

TT29

**MODELO DO BIOSCREEN PARA SIMULAÇÃO DE CONTAMINAÇÃO DE  
BETEX EM PLUMA**

**JOSIMAR ALMEIDA**

BIÓLOGO PÓS-DOCTORADO ENGENHARIA AMBIENTAL. PROFESSOR ESCOLA DE ENGENHARIA DA  
UFRJ/PROFESSOR ASSOCIADO DO IPEN/USP

**LAIS ALENCAR DE AGUIAR**

ENGENHEIRA QUÍMICA, DOUTORA EM ENGENHARIA NUCLEAR. PESQUISADORA ASSOCIADA DO  
NASA/UFRJ. CONSULTORA SENIOR EM ANÁLISE DE RISCOS

**GUSTAVO AVEIRO LINS**

BIÓLOGO, ESPECIALISTA EM MEIO AMBIENTE E EM EDUCAÇÃO. PROF. SEE/RJ/ CEDERJ; AGENTE  
DE SANEAMENTO CEDAE

## **Modelo do BIOSCREEN para simulação de contaminação de BTEX em pluma** JOSIMAR ALMEIDA; LAIS ALENCAR DE AGUIAR; GUSTAVO AVEIRO LINS

### **NATUREZA DO TRABALHO: PROFISSIONAL**

*A contaminação de águas subterrâneas por combustível derivado de petróleo tem sido objeto de crescente pesquisa no Brasil. Os compostos, benzeno, tolueno, etilbenzeno e xilenos (BTEX), presentes nesses combustíveis, são extremamente tóxicos à saúde humana e ao meio ambiente. A remediação de aquíferos e solos contaminados depende do conhecimento dos parâmetros físicos e químicos de cada sítio para quantificar os fluxos e o transporte de contaminantes nas águas subterrâneas, esta quantificação tem sido feita através da modelagem matemática utilizada em modelos computacionais, um destes modelos mais utilizados é o BIOSCREEN. O objetivo deste trabalho é avaliar a utilização do modelo BIOSCREEN para acompanhar a evolução da pluma de contaminantes, a extensão da área afetada e a previsão do tempo de restauração da qualidade da água da região estudada. O estudo de caso tratado neste artigo, refere-se a um vazamento accidental ocorrido em um posto de serviço localizado no bairro de Brisamar, município de Itaguaí/RJ. O referido posto possui um tanque de álcool, dois de gasolina e dois de diesel, cada um destes tanques com capacidade de 15.000 L. Concluiu-se que: depois de realizado o estudo não foi possível avaliar a evolução da pluma de contaminantes para este sítio através do modelo computacional BIOSCREEN devido ao número limitado de parâmetros experimentais.*

**Contaminação, BTEX, BIOSCREEN, Biorremediação.**

### **RESUMO**

Em vazamentos de postos de abastecimento automotivos, os maiores problemas de poluição da água subterrânea, são atribuídos aos hidrocarbonetos monocromáticos, que são os constituintes mais solúveis e móveis da gasolina, tais como: benzeno, tolueno, etilbenzeno e xilenos (conhecidos como BTEX). Esses compostos são poderosos depressores do sistema nervoso central, apresentando toxicidade crônica, mesmo em pequenas concentrações. O benzeno é reconhecidamente o mais tóxico de todos os BTEX. Trata-se de uma substância comprovadamente carcinogênica se ingerida mesmo em baixas concentrações durante períodos não muito longos de tempo. Uma exposição aguda (altas concentrações em curtos períodos) por inalação ou ingestão pode causar até mesmo a morte de uma pessoa. Enquanto o padrão de potabilidade do benzeno estabelecido pelo Ministério da Saúde (MS) é de  $5 \mu\text{g L}^{-1}$ , sua concentração, quando dissolvida na água em contato com gasolina, pode chegar a  $3 \times 10^4 \mu\text{g L}^{-1}$ .

