



# **Aplicação do Programa RISKPRO em Áreas Contaminadas por Gasolina**

Gilberto Costa Camarinha  
João Angelo Gomes de Souza

Projeto Final de Curso em Engenharia  
Química

Orientador

Prof.<sup>a</sup> Denize Dias de Carvalho

Co-orientador

Prof.<sup>a</sup> Lais Alencar de Aguiar

Setembro de 2007

# **APLICAÇÃO DO PROGRAMA RISKPRO EM ÁREAS CONTAMINADAS POR GASOLINA**

***Gilberto Costa Camarinha***  
***João Angelo Gomes de Souza***

Projeto de Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenharia Química.

Orientado por:

---

Denize Dias de Carvalho, D. Sc.

Co-orientado por:

---

Lais Alencar de Aguiar, D. Sc.

Aprovado por:

---

Lídia Yokoyama, D. Sc.

---

Maria Cláudia Barbosa, D. Sc.

---

Selma Gomes Ferreira Leite, D. Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil

Setembro de 2007

## **Ficha Catalográfica**

Camarinha, Gilberto Costa; Souza, João Angelo Gomes de.

Aplicação do Programa RISKPRO em Áreas Contaminadas por Gasolina / Gilberto Costa Camarinha; João Angelo Gomes de Souza. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2007.

i, 144 p.; xvii.

(Projeto) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2007.

Orientadores: Denize Dias de Carvalho e Lais Alencar de Aguiar.

1. RISKPRO. 2. Contaminação. 3. Gasolina. 4. SESOIL. 5. AT123D. 6. Gasolina.

Gilberto Costa Camarinha dedica este projeto a:

- MARIA DE FÁTIMA COSTA CAMARINHA e GILBERTO COSME CAMARINHA. Meus pais que muito me incentivaram e apoiaram em todos os momentos da minha vida. Com muito orgulho sou o reflexo de seus ensinamentos, os quais levarei para o resto da vida.
- ANTERO DA COSTA ALEXANDRE e MARIA CÉLIA DE ALMEIDA. Meus avós que me deram sempre muito carinho e amor são para mim meus pais de criação, jamais os esquecerei. Meu avô que me deixou a pouco tempo estará sempre vivo no meu coração.

João Angelo Gomes de Souza dedica este projeto a:

- GERALDINA GOMES DE SOUZA, SILVIA CAROLINA GOMES DE SOUZA e JOÃO FIGUEIRA DE SOUZA FILHO. Minha família, da qual meu maior legado foi a minha educação. Sem o apoio e carinho deles nada disso seria possível.
- AMANDA MOREIRA DE LIMA. Meu amor, minha vida, minha cúmplice, minha fonte de inspiração e de força: aquela que não me deixa desanimar!

Gênio: 1% de inspiração e 99% de transpiração.

**Thomas Alva Edison**

## **AGRADECIMENTOS**

A DEUS,

Acima de tudo, por ter nos dado saúde, força e determinação para a finalização desse projeto e de todos os sonhos realizados em nossas vidas.

À ESCOLA DE QUÍMICA DA UFRJ,

Pelo aprendizado, o qual permitiu a nossa formação acadêmica sólida.

À PROFESSORA DENIZE DIAS DE CARVALHO,

Pelo apoio durante a nossa vida acadêmica, pela paciência dada a nós nesse projeto.

À PROFESSORA LAIS ALENCAR DE AGUIAR,

Pelo apoio em conjunto com a professora Denize na orientação deste projeto.

AOS COLEGAS DE FINEP,

Por entender e deixarem o Gilberto disponível para desenvolver este projeto final, mesmo estando em horário de estágio. Obrigado a todos pelo incentivo e pela força.

AOS COLEGAS DE SMAC,

Por entenderem e deixarem ambos disponíveis para desenvolver este projeto, cedendo, ainda, preciso material para o desenvolvimento da pesquisa.

ÀS NOSSAS FAMÍLIAS,

Por terem nos dado todo apoio e incentivo durante todos os anos de faculdade e em todos os momentos difíceis das nossas vidas.

AOS NOSSOS AMIGOS DE GRADUAÇÃO,

Sem os quais não chegaríamos aqui hoje.

AOS PROFESSORES: ALINE PROCÓPIO SARMENTO, HUGO ABI KARAM,

Pela ajuda prestada na busca por informações para o trabalho.

Resumo do Projeto Final apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico.

## **APLICAÇÃO DO PROGRAMA RISKPRO EM ÁREAS CONTAMINADAS POR GASOLINA**

Gilberto Costa Camarinha

João Angelo Gomes de Souza

Setembro, 2007

**Orientador: Prof.<sup>a</sup> Denize Dias de Carvalho, D. Sc.**

**Co-orientador: Prof.<sup>a</sup> Lais Alencar de Aguiar, D. Sc.**

### **Resumo**

O passivo ambiental de águas subterrâneas e solos contaminados acumulado ao longo de décadas, gerou uma questão de extrema importância para ser gerenciada pelas atuais e futuras gerações; ainda mais se for considerado que a geração desse passivo não foi interrompida. As atividades oriundas da indústria petrolífera, entre elas a distribuição de combustíveis, contribuem com parcela significativa desse passivo, fato este evidenciado por sucessivos vazamentos de derivados do petróleo que impactam o meio ambiente. Este estudo objetiva contribuir para a discussão do uso no Brasil de programas que simulam concentrações e perfis de plumas de contaminação por hidrocarbonetos de petróleo. Para isso, são resumidas as informações consideradas pertinentes ao assunto e avaliada a aplicação no Brasil de um dos programas disponíveis no mercado, o programa RISKPRO, em estudo de caso específico de uma área contaminada por gasolina (posto de serviço) no município do Rio de Janeiro. Constatou-se que a utilização do programa como ele é hoje se torna muito difícil pela exigência de dados que ainda não estão disponíveis no Brasil. Porém, sugere-se o estudo mais aprofundado dos modelos utilizados, SESOIL e AT123D, para viabilizar modificações que os tornem aplicáveis a cenários brasileiros.

## ÍNDICE

<b>CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO .....</b>	<b>01</b>
<b>1.1. Motivação do Trabalho .....</b>	<b>04</b>
<b>1.2. Organização do Estudo .....</b>	<b>04</b>
<b>CAPÍTULO 2 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....</b>	<b>06</b>
<b>2.1. Caracterização das Áreas Contaminadas .....</b>	<b>06</b>
<b>2.2. Solo e Águas Subterrâneas .....</b>	<b>07</b>
<b>2.3. Contaminantes .....</b>	<b>10</b>
<b>2.4. Transporte de Contaminantes .....</b>	<b>12</b>
<b>2.4.1. Principais Mecanismos de Transporte .....</b>	<b>13</b>
<b>2.4.1.1. Mecanismo de Advecção .....</b>	<b>13</b>
<b>2.4.1.2. Mecanismo de Difusão .....</b>	<b>13</b>
<b>2.4.1.3. Mecanismo de Dispersão .....</b>	<b>14</b>
<b>2.4.1.4. Mecanismo de Degradação .....</b>	<b>15</b>
<b>2.4.1.5. Mecanismo de Volatilização .....</b>	<b>15</b>
<b>2.5. Modelos .....</b>	<b>16</b>
<b>2.5.1. Visão Geral .....</b>	<b>16</b>
<b>2.5.2. Aplicações .....</b>	<b>18</b>
<b>2.5.3. Alguns Programas Computacionais Utilizados em             Simulações .....</b>	<b>18</b>
<b>2.6. Alguns Parâmetros de Entrada do RISKPRO .....</b>	<b>19</b>



2.6.1. Porosidade e Condutividade Hidráulica .....	19
2.6.2. Umidade do Solo e Conteúdo de Matéria Orgânica .....	20
2.6.3. Permeabilidade Intrínseca .....	20
2.6.4. Capacidade de Troca Catiônica .....	20
2.6.5. Gradiente Hidráulico .....	21
2.6.6. Dispersividade .....	21
2.6.7. Isoterma de Adsorção (Expoente de <i>Freundlich</i> ) .....	21
2.6.8. <i>Runoff</i> .....	22
2.6.9. Evapotranspiração .....	22
2.6.10. Albedo .....	23
<b>CAPÍTULO 3 – DETALHAMENTO DO RISKPRO .....</b>	<b>24</b>
3.1. Modelo SESOIL .....	24
3.1.1. Dados Requeridos .....	24
3.1.2. Dados de Saída .....	26
3.1.3. O Compartimento do Solo no SESOIL .....	27
3.1.4. Os Ciclos do Modelo SESOIL .....	27
3.1.4.1. Ciclo Hidrológico .....	28
3.1.4.1.1. Rotina ou Ciclo Anual .....	29
3.1.4.1.2. Rotina ou Ciclo Mensal .....	30
3.1.4.1.3. Calibração do Modelo Hidrológico .....	32
3.1.4.2. Ciclo de Lixiviação ou Sedimentos .....	33

3.1.4.2.1. Implementação no SESOIL .....	35
3.1.4.3. Ciclo de Destino do Contaminante .....	36
3.1.4.3.1. Fundamentos Teóricos .....	37
3.1.4.3.2. Algoritmo Profundidade do Contaminante .....	39
3.1.4.3.3. Volatilização/Difusão .....	41
3.1.4.3.4. Sorção: Adsorção/Dessorção e Troca Catiônica (Equação de <i>Freundlich</i> ) .....	42
3.1.4.3.5. Degradação: Hidrólise e Biodegradação .....	45
3.1.4.3.6. Complexação Metálica .....	47
3.1.4.3.7. Contaminantes no <i>Runoff</i> Superficial e no Lixiviado .....	48
3.1.4.3.8. Temperatura do Solo .....	49
3.1.4.3.9. O Ciclo do Contaminante em Linhas Gerais ....	49
3.2. O Modelo AT123D .....	50
3.2.1. Dados Requeridos .....	51
3.2.2. Dados de Saída .....	52
3.2.3. Limitações Dimensionais do Modelo AT123D .....	52
3.2.4. A Equação que Governa o Modelo AT123D .....	52
3.2.5. A Interface do AT123D .....	54
3.2.6. Link SESOIL-AT123D .....	55
3.2.7. O AT123D <i>Post-processor</i> .....	55
CAPÍTULO 4 – METODOLOGIA .....	57

<b>4.1. Levantamento dos Dados Rqueridos pelo SESOIL .....</b>	<b>57</b>
<b>4.1.1. Dados Climáticos .....</b>	<b>57</b>
<b>4.1.2. Dados de Solo .....</b>	<b>60</b>
<b>4.1.3. Dados do Contaminante .....</b>	<b>60</b>
<b>4.1.4. Dados de Aplicação .....</b>	<b>61</b>
<b>4.2. Levantamento dos Dados Requeridos pelo AT123D .....</b>	<b>63</b>
<b>4.2.1. Parâmetros de Simulação .....</b>	<b>63</b>
<b>4.2.2. Propriedades do Solo e Contaminantes .....</b>	<b>63</b>
<b>4.2.3. Taxas de Lançamento da Fonte .....</b>	<b>65</b>
<b>CAPÍTULO 5 – RESULTADOS E DISCUSSÕES .....</b>	<b>66</b>
<b>5.1. Modelo SESOIL .....</b>	<b>66</b>
<b>5.2. Modelo AT123D .....</b>	<b>74</b>
<b>CAPÍTULO 6 – CONCLUSÕES .....</b>	<b>78</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>81</b>
<b>APÊNDICE A – Modelo SESOIL – Tolueno .....</b>	<b>85</b>
<b>APÊNDICE B – Modelo SESOIL – Etilbenzeno .....</b>	<b>110</b>
<b>APÊNDICE C – Modelo AT123D – Tolueno .....</b>	<b>135</b>
<b>APÊNDICE D – Modelo AT123D – Etilbenzeno .....</b>	<b>140</b>

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1.1</b>	Contaminação do solo por gasolina .....	<b>01</b>
<b>Figura 1.2</b>	Síntese da estrutura da análise de riscos .....	<b>02</b>
<b>Figura 2.1</b>	Representação esquemática de alguns horizontes do solo .....	<b>08</b>
<b>Figura 2.2</b>	Diagrama triangular de classes texturais do solo .....	<b>09</b>
<b>Figura 2.3</b>	Processos que influenciam destino e transporte de contaminantes químicos no subsolo .....	<b>12</b>
<b>Figura 2.4</b>	Diagrama dos principais componentes do ciclo hidrológico .....	<b>17</b>
<b>Figura 4.1</b>	Perfil esquemático das concentrações de tolueno e etilbenzeno por camada .....	<b>62</b>
<b>Figura 5.1</b>	Perfil de concentração dos contaminantes tolueno (a) e etilbenzeno (b) na profundidade de 100 cm para o período de 2 anos .....	<b>69</b>
<b>Figura 5.2</b>	Perfil de concentração dos contaminantes tolueno (a) e etilbenzeno (b) na profundidade de 250 cm para o período de 2 anos .....	<b>70</b>
<b>Figura 5.3</b>	Perfil de concentração dos contaminantes tolueno (a) e etilbenzeno (b) na profundidade de 300 cm para o período de 2 anos .....	<b>71</b>
<b>Figura 5.4</b>	Perfil de concentração dos contaminantes tolueno (a) e etilbenzeno (b) na profundidade de 350 cm para o período de 2 anos .....	<b>72</b>
<b>Figura 5.5</b>	Profundidade alcançada pela contaminação por tolueno no período de 2 anos .....	<b>73</b>
<b>Figura 5.6</b>	Profundidade alcançada pela contaminação por etilbenzeno no período de 2 anos .....	<b>73</b>
<b>Figura 5.7</b>	Plumas de concentração dissolvida, em ppm, de tolueno (acima) e etilbenzeno (abaixo) no plano XY para Z = 0, 1 e 2 m no primeiro ano .....	<b>75</b>

<b>Figura 5.8</b>	Plumas de concentração dissolvida, em ppm, de tolueno (acima) e etilbenzeno (abaixo) no plano XY para $Z = 0, 1$ e $2$ m no segundo ano .....	<b>76</b>
<b>Figura 5.9</b>	Evolução do perfil da pluma de contaminação de ambos os contaminantes .....	<b>77</b>

