

Avaliação do Risco à Saúde Humana Devido à Ingestão de Água Subterrânea Contaminada: Parte 1- Simulação Estocástica do Fluxo em Meio Poroso Saturado

Júlio Gomes¹, Nelson Oswaldo Luna Caicedo²

jgomes.dhs@ufpr.br; nlcaicedo@yahoo.com.br

Recebido: 14/02/12 - revisado: 16/12/12 - aceito: 13/08/14

RESUMO

O objetivo do presente trabalho é apresentar a simulação estocástica do fluxo em meio poroso saturado baseado em um caso real de contaminação do solo e da água subterrânea, como etapa inicial para a simulação estocástica do transporte de contaminantes e para a avaliação probabilística do risco à saúde humana devido à ingestão de água subterrânea contaminada. A abordagem estocástica utilizada consistiu na geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica para a área de estudo, procurando caracterizar a incerteza relacionada à variabilidade espacial da condutividade hidráulica. Foram estabelecidas 250 realizações de campos aleatórios para uma área de estudo retangular de 2 km x 5 km, discretizada em 2500 células. Os campos aleatórios de condutividade hidráulica foram gerados utilizando-se o método de Simulação Gaussiana Seqüencial (SGS), onde a estrutura espacial da condutividade hidráulica é determinada através do uso de geostatística. A partir dos campos aleatórios gerados, foram realizadas 200 simulações de fluxo em meio poroso saturado para a geração de campos de níveis do lençol freático e de velocidades de Darcy para posterior utilização em simulações de transporte de contaminantes e definição de distribuições de frequência de risco.

Palavras-chave: *fluxo de água subterrânea, contaminação de água subterrânea, simulação probabilística, simulação gaussiana seqüencial.*

INTRODUÇÃO

Uma característica dos problemas relacionados à contaminação do solo e da água subterrânea é a sua natureza de longo termo. Como consequência, os processos de remediação em geral demandam muito tempo e consomem muitos recursos. Portanto, a decisão de se remediar ou não um determinado local contaminado deve ser criteriosa, procurando-se, deste modo, evitar o desperdício de recursos.

Neste contexto, destaca-se o uso da avaliação do risco à saúde humana como uma ferramenta auxiliar na tomada de decisão em relação à adoção de processos de remediação de locais contaminados. A necessidade de representação das incertezas relacionadas às diferentes etapas do processo de avaliação de risco é destacada e sugerida por diversos

autores (THOMPSON *et al.*, 1992; BURMASTER e ANDERSON, 1994; FINLEY e PAUSTENBACH, 1994; SMITH, 1994; SMITH e YE, 1995).

No caso da contaminação da água subterrânea é fundamental reconhecer as incertezas associadas a diferentes fatores, relacionados tanto ao meio físico, quanto ao contaminante. Um aspecto bastante importante refere-se à variabilidade espacial e à incerteza associadas à condutividade hidráulica, parâmetro básico para a solução do problema de fluxo e, por consequência, para a solução do problema de transporte de contaminantes em meio poroso.

Especificamente em relação ao problema de fluxo e transporte em meio saturado, Freeze *et al.* (1990) dividem as incertezas em dois grandes grupos: incertezas geológicas e incertezas nos parâmetros hidrogeológicos. Os referidos autores destacam que os parâmetros hidrogeológicos incluem todas as propriedades do meio, tais como porosidade, condutividade hidráulica, coeficiente de armazenamento, transmissividade, dispersividade, entre outros. As incertezas nos parâmetros hidrogeológicos estão relacionadas às incertezas quanto aos seus valores, bem como, à sua variabilidade espacial. São também

¹ Departamento de Hidráulica e Saneamento (DHS) / Universidade Federal do Paraná (UFPR)

² Universidade Federal da Paraíba (UFPB)

relacionados como fontes de incerteza, alguns parâmetros relacionados ao contaminante: coeficiente de difusão, fator de retardo e taxa de decaimento (meia vida).

A propagação da incerteza, considerando-se os parâmetros hidrogeológicos (condutividade/transmissividade e porosidade), é função da abordagem (determinística ou estocástica) utilizada na simulação do fluxo e transporte do contaminante em meio poroso.

Andricevic e Cvetkovic (1996), Maxwell *et al.* (1998) e Maxwell *et al.* (1999) são exemplos dos primeiros trabalhos que procuram integrar a caracterização hidrogeológica à avaliação do risco à saúde humana. Benekos *et al.* (2007), Barros e Rubin (2008) e Maxwell *et al.* (2008) são exemplos de trabalhos mais recentes que tratam da avaliação probabilística do risco à saúde humana, considerando, além de outros fatores, a variabilidade espacial do meio físico.

Em uma abordagem estocástica, a incerteza dos dados e/ou parâmetros de entrada do modelo de simulação é especificada na forma de uma função densidade de probabilidade ou pela média e variância de uma dada distribuição de probabilidade. Existem três abordagens básicas para a propagação das incertezas através do modelo de simulação hidrogeológica e para a análise da incerteza nos resultados (FREEZE *et al.*, 1990): análise de primeira ordem (*first-order analysis*); análise das perturbações (*perturbation analysis*); e análise Monte Carlo (*Monte Carlo analysis*).

Zhang e Pinder (2003) destacam que o método de simulação Monte Carlo é freqüentemente usado para simular numericamente o fluxo e transporte de massa em meio poroso quando a condutividade hidráulica é descrita como um campo aleatório. O método consiste na geração de um grande número de realizações igualmente prováveis de cada parâmetro de entrada e na simulação, através de modelo matemático, a partir de cada uma das realizações geradas. Copty e Findikakis (2000) relacionam alguns estudos envolvendo o uso do método de Monte Carlo na avaliação de esquemas de remediação da água subterrânea.

