

ENPROMER'99

II Congresso de Engenharia de Processos do MERCOSUL
30 de Agosto a 02 de Setembro de 1999
Florianópolis - Santa Catarina - Brasil

SOLUÇÃO NUMÉRICA DO PROBLEMA DE DERRAMAMENTO DE GASOLINA ACRESCIDADA DE ÁLCOOL NO SOLO

J. CORDAZZO*, C. R. MALISKA# e H. X. CORSEUIL[†]

*Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor
Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina
88040-900, Florianópolis, SC, Brasil*

Palavras-Chave: Contaminação, métodos dos volumes finitos, aquíferos, gasolina, etanol, sorção, biodegradação, solução numérica.

Resumo

Este trabalho propõe uma solução numérica bidimensional para o escoamento na região saturada do solo, conhecida como lençol freático, em volumes finitos, com modelo de biodegradação de 1a. ordem, adaptado para a situação da gasolina brasileira, isto é, considerando a influência do etanol na biodegradação dos constituintes BTEX da gasolina e no

fenômeno de co-solubilidade do etanol na gasolina, assumindo que a solubilidade dos compostos hidrofóbicos na água aumenta log-linearmente. O efeito de sorção (retardo da pluma) da gasolina também é considerado no modelo, supondo uma sorção linear. A equação de transporte resolvida numericamente leva em consideração a dispersão, advecção, sorção e a biodegradação dos compostos BTEX, bem como do etanol. Também é resolvido numericamente o campo de velocidades da água subterrânea, através das equações de Darcy.

1. Introdução

Dados estatísticos das agências de proteção ambiental vem demonstrando que o solo tem sido contaminado frequentemente com problemas decorrentes de vazamentos, derrames e acidentes durante a exploração, refinamento, transporte e operações de armazenamento do petróleo e seus derivados. Destes, a gasolina merece destaque, seja pela quantidade envolvida, ou pela periculosidade, verificada pela liberação, ao entrar em contato com a água subterrânea, dos compostos BTEX (benzeno, tolueno, etil-benzeno e xilenos), que são substâncias depressoras do sistema nervoso central e causadoras de leucemia. No Brasil este problema com a gasolina acentua-se, pois a maioria dos tanques de armazenamento de combustível foram construídos na década de 70, e como a vida média destes tanques, estimada

em 25 anos, está próxima do final, pode-se esperar um aumento da ocorrência de vazamentos nos postos do país (Corseuil e Martins, 1997).

Existem na literatura muitos modelos que fornecem soluções analíticas e numéricas para o problema mencionado anteriormente. No entanto, a gasolina comercializada no Brasil é bastante diferenciada de outros países, pois, atualmente, é misturada com 22 % de álcool (etanol), que pode causar um comportamento completamente diferente no deslocamento da pluma (Fernandes e Corseuil, 1996).

Este trabalho apresenta a formulação matemática e numérica do problema em questão, as hipóteses assumidas e resultados preliminares comparados com a solução analítica.

2. Revisão Bibliográfica

A gasolina é constituída de uma mistura de hidrocarbonetos voláteis, cujos componentes maiores são cadeias ramificadas de parafinas, cicloparafinas e compostos aromáticos, incluindo constituintes como benzeno, tolueno,

* Mestrando em Engenharia Mecânica

Professor Depto. Eng. Mecânica

[†] Professor Depto. Eng. Sanitária e Ambiental

etilbenzeno e xilenos (denominados grupo BTEX), os quais representam os compostos mais solúveis e mais móveis encontrados na gasolina (Poulsen *et al.*, 1992). A solubilidade dos hidrocarbonetos monoaromáticos denominados BTEX encontrados na gasolina poderá ainda ser maior se a gasolina for misturada com solventes orgânicos oxigenados, tais como álcool e éteres, como é o caso da gasolina comercial brasileira que é misturada com etanol, que é um co-solvente potencial (Corseuil e Alvarez, 1996).