## ÍNDICE DE TABELAS

<b>Tabela 2.1</b>	Distribuição das fases do contaminante .....	<b>11</b>
<b>Tabela 2.2</b>	Variação da prosidade para diferentes tipos de solos .....	<b>20</b>
<b>Tabela 3.1</b>	Parâmetros de entrada do SESOIL .....	<b>25</b>
<b>Tabela 3.2</b>	Valores típicos das propriedades do solo usados no AT123D .....	<b>55</b>
<b>Tabela 4.1</b>	Sumário para os dados de entrada climáticos .....	<b>59</b>
<b>Tabela 4.2</b>	Parâmetros de solo areno-argilosos requeridos pelo SESOIL .....	<b>60</b>
<b>Tabela 4.3</b>	Sumário dos parâmetros químicos do tolueno fornecidos pelo SESOIL .....	<b>61</b>
<b>Tabela 4.4</b>	Sumário dos parâmetros químicos do etilbenzeno fornecidos pelo SESOIL .....	<b>61</b>
<b>Tabela 4.5</b>	Dados de aplicação da área contaminada .....	<b>61</b>
<b>Tabela 4.6</b>	Concentrações iniciais de tolueno e etilbenzeno para as camadas 1, 2, 3 e 4 do solo .....	<b>63</b>
<b>Tabela 4.7</b>	Parâmetros de entrada no solo e contaminantes para o modelo AT123D .....	<b>64</b>
<b>Tabela 5.1</b>	Concentração média de tolueno e etilbenzeno por camadas para o período de 2003/2004 .....	<b>66</b>
<b>Tabela 5.2</b>	Concentração média de tolueno e etilbenzeno por camadas para o período de 2004/2005 .....	<b>67</b>
<b>Tabela 5.3</b>	Resultados das concentrações de tolueno e etilbenzeno segundo Relatório de 2005 .....	<b>67</b>

## GLOSSÁRIO DE ABREVIações E SÍMBOLOS

SASC	Sistema de Abastecimento Subterrâneo de Combustíveis	
BTEX	Benzeno, Tolueno, Etilbenzeno e Xilenos	
ARA	Análise de Riscos Ambientais	
SESOIL	<i>Seasonal Soil Compartment Model</i>	
AT123D	<i>Analytical Transient 1-,2-,3-Dimensional Model</i>	
FEEMA	Fundação Estadual de Engenharia do Meio Ambiente	
CETESB	Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental	
USDA	Departamento de Agricultura dos Estados Unidos	
SBCS	Sociedade Brasileira de Ciência do Solo	
NALP	<i>Non Aqueous Phase Liquids</i>	
LNALP	<i>Light Non Aqueous Phase Liquids</i>	
DNALP	<i>Dense Non Aqueous Phase Liquids</i>	
RIVM	Instituto Nacional de Saúde Pública	
RBCA	<i>Risk-Based Corrective Action</i>	
CTC	Capacidade de Troca Catiônica	
ETP	Evapotranspiração Potencial	
ETR	Evapotranspiração Real	
USLE	<i>Universal Soil Loss Equation</i>	
CEC	<i>Cation Exchange Capacity</i>	
INMET	Instituto Nacional de Meteorologia	
CPTEC	Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos	
DZ	Diretriz	
R2	Revisão 2	
(-)	Não avaliado	
n.d.	Não detectado	
$v_x$	Velocidade de percolação na direção x	m/s
K	Condutividade hidráulica	m/s
n	Porosidade efetiva	
dh/dx	Gradiente hidráulico	m/m
$F_x$	Fluxo de massa de soluto	Kg/m <sup>2</sup> s
$D_d$	Coefficiente de difusão	m <sup>2</sup> /s
C	Concentração de soluto	Kg/m <sup>3</sup>

$dC/dx$	Gradiente de concentração	$Kg/m^3m$
$\partial C/\partial t$	Variação da concentração com o tempo	$Kg/m^3 s$
$D_L$	Coefficiente de dispersão hidrodinâmica paralelo à direção de fluxo principal (longitudinal)	$m^2/s$
$D_T$	Coefficiente de dispersão hidrodinâmica perpendicular à direção de fluxo principal (transversal)	$m^2/s$
$v_i$	Velocidade de percolação	$m/s$
$\alpha_L$	Dispersividade longitudinal	$m$
$\alpha_T$	Dispersividade transversal	$m$
$R_w$	Irradiância líquida disponível	$W/m^2$
$f_w$	Coefficiente de transferência de vapor	$W s/ m^2 K$
$v$	Pressão de saturação do vapor às temperaturas do ar	$Pa$
$v_D$	Pressão de saturação do vapor do ponto de orvalho	$Pa$
$\lambda$	Coefficiente de transferência de calor	$W s/ m^2 K$
$\Delta$	Taxa da variação da pressão de saturação do vapor d'água com a temperatura do ar	$Pa/s$
$P$	Precipitação	$cm/mês$
$E$	Evapotranspiração	$cm/dia$
$RU$	Retenção de umidade	
$S$	<i>Runoff</i> superficial	
$I$	Infiltração	
$p$	Produto	
$A$	<i>Runoff</i> no aquífero	
$K_z$	Permeabilidade média vertical	$cm^2$
$K_i$	Permeabilidade para camada i	$cm^2$
$d$	Profundidade da superfície até o aquífero	$cm$
$d_i$	Espessura da camada i	$cm$
$R'$	Radiação média mensal	
$R$	Radiação potencial	
$c$	Fração do céu nublado	
$k$	Fator de transmissão do céu nublado	
$Sat$	Percentual de saturação	
$\delta(Sat)$	Condutividade hidráulica para Sat	$cm/s$
$\delta$	Condutividade hidráulica saturada	$cm/s$



$\varepsilon$	Índice de desconexidade de poros	
$Q(t-1)$	Quantidade de contaminante originalmente no compartimento do solo num tempo t-1	$\mu\text{g}/\text{cm}^2$
$I'(t)$	Quantidade de poluente entrando no compartimento do solo durante um intervalo de tempo	$\mu\text{g}/\text{cm}^2$
$T'(t)$	Quantidade de poluente transferida para dentro do compartimento do solo em um passo	$\mu\text{g}/\text{cm}^2$
$R'(t)$	Quantidade de contaminante que permanece no compartimento de solo durante intervalo de tempo	$\mu\text{g}/\text{cm}^2$
$M(t)$	Quantidade de poluente que migra para fora do compartimento de solo durante intervalo de tempo	$\mu\text{g}/\text{cm}^2$
$C_{sa}$	Concentração de poluente no solo-ar	$\mu\text{g}/\text{mL}$
$c'$	Concentração de poluente no solo-água	$\mu\text{g}/\text{mL}$
$H$	Constante da lei de Henry	$\text{m}^3\text{atm}/\text{mol}$
$R$	Constante dos gases	$\text{m}^3\text{atm}/\text{mol K}$
$T$	Temperatura do solo	$^{\circ}\text{C}$
$s$	Concentração de poluente adsorvida	$\mu\text{g}/\text{g}$
$K_d$	Coefficiente de partição do poluente	$\mu\text{g}/\text{g}/\mu\text{g}/\text{mL}$
$m$	Expoente de Freundlich	
$C_g$	Concentração global de poluentes	$\mu\text{g}/\text{mL}$
$f_a$	Porosidade preenchida por ar	$\text{mL}/\text{mL}$
$f$	Porosidade do solo	$\text{mL}/\text{mL}$
$\theta$	Teor de umidade no solo	$\text{mL}/\text{mL}$
$\rho_b$	Densidade do solo	$\text{g}/\text{mL}$
$D$	Profundidade	$\text{cm}$
$J_w$	Velocidade da água	$\text{cm}/\text{s}$
$t_c$	Tempo de advecção	$\text{s}$
$J_{wz}$	Taxa de infiltração a profundidade z que é limite entre as duas principais camadas	$\text{m}/\text{s}$
$J_a$	Fluxo de difusão através do solo na fase vapor	$\mu\text{g}/\text{cm}^2\text{s}$
$d_i$	Profundidade da coluna de solo abaixo da profundidade z	$\text{cm}$
$D_a$	Coefficiente de difusão do vapor do componente no ar	$\text{cm}^2/\text{s}$
MCEC	Troca catiônica máxima de poluentes pelo solo	$\mu\text{g}/\text{g}$
$a$	Coefficiente de capacidade de troca catiônica	

CEC	Capacidade de troca catiônica do solo	meq/100g
MWT	Peso molecular do cátion poluente	g/gmol
VAL	Valência do cátion	
$P_d$	Massa de poluente degradado durante um passo	$\mu\text{g}$
$K_{dl}$	Taxa de biodegradação do composto na fase líquida	$\text{dia}^{-1}$
$K_{ds}$	Taxa de biodegradação do composto na fase sólida	$\text{dia}^{-1}$
$A_1$	Área de aplicação do contaminante	$\text{cm}^2$
$d_s$	Profundidade da subcamada do solo	cm
$\Delta t$	Intervalo de tempo (passo)	dia
$K_h$	Taxa constante de hidrólise	$\text{dia}^{-1}$
$K_o$	Taxa constante de hidrólise neutra	$\text{dia}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ L}$
$K_H$	Taxa constante de hidrólise catalisada por ácido	$\text{dia}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ L}$
$[\text{H}^+]$	Concentração do íon hidrogênio	mol/L
$K_{OH}$	Taxa constante de hidrólise catalisada por ácido	$\text{dia}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ L}$
$[\text{OH}^{-1}]$	Concentração do íon hidroxila	mol/L
Y	Temperatura média mensal do solo	$^{\circ}\text{F}$
X	Temperatura média mensal do ar	$^{\circ}\text{F}$
q	Vetor velocidade de Darcy	m/s
$D_h$	Coefficiente de dispersão hidráulica	$\text{m}^2/\text{s}$
$C_d$	Concentração dissolvida de soluto	$\mu\text{g}/\text{mL}$
$C_s$	Concentração adsorvida no sólido	$\mu\text{g}/\text{g}$
$n_e$	Porosidade efetiva	
$\lambda'$	Constante de degradação radioativa	$\text{h}^{-1}$
$K_d'$	Taxa de degradação	$\text{h}^{-1}$
$a_1$	Taxa temporal de perda de massa	
$b_1$	Densidade do aquífero	
$c_1$	Efeitos do transporte advectivo	
$d_1$	Taxa de lançamento da fonte	$\text{Kg}/\text{h}$
$e_1$	Efeitos da taxa de degradação de 1º ordem	
$f_1$	Efeitos de decaimento radioativo	
$g_1$	Efeitos de troca iônica reversível ou sorção	

## CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

A atual rede de distribuição de combustíveis líquidos a varejo no Brasil é dotada de um contingente de 34.300 postos de abastecimento [1]. A rede varejista brasileira distribui comumente quatro tipos de combustíveis líquidos: gasolina, gasolina aditivada, diesel e álcool hidratado; desses, sem dúvida, os mais consumidos são as gasolinas, com um volume vendido, em 2006, superior aos 16 milhões de metros cúbicos [1].

A estocagem das unidades de revenda é, via de regra, subterrânea, realizada através do aparato denominado SASC – Sistema de Abastecimento Subterrâneo de Combustíveis. Os grandes problemas com os tanques e instalações subterrâneas desse sistema estão associados à sua vida útil que, em média, é de 25 anos, e com a dificuldade em se detectar vazamentos. Boa parte dos postos de abastecimento brasileiros data sua origem na década de 70 e é de se esperar que muitos tenham problema de vazamento, ainda que não existam dados precisos a respeito [2].

Diante desse quadro, é de se esperar inúmeros sítios contaminados por gasolina no Brasil, dados o tamanho e as condições da rede distribuidora de combustíveis líquidos do país. Os principais sintomas da contaminação por gasolina são: a presença de fase livre em aquíferos e poços. A Figura 1.1 mostra a contaminação de um solo por gasolina.



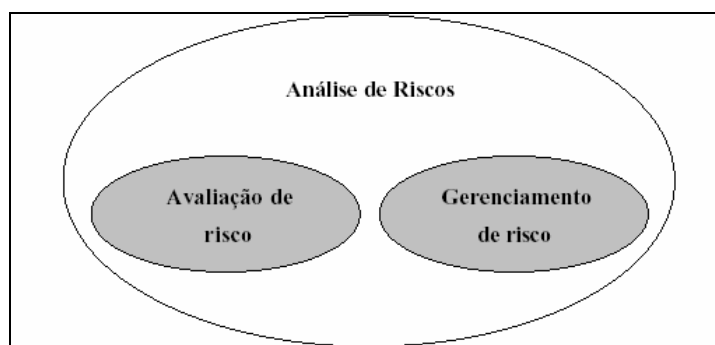
**Figura 1.1** – Contaminação do solo por gasolina. Fonte: CETESB.

Os hidrocarbonetos do grupo BTEX – benzeno, tolueno, etilbenzeno e xilenos – são depressores do sistema nervoso central, apresentando toxicidade crônica, mesmo em baixas concentrações [2]. Os padrões preconizados pelo Ministério da Saúde, na

portaria 518/04, utilizada como referência para qualidade de aquíferos, definem a concentração máxima de benzeno em 5 µg/L, de tolueno em 170 µg/L, de etilbenzeno em 200 µg/L, e de xilenos em 300 µg/L para a potabilidade da água [3].

Nesse sentido, surge a necessidade de estudos capazes de compreender o que acontece com um contaminante quando este atinge o meio subsuperficial. Quer seja o entendimento da movimentação de um contaminante no solo, quer seja a avaliação dos riscos à saúde humana e ao meio ambiente oriundos de um lançamento, ou ainda, como podem ser mitigados os efeitos danosos desse contaminante.

A análise de riscos ambientais (ARA) cumpre um desses papéis. O risco ambiental está associado aos efeitos deletérios que determinados compostos podem exercer sobre a saúde humana, ou, sob uma ótica mais abrangente, sobre o meio ambiente. A ARA é um processo que envolve a avaliação do risco e seu gerenciamento, seja ele de ordem natural ou tecnológica. A avaliação do risco envolve sua identificação e quantificação. O gerenciamento dá conta da seleção de ações a serem tomadas para conter o perigo e mitigar suas conseqüências [4]. As etapas de uma análise de risco são bem descritas pela Figura 1.2.



**Figura 1.2** – Síntese da estrutura da análise de riscos [4].

A ARA de sítios contaminados com hidrocarbonetos de petróleo deve, inexoravelmente, contemplar a avaliação do comportamento dos contaminantes no solo. Para tanto, existem modelos que são capazes de descrever a movimentação dos poluentes nos diferentes estratos do solo, simulando a interação dessas substâncias com os elementos abióticos e bióticos do ambiente subsuperficial.