A abordagem estocástica utilizada no presente trabalho é baseada na representação da variabilidade espacial da condutividade hidráulica, através da geração de campos aleatórios de condutividade, possibilitando o estabelecimento de várias soluções teoricamente equiprováveis para o problema de fluxo e, por extensão, para o problema de transporte em meio poroso, permitindo a definição de distribuições de frequência de concentrações e

de risco. Gomes (2008) e Gomes e Caicedo (2011) apresentam uma breve revisão sobre técnicas utilizadas na geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica.

Em resumo, o objetivo do presente trabalho é apresentar a simulação estocástica do fluxo em meio poroso saturado baseado em um caso real de contaminação do solo e da água subterrânea, como etapa inicial para a simulação estocástica do transporte de contaminantes e para a avaliação probabilística do risco à saúde humana devido à ingestão de água subterrânea contaminada.

MATERIAL E MÉTODOS

Área de Estudo e Dados Básicos

A caracterização da área de estudo e os dados básicos utilizados para a definição do modelo conceitual e dos cenários analisados no presente trabalho tem por fonte BRAIN (2004) e Bastos Neto *et al.* (2004).

O problema, do ponto de vista ambiental, se caracteriza pela existência de uma lagoa, utilizada no passado como destinação final de efluentes líquidos provenientes de um pólo petroquímico. O uso da lagoa como área de descarte dos efluentes implicou em sedimentação de finos e resíduos do processo produtivo no fundo da lagoa, gerando uma contaminação residual que pode atingir o aquífero através da conexão hidráulica entre o aquífero e a lagoa, bem como, através da recarga que atravessa áreas de solo contaminado.

A lagoa apresenta uma área aproximada de 319.183 m² na estação chuvosa e cerca de 219.183 m² na estação seca, resultando em uma área de solo contaminado exposto de 110.000 m² devido à retração da lagoa na estação seca, conforme apresentado em Bastos Neto *et al.* (2004).

Em relação ao relevo, na área em torno da lagoa, destaca-se uma serra a sudoeste com cotas superiores a 100 m, decaindo na direção N-NE até cotas de cerca de 5 m, em regiões de planície de inundação e salinas próximas do oceano, onde predomina uma extensa faixa arenosa. Os elementos hidrográficos presentes na área são pequenos cursos de água intermitentes, que cortam a área no sentido SW-NE, via de regra, desaguando em pequenas lagoas intermitentes ou não.

A Tabela 1 apresenta um resumo das estatísticas relativas a 16 pontos amostrados de condutividade hidráulica na área de estudo, a partir dos dados apresentados em BRAIN (2004).

Tabela 1 - Resumo das estatísticas dos valores de condutividade hidráulica (em m/s)

Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
Média	$1,36 \times 10^{-6}$	Valor máximo	$5,92 \times 10^{-6}$
Desvio-padrão	$1,49 \times 10^{-6}$	Quartil superior	$1,64 \times 10^{-6}$
Variância	$2,21 \times 10^{-12}$	Mediana	$1,13 \times 10^{-6}$
Coefficiente variação	1,09	Quartil inferior	$3,34 \times 10^{-7}$
Coefficiente assimetria	2,19	Valor mínimo	$1,70 \times 10^{-8}$

A Figura 1 apresenta a distribuição espacial dos pontos de amostragem da condutividade hidráulica, conforme apresentado em Gomes (2008), tendo por base o trabalho de BRAIN (2004).

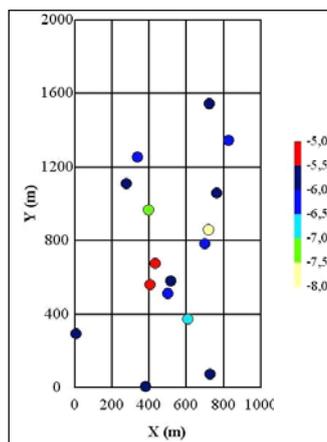


Figura 1 - Pontos de amostragem e valores de log K (eixo horizontal – Oeste-Leste; eixo vertical – Sul - Norte)
(Fonte: Gomes, 2008)

Geração dos Campos Aleatórios de Condutividade Hidráulica (K)

Os campos aleatórios de condutividade hidráulica foram gerados considerando-se uma área retangular de 2 km (sentido leste-oeste) x 5 km (sentido norte-sul) com espaçamentos de 40 m e 100 m, respectivamente, em cada uma das direções, resultando em uma grade de 50 x 50 células. O valor de condutividade hidráulica simulado para uma célula refere-se ao seu ponto central e foi considerado como sendo constante para toda a célula.

O procedimento utilizado para a geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica (K) seguiu o procedimento do método de simulação gaussiana seqüencial (SGS), conforme apresentado em Deutsch e Journel (1998).

A análise dos dados observados em campo permitiu verificar que a condição de normalidade é melhor aplicada ao logaritmo da condutividade hidráulica (K). Portanto, utilizou-se uma distribuição lognormal para a representação da distribuição probabilística dos valores de K.

Deste modo, o procedimento para a obtenção dos campos aleatórios de condutividade hidráulica (K) consistiu em gerar realizações equiprováveis de campos aleatórios da variável normal padronizada z, utilizando o programa *sgsim* (DEUTSCH e JOURNAL, 1998). Na seqüência, efetuou-se a transformação inversa da variável normal padronizada z para a variável normal y (log K), e finalmente foram calculados os valores de K.

O programa computacional GEOPACK (YATES e YATES, 1990) foi usado para o cálculo do variograma amostral da condutividade hidráulica (K) com o objetivo de auxiliar na identificação do modelo teórico para representação da estrutura espacial de K na área de estudo. Foram testados diferentes números de intervalos (*nlags*) e diversos espaçamentos (*lags*), procurando-se obter um variograma amostral relativamente estável.

Inicialmente foram ajustados e avaliados os modelos teóricos de variograma do tipo: gaussiano, exponencial e esférico (estacionários) e potência (não estacionário). Os modelos teóricos ajustados foram comparados aos variogramas amostrais, não sendo possível determinar uma vantagem clara entre os modelos gaussiano, exponencial e esférico (estacionários). Descartou-se apenas o modelo potência (não estacionário) por não reproduzir o patamar observado nos variogramas amostrais.