A poluição de água subterrânea por vazamento de gasolina de tanque de armazenamento subterrâneo (TAS) constitui uma grande preocupação pelos seus riscos ambientais e para a saúde humana. Este problema está associado ao final da vida útil dos TAS, que é em média de 25 anos e, como a maioria dos postos de gasolina aqui no Brasil foram inaugurados na década de 70, é de se esperar que muitos desses TAS estejam com problemas de vazamento, apesar de não existirem dados sobre o assunto.

A preocupação principal, após um vazamento de combustível, é a detecção e o isolamento da pluma do contaminante, objetivando facilitar os trabalhos de remediação, diminuir os impactos ambientais e os custos na recuperação da área atingida.

O objetivo deste trabalho é avaliar a utilização do modelo (BIOSCREEN) para acompanhar a evolução da pluma de contaminantes, a extensão da área afetada e a previsão do tempo de restauração da qualidade da água da região estudada.

## **EXPOSIÇÃO**

### **Características do sítio**

O estudo de caso tratado neste artigo, refere-se a um vazamento acidental ocorrido em um posto de serviço localizado no bairro de Brisamar, município de Itaguaí / RJ. O referido posto possui um tanque de álcool, dois de gasolina e dois de diesel, cada um destes tanques com capacidade de 15.000 L.

O vazamento de combustível foi constatado por dois moradores vizinhos ao posto, quando estes detectaram a saída de gasolina pura, em fase livre, de suas torneiras. Uma semana após a comunicação do vazamento foi efetuado o bombeamento do produto na fase livre e o esgotamento do tanque avariado.

Nos poços de monitoramento foram feitas coletas com o objetivo de avaliar a qualidade da água subterrânea quanto à presença dos BTEX, nitrato, sulfato e  $\text{Fe}^{2+}$ , além da análise dos seguintes parâmetros: pH, temperatura, condutividade, potencial químico, turbidez e oxigênio dissolvido.

Os dados de campo disponíveis, referentes à hidrogeologia local, foram apenas os fornecidos pela distribuidora (HIDROPLAN, 1999) e estão listados na Tabela 1.

**Tabela 1** – Dados hidrogeológicos do local

PARÂMETROS	MÍNIMO	MÁXIMO
Gradiente hidráulico	0,03%	1%
Condutividade hidráulica (cm s <sup>-1</sup> )	1,43 x 10 <sup>-5</sup>	2,98 x 10 <sup>-5</sup>
Porosidade efetiva para o fluxo	3%	12%
Velocidade linear média (cm dia <sup>-1</sup> )	0,03%	0,21%

A litologia da área, segundo relatório Hidroplan (1999), é monótono e permite assumir que o aquífero é homogêneo para a área de interesse deste trabalho. O aquífero foi assumido como sendo isotrópico. A extensão da pluma é da ordem de 83,85 m<sup>2</sup>.

A potenciometria local indica um fluxo da água subterrânea para o sul, com as linhas equipotenciais apresentando-se aproximadamente sob orientação leste-oeste. A condutividade hidráulica foi determinada a partir de realização de três *Slug* testes (AZIZ *et al.*, 2000)

Os dados de dispersão, adsorção foram extraídos da literatura (BEDIENT, RIFAI, & NEWELL, , 1999) com base em sítios com características semelhantes.

Para simulação do transporte de contaminantes os valores de dispersividade longitudinal, transversal e vertical foram obtidos a partir das equações:  $\alpha_x = 0,10 L_p$ ,  $\alpha_y = 0,10 \alpha_x$  e  $\alpha_z = 0,010 \alpha_x$  (GELHAR, 1986). Segundo Gelhar (1986), a dispersividade longitudinal pode ser estimada como um valor de 10% do comprimento da pluma.

Os valores de biodegradação considerados foram os valores médios de aceptores de elétron sugeridos por Newell *et al.*, (1997) apresentados na Tabela 2. O fator de retardo considerado foi igual a 1, o que significa que a velocidade dos contaminantes é igual a da água subterrânea.