Antes da década de 80, muitos

Simbologia

$b =$	<i>Coefficiente experimental de sorção (-)</i>
$C =$	<i>Concentração (ML^{-3})</i>
$C_f =$	<i>Concentração da fonte de contaminante (ML^{-3})</i>
$D_{ij} =$	<i>Coefficiente de Dispersão (L^2T^{-1})</i>
$f_c =$	<i>Fração volumétrica do co-solvente na mistura de solventes binários (-)</i>
$k =$	<i>Permeabilidade absoluta (L^2)</i>
$K_d =$	<i>Coefficiente de distribuição (L^3M^{-1})</i>
$K_{ow} =$	<i>Coefficiente de partição octanol-água (-)</i>
$n =$	<i>Porosidade efetiva (-)</i>
$P =$	<i>Pressão ($ML^{-1}T^{-2}$)</i>
$R =$	<i>Fator de retardo (-)</i>
$S =$	<i>Massa de soluto adsorvida por unidade de massa seca do meio poroso (-)</i>
$S_f =$	<i>Massa de soluto proveniente da fonte de contaminante adsorvida por unidade de massa seca do meio poroso (-)</i>
$S_m =$	<i>Solubilidade dos compostos hidrofóbicos na mistura binária de solventes (ML^{-3})</i>
$S_w =$	<i>Solubilidade dos compostos hidrofóbicos na água pura (ML^{-3})</i>
$t =$	<i>Tempo (T)</i>
$V =$	<i>Velocidade intersticial da água no meio poroso, representada pelas componentes u e v (LT^{-1})</i>
$V' =$	<i>Velocidade de Darcy (LT^{-1})</i>
$W =$	<i>Fluxo volumétrico de contaminante por unidade de comprimento (L^2T^{-1})</i>
$x, y =$	<i>Eixos coordenados ortogonais</i>
$\alpha_L,$	<i>Dispersividades longitudinal e transversal</i>
$\alpha_T =$	<i>(L)</i>
$\bar{\beta} =$	<i>Aumento relativo de solubilidade dos compostos hidrofóbicos orgânicos com o aumento da fração de co-solvente (-)</i>
$\lambda =$	<i>Coefficiente de decaimento de primeira ordem (T^{-1})</i>
$\mu =$	<i>Viscosidade dinâmica ($ML^{-1}T^{-1}$)</i>
$\rho_b =$	<i>Densidade do aquífero (ML^{-3})</i>
$\rho =$	<i>Densidade (ML^{-3})</i>

microbiologistas acreditavam que a vida abaixo dos primeiros poucos metros do solo era muito limitada ou até inexistente (Borden e Bedient, 1986). A seguir surgiram estudos, a partir de novas técnicas, que demonstraram que diversas populações microbianas estão presentes na subsuperfície, e, aparentemente a predominância é de bactérias (Hirsch e Rades-Rohkohl, 1983). Em amostras analisadas de água subterrânea de 12 diferentes aquíferos contaminados por hidrocarbonetos, foram encontradas bactérias consumindo hidrocarbonetos em todas as amostras a níveis acima de 10^6 organismos/ml (Litchfield e Clark, 1973). Portanto, o processo de biodegradação é uma reação bioquímica que é mediada por microorganismos.

Expressões cinéticas tem sido desenvolvidas para estimar a bio-transformação de contaminantes orgânicos. Em alguns casos pode-se assumir que a cinética de biodegradação microbiana é rápida em comparação com o transporte de oxigênio, e que o crescimento de microorganismos e a utilização de oxigênio e compostos orgânicos na subsuperfície pode ser simulada com uma reação instantânea entre o contaminante orgânico e o oxigênio. Este é o chamado *modelo de reação instantânea* (Borden e Bedient, 1986).

Um outro modelo de degradação que merece citação, é o *modelo cinético de Monod*, que faz distinção entre compostos orgânicos de diferentes potenciais de biodegradação. Este modelo é numericamente mais complexo para simular, requer uma quantidade enorme de dados de campo, e, principalmente, pouco trabalho tem sido feito aplicando-o em situações práticas (Rifai e Bedient, 1990).

Uma alternativa simples para determinar a razão de degradação envolve o uso de uma *equação de primeira ordem* (Bedient *et al.*, 1994), do tipo

$$\frac{dC}{dt} = -\lambda C \quad (1)$$

onde C é a concentração biodegradada e λ é o coeficiente de decaimento de primeira ordem.

2.1 Modelos de Simulação Pesquisados

As dificuldades tecnológicas e econômicas associadas a remediação de solos e aquíferos e a falta de critérios de qualidade ambiental que levem em consideração fatores específicos do local contaminado, têm dificultado tanto as

ações dos órgãos de controle ambiental como a das partes responsáveis pela contaminação (Corseuil e Martins, 1997). Daí a importância de uma ferramenta que auxilie na simulação e visualização do problema de contaminação de solos.