Destaca-se que, em razão do número relativamente pequeno de observações, não foi possível analisar, com algum grau de precisão, a existência ou não de anisotropia em relação à condutividade hidráulica. Adotou-se, portanto, a hipótese de que o meio é isotrópico para a geração dos campos de condutividade hidráulica (K).

Na geração dos campos de K, optou-se por adotar os modelos gaussiano e esférico para a representação da variabilidade espacial da condutividade hidráulica. Os dois modelos representam hipóteses opostas quanto ao comportamento espacial da variável z na área de estudo em relação ao modelo exponencial. O modelo gaussiano ajustado tende a produzir maior variabilidade em pequenas distâncias e

o modelo esférico menor variabilidade em pequenas distâncias em comparação ao modelo exponencial.

Nesta fase, foram gerados 250 campos aleatórios bidimensionais (plano horizontal) de condutividade hidráulica para cada um dos dois modelos teóricos de variograma adotados.

A análise dos resultados da geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica consistiu basicamente em avaliar o comportamento dos escores padronizados (z) e dos logaritmos da condutividade hidráulica (y), com o objetivo de definir qual o conjunto de campos aleatórios seria utilizado nas simulações de fluxo no meio poroso saturado.

Solução do Problema de Fluxo

O modelo computacional utilizado para a análise do problema de fluxo em dois cenários (estações chuvosa e seca) foi o modelo FLUXSAT, que trata do fluxo permanente tridimensional em meio poroso saturado, cuja concepção é apresentada em Gomes (2008). O modelo FLUXSAT resolve numericamente a equação a seguir que descreve o fluxo permanente em meio poroso saturado não homogêneo e anisotrópico.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) = 0 \quad (1)$$

onde: K = condutividade hidráulica [LT^{-1}];
 h = carga hidráulica [L];
 x, y e z = direção dos eixos coordenados.

A Equação 1 é obtida assumindo-se que as componentes principais do tensor das condutividades hidráulicas estão alinhadas com os eixos coordenados x, y e z (ZHENG e BENNETT, 2002).

O desenvolvimento do modelo FLUXSAT foi baseado principalmente no trabalho de McDonald e Harbaugh (1988) que descreve um modelo computacional de fluxo transiente tridimensional em meio poroso saturado, utilizando um esquema de diferenças finitas e que representa a base do modelo MODFLOW.

O modelo FLUXSAT foi desenvolvido para possibilitar a execução de várias simulações consecutivas sem a interferência do usuário, a partir de diferentes campos de condutividade hidráulica (K). No

presente trabalho, foram realizadas 200 simulações de fluxo, a partir dos campos aleatórios de K gerados pelo método SGS.

O problema de fluxo foi condicionado pelas hipóteses simplificadoras adotadas na geração dos campos aleatórios de K . Além disso, como foram gerados campos bidimensionais e isotrópicos de K , o problema de fluxo foi modelado como bidimensional (plano horizontal), sem a consideração de componentes verticais de fluxo. Considerou-se uma recarga constante para a área de estudo, equivalente a 315 mm/ano e de 190 mm/ano para os Cenários 01 (estação chuvosa) e 02 (estação seca), respectivamente.

A conexão hidráulica entre o aquífero e a lagoa é tratada como um processo externo ao aquífero no modelo FLUXSAT. Os dados básicos para o cálculo do fluxo entre a lagoa e o aquífero são: a espessura do leito (e_L), a condutividade hidráulica vertical do material do leito (K_L) e o nível da superfície livre da lagoa (h_L). A lagoa é considerada como sendo delimitada verticalmente por paredes impermeáveis. Portanto, o fluxo entre o aquífero e a lagoa se dá apenas através do fundo da lagoa. Como o modelo FLUXSAT trata do problema de fluxo permanente, o nível da superfície livre da lagoa (h_L) é considerado constante em cada cenário.

Adotou-se ainda, por hipótese, o nível do lençol freático na área da lagoa, no mínimo, igual ao nível do fundo da lagoa, o que implica em não existir faixa de solo não saturado entre o fundo da lagoa e o lençol freático. A hipótese adotada interfere principalmente no problema de transporte, sendo conservadora por admitir uma transferência direta de contaminante da lagoa para o aquífero sem a propagação por uma faixa de solo não saturado.

Justifica-se a adoção da hipótese de fluxo permanente principalmente por dois aspectos do estudo: o horizonte de tempo utilizado para a avaliação de risco (30 anos) e a dificuldade em representar o mecanismo sazonal de expansão/retração da lagoa contaminada. Os modelos de fluxo em meio poroso saturado, como por exemplo o modelo MODFLOW (MCDONALD e HARBAUGH, 1988), não trabalham propriamente com fluxo não permanente, em razão da própria característica do fluxo em meio poroso saturado (baixas velocidades e pequenas variações no tempo). Em geral, definem-se períodos de estresse (*stress periods*), nos quais as condições são mantidas constantes ao longo do tempo e as variações temporais ocorrem na interface entre os períodos de estresse.

Fluxo no Cenário 01 - Estação Chuvosa

Em função da discretização espacial adotada, a área do espelho de água da lagoa foi considerada com aproximadamente 320.000 m², apresentando ainda profundidade média de 40 cm, camada de sedimento de fundo com espessura média de 50 cm e condutividade hidráulica vertical de 1×10^{-7} m/s, o que equivale a cerca de 0,864 cm/dia. Estas informações foram obtidas a partir de Bastos Neto *et al.* (2004).

Como condição de contorno, adotou-se o nível do lençol freático constante e igual a 12,30 m, junto à fronteira norte do aquífero. Já para a lagoa, adotou-se nível constante e igual a 17,40 m.

O modelo conceitual que procura representar o problema de fluxo no cenário 01 (estação chuvosa) é mostrado, de modo simplificado, pelas Figuras 2 e 3. Em função da discretização espacial adotada, a lagoa é representada por 80 células de um total de 2500 células que representam a área de estudo.