**Tabela 2** – Valores médios dos aceptores de elétron sugerido pelo manual do BIOSCREEN

ACEPTOR DE ELÉTRON	CONCENTRAÇÃO (mg L <sup>-1</sup> )
Oxigênio dissolvido	5,8
Nitrato	6,3
Sulfato	24,6
Metano	7,2
Fe <sup>2+</sup>	1,6

### O modelo computacional BIOSCREEN

Com o objetivo de avaliar os riscos ambientais envolvidos no vazamento, foi feita uma simulação de transporte de contaminantes através do software BIOSCREEN. O BIOSCREEN (NEWELL *et al.*, 1997) é baseado na solução analítica de Domenico (CLEARY, 1991) e (CAMPOS, 1999) para o modelo de transporte de soluto, e tem habilidade para simular tridimensionalmente o transporte de hidrocarbonetos dissolvidos considerando os processos de advecção, dispersão, sorção e biodegradação (decaimento de primeira ordem e reação instantânea). O modelo original assume uma penetração vertical unidimensional do contaminante, orientada

perpendicularmente da fonte para o fluxo de água subterrânea, visando simular o vazamento de compostos orgânicos movendo-se segundo o fluxo de água subterrânea. Neste programa, a solução de Domenico é adaptada para promover a representação de três tipos de modelos:

1) Transporte de soluto sem decaimento – Adequado para prever o movimento de solutos conservativos (não degradáveis), como por exemplo: o cloro.

2) Transporte de soluto com processo de biodegradação com decaimento de primeira ordem – Neste modelo a razão de degradação do soluto é proporcional à sua concentração.

3) Transporte do soluto com reação de biodegradação – A biodegradação de compostos orgânicos em água subterrânea é muito mais difícil de ser quantificada quando se utiliza reação de decaimento, uma vez que, neste caso, se desconsidera a limitação dos aceptores de elétron, sendo estes efeitos mais exatos quando incorporados à equação de reação instantânea no modelo de transporte. Esta é a forma em que se baseia o modelo de reação instantânea do BIOSCREEN.

O BIOSCREEN tem sido muito utilizado como modelo de avaliação para se determinar a viabilidade de RNA (Remediação através da Atenuação Natural) no sítio, também pode ser utilizado como modelo primário de RNA em águas subterrâneas de pequenos sítios.

Como modelo analítico, o BIOSCREEN assume condições simples de fluxo para água subterrânea, não devendo ser aplicado onde sistemas de bombeamento são criados para complicar o fluxo do campo. Em adição, o modelo não pode ser aplicado onde os gradientes de fluxo vertical afetam o transporte do contaminante. Não se deve aplicá-lo onde os resultados esperados são extremamente detalhados, os quais estão intimamente ligados às condições requeridas do sítio. Nestes casos deve-se recorrer a modelos mais sofisticados e abrangentes.

O BIOSCREEN foi utilizado com o objetivo de simular tridimensionalmente o transporte de hidrocarboneto dissolvido considerando os processos de advecção, dispersão, sorção e biodegradação (decaimento de primeira ordem e reação instantânea). Neste trabalho, o modelo foi aplicado para avaliar o tempo de restauração da qualidade da água a níveis de potabilidade, os processos de transporte e a atenuação da contaminação pela biorremediação intrínseca.

### **Os modelos matemáticos e a remediação**

A proteção e a limpeza de aquíferos dependem do conhecimento dos parâmetros físicos e químicos de cada sítio para quantificar os fluxos e o transporte de contaminantes nas águas subterrâneas. Esta quantificação pode ser feita de diversas maneiras, incluindo medidas de campo e modelagem matemática. A abordagem através das medidas de campo é a mais direta, entretanto, raramente é utilizada com exclusividade, devido aos seus altos custos e longos prazos (a água subterrânea move-se muito lentamente, podendo requerer vários anos para se caracterizar seu comportamento), ou em certos casos, inaplicabilidade (por exemplo: o impacto de uma lagoa industrial projetada, mas ainda não construída, que necessita ser avaliado). A abordagem quantitativa utilizada com maior frequência pelos órgãos governamentais e empresas de consultoria é a modelagem. Os modelos utilizados podem ser físicos, ou

computacionais, sendo estes últimos os mais populares desde os anos 60. Como o nome indica, um modelo computacional é uma equação ou série de equações que simulam e prevêem respostas físico-químicas de um aquífero sujeito a perturbações, tais como poços de injeção ou extração ou a migração de um resíduo tóxico (CLEARY, 1991).