A utilização de modelos computacionais para a simulação do comportamento de contaminantes em ambientes subterrâneos é usual e tem importância capital na quantificação de fluxos e transporte de contaminantes. O estudo do comportamento de

poluentes pode ser feito através de medidas de campo, porém nem sempre esse método tem aplicabilidade prática, ou, por vezes, é inviável a tomada dessas medidas, o que abaliza a utilização dessas soluções computacionais [2].

Alguns dos modelos disponíveis no mercado são, o MODFLOW, utilizado para análise de fluxo, o BIOSCREEN, o BIOCHLOR, BIOPLUME, MT3D, RT3D, e FemPol, utilizados na simulação de transportes de contaminantes[2].

Entre esses modelos destaca-se o *software* RISKPRO, dotado de dois módulos o SESOIL e o AT123D. O RISKPRO é capaz de estabelecer previsões para o comportamento de contaminantes em dois níveis no solo: na zona insaturada através do módulo SESOIL e na zona saturada, através do AT123D.

SESOIL é uma sigla para o termo em inglês *Seasonal Soil Compartment Model* (Modelo Sazonal do Compartimento do Solo). Este é um modelo unidimensional para o transporte de contaminantes na zona insaturada do solo. O SESOIL modela o transporte de água, sedimento e o destino de poluentes simultaneamente, considerando uma movimentação vertical através da coluna de solo insaturada [5].

AT123D é sigla para *Analytical Transient 1-, 2-, 3-Dimensional Model* (Modelo Analítico Transiente Uni, Bi, ou Tridimensional). O AT123D computa uma distribuição espacial-temporal de concentrações de contaminantes no sistema de aquíferos e prediz a propagação transiente da pluma de contaminação através das águas subterrâneas [6].

O principal objetivo do presente trabalho foi avaliar a aplicabilidade do programa RISKPRO para uma área contaminada, levando em consideração contaminações pelo grupo BTEX oriundas de derramamentos de gasolina. Aliado a isso, foi avaliada a facilidade de uso do programa, através da comparação entre as exigências de *input* e a disponibilidade de dados brasileiros. Outros objetivos foram: verificar como os valores *default* e outras simplificações do programa influenciam os *outputs* e analisar os resultados frente aos estudos de campo pesquisados.

Para tanto, foi eleita uma área no município do Rio de Janeiro contaminada com despejos de gasolina, provenientes do vazamento de um SASC em um posto de abastecimento e serviços. Nesse local foram realizados dois levantamentos de campo: um em março de 2003 e outro em março de 2005, gerando dois relatórios de avaliação

ambiental distintos. O primeiro relatório serviu de base para dados de *input* do RISKPRO e o segundo foi usado como controle para as simulações.

### **1.1. Motivação do Trabalho**

A atividade de revenda de combustíveis líquidos está extensamente presente nas regiões urbanas do Brasil e por muito tempo foi realizada sem a menor preocupação com o meio ambiente, o que resulta hoje em diversos pontos de contaminação do solo decorrentes de vazamentos em SASC.

Para gerenciar e remediar estas áreas contaminadas há necessidade de tecnologias diversas que, a cada dia, vêm sendo melhoradas com intuito de tornar mais efetiva a descontaminação desses sítios.

Compreender a movimentação dos contaminantes no solo é algo de importância capital para a gestão e remediação de regiões onde ocorreram derramamentos de hidrocarbonetos. Nesse sentido, modelos matemáticos capazes de prever o comportamento de compostos químicos poluentes no solo se tornam ferramentas muito interessantes.

O RISKPRO, em especial, é pouco explorado no país. Pouquíssimos trabalhos relatam sua utilização como ferramenta de previsão do comportamento de substâncias no solo do Brasil, mesmo havendo relatos de sua aplicação com sucesso nos EUA [5], [6].

Assim, pretende-se com este trabalho verificar a possibilidade da adição de mais uma ferramenta à coleção de instrumentos de gerenciamento de áreas contaminadas que já estão disponíveis no país.

### **1.2. Organização do Estudo**

O conteúdo deste trabalho foi dividido em cinco capítulos, a saber:

- Capítulo 1: situa o leitor sobre o contexto no qual foi elaborado o trabalho, dá os objetivos e motivações centrais da obra e a organização da mesma;
- Capítulo 2: aborda os principais conceitos necessários à compreensão da obra e trabalhados durante a confecção do estudo;

- Capítulo 3: detalha a aplicação computacional adotada, o RISKPRO.
- Capítulo 4: descreve a metodologia adotada para as coletas de dados e para a execução dos experimentos com o sistema computacional adotado;
- Capítulo 5: exhibe e comenta os principais resultados obtidos com a utilização do programa;
- Capítulo 6: responde as indagações traçadas nos objetivos do trabalho, concluindo o estudo à luz dos resultados do capítulo anterior.

## CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1. Caracterização das Áreas Contaminadas

Atualmente, a rede de distribuição de combustíveis no Brasil conta com cerca de 34.300 unidades de abastecimento [1], das quais grande parte é equipada com sistema de estocagem subterrânea. Muitos dos tanques enterrados têm tempo de operação superior a 25 anos, o que os coloca num quadro de fragilidade acentuada, sujeitos a corrosão e ao surgimento de rachaduras. Nesse cenário, a possibilidade de vazamento e contaminação do solo é flagrante [7].

O quadro é agravado quando se observa que as regulamentações legais para a produção, transporte e armazenamento de substâncias perigosas são relativamente recentes. Nos EUA, por exemplo, até cerca de 1970 não havia regulamentação para uso e disposição de produtos químicos focando a proteção à saúde humana e ambiental. O manejo incorreto desses produtos ao longo dos anos resultou na ocorrência de inúmeros acidentes [8].

A contaminação potencializa a geração de efeitos nocivos à saúde humana e ao meio ambiente, constituindo um problema de saúde pública. Dados de 2005 exibem que em São Paulo foram verificadas 1.596 áreas contaminadas, das quais 1.164 resultantes da atividade de postos de abastecimento de combustíveis, ou seja, 73 % do total [9].

No Rio de Janeiro, no período de 1983 a 2003, 12 % das ocorrências registradas pela equipe de pronto atendimento a acidentes ambientais da FEEMA estão ligadas a postos de combustíveis [10].

O IBGE inclui em sua lista de atividades potencialmente poluidoras a atividade de “comércio varejista de combustíveis, lubrificantes e gás liquefeito de petróleo”, apresentada no manual da CETESB para gerenciamento de áreas contaminadas. De acordo com o manual, atividade potencialmente poluidora do solo e das águas subterrâneas é “aquela onde ocorre o manejo de substâncias, cujas características físico-químicas, biológicas e toxicológicas podem ocasionar danos aos bens a proteger” [11].

Vários fatores contribuem para o grande número de ocorrências de áreas contaminadas por postos de gasolina: a grande quantidade de empreendimentos; estocagem de



produtos perigosos, extremamente tóxicos, que mesmo em pequenas quantidades são capazes de produzir grandes plumas de contaminação em potencial; a dificuldade em se detectar vazamentos em tanques subterrâneos e a falta de fiscalização adequada. Em geral, a detecção de um vazamento só se dá após longos períodos, quando se detecta o produto em alguma galeria de esgoto, rede de drenagem, subsolo de edifícios, escavações ou poços de abastecimento de água [12].

## 2.2. Solo e Águas Subterrâneas

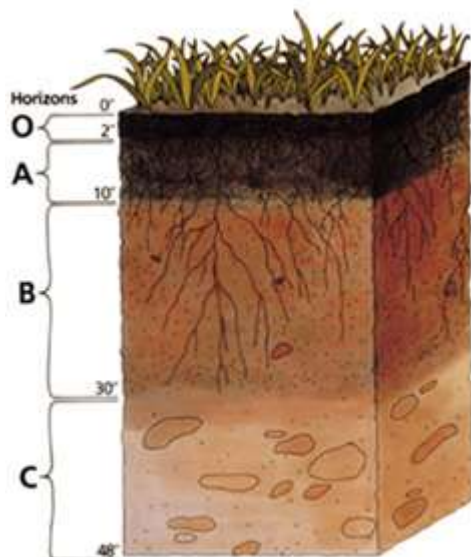
O solo é um material geológico não consolidado, poroso, composto de substâncias químicas orgânicas e inorgânicas dispostas abaixo e na superfície terrestre, que pode ser modificado por agentes químicos, físicos ou biológicos, possuindo propriedades físicas, químicas, mineralógicas e biológicas [13].

GUIMARÃES (2003) define solo como “um material particulado, heterogêneo, anisotrópico, e de composição (química, física, mineralógica e biológica) altamente variável” [4].

De fato, o solo é responsável pela cobertura da maior fração da superfície continental do planeta. A formação do solo envolve a desintegração de rochas e partículas menores e a mistura dessas com a matéria orgânica em decomposição. Durante a formação do solo surgem camadas horizontais (Figura 2.1), os horizontes do solo [13]:

- Horizonte “O”: horizonte dominado pela presença de material orgânico;
- Horizonte “A”: horizonte mineral que é formado pelo acúmulo de material orgânico húmifero intimamente misturado com a fração mineral;
- Horizonte “E”: horizonte mineral no qual a principal característica é a perda de silicatos, argilas, alumínio, ferro, ou algumas combinações desses, e tem o acúmulo de partículas de areia e silte compostas de quartzo ou outros materiais resistentes;
- Horizonte “B”: horizonte dominado pela acumulação de materiais provenientes dos horizontes superiores, possui coloração definida e pouca matéria orgânica;

- Horizonte “C”: horizonte dotado de granulações mais grosseiras, aquele no qual inicia-se a decomposição da rocha matriz;
- Horizonte “R”: Rocha matriz [9], [13].



**Figura 2.1** - Representação esquemática de alguns horizontes do solo. [14]

O solo pode ser assumido como um sistema multicomponente, integrado pelas fases sólida, líquida e gasosa. Essas duas últimas ocupam o espaço poroso do solo e caracterizam-se por serem complementares, ou seja, a ausência de uma implica na presença máxima da outra. O solo é dito saturado (zona saturada) quando a fase líquida ocupa completamente os poros, caso contrário, diz-se que o solo é não-saturado (zona insaturada). Combinadamente, as fases líquida e gasosa chegam a ocupar uma grande parte do volume do solo e compõem a porosidade total. A fase sólida é constituída de partículas minerais, na grande maioria, e de substâncias orgânicas. Os compostos orgânicos e os minerais sólidos são de várias formas, tamanhos e composições químicas e constituem-se o que se chama a matriz do solo [15].

As partículas sólidas minerais do solo são divididas em três frações, chamadas frações texturais: areia, silte e argila. Algumas são suficientemente grandes para serem vistas a olho nu, outras são tão pequenas a ponto de apresentarem propriedades coloidais. Solos de diferentes classes texturais resultam de diferentes combinações de areia, silte e argila. A Figura 2.2 é um diagrama triangular, proposto pela USDA (Departamento de Agricultura dos Estados Unidos) e adotado pela SBCS (Sociedade Brasileira de Ciência

do Solo), que descreve as misturas de areia, silte e argila com seus respectivos nomes [15].

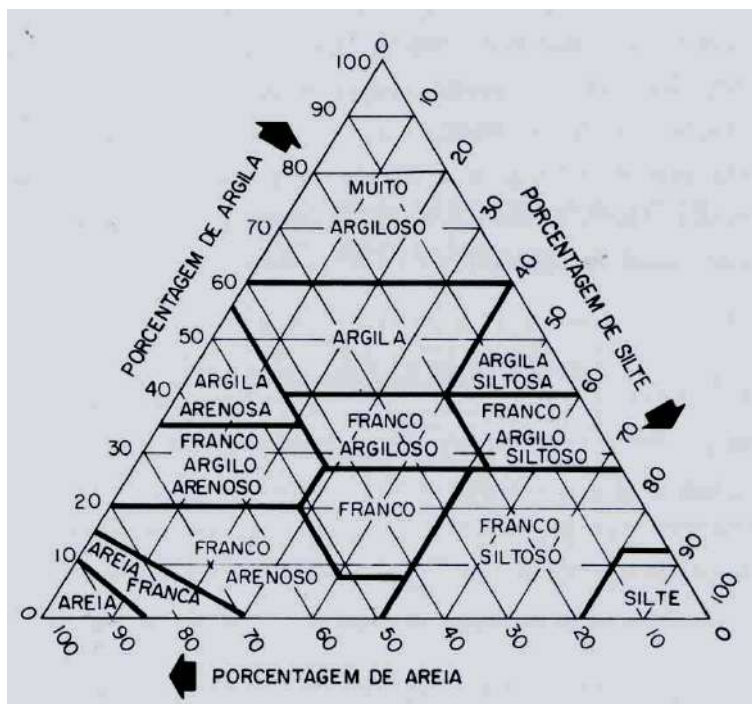


Figura 2.2 – Diagrama triangular de classes texturais do solo [15].

A matéria orgânica existente no solo é resultante da ação microbiana sobre materiais de origem animal e vegetal. Quando não está completamente degradada, a matéria orgânica contribui para a formação do húmus [16].

A fase gasosa caracteriza a porosidade de aeração do solo ou porosidade livre de água, a qual contém gases como o  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{NH}_3$  e vapor de água [15].

A fase líquida está ligada à existência da água subterrânea. Ela ocorre em poros, fendas, fraturas e outros espaços vazios de dimensões milimétricas das rochas. Sua presença deriva da infiltração da água da chuva através da zona insaturada. É caracterizada pela umidade do solo e representada pela solução do solo contendo íons como  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{H}^+$ ,  $\text{NH}_4^+$ , etc [15].

Deve-se citar, ainda, a existência de formações geológicas do subsolo, constituídas por rochas porosas, que são capazes de armazenar e transmitir facilmente a água: os chamados aquíferos. Os aquíferos podem ser divididos em dois grupos, dependendo da

superfície superior (segundo a pressão d'água): aquífero livre ou freático e aquífero confinado ou artesiano [17].

### 2.3. Contaminantes

Os três principais combustíveis líquidos distribuídos em postos de revenda no Brasil são: álcool hidratado, gasolina (adicionada de álcool anidro) e o diesel. A estocagem subterrânea desses combustíveis os coloca como contaminantes em potencial do solo nas regiões circunvizinhas aos postos de abastecimento. Porém, propõe-se aqui a abordagem específica aos contaminantes associados à gasolina.

Segundo dados da CETESB, 42 % dos acidentes ambientais ocorridos em postos de abastecimento no estado de São Paulo no ano de 2001 foram em decorrência de vazamentos de gasolina [18].