O software “Bioscreen” (Newell *et al.*, 1996) é uma das ferramentas disponíveis para simulação de derramamento de contaminantes. Ele inclui três diferentes modelos: transporte de soluto sem decaimento, transporte de soluto com processo de decaimento de primeira ordem modelado com biodegradação e, transporte de soluto com biodegradação modelada com reação de biodegradação “instantânea” (Newell *et al.*, 1996). Baseia-se no modelo analítico de Domenico (1987) que assume uma fonte plana vertical de concentração constante e infinita. Entende-se por decaimento aqui, a queda temporal da concentração do componente.

A simulação da contaminação de solos e aquíferos a partir de NAPL (Non-Aqueous Phase Liquids), incluindo as três fases envolvidas no problema (água, NAPL e gás), pode ser feita a partir do “NAPL: Simulator Documentation” (Guarnaccia *et al.*, 1997), que resolve numericamente por elementos finitos um conjunto de equações diferenciais parciais acopladas, que são as equações de balanço fundamentais e relações termodinâmicas.

Mais recentemente Rifai *et al* (1998) elaboraram o “Bioplume III”, que é um modelo bidimensional, em diferenças finitas para simulação da atenuação natural de contaminantes orgânicos em águas subterrâneas, incluindo os processos de advecção, dispersão, sorção e biodegradação. Para tanto, esta ferramenta numérica está baseada no Método das Características (MOC). O modelo acopla as equações hidrodinâmicas da água com as equações de transporte do soluto (Konikow e Bredehoeft, 1978).

É proposto neste trabalho um modelo que resolve por volumes finitos o campo de concentração bidimensional, considerando a difusão, advecção e a sorção do contaminante. A influência da presença do etanol na gasolina é considerada nos fenômenos de biodegradação e co-solvência dos BTEX. Além disso, o campo de velocidades da água subterrânea é obtido a partir das equações de Darcy. Como as equações são resolvidas numericamente, heterogeneidades poderão também serem consideradas.

2.2 A Influência do Etanol na Biodegradação dos BTEX

Em todos os trabalhos pesquisados não se verificou a existência de modelos que simulassem a presença de dois contaminantes, como etanol e compostos BTEX, o caso da gasolina brasileira. Foi comprovado por Santos (1996), que há preferencialmente a degradação do etanol por parte dos microorganismos, retardando a degradação dos compostos BTEX, conforme ilustra a Fig. 1 para o benzeno. Percebe-se, pela figura, que a amostra do contaminante puro foi totalmente consumida em menos de quatro dias, ao passo que misturado a uma grande concentração de etanol (300 mg/l), em doze dias não foi verificada biodegradação significativa.

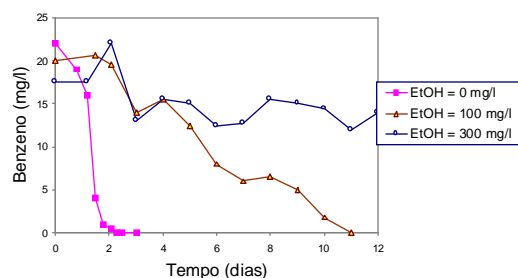


Figura 1. Efeito de concentrações do etanol sobre a biodegradação aeróbica do benzeno

A causa mais provável para a não degradação dos compostos BTEX em presença de etanol, deve-se a preferencial degradação dos microorganismos pelo etanol que é um substrato mais simples em relação ao benzeno, tolueno, etilbenzeno e xileno, o que ocasiona uma demanda de oxigênio suficiente para tornar o meio anaeróbico (Santos, 1996).

2.3 Efeito de Co-Solvência do Etanol na Gasolina

A solubilidade efetiva de um composto orgânico presente na gasolina, pode ser estimado a partir da solubilidade do composto puro e sua fração molar na gasolina. A solubilidade na gasolina aumenta se o composto orgânico conter oxigênio, como o álcool e o éter. Quando a gasolina entra em contato com a água, o álcool existente neste combustível, completamente miscível em água, irá migrar para a água subterrânea (Corseuil e Fernandes, 1999).

Portanto, uma alta concentração de etanol na água pode facilitar a transferência dos *BTEX* presentes na gasolina para a fase aquosa, aumentando a solubilidade dos hidrocarbonetos aromáticos na água subterrânea, num processo chamado de “efeito de co-solvência” (Banerjee e Yalkowsky, 1988).