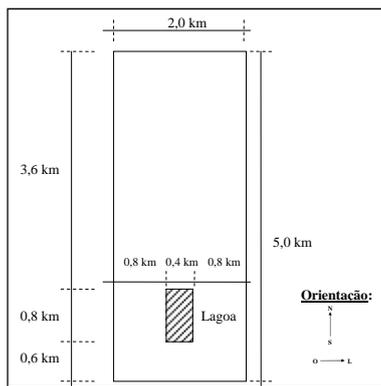


Figura 2 - Modelo conceitual da área de estudo para o cenário 01 (estação chuvosa)

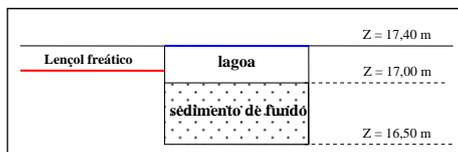


Figura 3 - Corte vertical do modelo conceitual na área da lagoa para o cenário 01 (estação chuvosa)

Fluxo no Cenário 02 - Estação Seca

O problema de fluxo no meio saturado para o cenário 02 (estação seca) foi condicionado pelas

mesmas hipóteses simplificadoras adotadas para o cenário 01 (estação chuvosa). No entanto, algumas diferenças fundamentais são destacadas a seguir.

Em comparação à representação da lagoa no cenário 01 (estação chuvosa), verifica-se uma retração do espelho de água de 320.000 m² para 208.000 m² no cenário 02 (estação seca). Como condição de contorno, adotou-se o nível do lençol freático constante e igual a 12,30 m, junto à fronteira norte do aquífero. Já para a lagoa, adotou-se nível constante e igual a 17,20 m.

Em termos do problema de fluxo, existe uma mudança de mecanismo de alimentação do aquífero na área de solo exposto (112.000 m²) quando comparados os cenários 01 e 02. No cenário 01 (estação chuvosa), esta alimentação se dá pela conexão hidráulica entre a lagoa e o aquífero. Já no cenário 02 (estação seca), esta alimentação se dá pelo processo de recarga natural do aquífero.

O modelo conceitual que procura representar o problema de fluxo no cenário 02 (estação seca) também é apresentado, de modo simplificado, pelas Figuras 2 e 3, exceção feita à representação da área da lagoa, conforme esquematizada na Figura 4.

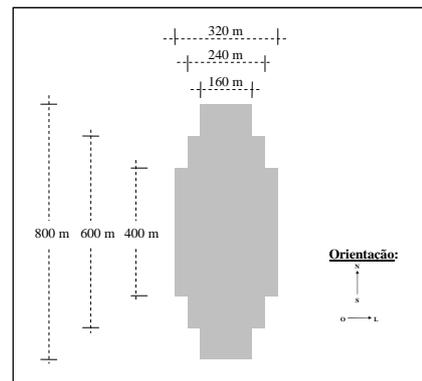


Figura 4 - Representação esquemática da lagoa para o cenário 02 (estação seca)

Em função da discretização espacial adotada e da retração da lagoa, a área da lagoa passa a ser representada por 52 células. Portanto, define-se uma região de solo exposto, correspondente a 28 células no modelo conceitual do cenário 02.

Assim como no cenário 01 (estação chuvosa), adotou-se uma espessura de camada de sedimentos de fundo de 50 cm, que corresponde também à espessura da camada de solo exposto, conforme representado na Figura 3, e uma condutividade hidráulica vertical de 1×10^{-7} m/s, equivalente

a 0,864 cm/dia. Adicionalmente, assumiu-se uma profundidade média da lagoa de 20 cm.

Neste momento, é fundamental destacar um aspecto importante na modelagem dos problemas de fluxo e transporte nos cenários 01 (estação chuvosa) e 02 (estação seca), principalmente devido à existência de uma área de solo contaminado exposto no cenário 02.

No cenário 01, na solução do problema de fluxo, que envolve basicamente o cálculo dos níveis do lençol freático e do campo de velocidades, não existe a necessidade da simulação do fluxo em meio não saturado, pois a recarga pode ser considerada diretamente sobre o lençol freático, devido à hipótese de fluxo permanente. Na solução do problema de transporte, como a entrada de contaminantes no aquífero se dá apenas pela transferência direta da lagoa para o aquífero, também não existe a necessidade de simulação do fluxo em meio não saturado, devido à hipótese de não existir faixa de solo não saturado entre o fundo da lagoa e o aquífero.

No cenário 02, na solução do problema de fluxo também não existe a necessidade da simulação do fluxo em meio não saturado, pois a recarga novamente pode ser aplicada diretamente sobre o lençol freático devido à hipótese de fluxo permanente. Na solução do problema de transporte, como a entrada de contaminantes no aquífero se dá pela transferência direta da lagoa para o aquífero e pela propagação do contaminante pelo meio não saturado na área de solo exposto, há a necessidade de representação do fluxo no meio não saturado, porque o mesmo interfere na propagação do contaminante na área de solo exposto, mesmo sob a hipótese de fluxo em regime permanente.

No presente trabalho, a discussão é centrada na geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica e no fluxo em meio poroso saturado.

RESULTADOS E ANÁLISE

Geração dos Campos Aleatórios de Condutividade Hidráulica

O número máximo de pares de pontos para o cálculo do variograma amostral, em função do número de pontos amostrados (16), foi de 120 pares. A menor distância entre dois pontos de amostragem resultou em 68,9 m e a maior distância em 1571,8 m. A distância média entre pontos resultou em 624,2 m. Estas distâncias condicionaram a obtenção do variograma amostral, uma vez que não é possível nenhuma análise para distâncias inferiores a

68,9 m e para distâncias superiores a 1571,8 m. Estas distâncias também auxiliaram na definição das possíveis combinações entre número de intervalos (*n-lags*) e espaçamentos (*lags*) para a definição do variograma amostral.