Hidrocarbonetos do petróleo são compostos parcialmente imiscíveis em água (NAPL, *Non-aqueous phase liquids*), podendo ser classificados de acordo com a sua densidade em: fase líquida parcialmente imiscível menos densa que a água (LNAPL, *Light non-aqueous phase liquids*) e fase líquida parcialmente imiscível mais densa que a água (DNAPL, *Dense non-aqueous phase liquids*) [9].

A gasolina é uma mistura complexa de hidrocarbonetos, classificada como um LNAPL, já que sua massa específica (entre 0,72 e 0,78 g/cm<sup>3</sup>) é inferior à da água (0,997 g/cm<sup>3</sup>) [18]. É a fração do petróleo que destila entre 30 e 225 °C e é composta por mais de 200 componentes, sendo a maior parte deles hidrocarbonetos alifáticos e aromáticos, das séries C<sub>4</sub> a C<sub>12</sub>. Oxigenados também fazem parte da composição da gasolina, assim como compostos de enxofre, nitrogênio e compostos metálicos, porém todos em concentrações reduzidas. Entre os principais alifáticos da gasolina estão o butano, o pentano e o octano; e entre os aromáticos o benzeno, o tolueno, o etilbenzeno e os xilenos (meta, orto e para substituídos), ou seja, o grupo BTEX [9].

No Brasil a gasolina ainda recebe um componente adicional, o etanol anidro, adicionado numa proporção de 24 % de acordo com as normas estabelecidas em lei. O álcool é adicionado no momento de carregamento dos caminhões. Por conta disso, é necessário se levar em conta a especificidade da gasolina brasileira, é preciso que se conheça

detalhadamente as interações físico-químicas e biológicas do etanol para que se entenda o comportamento da gasolina no solo [2].

A gasolina, por ser uma mistura de compostos orgânicos, apresenta uma grande variação nas suas características, tais como volatilidade e solubilidade; ao vazar de um tanque de armazenamento subterrâneo pode resultar em três fases distintas: ao migrar pela zona não saturada o produto é parcialmente detido pelo solo, formando a chamada fase sorvida. Ao atingir o lençol freático, passa a flutuar sobre o mesmo, gerando a fase livre. Parte do produto que atinge o lençol freático se dissolve na água subterrânea formando uma pluma de contaminação denominada fase dissolvida. Deve-se considerar ainda uma fase vapor coexistindo nos poros com a fase sorvida. A fase sorvida é também uma fonte constante de contaminação da água subterrânea, pois os compostos sorvidos pelo solo são liberados gradativamente para água, fenômeno este que pode durar vários anos, inviabilizando a captação de água subterrânea [20].

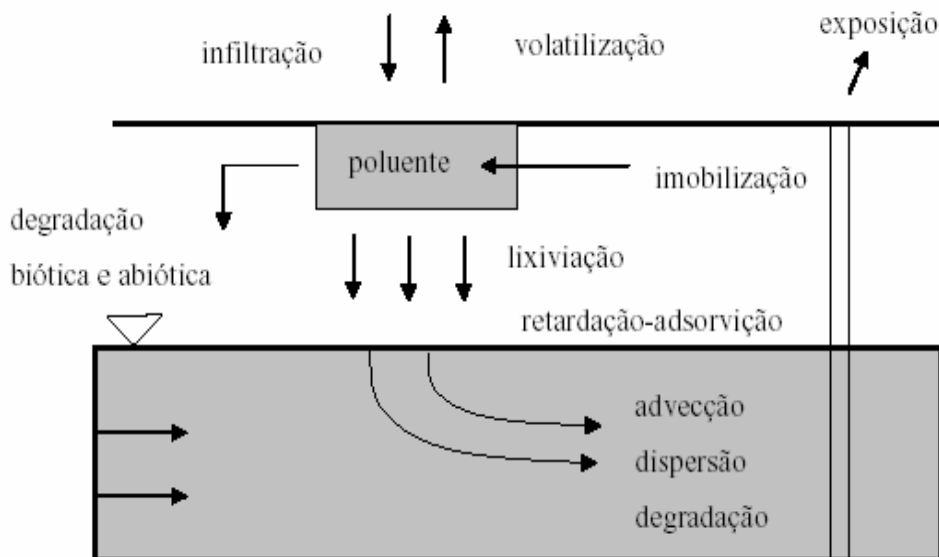
A Tabela 2.1. apresenta uma distribuição de fases estimada para um derramamento de gasolina em um aquífero médio de areia com profundidade do lençol freático de cerca de 5 m. Os valores expostos na Tabela 2.1 evidenciam a participação de cada uma das fases na contaminação do meio ambiente subsuperficial. A quantidade de produto dissolvida na água subterrânea é relativamente pequena (1-5 %) em comparação ao total derramado, mas esta é a responsável pela maior quantidade de material contaminado (79 %). Uma vez que o fluxo da água subterrânea, pela sua dinâmica, é um mecanismo de maior capacidade de dispersão da contaminação, a quantidade de produto retido na parte sorvida (33 % do total derramado), embora de mobilidade reduzidíssima, funciona como uma fonte permanente de contaminação das águas subterrâneas pela liberação lenta e contínua de produto para a fase dissolvida [21].

**Tabela 2.1** - Distribuição das fases do contaminante [2].

<b>Fase</b>	<b>Volume Contaminado (m<sup>3</sup>)</b>	<b>% do Total</b>	<b>Volume Derramado (m<sup>3</sup>)</b>	<b>% do Total</b>
LIVRE	7.100	1	18.500	62
SORVIDA	250.000	20	10.000	33
DISSOLVIDA	960.000	79	333	1- 5
TOTAL	1.217.100	100	28.833	100

## 2.4. Transporte de Contaminantes

Existem vários fatores e processos que afetam o transporte dos poluentes. A Figura 2.3 mostra uma vista esquemática dos processos que afetam o destino e transporte de contaminantes, com uma superfície próxima à fonte de contaminação [23].



**Figura 2.3** – Processos que influenciam o destino e transporte de contaminantes químicos no subsolo [23].

Alguns dos componentes químicos podem ser imobilizados dentro da área da fonte, enquanto que o restante está livre para se transportar através de uma das fases móveis. A partição multifásica determina o quanto de constituintes químicos reside em cada fase. Os constituintes químicos, vindos da fase de vapor, são perdidos para a atmosfera pelo processo de volatilização. Os componentes solúveis podem ser levados da área da fonte de contaminação pela água infiltrada no solo. A taxa do movimento de componentes químicos durante a lixiviação deverá ser menor do que a taxa de água em movimento, se os componentes químicos estiverem significativamente sorvidos no solo, ou particionados numa fase imóvel de hidrocarbonetos [23].

Na área da fonte de contaminação e durante o transporte, alguns dos componentes químicos podem ser perdidos devido à degradação, por fatores bióticos ou abióticos. Se as perdas e a retardamento não forem suficientes, alguns dos componentes químicos alcançarão a superfície da água e serão transportados com o fluxo de água-subterrânea [22].

O fluxo de um contaminante imiscível é controlado por seu próprio potencial de fluxo, o qual depende da pressão, gravidade, e forças de superfície, não sendo necessariamente similar ao potencial de fluxo da água subterrânea [24].

### 2.4.1. Principais Mecanismos de Transporte

#### 2.4.1.1. Mecanismo de Advecção

A advecção é o mecanismo de transporte que representa o movimento do contaminante dissolvido ao longo da direção do fluxo da água. Esse está relacionado somente com a velocidade de percolação no meio poroso, descrito pela Lei de Darcy, a qual é definida para meio homogêneo, fluxo incompressível e movimento unidimensional segundo equação (2.1) [2].

$$v_x = -K/n * dh/dx \quad (2.1)$$

Onde,

- $v_x$ , velocidade de percolação na direção x (m/s);
- K, condutividade hidráulica (m/s);
- n, porosidade efetiva;
- $dh/dx$ , gradiente hidráulico (m/m).

#### 2.4.1.2. Mecanismo de Difusão

O processo de difusão molecular é o movimento do contaminante de uma área seguindo um gradiente decrescente de concentração. O processo de difusão é descrito pela Primeira Lei de Fick, onde o transporte de massa é proporcional ao gradiente de concentração unidimensional, a Lei de Fick é dada pela equação (2.2) [2].

$$F_x = D_d * [dC/dx] \quad (2.2)$$

Onde,

- $F_x$ , fluxo de massa de soluto ( $\text{Kg}/\text{m}^2 \text{ s}$ );
- $D_d$ , coeficiente de difusão ( $\text{m}^2/\text{s}$ );

- $C$ , concentração do soluto ( $\text{Kg/m}^3$ );
- $dC/dx$ , gradiente de concentração ( $\text{Kg/m}^3\text{m}$ ).

A difusão é predominante quando a velocidade de percolação da água é reduzida (por exemplo, em solos de baixa permeabilidade) ou em casos do transporte de massa envolvendo períodos de tempo muito elevados. Os valores dos coeficientes de difusão são relativamente constantes, podendo variar de  $1.0\text{E}-09$  a  $2.0\text{E}-09$   $\text{m}^2/\text{s}$  [25].

Tais valores não variam muito com a concentração, mas são dependentes da temperatura, sendo 50% menores em temperatura de  $5^\circ\text{C}$ . Para sistemas onde a concentração varia com o tempo, o processo difusivo é representado pela Segunda Lei de Fick, também unidimensional dada pela equação (2.3) [2].

$$\partial C/\partial t = D_d \partial^2 C/\partial x^2 \quad (2.3)$$

Onde,

- $\partial C/\partial t$ , variação da concentração com o tempo ( $\text{Kg/m}^3 \text{ s}$ ).

#### 2.4.1.3. Mecanismo de Dispersão

A dispersão mecânica é o espalhamento do contaminante, ou seja, uma diluição do soluto, causada pelas heterogeneidades no meio, que criam variações nas velocidades e nos caminhos do fluxo. As variações podem ocorrer devido ao atrito no interior de um único canal de poro devido à diferença das velocidades de um canal para outro, ou devido à variação do comprimento dos canais [26].

O espalhamento pode ocorrer ao longo de qualquer direção, desde que seja no mesmo sentido do fluxo. Em particular, se a direção do espalhamento é a mesma direção do fluxo, diz-se que existe uma dispersão mecânica longitudinal. Se a direção do espalhamento é normal à direção do fluxo tem-se uma dispersão mecânica transversal [25].

Cabe ressaltar que o processo de difusão não pode ser separado do processo de dispersão mecânica em fluxo de água subterrânea. Os dois processos são combinados para definir um parâmetro  $D$  chamado coeficiente de dispersão hidrodinâmica. Este parâmetro é representado pelas equações (2.4) e (2.5) [22].



$$D_L = v_i \alpha_L + D_d \quad (2.4)$$

$$D_T = v_i \alpha_T + D_d \quad (2.5)$$

Onde,

- $D_L$ , coeficiente de dispersão hidrodinâmica paralelo à direção de fluxo principal, longitudinal, ( $m^2/s$ );
- $D_T$ , coeficiente de dispersão hidrodinâmica perpendicular à direção de fluxo principal, transversal, ( $m^2/s$ );
- $v_i$ , velocidade de percolação ( $m/s$ );
- $\alpha_L$ , dispersividade longitudinal ( $m$ );
- $\alpha_T$ , dispersividade transversal ( $m$ ).

#### 2.4.1.4. Mecanismo de Degradação

A degradação se refere à perda local de constituintes químicos no subsolo. Isto pode ser devido a transformações abióticas, tais como hidrólise, ou de origem biótica. A biodegradação é um importante processo ambiental que causa a hidrólise de componentes químicos no solo. As transformações químicas são causadas por atividades de microrganismos que estão naturalmente presentes no solo. Os produtos da degradação podem ser mais ou menos tóxicos que os componentes originais [22].

A taxa de biodegradação é uma função complexa, determinada pelo número e tipo de microrganismos presentes, a toxicidade do seu componente de origem, a quantidade de água e temperatura do solo, a presença de elétrons e o potencial de redução, o pH do solo, a presença de outros nutrientes para o metabolismo de microrganismos, a solubilidade dos componentes químicos, e possivelmente por outros fatores [2].

#### 2.4.1.5. Mecanismo de Volatilização

A volatilização é um processo que envolve transferência de massa do solo, ar, e água que estão presentes no meio poroso, para a atmosfera. A volatilização está associada com difusão. A taxa de volatilização é afetada por vários fatores, tais como as propriedades do solo, propriedades químicas e condições do meio ambiente. A taxa de

volatilização é limitada pela concentração de vapor, o qual é mantido na superfície do solo, e pela taxa com que este vapor é lançado para a atmosfera. O mecanismo de volatilização pode ser comparado com a evaporação de água do solo, onde no lugar da água, temos o componente químico sendo evaporado [22].

## **2.5. Modelos**

### **2.5.1. Visão Geral**

Um modelo pode ser considerado como uma representação simplificada da realidade, auxiliando no entendimento dos processos que envolvem esta realidade. Os modelos estão sendo cada vez mais utilizados em estudos ambientais, pois ajudam a entender o impacto das mudanças no uso e cobertura da terra e a prever alterações futuras nos ecossistemas [22].

Os processos ambientais no mundo real são geralmente bastante complexos e são tipicamente tridimensionais e dependentes do tempo. Tal complexidade pode incluir comportamentos não lineares e componentes estocásticos sobre múltiplas escalas de tempo e espaço. É possível atingir um entendimento qualitativo de um processo particular, mas o quantitativo pode ser limitado. A possibilidade de expressar os processos físicos como um conjunto de equações matemáticas detalhadas pode não existir, ou as equações podem ser muito complexas, exigindo simplificações para seu uso [27].

Em alguns casos, esses conjuntos de equações podem ser vistos como uma coleção de hipóteses que conectam entradas e saídas do sistema. Esse conjunto de equações parametrizadas representa a melhor aproximação do modelador para explicar esses processos, considerando todas essas restrições. Entretanto, é importante reconhecer que um modelo ambiental é, no melhor caso, apenas uma representação dos processos do mundo real. Um mesmo processo pode ser representado de diferentes maneiras, sendo algumas mais apropriadas para determinados casos. Assim, não existe um modelo único que seja o melhor e sim, pode existir aquele que descreve com maior fidelidade um fenômeno [28].