Dentre estes programas computacionais, pode-se citar o MODFLOW (MACDONALD & HARBAUGH, 1988), utilizado para análise de fluxo, e os programas BIOSCREEN (NEWELL, *et al.*, 1997), BIOCHLOR (AZIZ, *et al.*, 2000), BIOPLUME III (RIFAI, *et al.*, 1997), MT3D (ZHENG, 1990), RT3D (CLEMENT, 1997) e FemPol (CAMPOS, 1999), utilizados na simulação de transporte de contaminantes. Todos esses modelos são sofisticados e devem ser utilizados quando os resultados esperados devam ser de grande precisão. Em casos onde se deseja utilizar modelos mais simples, o Serviço de Água Subterrânea de Houston desenvolveu o modelo BIOSCREEN (1997). Este é um modelo simples, fácil de ser utilizado e que simula a remediação através da atenuação natural em sítios onde a ocorrência de vazamentos de petróleo ou de seus derivados foi detectada. Seus dados aproximam-se bastante dos usados no BIOPLUME, sendo que no BIOSCREEN não considera interferências verticais no fluxo subterrâneo, o que o torna simplificado quando comparados aos demais modelos citados anteriormente. Entretanto, é de grande utilidade em ambientes em que o fluxo subsuperficial não sofre estes tipos de interferência (CLEARY, 1991).

### **A aplicação do modelo BIOSCREEN no sítio**

Foram feitas três simulações aplicando o modelo BIOSCREEN. Com as simulações 1 e 2 foram feitas tentativas de reproduzir as concentrações de BTEX na época do acidente. A simulação 3 imagina um cenário onde ocorre um acidente TAS (tanque de armazenamento subterrâneo) no município estudado (município de Itaguaí). Esta simulação foi feita na tentativa de avaliar, de acordo com a área modelada e o tempo de vazamento, que pontos de captação de água podem ser atingidos pela pluma de contaminantes.

A simulação 1 foi uma tentativa de reproduzir as concentrações de BTEX na época do acidente a partir dos dados de campo apresentados nas tabelas 1 e 2. A área modelada, de 62 m de comprimento por 30,5 m de largura abrange os pontos atingidos pelo vazamento, incluindo o primeiro ponto de captação, a 30 m da fonte de contaminação. A partir do comprimento da pluma,  $L_p = 62$  m (200ft) e das equações ( $\alpha_x = 0,10 L_p$ ,  $\alpha_y = 0,10 \alpha_x$  e  $\alpha_z = 0,010 \alpha_x$ ), foram calculadas: a dispersividade longitudinal,  $\alpha_x = 6,2$  m (20ft) a dispersividade transversal,  $\alpha_y = 0,6$  m (2 ft) e a dispersividade vertical,  $\alpha_z = 0,06$  (0,02 ft). Os dados da fonte foram estimados segundo as informações da HIDROPLAN (1999), que após bombeamento da fase livre de gasolina, reportou uma concentração residual de BETEX no poço de monitoramento mais próximo da fonte  $16,6 \text{ mg L}^{-1}$  e tamanho  $15 \text{ m}^2$ .

Na simulação 2 foi feita uma calibração do modelo BIOSCREEN na tentativa de reproduzir as concentrações de BETEX na época do acidente. Os dados hidrogeológicos, de biodegradação, área modelada e dados de concentração de BETEX, foram os mesmos utilizados na simulação 1. Contudo, nesta simulação foram

superestimados os dados de dispersão e da área da fonte. Os valores usados foram: dispersividade longitudinal,  $\alpha_x = 96$  m (306 ft), dispersividade transversal,  $\alpha_y = 9,6$  m (30,6 ft) e a dispersividade vertical,  $\alpha_z = 0,96$  m (0,3 ft) e  $150 \text{ m}^2$  para a área da fonte.