Um modelo matemático simples para prever o possível aumento da solubilidade de contaminantes na presença de etanol na água subterrânea, consiste em assumir que a solubilidade dos compostos hidrofóbicos na água (*BTEX*, por exemplo) aumenta *log-linearmente* com o aumento da fração volumétrica dos solventes orgânicos completamente miscíveis na água, numa mistura binária. Esta relação pode ser expressa matematicamente como o proposto por Yalkowsky e Roseman (1981):

$$\log(S_m) = \log(S_w) + f_c \bar{\beta} \quad (2)$$

onde S_m é a solubilidade dos compostos *BTEX* ou outros compostos hidrofóbicos na mistura binária de solventes, S_w é a solubilidade dos compostos *BTEX* ou outros compostos hidrofóbicos na água pura, f_c é a fração volumétrica do co-solvente (etanol, por exemplo) na mistura de solventes binários e $\bar{\beta}$ é definido como o aumento relativo de solubilidade dos compostos hidrofóbicos orgânicos com o aumento da fração de co-solvente, e pode ser determinado a partir de (Corseuil e Fernandes, 1999):

$$\bar{\beta} = 1.02 \log(K_{ow}) - 1.52 \quad (3)$$

onde K_{ow} é o coeficiente de partição octanol-água, que para os compostos *BTEX* assume valores entre 2 e 3 (Howard, 1990), e representa a hidrofobicidade dos compostos (Bedient *et al.*, 1994). Os experimentos de laboratório demonstram que a massa total dos compostos *BTEX* aumenta, aproximadamente, 30% para uma fração de 10% de etanol na água (Corseuil e Fernandes, 1999).

2.4 O Efeito de Sorção – A interação do Contaminante com o Solo

Os processos de sorção podem ser divididos em adsorção e absorção. O primeiro refere-se ao excesso de concentração de contaminante na superfície do sólido (solo), enquanto a absorção

implica na maior ou menor penetração no sólido pelo contaminante. A hidrofobicidade dos compostos contaminantes orgânicos na água justifica a sua acumulação na interface sólido-água (Bedient *et al.*, 1994).

A sorção é determinada experimentalmente pela mensuração do paracionamento do contaminante em um sedimento particular, solo ou rochas. Os diversos modelos aplicados em sistemas ambientais relatam a quantidade de soluto, S , retardada por unidade de fase sólida. Os resultados são plotados em um gráfico, originando expressões avaliadas em um sistema fixo de temperatura, conhecido como “isoterma de sorção”. A isoterma de Freundlich é o modelo não-linear mais largamente utilizado (Weber Jr *et al.*, 1991), e é dado por

$$S = K_d C^b \quad (4)$$

onde K_d é o coeficiente de distribuição e b é um coeficiente obtido experimentalmente. Se $b = 1$, a Eq. 4 é conhecida como isoterma linear. A isoterma linear é apropriada para casos em que o potencial da sorção aumenta uniformemente com o aumento da concentração. Este modelo tem sido considerado adequado em alguns casos, mais comumente em casos de concentrações baixas de contaminante e para sólidos com baixo potencial de sorção (Weber Jr *et al.*, 1991).

Além disso, optou-se por este modelo de sorção neste trabalho em virtude da substancial redução da complexidade numérica, uma vez que desta forma elimina-se qualquer possibilidade de não-linearidades no problema, que demandariam atualização constante dos coeficientes, para cada nível temporal.

3. Formulação Matemática

O modelo matemático a ser resolvido envolve a solução das equações de Darcy no meio poroso (que são as equações do movimento para este caso), acrescidas das equações de transporte de soluto (concentração) para os elementos *BTEX* e o etanol.

Propõe-se aqui uma formulação matemática que será resolvida numericamente. Tal metodologia, além de considerar heterogeneidades no modelo, permite tratar a fonte de contaminação como fisicamente o é: um termo fonte para a equação diferencial. Todas as soluções analíticas pesquisadas trazem a “informação” da fonte de contaminação para a equação diferencial como uma condição de contorno, o que implica na impossibilidade da

visualização da dispersão (*dispersão hidrodinâmica + difusão molecular*) a montante, que em alguns casos, embora assumindo valores pequenos, não pode ser desprezada. A solução numérica também permite a solução de problemas físicos que apresentem mais de uma fonte de contaminação no domínio analisado. Estes fatores justificaram a escolha do método numérico.