Um modelo hidrológico, por exemplo, pode ser definido como uma representação matemática do fluxo de água e seus constituintes sobre alguma parte da superfície e/ou



### 2.5.2. Aplicações

Modelos de fluxo e transporte são aplicados na solução de problemas de águas subterrâneas que envolvem condições geológicas complexas, ou líquidos não aquosos multifásicos. Algumas das aplicações podem ser [2]:

- Como ferramenta para a determinação de quanto e onde coletar dados de campo ou para avaliação da utilidade de dados de campo pré-existentes;
- Para compreensão e previsão de fenômenos de fluxo e transporte em sistemas de aquíferos heterogêneos, anisotrópicos e estratificados;
- Como ferramenta auxiliar na seleção de possíveis alternativas para remediação de aquífero contaminado;
- Para o delineamento de áreas de proteção da zona de contribuição do poço, sob condições geológicas de heterogeneidade e anisotropia;
- Para previsão do destino e transporte de contaminantes na água subterrânea, sob condições multifásicas, em sistemas de aquíferos heterogêneos, saturados ou insaturados;
- Para otimização da gestão dos recursos de água subterrânea.

### 2.5.3. Alguns Programas Computacionais Utilizados em Simulações

A modelagem e o processo de transporte de água subterrânea têm sua simulação e técnica de prognóstico bem estabelecida, tendo sido desenvolvidos por alguns pesquisadores programas computacionais para tais simulações. Com os resultados de campo e análise de laboratório, os modelos tornam-se confiáveis, podendo ser utilizados em casos onde se deseja simular o transporte e a atenuação natural de vários compostos orgânicos [29].

Nesse sentido, citam-se alguns programas de relevância:

- **C-SOIL**, este programa de exposição humana, desenvolvido pelo Instituto Nacional de Saúde Pública e Meio Ambiente da Holanda (RIVM), simula o risco a que uma população está sujeita, quando exposta a um contaminante de

interesse, presente no solo e nas águas subterrâneas, e consiste de fórmulas que descrevem as relações entre as concentrações dos contaminantes nas fases do solo (sólida, líquida e gasosa) e o aporte dos mesmos aos seres humanos por diversas vias de exposição, viabilizando a comparação entre o ingresso total estimado e o nível de exposição máximo tolerável [4];

- Programas que seguem a metodologia RBCA (*Risk-Based Corrective Action*) que estabelece níveis gerais de contaminação baseados no risco, entre eles: o **RBCA TOOL KIT FOR CHEMICAL RELEASES v 1.3a**, **MEPAS 4.0**, **RISC v 4.0**, **API-DSS v 1.03**. Dentre estes programas, destaca-se o API-DSS V 1.03, que utiliza como modelagens principais Jury e SESOIL/AT123D, objetos do presente estudo [4];
- **MODFLOW**, utilizado para análise de fluxo, e os programas **BIOSCREEN**, aplicados na simulação de transporte de contaminantes e quantificam os processos de biodegradação [2].

O uso dos programas RBCA TOOL KIT v 1.3A e RISC v 4.0 é o mais indicado para execução de Análises de Risco Ambiental de sítios impactados por hidrocarbonetos de petróleo, visto que os demais programas apresentam algumas limitações como restrições de cenários e vias de exposição, não focam na avaliação de risco e não calculam níveis de remediação ou não dispõem de modelagem de fluxo e de transporte [4].

## 2.6. Alguns Parâmetros de Entrada do RISKPRO

### 2.6.1. Porosidade e Condutividade Hidráulica

A porosidade e a condutividade hidráulica podem variar dentro de um mesmo tipo de solo. Diferenças em grande escala nessas propriedades podem influenciar o transporte multifásico de hidrocarbonetos [30].

A porosidade é a proporção entre o volume de espaços vazios no solo e o volume total da matriz do solo e é expressa em porcentagem. A Tabela 2.2 apresenta alguns valores típicos de porosidade total para diferentes solos:

**Tabela 2.2** - Variação da porosidade para diferentes tipos de solos [29].

PARÂMETROS	VARIAÇÃO DE POROSIDADE (%)
Areia ou cascalho	25 a 40
Areia e cascalho misturados	25 a 35
Sedimentos glaciais	10 a 20
Argila	33 a 80

A condutividade hidráulica é a medida da capacidade do solo em transportar fluido, mas é também função das propriedades do fluido em consideração. As heterogeneidades do solo acarretam em diferenças na porosidade e condutividade hidráulica, dentro, ou entre diferentes camadas de solo [22].

### 2.6.2 Umidade do Solo e Conteúdo de Matéria Orgânica

A umidade do solo e as características e concentrações dos constituintes nos hidrocarbonetos podem influenciar significativamente o comportamento dos combustíveis líquidos no solo. Um solo próximo à superfície que tenha uma quantidade reduzida de água e um conteúdo elevado de material orgânico, tende a reter os constituintes de peso molecular maior num vazamento de hidrocarbonetos [30].

A adsorção de hidrocarbonetos em materiais do solo aumenta com o declínio de umidade e aumento de conteúdo orgânico [30].

### 2.6.3. Permeabilidade Intrínseca

A propriedade do meio poroso que mede a capacidade deste se deixar atravessar por um fluido é denominada de permeabilidade intrínseca, cujo símbolo pode ser escrito como  $k$  (medida em Darcy =  $0.987E-08 \text{ cm}^2$ ) [22].

A permeabilidade intrínseca, também conhecida como permeabilidade específica é função do tipo de material poroso, sua granulometria e sua disposição estrutural. No caso de sedimentos não consolidados, vários estudos comprovam que quanto maior o tamanho médio das partículas do solo maior a permeabilidade devido aos maiores espaços vazios [31].

### 2.6.4. Capacidade de troca catiônica

A Capacidade de Troca Catiônica (CTC) é a quantidade total de cátions que um solo, ou alguns de seus constituintes, pode adsorver e trocar a um pH específico, em geral pH

7,0. No solo, a CTC é devido à superfície específica e às cargas inerentes ou acidentais de colóides eletronegativos, como os minerais de argila, a sílica coloidal e o húmus [32].

### **2.6.5. Gradiente Hidráulico**

O gradiente hidráulico corresponde ao declive do lençol freático medido em ângulo, ou em porcentagem, entre dois pontos, dados a localização e a altimetria desses pontos. É uma grandeza adimensional, normalmente é expresso em m/m [31].

### **2.6.6. Dispersividade**

A dispersão hidrodinâmica do poluente deve-se à dispersão mecânica e à difusão molecular, como já discutido no tópico 2.4. Grande parte dos modelos de transporte de poluentes utiliza esta formulação para a dispersão, no entanto o grande problema é o cálculo da dispersividade que depende da escala de observação do cenário. Diversos pesquisadores têm estudado o assunto e observado que quando se passa da escala local para a regional, a dispersividade aumenta, talvez pelo fato do poluente encontrar mais heterogeneidades no aquífero [31].

### **2.6.7. Isoterma de Adsorção (Expoente de *Freundlich*)**

A adsorção, que pode ser física e/ou química, é a acumulação de uma substância em uma interface. Ocorre com todos os tipos de interface, tais como gás-sólido, solução-sólido, solução-gás [33].

A quantidade de substância adsorvida na superfície decresce com o aumento da temperatura, já que todos os processos de adsorção são exotérmicos. A uma temperatura constante a quantidade adsorvida aumenta com a concentração do adsorbato (em solução, ou na fase gasosa), e a relação entre a quantidade adsorvida e a concentração é conhecida como a isoterma de adsorção. Em geral, nos sistemas que seguem a isoterma de *Freundlich* a adsorção ocorre com a formação de multicamadas, ao invés de uma monocamada apenas [33].

### 2.6.8. *Runoff*

Quando a intensidade pluviométrica na superfície é maior do que o fluxo de infiltração, a água se acumula e forma uma espécie de lâmina que é capaz de escorrer sobre a superfície (*runoff*). A velocidade com que a água escorre é função de vários fatores, como a inclinação, espessura da lâmina de água, distância a percorrer e rugosidade da superfície. A rugosidade varia bastante, sendo elevada para superfícies com cobertura vegetal e reduzida para superfícies pavimentadas. A distância a percorrer é função da densidade da rede de drenagem, quanto mais afluentes, menor será essa distância [31].

### 2.6.9. Evapotranspiração

A evapotranspiração é considerada como a perda de água por evaporação do solo e transpiração dos vegetais. A evapotranspiração é importante para o balanço hídrico de uma bacia como um todo e, principalmente, para o balanço hídrico agrícola, que poderá envolver o cálculo da necessidade de irrigação. Na medida em que diminui a umidade do solo, ocorrem restrições à transferência de água para a atmosfera, que passa a depender não somente das condições meteorológicas, mas também do sistema radicular das plantas, bem como do estado fitossanitário das mesmas. Esta condição permite distinguir entre evapotranspiração potencial e real [31].

Define-se como evapotranspiração potencial (ETP) a quantidade de água transferida para a atmosfera por evaporação e transpiração, na unidade de tempo, de uma superfície extensa completamente coberta de vegetação de porte baixo e bem suprida de água. Já a evapotranspiração real (ETR) é quantidade de água transferida para a atmosfera por evaporação e transpiração, nas condições reais (existentes) de fatores atmosféricos e umidade do solo. A evapotranspiração real é igual ou menor do que a evapotranspiração potencial ( $ETR < ETP$ ) [34].

Informações confiáveis sobre evapotranspiração real são escassas e de difícil obtenção, pois demandam um longo tempo de observação e custam muito caro. Já a evapotranspiração potencial, pode ser obtida a partir de modelos baseados em leis físicas e relações empíricas de forma rápida e suficientemente precisas. A equação (2.6) desenvolvida por Kohler e Parmele (1967) inclui os efeitos das variações de temperatura na superfície no balanço de radiação de ondas longas. [34]



$$ETP = D' * R_w + (1 - D') * f_w * (v - v_D) \quad (2.6)$$

Onde,

- $R_w$ , irradiância líquida disponível ( $W/m^2$ );
- $f_w$ , coeficiente de transferência de vapor ( $W s / m^2 K$ );
- $v, v_D$ , pressões de saturação do vapor às temperaturas do ar e do ponto de orvalho, respectivamente (Pa);
- $D' = 1 / (1 - \lambda/\Delta)$ , onde  $\lambda$  é o coeficiente de transferência de calor ( $W s / m^2 K$ ) e  $\Delta$  (Pa/s) é a taxa da variação da pressão de saturação do vapor d'água com a temperatura do ar.

#### 2.6.10. Albedo

O albedo é uma medida da refletividade de um corpo ou de uma superfície. É a razão entre a radiação electromagnética refletida e a quantidade incidente. O albedo depende do ângulo solar, da distribuição espectral da radiação solar incidente na superfície, e se tal radiação é direta ou difusa, das características da superfície (vegetação, solo, água, deserto, neve) e da umidade disponível [34].

## CAPÍTULO 3 – DETALHAMENTO DO SISTEMA RISKPRO

O Sistema RISKPRO é um programa computacional dotado de dois modelos matemáticos: o SESOIL e o AT123D, que são capazes de prever o comportamento de uma dada substância química potencialmente poluidora no solo.

O SESOIL, *Seasonal Soil Compartment Model*, responde pelo comportamento do poluente na zona insaturada do solo, descrevendo sua movimentação vertical através do perfil do solo.

O AT123D, *Analytical Transient 1-, 2-, 3- Dimensional Model*, prediz a movimentação de contaminantes na zona saturada do solo. Através dele é possível prever plumas de contaminação do aquífero em até três dimensões.

As versões do RISKPRO utilizadas nesse programa foram a 3.1, de março de 2003, para o SESOIL, e a versão 3.0, de maio de 1998, para o AT123D.

### 3.1. O Modelo SESOIL

O SESOIL é um modelo que considera o transporte unidimensional vertical do contaminante na zona insaturada do solo, como já mencionado anteriormente. O modelo utiliza menos entradas de informações de solo, substâncias químicas e dados meteorológicos, que a maioria dos outros *softwares*. A saída do programa inclui a variação temporal das concentrações dos poluentes, levando-se em consideração: os tipos de solo e a redução do poluente na zona insaturada, a percolação para o lençol, a volatilização e a taxa de degradação [5].

Geralmente, o SESOIL é usado para estimar a taxa de migração de poluentes e o perfil de concentração dos mesmos através do solo a partir do ponto de lançamento.

#### 3.1.1. Dados Requeridos

Os dados de entrada no SESOIL podem ser agrupados em cinco categorias: clima, solo, substâncias químicas, aplicação e lixiviação, cada uma delas corresponde a um dos cinco arquivos de entrada que são requeridos para que o SESOIL funcione, são eles [5]:

**Clima:** o arquivo com os dados de clima contém estatísticas pluviométricas e parâmetros climáticos mensais para calcular a evapotranspiração;

**Solo:** os dados consistem nas médias de parâmetros do solo que estão acima de toda a zona insaturada, tais como densidade, permeabilidade intrínseca, conteúdo de carbono orgânico, etc.;

**Substâncias Químicas:** os dados requerem as informações sobre as propriedades químicas como o coeficiente de adsorção e a solubilidade de substâncias químicas;

**Aplicação:** a entrada do modelo descreve as especificações de compartimento, as características de carregamento dos poluentes e algumas propriedades dependentes da camada de solo. Por exemplo, as especificações incluem um número de camadas e de subcamadas para cada camada, a área de aplicação do compartimento e a espessura da camada;

**Lixiviação:** é opcional e contém dados usados pelo SESOIL para calcular o transporte de lixiviados e a migração do poluente adsorvido para partículas do solo erodidas.

Todos os parâmetros dos cinco diferentes tipos de arquivos de entrada estão listados na Tabela 3.1.