Análise dos escores padronizados (*z*)

Esta primeira análise procurou avaliar o comportamento dos campos aleatórios da variável normal padronizada (*z*) em termos de valores estatísticos. A Tabela 2 apresenta um resumo das estatísticas dos valores de média e variância dos escores padronizados (*z*) dos campos aleatórios gerados.

Tabela 2 - Parâmetros estatísticos das médias e das variâncias dos escores-padrão (*z*) dos campos aleatórios gerados

Parâmetro	Modelo gaussiano		Modelo esférico	
	Média	Variância	Média	Variância
Média	0,001	1,001	0,000	0,999
Desvio-padrão	0,024	0,027	0,050	0,047
Valor mínimo	-0,081	0,917	-0,133	0,866
Valor máximo	0,070	1,081	0,171	1,137

Os valores apresentados na Tabela 2 mostram que cada campo gerado, quando analisado separadamente, não reproduz exatamente a média e a variância de uma distribuição normal padrão, que correspondem respectivamente a 0 (zero) e 1 (um). Contudo, observa-se que esses valores são reproduzidos em termos médios, quando os campos são analisados em conjunto.

Verifica-se ainda que o modelo gaussiano apresentou menor dispersão para a média e variância em relação ao modelo esférico, considerando-se os campos aleatórios gerados.

As Figuras 5 e 6 apresentam respectivamente a variação da média e da variância de *z* em função do número de simulações (número de campos aleatórios gerados) para os modelos gaussiano e esférico.

Verifica-se, a partir das Figuras 5 e 6, que os valores de média e variância dos escores padronizados (*z*) dos campos aleatórios gerados tenderam para os valores teóricos de média e variância de uma distribuição normal padrão com o aumento do número de simulações. Os resultados também indicam que esta convergência é relativamente boa para um número de 200 simulações. Os resultados mostra-

ram uma convergência mais rápida do modelo gaussiano em comparação ao modelo esférico.

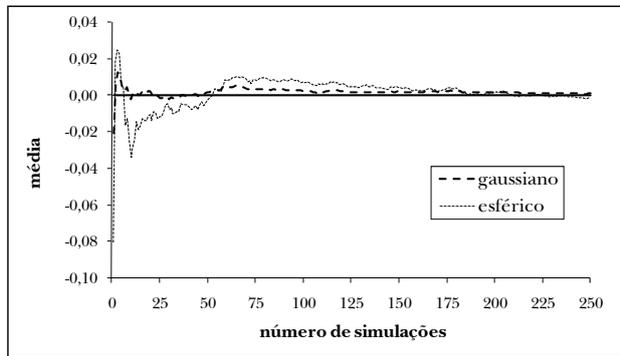


Figura 5 - Variação da média de z em função do número de campos aleatórios gerados

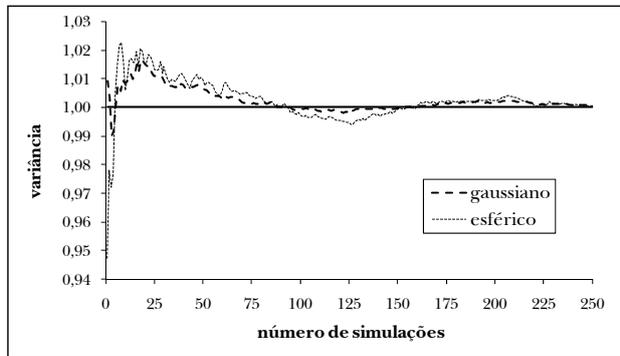


Figura 6 - Variação da variância de z em função do número de campos aleatórios gerados

Análise dos valores dos logaritmos da condutividade hidráulica (y)

Esta segunda análise procurou avaliar o comportamento dos campos aleatórios do logaritmo da condutividade hidráulica (y) em termos de seus valores estatísticos. Os referidos campos foram obtidos a partir dos campos aleatórios da variável normal padronizada (z), utilizando-se a transformação inversa da distribuição normal, conforme procedimento sugerido em Deutsch e Journel (1998).

A Tabela 3 mostra um resumo das estatísticas de média e variância de y dos campos aleatórios gerados. Novamente, verifica-se que o modelo gaussiano apresentou menor desvio-padrão (dispersão) para a média e variância em relação ao modelo esférico.

Tabela 3 - Parâmetros estatísticos dos valores de y dos campos aleatórios gerados

Parâmetro	Modelo gaussiano		Modelo esférico	
	Média	Variância	Média	Variância
Média	-6,143	0,436	-6,144	0,435
Desvio-padrão	0,016	0,018	0,033	0,032
Valor mínimo	-6,199	0,382	-6,238	0,342
Valor máximo	-6,103	0,493	-6,035	0,529

Análise da estrutura espacial dos campos aleatórios gerados

Em relação à análise da estrutura espacial dos campos aleatórios gerados, destaca-se que o método de simulação gaussiana seqüencial (SGS) não reproduz exatamente o variograma teórico em cada uma das simulações. O importante é verificar se os variogramas associados a cada campo aleatório gerado são semelhantes, do ponto de vista qualitativo, ao variograma teórico utilizado no processo de geração.

A Figura 7 apresenta a comparação entre os modelos teóricos de variograma usados na geração dos campos aleatórios e cinco variogramas obtidos a partir de campos aleatórios gerados pelo método SGS.

Observa-se, a partir da Figura 7, que os variogramas obtidos a partir dos campos aleatórios gerados pelo método SGS “flutuam” em torno dos modelos teóricos de variograma utilizados na geração dos campos aleatórios, correspondendo a um comportamento esperado, considerando o procedimento e o método adotados para a geração dos campos. Novamente, verifica-se uma maior dispersão do modelo esférico em comparação ao modelo gaussiano.