Os processos físicos que controlam o fluxo que entra e sai do volume elementar são advecção e dispersão hidrodinâmica. A perda ou ganho de massa de soluto no volume elementar pode ocorrer como um resultado de reações químicas ou bioquímicas ou decaimento radioativo. A principal equação diferencial que descreve o transporte de elementos reativos dissolvidos em um meio poroso saturado é dada por (Bedient *et al.*, 1994)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho C) = & \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) + \\ & - \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho C V_i) - \lambda \rho \left(C + \frac{\rho_b}{n} S \right) + \\ & - \frac{\rho_b}{n} \frac{\partial}{\partial t} (\rho S) + \frac{W\rho}{n\Delta x\Delta y} \left[C_f + \frac{\rho_b}{n} S_f \right] \end{aligned} \quad (5)$$

onde D_{ij} é o tensor dispersão, λ é o coeficiente de decaimento de 1a. ordem, ρ_b a densidade do aquífero, n a porosidade, W o fluxo volumétrico de contaminante por unidade de comprimento, C_f é a concentração da fonte de contaminante, e S e S_f são, respectivamente, a massa de soluto adsorvida por unidade de massa seca do meio poroso e massa de soluto proveniente da fonte de contaminante adsorvida por unidade de massa seca do meio poroso, que são calculadas a partir da Eq. 4. Assumindo a hipótese de $b=1$ na isoterma de Freundlich, e substituindo na Eq. 5, obtém-se a equação de transporte, que aqui será utilizada para os elementos BTEX e o etanol,

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho C)}{\partial t} = & \frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial(\rho C V_i)}{\partial x_i} \right] + \\ & - \lambda \rho C + \frac{W\rho C_f}{n\Delta x\Delta y} \end{aligned} \quad (6)$$

onde R é o chamado fator de retardo, que tem o efeito de retardar as espécies adsorvidas em relação a velocidade advectiva da água subterrânea, dado por

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{n} K_d \quad (7)$$

Como na maioria dos casos o termo advectivo é o mais importante no transporte de contaminantes, justifica-se portanto, a contribuição deste trabalho também na determinação do campo de velocidades da água subterrânea, que será utilizado na determinação dos campos de concentração. Neste ponto, os modelos pesquisados, com exceção do “Bioplume III”, apresentaram-se deficientes por não possibilitarem a determinação do campo de velocidades.

Em um meio poroso, a velocidade de escoamento é proporcional ao gradiente de pressão. Esta é a chamada Lei de Darcy (Bejan, 1995). A equação para o caso monofásico e meio isotrópico é dada por

$$\vec{V}' = -\frac{k}{\mu} \nabla P \quad (8)$$

onde k é a permeabilidade absoluta e μ é a viscosidade.

Finalmente, considera-se importante a determinação do campo de velocidades, uma vez que quando existir um bombeamento de água subterrânea, o campo de velocidades, que poderia estar sendo considerado unidimensional, alterar-se-á consideravelmente.

4. Formulação Numérica

Conforme já foi mencionado anteriormente, a metodologia numérica adotada aqui é a dos volumes finitos. Embora não se tenha encontrado na literatura nenhum modelo que houvesse resolvido algum problema de derramamento de contaminantes em águas subterrâneas com tal metodologia, justifica-se a escolha porque trata-se de um técnica numérica largamente empregada em problemas de escoamentos de fluidos, e portanto, nada mais próprio que utilizá-la aqui.

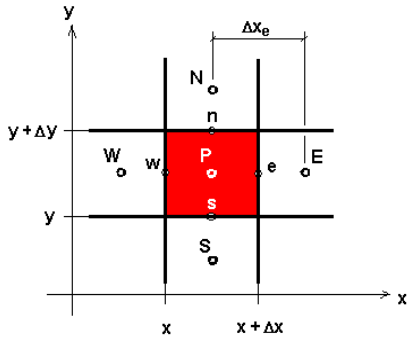


Figura 2. Volume elementar e seus vizinhos. Situação bidimensional

É prática dos volumes finitos obter a aproximação numérica da equação diferencial, a partir de sua integração no volume elementar apresentado na Fig. 2.