**Tabela 3.1** – Parâmetros de entrada do SESOIL.

<b>CATEGORIA DE DADOS</b>	<b>INFORMAÇÃO DOS PARÂMETROS</b>	
<b>CLIMA</b>	<b>Evapotranspiração</b>	<b>Estatísticas de precipitação</b>
	Temperatura do ar	Profundidade pluviométrica
	Fração do céu nublado	Duração de Tempestades
	Umidade relativa do ar	Número de tempestades por mês
	Albedo	Duração estação chuvosa no mês
<b>SOLO</b>	Densidade do solo	Conteúdo de carbono orgânico
	Permeabilidade intrínseca	Capacidade de troca catiônica
	Índice de desconectividade	Expoente de <i>Freundlich</i>
	Porosidade Efetiva	
<b>SUBSTÂNCIAS QUÍMICAS</b>	<b>Compostos</b>	<b>Ligantes</b>
	Solubilidade em água	Cte. de estabilidade do ligante
	Coeficiente de difusão no ar	Mols de lig. por mols de comp.
	Constante da Lei de Henry	Peso molecular do ligante
	Peso molecular	
	Valência	
	Taxas de hidrólises	
	Taxas de biodegradação	
	Coef. de adsorção carbono org.	
	Coef. de adsorção ao solo	
<b>APLICAÇÃO</b>	<b>Especif. do compartimento</b>	<b>Prop. dependentes da camada</b>
	Número de camadas	Permeabilidade de cada camada
	N.º de subcamadas por camada	pH de cada camada

CATEGORIA DE DADOS	INFORMAÇÃO DOS PARÂMETROS	
APLICAÇÃO	<b>Especif. do compartimento</b>	<b>Prop. dependentes da camada</b>
	Área de aplic. compartimento	Taxas de biodegradação
	Espessura da camada	Razão de carbono orgânico
	Latitude do sítio	Capacidade de troca catiônica
	<b>Tx. de carregamento mensais</b>	<b>Parâmetros mensais</b>
	Tx. ent. de pol. em cada camada	Índice de volatilização
	Conc. inic. pol. em cada camada	Índice partição do runoff superf.
	Conc. de poluentes na chuva	
	Massa de ligante	
	<b>Parâmetros do aquífero</b>	
	Condutividade hidráulica	Espessura
	Gradiente	Comprimento
LIXIVIAÇÃO	<b>Área de lixiviação</b>	
	Perc. de silte, areia e argila	Fator de solo erodido
	Relação de perda de solo	Fator de contorno

### 3.1.2. Dados de Saída

O arquivo de saída contém as informações de entrada e os resultados de cada mês dos ciclos hidrológico, de lixiviação (se utilizado) e do poluente. Um relatório resumido é também impresso para cada ano. Os resultados mensais são organizados da seguinte forma [5] (vide os apêndices A e B):

- Componentes do ciclo hidrológico;
- Componentes do ciclo de lixiviação;
- Massa de contaminante distribuído para cada camada (subcamada);
- Concentração do poluente distribuída para cada camada (subcamada);
- Profundidade do poluente.

Os resultados mensais são seguidos por um sumário anual. Este reporta um “total” ou “média” para cada parâmetro. “Total” é simplesmente a soma dos valores de doze meses para os componentes do ciclo hidrológico, a massa total de entrada, a massa total removida de cada camada ou subcamada e a máxima profundidade do poluente. “Média” representa a soma dos teores mensais de umidade do solo e a distribuição de concentração de contaminantes para cada subcamada, dividido por doze [5].

### 3.1.3. O Compartimento do Solo no SESOIL

As dimensões dos compartimentos do solo são definidas pelo usuário. O comprimento e a largura da coluna são estabelecidos como a área de aplicação do lançamento de contaminante no solo. A profundidade até o aquífero é determinada através da espessura das camadas de solo e definidas também pelo usuário.

O perfil do solo pode ser representado em duas, três ou quatro camadas distintas e mais de dez subcamadas podem ser especificadas por cada camada, cada uma apresentando as mesmas propriedades da camada na qual integram.

Não existe uma dimensão ótima para as camadas ou subcamadas do solo. As dimensões da coluna podem ser especificadas para cobrir qualquer área, desde um centímetro quadrado até vários quilômetros quadrados. A área nos compartimentos é importante para o balanço de massa, todavia, em termos de concentração do contaminante, a área de aplicação é irrelevante, desde que esta seja constante para todas as camadas ou subcamadas [5].

### 3.1.4. Os Ciclos do Modelo SESOIL

O transporte e a transformação de poluentes na zona insaturada do solo são processos complexos afetados por substâncias químicas, pelo solo e pelas características hidrogeológicas. Cada um desses processos está incluído em um dos três ciclos pelo modelo SESOIL [5]:

- Ciclo hidrológico
- Ciclo de sedimentos ou lixiviação
- Ciclo de destino dos contaminantes

O primeiro ciclo realizado pelo programa é o hidrológico, seguido pelo ciclo de sedimentos, e os resultados obtidos são utilizados no ciclo de destino do contaminante.

O ciclo hidrológico controla o ciclo de sedimentos, o qual é uma rotina de lixiviação mensal. O ciclo de destino do contaminante simula os processos de transporte e transformação em três fases presentes no compartimento do solo: solo-ar ou fase gasosa, fase solo-umidade e fase adsorvida ou fase solo-sólidos [5].

### 3.1.4.1. Ciclo Hidrológico

O ciclo hidrológico focaliza basicamente o papel da umidade no solo (água intersticial). O submodelo do ciclo hidrológico calcula resultados para a hidrologia de um *site* e os passam para ambos os ciclos de lixiviação e de destino dos contaminantes. O ciclo hidrológico usado no SESOIL é uma adaptação da teoria de Eagleson (1978) para o balanço dinâmico de água. Essa teoria pode ser descrita como uma representação dimensional analítica de um balanço anual de água baseado em simplificações de processos hidráulicos, incluindo termos para o clima, solo e vegetação [5].

O ciclo hidrológico está baseado nas seguintes equações de balanço de água:

$$P - E - RU = S + A = p \quad (3.1)$$

$$I = P - S \quad (3.2)$$

Onde:

- P, precipitação;
- E, evapotranspiração;
- RU, retenção de umidade;
- S, *runoff* superficial;
- I, infiltração;
- p, produto;
- A, *runoff* no aquífero.

O grau de percolação que ocorre através do solo é assumido constante a cada passo de simulação, a uma taxa determinada pela média dos tempos simulados para o conteúdo de umidade do solo.

Cada um dos processos descritos nas equações (3.1) e (3.2) são relacionados com o teor de umidade do solo, e a solução das equações é efetuada pela interação com essa umidade até que os valores calculados para precipitação alcancem o nível de 1% do valor fornecido pelo usuário do programa. Quando esta interação é concluída, os

componentes tais como infiltração, evapotranspiração e outros nas equações (3.1) e (3.2) são determinados. O SESOIL usa esse procedimento tanto na rotina anual quanto na mensal, que serão descritas posteriormente [5].

O termo S da equação (3.1), que representa o *runoff* superficial, é o resultado da distribuição da intensidade e da duração pluviométrica. Os efeitos do teor de umidade encontram-se descritos no trabalho de Metzger e Eagleson (1980), que assumem a homogeneidade do solo e que a coluna de solo é semi-infinita em relação aos processos de superfície. Dessa forma, no ciclo hidrológico do SESOIL, considera-se a zona insaturada como uma camada ou compartimento simples e o teor de água no solo é um valor médio obtido pela totalidade da zona insaturada [5].

O ciclo hidrológico computa e utiliza a média ponderada da profundidade com a permeabilidade de acordo com a equação (3.3) que segue:

$$K_z = d / [\sum(d_i/K_i)] \quad (3.3)$$

Onde:

- $K_z$ , permeabilidade média vertical ( $\text{cm}^2$ );
- $K_i$ , permeabilidade para camada i ( $\text{cm}^2$ );
- d, profundidade da superfície até o aquífero (cm);
- $d_i$ , espessura da camada i (cm).

É necessária atenção especial com relação a esta equação quando aplicada em *sites* que apresentam uma grande variedade vertical nas propriedades do solo. Assim, a permeabilidade média calculada pela equação (3.3) pode não representar adequadamente a realidade da área, resultando em um teor de umidade do solo inválido [5].

#### 3.1.4.1.1. Rotina ou Ciclo Anual

A rotina anual de balanço de água é baseada na Teoria de Eagleson (1978). Simulações para vários anos precisam ser realizadas em ciclos separados, essa rotina simplesmente

determina o teor de umidade do solo baseado na solução das equações (3.1) e (3.2) utilizando parâmetros climáticos anuais [5].

No momento em que o valor para o teor de umidade do solo é atingido por meio de iterações, os vários parâmetros descritos nas equações (3.1) e (3.2) são obtidos, sendo que os efeitos de armazenamento no solo não são considerados na rotina anual do ciclo hidrológico.

As predições do modelo anual foram comparadas com observações empíricas (tomada de dados realizada durante cinco anos) em regiões de clima subúmido e árido. Os resultados obtidos pelo modelo SESOIL foram muito próximos daqueles notados pela observação de campo.

#### **3.1.4.1.2. Rotina ou Ciclo Mensal**

O ciclo mensal é uma extensão da rotina anual para o SESOIL. A rotina mensal do balanço de água é baseada na mesma teoria do ciclo anual, com algumas modificações na transferência de umidade mensal e nos efeitos da radiação.

Os valores iniciais para o teor de umidade do solo são calculados assumindo dados climáticos mensais de entrada apropriados como: o número de tempestades e a duração da estação chuvosa. No caso das equações (3.1) e (3.2), que calculam o teor de umidade do solo, os resultados para os outros parâmetros são divididos por doze para se obter valores mensais [5].

Como o tempo de simulação médio dos dados climáticos é utilizado como entrada para cada ano (entrada de cada mês é a mesma de ano a ano), poderia se esperar que os resultados da hidrologia mensal sejam idênticos aos anuais, porém isso não ocorre. A umidade do solo é computada para o primeiro mês (do primeiro ano), esse valor será diferente do grau de umidade calculado para o décimo segundo mês que é, então, usado para o primeiro mês do ano seguinte [5].

O ciclo mensal no SESOIL leva em consideração a variação de umidade armazenada mês após mês. Além disso, o algoritmo de evapotranspiração foi modificado em relação ao trabalho original de Eagleson (1978) com a inclusão de mudanças sazonais na radiação média mensal que anteriormente era uma função constante da latitude. Hetrick (1984) observou que as predições hidrológicas do SESOIL original não consideravam



mudanças sazonais nos dados meteorológicos e, a partir dessa constatação, para modelar a hidrologia mais realisticamente foi utilizado um algoritmo do modelo AGTM (Hetrick et al., 1982) o qual computa diariamente o potencial de radiação, ou seja, a radiação entrante em céus desprovidos de nuvens, para uma dada latitude. Esse algoritmo pode ser expresso pela equação (3.4) [5].

$$R' = R[(1-c) + K'(c)] \quad (3.4)$$

Onde:

- $R'$ , radiação média mensal;
- $R$ , radiação potencial;
- $c$ , fração do céu nublado;
- $K'$ , fator de transmissão do céu nublado.

O valor  $K'$  na equação usada no modelo é 0,32; sugerido por Hetrick et al. (1982). Dessa maneira, a latitude e o período no qual o céu permanece nublado durante o mês passam a ser entradas do SESOIL.

Embora o modelo SESOIL forneça resultados mensais para o teor de umidade do solo na sua zona radicular, definida no modelo como sendo os cem primeiros centímetros de profundidade em relação à superfície, essa opção do programa não se encontra completamente desenvolvida. Em função disso, valores de umidade do solo para a zona radicular serão freqüentemente identificados para toda a coluna do solo e, no caso de climas excessivamente secos podem ocorrer variações significativas [5].

Predições do modelo SESOIL, usando a opção mensal, dos componentes hidrológicos da bacia hidrográfica vem sendo comparados com outros dados do modelo hidrológico do ecossistema terrestre AGTEHM, assim como com medidas empíricas. Embora houvesse algumas diferenças nos resultados mensais entre os dois modelos, uma boa aproximação entre os resultados foi obtida nas predições para valores anuais de infiltração, evapotranspiração, *runoff* na superfície e no aquífero. As predições do modelo SESOIL se comparam satisfatoriamente com medidas empíricas [5].

### 3.1.4.1.3. Calibração do Modelo Hidrológico

A calibração dos modelos para a zona insaturada do solo pode ser incerta e difícil, porque o clima, a umidade do solo, a infiltração e a percolação são parâmetros fortemente interligados que são difíceis e caros de mensurar na área. No entanto, os parâmetros de entrada de qualquer modelo da zona insaturada do solo precisam ser calibrados para que as previsões estejam de acordo com as observações. No SESOIL, todos os parâmetros de entrada requeridos para o ciclo hidrológico podem ser estimados por estudos de campo com exceção do índice de desconectividade de poros. Este parâmetro é definido como um expoente relativo ao percentual de saturação do solo [5].

A equação (3.5) mostra a relação entre a condutividade hidráulica para o percentual de saturação e o índice de desconectividade de poros.

$$\delta(\text{Sat}) = \delta^*(\text{Sat})^\varepsilon \quad (3.5)$$

Onde,

- $\delta(\text{Sat})$ , condutividade hidráulica para “Sat” (cm/s);
- $\delta$ , condutividade hidráulica saturada (cm/s);
- Sat, percentual de saturação;
- $\varepsilon$ , índice de desconectividade de poros.

O índice de desconectividade de poros não é comumente encontrado na literatura, alguns valores *default* para “ $\varepsilon$ ” sugeridos por Eagleson (1978), Bonazountas e Wagner (1981, 1984) são: argiloso: 12; argilo-siltoso: 10; areno-argiloso: 6 e arenoso: 3,7. No entanto, quando os dados são avaliados, esses parâmetros precisam ser variados primeiro, para otimizar uma aproximação entre os resultados do SESOIL e as medidas hidrológicas.

A maioria dos modelos para a zona insaturada do solo requer dados detalhados de difícil obtenção, como as curvas características de umidade do solo. A “variável um” (variável principal) aproximada por Eagleson (1978) simplifica o processo de estimar esses dados e reduz o esforço computacional.

Outros parâmetros sensíveis para o ciclo hidrológico são a porosidade efetiva e a permeabilidade intrínseca. Demais parâmetros podem ser variados quando calibrado o modelo para dados hidrológicos medidos, sendo recomendado que o usuário do programa varie primeiro o índice de desconectividade de poros e, posteriormente, a permeabilidade e/ou porosidade [5].

#### 3.1.4.2. Ciclo de Lixiviação ou Sedimentos

Nos modelos de transporte do contaminante são necessárias estimativas de erosão e de sedimentos produzidos nas bacias hidrográficas para computar-se a remoção de substâncias químicas sorvidas nos sedimentos erodidos. Um fator importante desse processo é o *runoff* superficial, que é definido como a água da chuva que não infiltra no solo e pode carrear contaminantes dissolvidos, sendo, portanto, considerado parte do ciclo hidrológico [5].

A erosão é uma função da taxa de *runoff* na superfície e de vários outros fatores como: o impacto das gotas de chuva que separam as partículas e as mantêm em movimento através do fluxo no solo; as características superficiais tais como vegetação e aspereza; e a capacidade de infiltração. Técnicas para estimar esses dados e modelos são largamente empregadas por causa da dificuldade de medição direta usando métodos de monitoramento da qualidade da água [5].