A simulação 3 foi feita na tentativa de avaliar, de acordo com a área modelada e o tempo de vazamento, que pontos de captação de água poderiam ser atingidos por uma pluma de contaminantes, em caso de vazamento de combustível em um dos TAS instalados. Nesta simulação foram considerados: a área modelada,  $60 \text{ m}$  (300 ft) x  $30,5 \text{ m}$  (120 ft), tempo de 2 anos após o início do vazamento, a área da fonte de contaminação,  $15 \text{ m}^2$ , e a velocidade da pluma de contaminantes,  $8 \text{ m ano}^{-1}$  ( $26 \text{ ft ano}^{-1}$ ). Por questões de segurança, o valor da velocidade da pluma, foi calculado em 10 vezes maior do que os parâmetros de campo. A partir do comprimento da pluma,  $L_p = 100 \text{ m}$  (330 ft), a das equações ( $\alpha_x = 0,10 L_p$ ,  $\alpha_y = 0,10 \alpha_x$  e  $\alpha_z = 0,010 \alpha_x$ ), foram obtidos os valores para: dispersividade longitudinal,  $\alpha_x = 10,0 \text{ m}$  (33 ft), dispersividade transversal,  $\alpha_y = 1,0 \text{ m}$  (3,3 ft) e a dispersividade vertical,  $\alpha_z = 0,1 \text{ m}$  (0,3 ft). Em relação à concentração de BETEX da fonte, o valor adotado corresponde à solubilidade dos compostos na água que é de  $164 \text{ mg L}^{-1}$ . Este valor foi extraído de <sup>(12)</sup>, pois não foi encontrado na literatura o valor correspondente à solubilidade da gasolina brasileira que, devido à adição de etanol à sua composição, faz com que o valor da solubilidade seja maior que o produto puro. Não houve consideração na fase livre, pois como a sua velocidade só pode ser determinada de forma indireta, considerando-se o acompanhamento de entrada e saída de gasolina no posto e a chegada da fase livre em um ponto de captação.

### **Avaliação da evolução da pluma de contaminantes através do modelo BIOSCREEN**

O BIOSCREEN é utilizado como uma ferramenta para prescrever uma área contaminada e para simular, com os dados de campo, a possibilidade de biorremediação intrínseca como técnica de recuperação.

A primeira simulação realizada com o modelo computacional BIOSCREEN, a partir dos dados de campo e da literatura com um tempo de 2 anos, mostra que a partir dos dados inseridos, em todos os modelos (sem degradação, decaimento de primeira ordem e degradação instantânea), a pluma de contaminação atingiu um máximo de  $14 \text{ m}$  (40 pés) a partir da fonte com um espalhamento de  $9 \text{ m}$  (25 pés). Como o primeiro ponto de captação de água encontra-se a  $30 \text{ m}$  de distância da fonte, isto significa que em dois anos a pluma de contaminantes não atingiria nenhum ponto de captação de água no sítio estudado.

Como a primeira simulação não reproduziu os dados de campo, foi realizada outra simulação com a finalidade de ajustar a esses dados. Esta segunda simulação foi realizada a partir de variações nos dados de dispersão das variáveis da literatura para ajustar as respostas teóricas aos dados de campo. Estes resultados, mostraram que tanto para o modelo sem degradação quanto para o de primeira ordem deve-se inserir um valor de tamanho da fonte 10 vezes maior que o real e valores de dispersividade longitudinal ( $\alpha_x$ ) 15 vezes maior que o descrito na literatura,  $6$  a  $10 \text{ m}$  <sup>(2)</sup>, para que as respostas obtidas sejam equivalentes aos dados de campo.