Portanto, integrando a Eq. 6 no tempo e no espaço bidimensional, conforme proposto por (Maliska, 1995) e, avaliando as derivadas cruzadas nos pontos e , w , n e s por aproximações de segunda ordem (do tipo diferenças centrais), enquanto que a avaliação das funções e suas outras derivadas nestes mesmos pontos, pela função de interpolação WUDS (*Weighted Upstream Differencing Scheme*), chega-se a equação geral para o transporte de concentração dada por

$$A_p C_P = A_e C_E + A_w C_W + A_n C_N + A_s C_S + A_{ne} C_{NE} + A_{se} C_{SE} + A_{nw} C_{NW} + A_{sw} C_{SW} + B \quad (9)$$

onde A_i são coeficientes, os sub-índices E , W , N , S , SE , NE , NW e SW são os pontos onde são avaliadas as propriedades e B é o termo fonte.

As componentes da velocidade média intersticial u e v são dadas pela velocidade de Darcy (velocidade média no volume) dividida pela porosidade n , na forma,

$$\vec{V} = \frac{\vec{V}'}{n} - \frac{k}{n\mu} \nabla P \quad (10)$$

A Eq. 10 pode ser aproximada de forma conveniente para contemplar a heterogeneidade do meio, resultando em expressões para a velocidade do tipo da Eq. 11 para a componente u avaliada na face leste do volume de controle apresentado na Fig. 2, por exemplo.

$$u_e = \frac{u_e'}{n} - \frac{1}{n\mu} \frac{k_E k_P}{(k_E + k_P)} \frac{(P_E - P_P)}{\frac{\Delta x_e}{2}} \quad (11)$$

Substituindo as equações de u_e , u_w , v_n e v_s na equação da conservação da massa para meios porosos (Bejan, 1995),

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho n) + \frac{\partial(\rho u')}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v')}{\partial y} = 0 \quad (12)$$

obtém-se uma equação geral para a pressão dada por

$$A_p P_P = A_e P_E + A_w P_W + A_n P_N + A_s P_S + B \quad (13)$$

onde A_i são coeficientes, os sub-índices E , W , N e S são os pontos onde são avaliadas as propriedades e B é o termo fonte. Uma vez determinado o campo de pressões, retorna-se às expressões do tipo da Eq. 11 e determina-se o campo de velocidades.

5. Resultados

O problema unidimensional de transporte de benzeno, supondo decaimento de 1a. ordem, sem retardo, foi resolvido e comparado com os resultados de Davis *et al.*(1994), para o caso da velocidade da água subterrânea $u = 0,1524$ m/d, dispersividade $\alpha_L = 6,858$ m, e o domínio limitado em 150 m, para um tempo de aproximadamente 4 anos. A meia-vida do contaminante foi assumida como sendo $t_{1/2} = 50$ d. A condição inicial é $C(x,0) = 0$. Já as condições de contorno são $C(0,t) = 15$ mg/l e derivada nula à jusante. Este problema tem solução analítica dada por Bear (1979). A Fig. 3 apresenta um gráfico que demonstra que os resultados aqui obtidos concordam com a solução analítica.

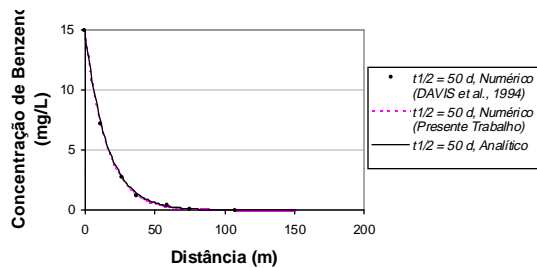


Figura 3. Comparação entre os resultados numéricos de Davis *et al.*(1994), com aqueles obtidos pelo presente trabalho e a solução analítica dada por Bear (1979)

A solução numérica do problema mostrado na Fig. 4, bidimensional, com decaimento de 1a. ordem, com velocidade constante e horizontal, e com retardo é apresentada por Macquarrie *et al.* (1990). A solução analítica deste problema é encontrada em Sudicky (1985). A comparação entre as soluções analítica e aquelas obtidas a partir da metodologia de volumes finitos proposta neste trabalho pode ser observado nas Fig. 5 e 6, de onde se conclui que os resultados aqui obtidos podem ser considerados muito bons.