A análise dos resultados da geração dos campos aleatórios de K permitiu identificar uma relativa superioridade do modelo gaussiano em relação ao modelo esférico, principalmente considerando-se a menor dispersão da média e variância dos campos aleatórios gerados, o que implica na geração de campos aleatórios com propriedades estatísticas mais próximas entre si.

Contudo, em razão do pequeno número de informações de condutividade hidráulica, optou-se por adotar o conjunto de campos aleatórios gerados pelo modelo esférico nas simulações de fluxo. Esta decisão representa uma hipótese conservadora em termos de avaliação de risco, uma vez que deve implicar na obtenção de uma distribuição de frequên-

cia de risco com uma maior variância, o que aumenta a probabilidade de ocorrência de valores extremos de risco.

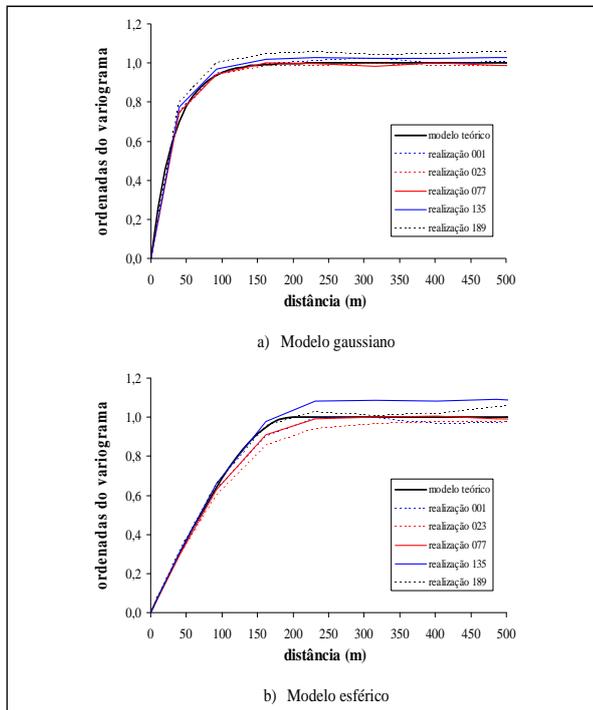


Figura 7 - Comparação entre o modelo teórico do variograma e os variogramas relativos a alguns campos aleatórios gerados

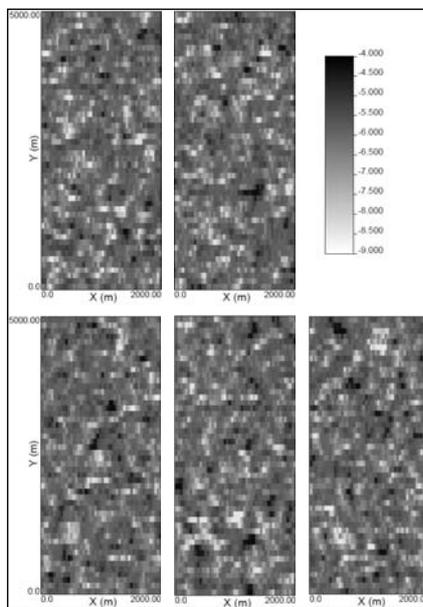


Figura 8 - Realizações 001, 023, 077, 135 e 189 da variável y (logaritmo da condutividade hidráulica)

A Figura 8 apresenta, como ilustração, alguns campos aleatórios de condutividade hidráulica gerados pelo modelo esférico. Verifica-se, a partir da Figura 8, que os campos gerados se apresentam, de modo geral, descontínuos em termos de valores de y. Isto ocorre porque a discretização espacial adotada para a grade (40m x 100m) é relativamente grande comparada às amplitudes dos variogramas ajustados dos modelos gaussiano (100,0 m) e esférico (200,0 m), cujos valores podem ser inferidos a partir da Figura 7.

Simulações de Fluxo para o Cenário 01 Estação Chuvosa

A Figura 9 apresenta os valores médios dos níveis do lençol freático, obtidos a partir de 200 simulações de fluxo no meio saturado para o cenário 01 (estação chuvosa).

Observa-se, a partir da Figura 9, uma relativa simetria dos níveis médios do lençol freático na direção Sul-Norte. Um fator importante que contribui para essa simetria são as condições de contorno impostas ao modelo de fluxo. Contudo, essa simetria acontece apenas em termos médios, o mesmo não ocorre ao se analisar as simulações individualmente, como mostrado pela Figura 10.

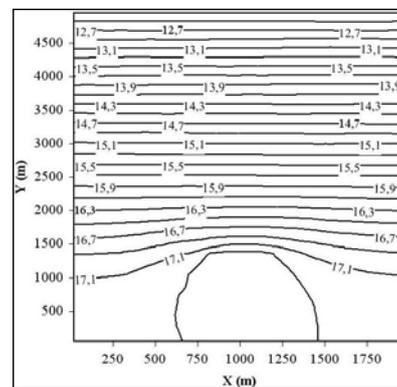


Figura 9 - Valores médios de níveis (em m) do lençol freático (estação chuvosa)

A Figura 11 mostra os valores médios de velocidade de Darcy, considerando-se as 200 simulações realizadas, fornecendo uma ordem de grandeza do fluxo na área de estudo. A direção e o sentido do fluxo, em termos médios, podem ser percebidos na Figura 9 que apresenta os níveis médios obtidos nas simulações do cenário 01.