A terceira simulação foi feita na tentativa de avaliar, de acordo com a área modelada e o tempo de vazamento, que pontos de captação de água podem ser atingidos por uma pluma de contaminantes. Os resultados mostram que somente a partir de 82,5 m (270 pés) de distância da fonte, há proteção dos pontos de captação de água subterrânea. Quanto ao espalhamento (área) da contaminação, o modelo apresenta os seguintes resultados: com o modelo de reação de primeira ordem, somente a partir 73 m (240 ft) de extensão por 18,3 m (60 ft) de largura, os pontos de captação de água estariam protegidos, pois a concentração de BTEX seria de  $3 \mu\text{g L}^{-1}$ . Os modelos sem degradação e reação instantânea, indicam que somente a partir de 73 m (240 ft) de extensão por 9,15 m (30 ft) de largura, os pontos de captação de água não estariam protegidos, pois a concentração de BTEX seria de  $16 \mu\text{g L}^{-1}$  ou três vezes maior que o máximo estabelecido para águas de consumo humano.

## CONCLUSÕES

Através da comparação dos dados fornecidos pelo modelo BIOSCREEN no momento do vazamento de BTEX com as informações coletadas no sítio após 2 anos, foi possível constatar que:

1 - Na tentativa de avaliar a evolução da pluma de contaminantes e verificar a viabilidade da ocorrência da atenuação natural neste sítio, pode-se concluir que devido ao limitado número de parâmetros experimentais, não foi possível obter respostas para o comportamento da pluma para este sítio.

2 - Uma aplicação mais adequada deste modelo seria utilizá-lo como ferramenta no momento da instalação de um TAS, com o objetivo de prever, através de simulações empíricas com dados de campo, a área protegida ou contaminada, caso um vazamento vier a ocorrer.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AZIZ, C.E.; NEWELL, C.J.; GONZALES, A. R.; HASS, P., CLEMENT, T.P. SUN, Y., 2000. *BIOCHLOR - Natural Attenuation Decision Support System, User's Manual, Version 1.0.*

BEDIANT, P.B.; RIFAI, H.S. & NEWELL, C.J., 1999. *Groundwater contamination - Transport and Remediation, 2nd ed., 604p.*

BROST, E., BECKETT, G. D., 2000. A multiphase screening method to determine fuel immobility in the saturated zone. AEHS Conference Workshop, San Diego, California.

CAMPOS, J.L.E., 1999. Análise numérica do transporte de contaminantes em meios Porosos com reações Químicas, Tese de Doutorado, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Civil, Rio de Janeiro.

CLEARY, R.W., 1991. Qualidade da Água Subterrânea, *In: Hidrogeologia Ambiental*, Rubem La Laina Porto (editor), Editora ABRH.

CLEMENT, T.P., SUN, Y., HOOKER, B.S. & PETERSEN, J.N., 1997. Modeling natural attenuation of contaminants in saturated groundwater, Proceedings of the Fourth International *in situ* and on Site Bioremediation Conference, New Orleans, 37 – 42.

GELHAR, L.W., 1986. Stochastic subsurface hydrology from theory to applications, *Water Resources Research*, 22(9), 135s- 145s.

HIDROPLAN, HIDROGEOLOGIA E PLANEJAMENTO AMBIENTAL S/C LTDA, 1999. Relatório técnico, Rio de Janeiro.

MACDONALD, M.G. & HARBAUGH, A.W., 1988. A modular three - dimensional finite difference groundwater flow model, Book 6 Modeling Techniques, Scientific Software Group, Washington.

NEWELL, C.J.; McLEOD, R.K.; GONZALES, J.R., 1997. BIOSCREEN – Natural attenuation decision support system, User's Manual, Version 1.4 Revisions, <http://www.epa.gov/ada/csmos/models/bioscrn.html>.

RIFAI, H. S.; NEWELL, C.J.; GONZALES, J. R.; DENDROU, S.; KENNEDY, L. & WILSON, J., 1997. BIOPLEME III - Natural Attenuation Decision Support System, User's Manual, Version 1,0, <http://www.epa.gov/ada/csmos/models/bioplume3.html>.

ZHENG, C., 1990. MT3D - A Modular three - dimensional transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems, report to the U. S. Environmental Protection Agency, Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, Ada, Oklahoma, <http://hydro.geo.ua.edu/mt3d/mt3dhome.htm>