Nos casos resolvidos, para permitir comparação com a solução analítica, o campo de velocidades foi admitido unidimensional e constante, e neste caso as componentes do tensor dispersão D_{ij} diferentes de zero, desprezada a difusão molecular, são dadas por (BEAR, 1969)

$$D_{xx} = a_L u \quad (14)$$

$$D_{yy} = a_T u \quad (15)$$

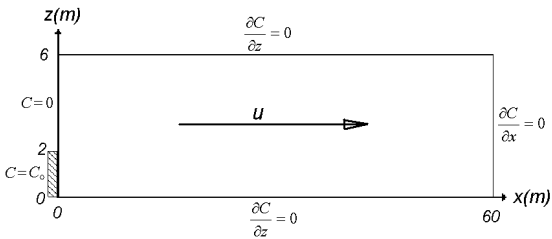


Figura 4. Condições de contorno e domínio do problema bidimensional analisado, com $u = 0,09 \text{ m/d}$, $\alpha_L = 0,6 \text{ m}$, $\alpha_T = 0,005 \text{ m}$, $R = 1,2$ e $\lambda = 0,007 \text{ d}^{-1}$

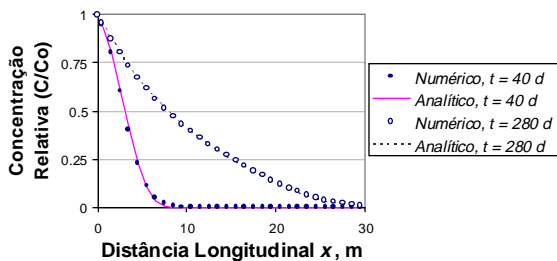


Figura 5. Comparação entre as soluções analítica e numérica para o perfil de concentração longitudinal ($z = 0$)

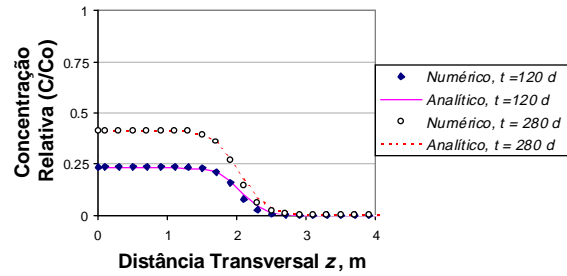


Figura 6. Comparação entre as soluções analítica e numérica para o perfil de concentração transversal ($x = 10 \text{ m}$)

6. Conclusões

Os resultados do presente trabalho, mesmo preliminares, mostraram que o modelo matemático para previsão de contaminantes no lençol freático considerando sorção, retardo, biodegradação e, principalmente, a influência do etanol na biodegradação de 1a. ordem e na co-solvência dos BTEX, pode ser resolvido eficientemente com o método dos volumes finitos. A possibilidade de determinar o campo de velocidades através das equações de Darcy permitem que escoamentos mais complexos, envolvendo bombeamentos e sucções no solo, possam ser fornecidos às equações de conservação dos contaminantes, conferindo ao método características que o tornam importante ferramenta na área de engenharia ambiental.

Referências

- Banerjee, S., Yalkowsky, S. H., *Cosolvent-Induced Solubilization of Hydrophobic Compounds into Water*. Analytical Chemistry, v. 60, p. 2153-2155 (1988).
- Bear, J., *Hydraulics of Groundwater*, McGraw-Hill, New York, pp. 268-269 (1979).
- Bear, J., *Flow through Porous Media*, (R. J. M. De Wiest, ed.), pp. 109-199. Academic Press, New York (1969).
- Bedient, P. B., Rifai, H. S., Newell, C. J., *Ground Water Contamination: Transport and Remediation*. Prentice-Hall PTR, NEW JERSEY (1994).
- Bejan, A., *Convection Heat Transfer*. John Wiley & Sons, New York (1995).
- Borden, R. C., Bedient, P. B., *Transport of Dissolved Hydrocarbons Influenced By Oxygen-Limited Biodegradation: 1. Theoretical Development*. Water Resources Research, 13: 1973-1982 (1986).

Corseuil, H. X., Alvarez, P. J. J., *Implications of the Presence of Ethanol on Intrinsic bioremediation of BTX Plumes in Brazil*. Hazardous Materials, 13 (2): 213-221 (1996).

Corseuil, H. X., Fernandes, M., *Co-Solvency Effect in Aquifers Contaminated with Ethanol-Amended Gasoline*. Dep. Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, Brasil (1999).