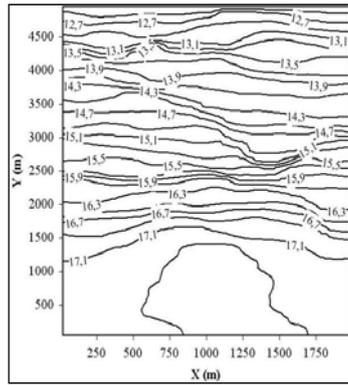


Figura 10 - Valores de níveis (em m) do lençol freático para a realização 146 (estação chuvosa)

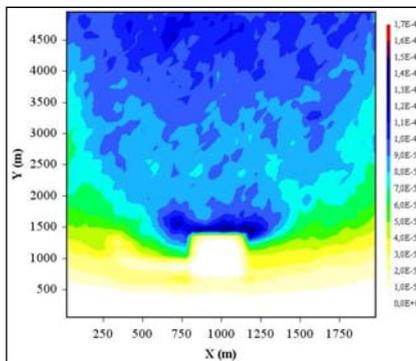


Figura 11 - Valores médios de velocidade de Darcy (em m/dia) (estação chuvosa)

Observa-se, a partir da Figura 11, que existe uma aceleração do fluxo, principalmente no sentido norte. Isso pode ser explicado pela simulação em regime permanente em um aquífero livre, onde a diminuição do nível do lençol freático (espessura do fluxo) é compensada pelo aumento de velocidade. Verifica-se ainda uma região com velocidades mais altas no contorno norte da lagoa, resultado da influência da lagoa sobre os níveis do aquífero.

**Simulações de Fluxo para o Cenário 02
Estação Seca**

A Figura 12 apresenta os valores médios dos níveis do lençol freático, obtidos a partir de 200 simulações de fluxo no meio saturado para o cenário 02 (estação seca).

Novamente, observa-se uma relativa simetria dos níveis médios do lençol freático na direção Sul-Norte. Destaca-se novamente que, para uma realização em particular, não se verifica para os níveis do

lençol freático a mesma simetria observada para os valores médios.

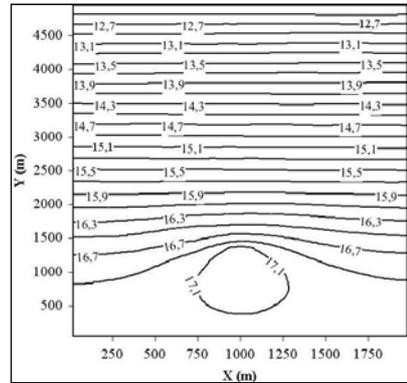


Figura 12 - Valores médios de níveis (em m) do lençol freático (estação seca)

A Figura 13 apresenta os valores médios de velocidade de Darcy, considerando-se as 200 simulações realizadas. A direção e o sentido do fluxo, em termos médios, podem ser percebidos na Figura 12 que apresenta os níveis médios obtidos nas simulações do cenário 02.

A partir da Figura 13, observa-se novamente que existe uma aceleração do fluxo, principalmente na direção norte. Assim como no cenário 01 (estação chuvosa), a explicação se deve à adoção da condição de regime permanente, onde a diminuição do nível do lençol freático (espessura do fluxo) é compensada pelo aumento de velocidade. Novamente, verifica-se uma região com velocidades de fluxo mais altas junto ao contorno norte da lagoa, como resultado da influência da lagoa sobre os níveis locais do aquífero.

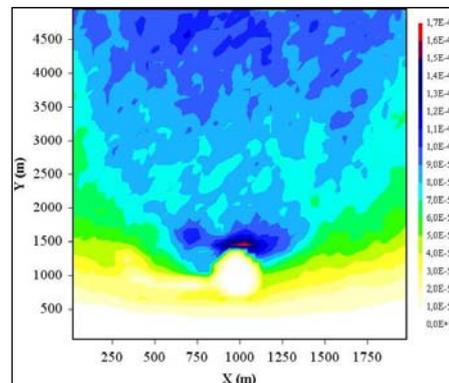


Figura 13 - Valores médios de velocidade de Darcy (m/dia) (estação seca)

CONSIDERAÇÕES FINAIS

O objetivo do presente trabalho foi o de apresentar a simulação estocástica do fluxo em meio poroso saturado baseado em um caso real de contaminação do solo e da água subterrânea, como etapa inicial para a simulação estocástica do transporte de contaminantes e para a avaliação probabilística do risco à saúde humana devido à ingestão de água subterrânea contaminada.

O problema do ponto de vista ambiental se caracteriza pela existência de uma lagoa utilizada como destinação final de efluentes líquidos de um pólo petroquímico e cuja contaminação residual pode atingir o aquífero através da conexão hidráulica entre o aquífero e a lagoa.

O método usado, baseado na geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica, proporcionou a geração de 200 campos de níveis de lençol freático e de velocidades de Darcy para posterior utilização na solução do problema de transporte de contaminantes em meio poroso saturado e definição de distribuições de frequência de risco para a avaliação probabilística do risco à saúde humana pela ingestão de água subterrânea contaminada.

A modelagem do fluxo no meio poroso saturado foi realizada considerando-se dois cenários principais: cenário 01 (estação chuvosa) e cenário 02 (estação seca). De modo geral, verificou-se, para os dois cenários, uma relativa simetria dos níveis médios do lençol freático na direção Sul-Norte. Um fator importante que contribuiu para essa relativa simetria são as condições de contorno impostas ao modelo de fluxo. Contudo, isto ocorre apenas em termos médios, já o mesmo não acontece quando as simulações são analisadas individualmente.

Observou-se, também para os dois cenários, uma aceleração do fluxo, principalmente no sentido norte. Isso pode ser explicado pela simulação em regime permanente em um aquífero livre, onde a diminuição do nível do lençol freático (espessura do fluxo) é compensada pelo aumento de velocidade do fluxo. Verificou-se ainda uma região com velocidades de fluxo mais altas, junto ao contorno norte da lagoa, como resultado da influência da lagoa sobre os níveis do aquífero.

REFERÊNCIAS

ANDRICEVIC, R.; CVETKOVIC, V. Evaluation of risk from contaminants migrating by groundwater.

Water Resources Research, v. 32, n. 3, pp. 611-621, 1996.

BARROS, F. P. J. de; RUBIN, Y. A risk-driven approach for subsurface site characterization. *Water Resources Research*, v. 44, W01414, 14p., 2008. (doi: 10.1029/2007wr006081).