O ciclo de lixiviação ou de sedimentos do SESOIL é opcional, podendo ser acionado ou não pelo usuário. Se o contaminante no *runoff* superficial for considerado negligenciável, o ciclo de lixiviação é desconsiderado. Caso contrário, o SESOIL emprega um modelo teórico para sedimentos conhecido como EROS, o qual faz parte do modelo CREAMS.

Para o caso de erosão, consideram-se os processos básicos de separação do solo, transporte e deposição. O modelo EROS utiliza isoladamente equações para separação e transporte de sedimentos. Equações são necessárias para esses dois processos, por causa do fato da relação de separação ser diferente das relações de transporte e deposição no processo erosivo.

Para os processos de separação, o modelo emprega a Equação Universal de Perda de Solo (*Universal Soil Loss Equation - USLE*), modificada por Foster (1980) para eventos

simples de tempestade. A USLE é aplicável para erosão de sedimentos originados principalmente de pequenas bacias hidrográficas, as quais estão sujeitas a erosão do lençol e do rio. A separação de partículas do solo ocorre quando a carga de sedimentos é menor que a capacidade de sedimentação no fluxo e a equação que descreve esse processo leva em conta a capacidade de erosão do solo, isto é, a taxa de perda de solo por tempestade, a qual varia para diferentes tipos e texturas [5].

A USLE considera a topografia, desde que o comprimento e a lixiviação do declive do solo afetem a taxa de erosão induzida pela chuva. A cobertura do solo como, por exemplo, a vegetação e a aspereza da superfície, também afetam as taxas de erosão e transporte. A USLE inclui um parâmetro chamado “*Manning’s n*”, que corresponde ao coeficiente de aspereza, para modelos com essas influências.

Para modelar a capacidade de transporte dos sedimentos através do solo, o EROS incorpora a Equação de Transporte de Yalin, modificada para sedimentos não uniformes, representados por uma mistura de partículas de diferentes tamanhos e densidades. O modelo estima a distribuição de partículas e sedimentos como areia, silte e argila, e a fração da matéria orgânica no sedimento erodido. As simulações no SESOIL para transporte de sedimentos são realizadas considerando-se cada tipo e tamanho de partículas.

O modelo EROS do SESOIL considera vários aspectos de superfície, os quais podem desviar e reduzir o *runoff* superficial, permitindo calcular a deposição de materiais lixiviados. Estes incluem: a vegetação, a qual reduz o fluxo das partículas filtradas; e a topografia, que inclui características da superfície tal qual aspereza e existência de pequenas depressões. Alterações no declive e perda de água por meio de infiltração dentro do solo reduzirão o fluxo e promoverão a deposição de partículas (solo “enriquecido”) [5].

A matéria orgânica é distribuída ao longo dos tipos de partículas baseando-se na proporção de argila primária em cada tipo. O EROS computa o enriquecimento de sedimentos usando a razão entre a sua área superficial contendo matéria orgânica e a área superficial do solo residual [5].

### 3.1.4.2.1. Implementação no SESOIL

O modelo EROS utiliza características de precipitação pluviométrica e fatores de *runoff* para uma tempestade a fim de computar a erosão e o transporte de sedimentos. A entrada hidrológica para a erosão consiste no volume de chuvas, na erosão provocada por estas, no volume de *runoff* e no pico da taxa de *runoff* para cada evento tempestivo. Os dados de entrada para o ciclo hidrológico do SESOIL incluem a precipitação total mensal e o número de tempestades por ano, fazendo exclusivamente estimativas mensais de parâmetros hidrológicos. No sentido de associar os modelos SESOIL e EROS, um método estatístico é usado para gerar o grau de precipitação pluviométrica e duração de cada tempestade para todo o evento de chuva durante o mês. Esse algoritmo emprega um modelo de distribuição de probabilidades para estimar os parâmetros de tempestade isolada [5].

O ciclo de lixiviação é implementado com duas sub-rotinas em adição ao modelo EROS: PARAM e STORM. Essas rotinas tomam os dados de entrada e os resultados gerados pelo ciclo hidrológico, adaptando-os para o usuário. A sub-rotina PARAM suporta a EROS através de uma recuperação preliminar dos dados hidrológicos de entrada, lidos pelo SESOIL, e ajustando parâmetros específicos aplicáveis às sub-rotinas STORM e EROS [5].

A sub-rotina STORM usa os resultados da PARAM e gera estatisticamente informações sobre cada tempestade usando o algoritmo mencionado acima. A junção entre os dados de SESOIL/EROS não requer nenhum parâmetro hidrológico de entrada adicional para tempestades isoladas. Entretanto, ele precisa reconhecer que as estimativas de chuva para cada tempestade podem ser substancialmente diferentes de valores reais.

Dados adicionais necessários para o ciclo de sedimentos incluem: a área de lixiviação, que necessariamente deve ser menor ou igual à área de aplicação do contaminante; a fração de areia, silte e argila no solo; o declive médio e o comprimento do declive do perfil representativo do fluxo; o fator de erosão; a razão de perda de solo; o fator de contorno e o coeficiente de aspereza. Valores que servem como referências para esses parâmetros podem ser encontrados na documentação do CREAMS.

O modelo EROS processa a informação gerada por ambas as sub-rotinas PARAM e STORM e registra as estimativas de produtos de sedimentos para cada mês. A

informação obtida pelo ciclo de sedimentos é então executada pelo ciclo de destino do contaminante [5].

### 3.1.4.3. Ciclo de Destino do Contaminante

O ciclo de destino do contaminante focaliza as várias formas de transportes de substâncias químicas e processos de transformação que podem ocorrer no solo. O ciclo de destino do poluente usa resultados dos ciclos hidrológico e de lixiviação. Informações desses ciclos são automaticamente providas ao ciclo destino do poluente. No SESOIL, o último destino e a distribuição do poluente são controlados por processos inter-relacionados pela equação (3.6) de transferência de massa. Os processos são seletivamente empregados e combinados baseados nas propriedades químicas e na simulação de cenários especificados pelo usuário [5]

A transferência do contaminante através dos diversos processos envolvidos e a taxa de migração do mesmo para o aquífero dependem da partição do poluente no solo entre as fases gás, dissolvida e sólida.

$$Q(t-1) + I'(t) = T'(t) + R'(t) + M(t) \quad (3.6)$$

Onde,

- $Q(t-1)$ , quantidade de contaminante originalmente no compartimento do solo num tempo  $t-1$  ( $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ );
- $I'(t)$ , quantidade de poluente entrando no compartimento do solo durante um intervalo de tempo ( $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ );
- $T'(t)$ , quantidade de poluente transferida para dentro do compartimento do solo em um passo ( $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ );
- $R'(t)$ , quantidade de contaminante que permanece no compartimento de solo durante um intervalo de tempo ( $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ );
- $M(t)$ , quantidade de poluente que migra para fora do compartimento de solo durante um intervalo de tempo ( $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ ).

### 3.1.4.3.1. Fundamentos Teóricos

No SESOIL, qualquer camada ou subcamada do solo pode receber contaminantes, armazená-los e exportá-los para outros sub-compartimentos. O movimento para baixo do poluente ocorre apenas com a umidade do solo, enquanto o movimento para cima é impulsionado pela difusão da fase vapor. Como no ciclo hidrológico, o ciclo de destino do poluente é baseado em uma equação de balanço de massas, equação (3.6), que localiza o movimento do contaminante na umidade do solo entre os sub-compartimentos. Ao reagir e entrar na camada ou subcamada assume-se um modelo de distribuição uniforme instantânea do poluente por toda a sua extensão [5].

O destino do poluente na coluna de solo inclui tanto o transporte quanto o processo de transformação, que depende da partição das substâncias químicas em três fases: solo-ar, solo-água e solo-sólidos. Assume-se que essas três fases estão em equilíbrio mútuo e o particionamento é uma função suprida pelo usuário e específica de cada substância. Se uma concentração em uma fase é conhecida, as concentrações nas demais fases podem ser calculadas. O ciclo do contaminante no SESOIL está baseado na concentração das substâncias na região úmida do solo, de acordo com a equação (3.6) descrita anteriormente [5].

A concentração no ar do solo é calculada pela lei de Henry modificada, dada pela equação (3.7).

$$C_{sa} = c' * H / [R * (T + 273)] \quad (3.7)$$

Onde,

- $C_{sa}$ , concentração de poluentes no solo-ar ( $\mu\text{g/mL}$ );
- $c'$ , concentração de poluente no solo-água ( $\mu\text{g/mL}$ );
- $H$ , constante da lei de Henry ( $\text{m}^3 * \text{atm/mol}$ );
- $R$ , constante dos gases ( $8,2 \times 10^{-5} \text{ m}^3 * \text{atm/mol} * \text{K}$ );
- $T$ , temperatura do solo ( $^{\circ}\text{C}$ ).

A concentração adsorvida no solo é calculada usando a isoterma de Freundlich como indicado na equação (3.8):

$$s = K_d * c'^{(1/m)} \quad (3.8)$$

Onde,

- $s$ , concentração de poluente adsorvida ( $\mu\text{g/g}$ );
- $K_d$ , coeficiente de partição do poluentes ( $(\mu\text{g/g})/(\mu\text{g/mL})$ );
- $c'$ , concentração de poluente no solo-água ( $\mu\text{g/mL}$ );
- $m$ , expoente de *Freundlich*.

A concentração total do poluente no solo é computada como indicado na equação (3.9):

$$C_g = f_a * C_{sa} + \theta * c' + \rho_b * S \quad (3.9)$$

Onde,

- $C_g$ , concentração global de poluentes ( $\mu\text{g/mL}$ );
- $f_a = (f - \theta)$ , porosidade preenchida por ar ( $\text{mL/mL}$ );
- $f$ , porosidade do solo ( $\text{mL/mL}$ );
- $\theta$ , teor de umidade volumétrica no solo ( $\text{mL/mL}$ );
- $\rho_b$ , densidade do solo ( $\text{g/mL}$ ).

No SESOIL, cada camada de solo ou subcamada tem um volume fixo e a coluna total é tratada como uma série de camadas interconectadas. Cada camada (subcamada) tem sua própria equação de balanço de massas, de acordo com a equação (3.6), podendo receber e lançar o contaminante para e a partir de camadas adjacentes [5].

O destino dos processos que compõem os balanços de massa no SESOIL, como a volatilização e a degradação, são funções da concentração de contaminantes na água do solo em cada zona e uma variedade de taxas de primeira ordem, coeficientes de partição



e outras constantes. Um procedimento de solução iterativa (solução numérica) é usado para resolver esses sistemas.

As equações do ciclo de destino do contaminante são formuladas em bases mensais e os resultados são dados para cada mês simulado. No entanto, considera-se para processos dinâmicos um passo explícito de um dia. A saída de dados mensais representa a simulação dos resultados para cada dia.

Em um evento no qual a concentração dissolvida excede a solubilidade do solvente, esta é assumida igual à solubilidade em fase aquosa. Isto significa que caso, para a solução da equação de balanço de massas em qualquer camada, a concentração dissolvida exceda a solubilidade da substância química, a iteração é interrompida naquele momento e a solubilidade é usada como concentração. As concentrações adsorvidas e de solo-ar são calculadas usando as equações de partição química mostradas anteriormente, equações (3.7) e (3.8).

Para manter o balanço de massas, o poluente residual é assumido como remanescente na fase pura (não dissolvida), enquanto o transporte nessa fase não é considerado. Porém, a massa de substância química é usada como entrada para mesma camada no próximo passo. A simulação continua até o eventual desaparecimento da fase pura [5].

Essa característica da fase não dissolvida não fazia parte do modelo original e foi adicionada no SESOIL por Hetrick et al., 1989. As discussões nas subseções seguem introduzindo mais algoritmos e simulações de processos no ciclo do contaminante.

#### **3.1.4.3.2. Algoritmo Profundidade do Contaminante**

O ciclo do contaminante no SESOIL é baseado na concentração de poluente na umidade do solo. Na teoria, um contaminante não reativo dissolvido originário de qualquer camada insaturada do solo migrará para outra camada ou para o aquífero com a mesma velocidade que a massa de umidade originária da mesma camada. O movimento de um poluente reativo, no entanto, será retardado em relação ao movimento da quantidade de massa úmida devido à partição da fase vapor e a adsorção do poluente nas partículas do solo. Se for assumido que a adsorção não ocorre e que a fase vapor é negligenciável, o poluente se moverá na mesma taxa que a água através do solo [5].

Originalmente, somente a velocidade advectiva era usada no SESOIL para determinar a profundidade do poluente alcançada durante um passo. A profundidade (D) pode ser calculada como indicado na equação (3.10) a seguir.

$$D = (J_w * t_c) / \theta \quad (3.10)$$

Onde,

- D, profundidade (cm);
- $J_w$ , velocidade da água (cm/s);
- $t_c$ , tempo de advecção (s);
- $\theta$ , teor de umidade do solo (mL/mL).

Essa aproximação feita pela equação (3.10) permite calcular a profundidade de todas as substâncias químicas identificadas no aquífero em um passo, sem levar em consideração as suas características de sorção.

Além disso, o SESOIL utiliza a equação (3.11) para calcular a profundidade alcançada pela substância química em equilíbrio com o vapor, o líquido e as fases adsorvidas.

$$D = (J_w * t_c) / [\theta + \rho_b * K_d + (f_a * H) / R * (T + 273)] \quad (3.11)$$

O SESOIL calcula o fluxo  $J_w$  para cada camada do solo usando as taxas de infiltração e o *runoff* no aquífero, ponto de recarga, computados pelo ciclo hidrológico, além da profundidade e permeabilidade inseridas pelo usuário. Diferentes valores de permeabilidade podem ser adotados para cada uma das quatro maiores camadas [5].

Enquanto o ciclo hidrológico usa a média ponderada das permeabilidades nas camadas de acordo com a equação (3.3), o ciclo de destino do poluente considera a permeabilidade separadamente para cada camada, computando  $J_w$  para os seus limites de acordo com a equação (3.12) que segue.

$$J_{wz} = [A + (I - A) * (d_j / d)] * (K_i / K_z) \quad (3.12)$$

Onde,

- $J_{wz}$ , taxa de infiltração à profundidade z que é limite entre as duas principais camadas (m/s);
- $d_j$ , profundidade da coluna de solo abaixo da profundidade z (cm).