Corseuil, H. X., Martins, M. D. M., *Contaminação de Águas Subterrâneas por Derramamentos de Gasolina: O Problema é Grave?* In: Engenharia Sanitária e Ambiental, Vol. 2, N° 2, Abril/Junho (1997).

Davis, J. W., Klier, N. J. And Carpenter, C. L., *Natural Biological Attenuation of Benzene in Ground Water Beneath a Manufacturing Facility*, Ground Water, Vol. 32, No. 2, pp. 215-226 (1994).

Domenico, P. A., *An Analytical model for Multidimensional Transport of a Decaying Contaminant Species*. Journal of Hydrology, 91, 49-58 (1987).

Fernandez, M., Corseuil, H. X., *Contaminação de Águas Subterrâneas por Derramamento de Gasolina: Efeito Cossolvência*. In: 3° Simpósio Ítalo-Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental (SIBESA), Gramado, Junho (1996).

Guarnaccia, J., Pinder, G., Fishman, M., *NAPL: Simulator Documentation*. National Risk Management Research Laboratory, EPA/600/R-97102, October (1997).

Hirsch, P., Rades-Rohkohl, *Microbial Diversity in a Ground-Water Aquifer in Northern Germany*, Appl. Environ. Microbiol., 24, 183-200 (1983).

Howard, P. H., *Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals*. Vol. I and II, Lewis Publishers, Inc, Chelsea, MI (1990).

Konikow, L. F., Bredehoeft, J. D., *Computer Model of Two-Dimensional Solute Transport and Dispersion in Ground Water*. Techniques of Water Resources Investigation of the United States Geological Survey, Book 7, Reston, VA (1978).

Litchfield, J. H., Clark, L. C., *Bacterial Activities in Ground Waters Containing Petroleum Products*, Pub. 4211, Am. Petrol. Inst., Washington, D. C. (1973).

Macquarrie, K. T. B., Sudicky, E. A., And Frind, E. O., *Simulation of Biodegradable*

Organic Contaminants in Groundwater: 1. Numerical Formulation in Principal Directions, Water Resources Res. 26(2): 207-222 (1990).

Maliska, C. R., *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, LTC – Livros Técnicos e Científicos S.A., Rio de Janeiro, Brasil (1995).

Newell, C. J., Mcleod, R. K., Gonzalez, J. R., *BIOSCREEN User's Manual. National Attenuation Decision Support System. Version 1.3*, National Risk Management Research Laboratory, EPA/600/R-96/087, August (1996).

Poulsen, M.; Lemon, L.; Barker, J. F., *Dissolution of Monoaromatic Hydrocarbons into Groundwater from Gasoline – Oxigente mixtures*. Environ. Sci. Technol., Vol. 26, pp. 2483-2489 (1992).

Rifai, H. S. And Bedient, P. B., *Comparison of Biodegradation Kinetics with an Instantaneous Reaction Model for Groundwater*. Water Resources Research, Vol. 26, No. 4, Pages 637-645 (1990).

Rifai, H. S., Newell, C. J., Gonzalez, J. R. Dendrou, S. Kennedy, L., Wilson, J. T., *BIOPLUME III Natural Attenuation Decision Support System*. National Risk Management Research Laboratory, EPA/600/R-98/010, January (1998).

Santos, R. C. dos., *Impacto do Etanol na Biodegradação de Compostos Hidrocarbonetos Monoaromáticos em Aquíferos Contaminados por Derramamento de Gasolina*. Dissertação de Mestrado. Departamento de Engenharia Ambiental. UFSC, Florianópolis (1996).

Sudicky, E. A., *A Collection of Analytical Solutions for Solute Transport in Porous and Fractured Porous Media*, report, Inst. For Groundwater Res., University of Waterloo, Ont. (1985).

Weber Jr, W. J., Mcginley, P. M., And Lynn, E. K., *Sorption Phenomena in Subsurface Systems: Concepts, Models and Effects on Contaminant Fate and Transport*. Water Res., Vol. 25, No. 5, pp. 499-528 (1991).

Yalkowsky, S. H. & Roseman, T. *Solubilization of Drugs by Cosolvents. Techniques of Solubilization of Drugs*. Yalkowski, S. H., Ed. Marcel Dekker, Inc: New York, p. 91-134 (1981).