BASTOS NETO, A.; CAICEDO, N. L.; FINOTTI, A. R.; MARQUES, P. E. *Avaliação de risco ambiental na área da lagoa de baixo: polo de Guamaré: PETROBRAS-RN*. Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul: Núcleo de Avaliação e Remediação de Áreas Contaminadas, 2004. 55 p.

BENEKOS, I. D.; SHOEMAKER, C. A.; STENDIGER, J. Probabilistic risk and uncertainty analysis for bioremediation of four chlorinated ethenes in groundwater. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, v. 21, p. 375-390, 2007. (doi: 10.1007/s00477-006-0071-4).

BRAIN. *Relatório de diagnóstico geoambiental*. BRAIN: Petrobrás: Pólo Industrial de Guamaré, 2004.

BURMASTER, D. E.; ANDERSON, P. D. Principles of good practice for the use of monte carlo techniques in human health and ecological risk assessments. *Risk Analysis*, v. 14, n. 4, p. 477-481, 1994.

COPTY, N. K.; FINDIKAKIS, A. N. Quantitative estimates of uncertainty in evaluation of ground water remediation schemes. *Ground Water*, v. 38, n. 1, p. 29-37, 2000.

DEUTSCH, C. V.; JOURNAL, A. G. *Gslib: geostatistical software library and user's guide*. 2. ed. New York: Oxford University Press, 1998. 369 p. Coleção Applied Geostatistics Series.

FINLEY, B.; PAUSTENBACH, D. The benefits of probabilistic exposure assessment : three case studies involving contaminated air, water and soil. *Risk Analysis*, v. 14, n. 1, p. 53-73, 1994.

FREEZE, R. A.; MASSMANN, J.; SMITH, L.; SPERLING, T.; JAMES, B. Hydrogeological decision analysis : 1. framework. *Ground Water*, v. 28, n. 5, p. 738-766, 1990.

GOMES, J. *Uso de uma abordagem estocástica para a avaliação do risco à saúde humana devido à*

ingestão de água subterrânea contaminada. Porto Alegre : IPH/ UFRGS, 2008. 302 p. Tese de Doutorado submetida ao Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

GOMES, J.; CAICEDO, N. O. L. Uso do método de simulação gaussiana sequencial (SGS) na simulação estocástica do fluxo e transporte em meio poroso saturado. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 16, n.4, PP. 135-147, 2011.

McDONALD, M. G.; HARBAUGH, A. W. *A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model*. Washington: U. S. Government Printing Office, 1988. paginação irregular. (Techniques of Water-Resources Investigations of the United States Geological Survey. Book 6 - Modeling Techniques. Chapter A1).

MAXWELL, R. M.; PELMUDER, S. D., TOMPSON, A. F. B.; KASTENBERG, W. E. On the development of a new methodology for groundwater-driven health risk assessment. *Water Resources Research*, v. 34, n. 4, pp. 833-847, 1998.

MAXWELL, R. M.; KASTENBERG, W. E.; RUBIN, Y. A methodology to integrate site characterization information into groundwater-driven health risk assessment. *Water Resources Research*, v. 35, n. 9, pp. 2841-2855, 1999.

MAXWELL, R. M.; CARLE, S. F.; TOMPSON, A. F. B. Contamination, risk, and heterogeneity: on the effectiveness of aquifer remediation. *Environmental Geology*, v. 54, p. 1771-1786, 2008. (doi: 10.1007/s00254-007-0955-8).

SMITH, E. P.; YE, K. A statistical perspective of uncertainty. In: WARREN-HICKS, W. J.; MOORE, D. R. J., edit. *Uncertainty analysis in ecological risk assessment*. Proceedings from the Pellston Workshop on Uncertainty Analysis in Ecological Risk Assessment. 23-28 August 1995. Pellston, Michigan. Pensacola : Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC), 1998. p. 149-168.

SMITH, R. L. Use of monte carlo simulation for human exposure assessment at a superfund site. *Risk Analysis*, v. 14, n. 4, p. 433-439, 1994.

THOMPSON, K. M.; BURMASTER, D. E.; CROUCH, E. A. C. Monte carlo techniques for quantitative uncertainty analysis in public health risk

assessments. *Risk Analysis*, v. 12, n. 1, p. 53-63, 1992.

YATES, S. R.; YATES, M. V. *Geostatistics for waste management : user's manual for the GEOPACK (version 1.0)*. Ada: USEPA, 1990. 72 p. (EPA/600/8-90/004).

ZHANG, Y.; PINDER, G. Latin hypercube lattice sample selection strategy for correlated random hydraulic conductivity fields. *Water Resources Research*, v. 39, n. 8, 1226, 2003 (doi: 10.1029/2002wr001822, SBH 11.1-11.11).

ZHENG, C.; BENNETT, G. D. *Applied contaminant transport modeling*. 2. ed. New York : John Wiley & Sons, 2002. 621 p.

Human Health Risk Assessment Due To The Ingestion Of Contaminated Groundwater: Part 01- Stochastic Flow Simulation In Saturated Porous Media

ABSTRACT

The aim of this paper is to present the stochastic flow simulation in saturated porous media, based on a real case of soil and groundwater contamination. The flow simulation is an initial step for the stochastic simulation of contaminant transport and also for the probabilistic human health risk assessment due to ingestion of contaminated groundwater. The stochastic approach consisted in generating hydraulic conductivity random fields for the study area, in order to characterize the uncertainty related to the spatial variability of hydraulic conductivity. Two hundred and fifty random field realizations were performed for a 2 km x 5 km rectangular study area, discretized into 2500 cells. The hydraulic conductivity random fields were generated using the Sequential Gaussian Simulation (SGS) method. The spatial structure of the hydraulic conductivity was determined using Geostatistics. From the generated random fields, 200 groundwater flow simulations were performed, resulting both in phreatic level and Darcy's velocity fields for later use both in simulations of contaminant transport and in definition of risk frequency distributions.

Key-words: *groundwater flow, groundwater contamination, probabilistic simulation, sequential gaussian simulation.*