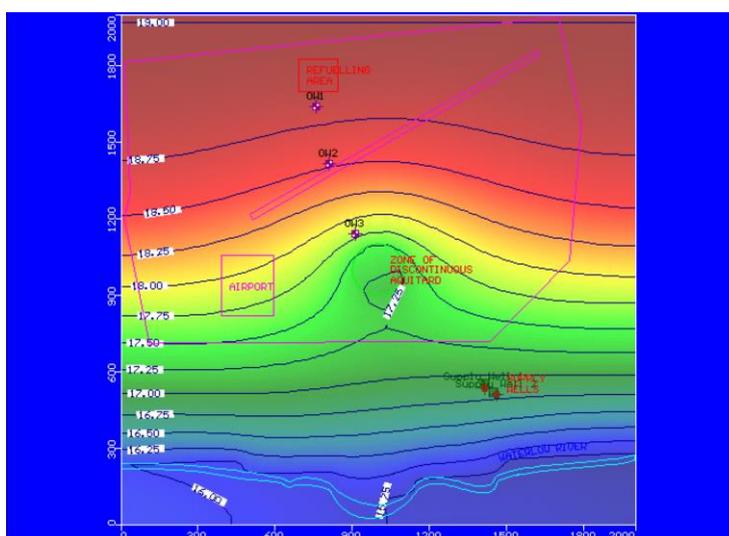


Figura 1 Mapa potenciométrico do modelo

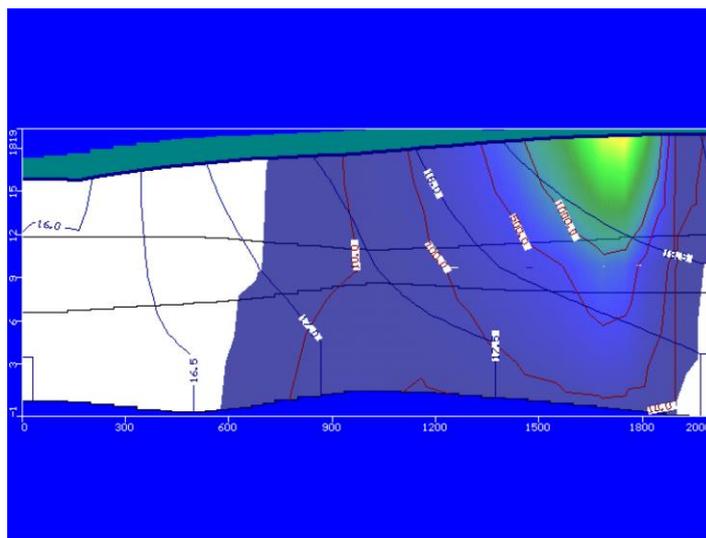


Figura 2 Mapa de concentração de poluentes do modelo MT3DMS

Os cenários da simulação do fluxo subterrâneo, transporte e remediação de poluentes são construídos com dados fornecidos pelas guias de simulação computacional da empresa de estudos hidrogeológicos *Schlumberger Water Service*. Estes dados vão permitir a avaliação do avanço da pluma poluente de maneira acoplada com o modelo de fluxo. Esta simulação sob uma dada sintética tem a mesma estrutura metodológica de qualquer cenário real, assim, esta modelagem, tem a utilidade de avaliar os modelos hidrogeológicos do fluxo, transporte e remediação.

Em resumo os objetivos são:

- Estudar e apresentar os modelos físicoquímicos do transporte de poluentes nas águas subterrâneas (acoplamento do modelo de fluxo e modelo do transporte).
- Simular computacionalmente a evolução espaciotemporal de uma pluma poluente nas águas subterrâneas.
- Simular computacionalmente técnicas de remediação de aquíferos poluídos (técnica *Pump-Treat*).
- Fornecer uma guia metódica para a abordagem de estudos de impacto ambiental dos recursos hídricos subterrâneos.