O modelo SESOIL permite ao usuário utilizar duas opções para carga do poluente: uma em caso de derramamento em que todos os contaminantes entram na superfície do solo no primeiro passo mensal, ou então uma aplicação constante na qual a carga de poluente é distribuída uniformemente a cada passo durante o mês.

A primeira opção permite colocar a carga de contaminante apenas na superfície do solo (camada um, subcamada um), ao passo que a segunda possibilita carregar uma ou mais das quatro maiores camadas. No caso das subcamadas serem especificadas, o ponto de carga na entrada sempre será na primeira subcamada (topo) da maior camada.

Em uma situação de derramamento, a profundidade da “frente”, isto é, aquela na qual o poluente se encontra na camada mais interior do solo, é calculada utilizando-se a equação (3.11), partindo-se da superfície.

No caso de um vazamento constante, a profundidade da “frente” é então assumida como aquela que começa de um nível intermediário para inferior da camada a qual o poluente é carregado (subcamada um das camadas dois, três e/ou quatro, se as subcamadas forem incluídas) e a equação (3.11) também é usada para computar a profundidade da “frente” do contaminante a partir desse ponto.

As unidades que o SESOIL requer para as concentrações iniciais são dadas em  $\mu\text{g/mL}$  ou  $\mu\text{g/cm}^3$ . Normalmente, as concentrações adsorvidas são medidas em  $\mu\text{g/g}$ . Assim, a conversão para as concentrações de  $\mu\text{g/g}$  para  $\mu\text{g/mL}$  são necessárias. Para fazê-la, simplesmente multiplicam-se as concentrações adsorvidas pela densidade do solo, em  $\text{g/cm}^3$ , para que as concentrações sejam obtidas em  $\mu\text{g/mL}$  [5].

#### **3.1.4.3.3. Volatilização/Difusão**

No SESOIL, a volatilização/difusão inclui movimentos do contaminante da superfície do solo para a atmosfera e das camadas mais interiores para as superiores. De acordo com o modelo do programa, a difusão na fase vapor ocorre somente na direção superior.

A taxa de difusão para as substâncias químicas é determinada por suas propriedades e as do solo, além das condições ambientais. O modelo de volatilização/difusão no SESOIL é baseado no modelo de Farmer (1980) e Millington e Quirk (1961) e é uma versão discretizada da primeira lei de Fick, assumindo a difusão da fase vapor como uma taxa controlada do processo. Isso significa que a mesma equação usada na volatilização para

atmosfera, também pode ser aplicada em casos nos quais a difusão ocorre de camadas rebaixadas para superiores [5].

O fluxo de difusão através do solo na fase vapor,  $J_a$  ( $\mu\text{g}/\text{cm}^2\text{s}$ ), é descrito pela equação (3.13).

$$J_a = -D_a * (f_a^{(10/3)}/f^2) * (d * C_{sa}/d * z) \quad (3.13)$$

Onde,

- $D_a$ , coeficiente de difusão do vapor do componente no ar ( $\text{cm}^2/\text{s}$ ).

O algoritmo de volatilização na versão original do SESOIL assumia que o poluente na segunda camada, ou abaixo dela, volatilizava diretamente para a atmosfera, esse algoritmo foi modificado por Hetrick (1989). A partir dessa alteração, o contaminante pode volatilizar diretamente para atmosfera, porém se as substâncias químicas presentes na segunda camada ou abaixo e as suas concentrações forem maiores do que aquelas na camada acima, então esses compostos difundirão pela camada superior ao invés de volatilizar diretamente para atmosfera.

O usuário pode retirar o cálculo da volatilização pelo uso de uma entrada do índice para cada camada. Por exemplo, se é colocado como índice 0,0 não seria possível a difusão do contaminante para cima ou volatilizar para atmosfera; somente ocorreria o movimento para baixo [5].

Os dados disponíveis nesse índice podem ser variados para calibrar os cálculos das medidas.

#### **3.1.4.3.4. Sorção: Adsorção/Dessorção e Troca Catiônica (Equação de Freundlich)**

O SESOIL inclui dois processos de partição para o movimento do contaminante da umidade do solo ou solo-ar para solo-sólidos. Existem os processos de sorção e os mecanismos de troca catiônica.

O processo de sorção pode ser definido como a adesão das moléculas do contaminante ou íons na superfície do solo-sólidos. A maioria dos processos de sorção é reversível, a adsorção descreve o movimento do contaminante sobre o solo e a dessorção é a partição

das substâncias químicas do sólido para as fases líquida ou gasosa. A adsorção e a dessorção são frequentemente assumidas no SESOIL por sua ocorrência no equilíbrio e são, então, modelados como um processo simples. O fato do processo de adsorção ocorrer com relativa rapidez pode retardar drasticamente a migração do poluente através da coluna de solo.

O SESOIL emprega a equação geral de *Freundlich*, equação (3.8), para modelar os processos de sorção no solo. A relação de *Freundlich* correlaciona as concentrações adsorvida e dissolvida do contaminante por meio de um coeficiente de adsorção e do parâmetro de *Freundlich*, empregado para muitos contaminantes, em especial substâncias químicas orgânicas.

Para a maioria das substâncias químicas orgânicas, a adsorção ocorre principalmente em partículas de carbono orgânico no interior do solo. O coeficiente de partição do carbono orgânico ( $K_{oc}$ ) para substâncias químicas orgânicas pode ser medido ou estimado e convertido para o coeficiente de partição ( $K_d$ ), multiplicando-se pela fração de carbono orgânico no solo.

Valores para o expoente de *Freundlich* podem ser encontrados na literatura. Eles geralmente variam na faixa entre 0.7 e 1.1, embora possam ser encontrados valores como 0.3, baixo, e 1.7, alto. Na ausência de dados, o valor 1.0 é recomendado desde que não existam técnicas para estimar esse parâmetro [5].

Usando 1.0 para o expoente de *Freundlich*, assume-se um modelo linear para sorção, de acordo com a equação (3.8). Os valores da literatura para o coeficiente de partição  $K_d$ , o expoente de *Freundlich* ou métodos de estimativa para  $K_d$ , podem sofrer enormes variações quando comparados a medidas reais do sítio.

A Capacidade de Troca Catiônica (CEC – *Cation Exchange Capacity*), modelada por *Freundlich*, ocorre quando átomos carregados positivamente ou moléculas, cátions como metais pesados, são trocados com os cátions de minerais e outros constituintes do solo. CEC é uma medida quantitativa de cátions por unidade de solo que é avaliada pela troca com o contaminante.

O algoritmo de troca catiônica no SESOIL é muito simples, ele estima a quantidade máxima de contaminante que pode ser adsorvida. O cálculo do poluente imobilizado pela troca catiônica é dado pela equação (3.14) [5].

$$\text{MCEC} = a * \text{CEC} * \text{MWT} / \text{VAL} \quad (3.14)$$

Onde,

- MCEC, troca catiônica máxima de poluentes pelo solo ( $\mu\text{g/g}$  de solo);
- $a = 10,0$ , coeficiente de capacidade de troca catiônica (adimensional);
- CEC, capacidade de troca catiônica do solo ( $\text{meq}/100\text{g}$  de peso seco de solo);
- MWT, peso molecular do cátion poluente;
- VAL, valência do cátion (-).

Para argilas, a troca iônica é freqüentemente calculada, e solos argilosos tendem a ter uma capacidade de troca catiônica maior.

O valor CEC de um solo aumenta com a elevação do pH, mas este não é incluído no algoritmo CEC do SESOIL. Esse valor pode ser ajustado pelo usuário para incluir efeitos derivados do pH. Por questões de cálculo, assume-se que a troca catiônica observada, equação (3.14), ocorre instantânea e irreversivelmente.

O uso da sub-rotina que diz respeito à troca catiônica é opcional, caso selecionada, a equação (3.8) não poderá ser empregada, visto que  $K_d$  e  $K_{oc}$  precisariam ser 0.00.

É necessário que o usuário certifique-se que a troca catiônica é o mecanismo de adsorção predominante para o *site* modelado. Essa determinação inclui considerações relacionadas a características como pH, classe de contaminante, força iônica e a presença de concentrações de outros cátions, encontrados freqüentemente em aterros de lixo e indústrias com despejos aquosos que podem ter maior afinidade para troca com cátions do solo [5].

### 3.1.4.3.5. Degradação: Hidrólise e Biodegradação

O ciclo do poluente no SESOIL contém duas rotinas de transformação, as quais podem ser usadas para estimar a degradação do contaminante no solo. A biodegradação é a transformação de substâncias orgânicas por ação biológica. A hidrólise é uma reação química do contaminante com a água. Ambos os processos resultam na perda do contaminante original e na formação de novas substâncias químicas. O modelo SESOIL considera que a massa de contaminante original é perdida via degradação, mas não mantém indícios de quaisquer produtos de degradação. O usuário é responsável pelo conhecimento dos produtos que serão degradados e os seus significados potenciais [5].

Os processos de biodegradação geralmente representam um mecanismo de perda significativo nos sistemas do solo desde que os ambientes tenham uma população microbiana diversa e uma extensa variedade de fontes nutritivas. O SESOIL não considera muitos fatores ambientais que afetam a taxa de biodegradação no solo. É necessário que o usuário selecione fatores como pH, teor de umidade do solo, temperatura, potencial redox, disponibilidade de nutrientes, teor de oxigênio no solo-ar, concentração de substâncias químicas, presença de microrganismos apropriados e de outros componentes que podem ser preferencialmente substratos.

A biodegradação no SESOIL é manipulada como se fosse uma degradação primária, a qual é definida como uma transformação estrutural no composto original, resultando na troca de identificação de substâncias químicas. Estima-se esse tipo de degradação usando a razão de decaimento das substâncias existentes nas fases dissolvida e adsorvida de acordo com a taxa de primeira ordem apresentada na equação (3.15) [5].

$$P_d = (\varepsilon * \theta * K_{dl} + Sat * \rho_b * K_{ds}) * A_1 * d_s * \Delta t \quad (3.15)$$

Onde,

- $P_d$ , massa de poluente degradada durante um intervalo de tempo  $t$  ( $\mu\text{g}$ );
- $K_{dl}$ , taxa de biodegradação do composto na fase líquida ( $\text{dia}^{-1}$ );
- $K_{ds}$ , taxa de biodegradação do composto na fase sólida ( $\text{dia}^{-1}$ );
- $A_1$ , área de aplicação do contaminante ( $\text{cm}^2$ );

- $d_s$ , profundidade da subcamada do solo (cm);
- $\Delta t$ , intervalo de tempo ou passo (dia).

O uso da equação (3.15) é típico dos modelos de destino e transporte do contaminante e geralmente é uma representação adequada da biodegradação para muitas substâncias químicas. No entanto, devido a muitos fatores que afetam a biodegradação, em alguns casos a taxa de reação de primeira ordem não se aplica às condições do *site* e as taxas de ordens zero, dois ou de ordens acima podem ser mais apropriadas. Sendo assim, o algoritmo de biodegradação descrito pela equação (3.15) não pode ser usado nesses casos.

Os valores fornecidos pela literatura com relação às taxas de biodegradação são muito específicos para cada *site* e as incertezas dessas taxas são notórias quando variados os casos. Os dados relacionados às constantes de taxas de decaimento de primeira ordem precisam ser valores medidos para o contaminante na cultura teste do solo sob condições similares ao *site* que está sendo modelado [5].

O algoritmo de hidrólise no SESOIL permite a simulação de reações neutras, ácidas ou básicas catalisadas e assume que os contaminantes dissolvidos e adsorvidos estão suscetíveis à hidrólise. Como a hidrólise é a reação entre o poluente e a água, essa pode ocorrer a qualquer profundidade por causa do movimento do contaminante pela coluna de solo.

A sub-rotina de hidrólise no programa requer o fornecimento de dados pelo usuário de taxas constantes para reações de hidrólise neutras, ácidas e básicas do contaminante, além do pH para cada camada do solo. O modelo não corrige a temperatura do solo modelado, o que será discutido posteriormente em outro tópico [5].

Assim como para o processo de biodegradação, o algoritmo de hidrólise usa a equação (3.16) excetuando-se as taxas  $K_{dl}$  e  $K_{ds}$  que são trocadas por uma taxa constante  $K_h$ , definida como taxa constante de hidrólise.

$$K_h = K_o + K_H [H^+] + K_{OH} [OH^-] \quad (3.16)$$

Onde,



- $K_h$ , taxa constante de hidrólise ( $\text{dia}^{-1}$ );
- $K_o$ , taxa constante de hidrólise neutra ( $\text{dia}^{-1} * \text{mol}^{-1} * \text{L}$ );
- $K_H$ , taxa constante de hidrólise catalisada por ácido ( $\text{dia}^{-1} * \text{mol}^{-1} * \text{L}$ );
- $[\text{H}^+]$ , concentração do íon hidrogênio ( $\text{mol/L}$ );
- $K_{\text{OH}}$ , taxa constante de hidrólise catalisada por base ( $\text{dia}^{-1} * \text{mol}^{-1} * \text{L}$ );
- $[\text{OH}^-]$ , concentração do íon hidroxila ( $\text{mol/L}$ ).

Se for considerada a troca catiônica, então a equação (3.17) é usada:

$$Pd = MCEC * K_h * \rho_b * A_1 * d_s * \Delta t \quad (3.17)$$

Extrapolando as taxas de hidrólise medidas em laboratório para o ambiente aumenta a incerteza dos resultados modelados se a taxa não for corrigida para as influências da temperatura, adsorção, força iônica e possíveis efeitos catalíticos de material dissolvido ou de superfícies sólidas.

A rotina para hidrólise no SESOIL é apenas uma aproximação, esta não considera a influência da força iônica ou da presença de outras substâncias orgânicas dissolvidas para efeitos de cálculo da taxa de hidrólise do contaminante [5].

#### 3.1.4.3.6. Complexação Metálica

A complexação, também chamada de quelação, é definida como um processo de transformação. No SESOIL, a complexação incorpora o contaminante como parte de uma grande molécula e resulta na ligação deste com o solo. Por exemplo, cátions metálicos como cobre, chumbo, ferro, zinco e cádmio combinam com substâncias orgânicas ou outras moléculas monometálicas (ligantes) para formar complexos estáveis [5].

O ciclo de destino do contaminante incorpora uma representação simplificada do processo de complexação que envolve a remoção, sendo freqüente a avaliação de cenários, na qual o contaminante é um metal pesado. O modelo assume um processo irreversível no qual um íon metálico é complexado por uma substância orgânica especificada e se liga na forma de um complexo, o qual é solúvel, não é adsorvido e

nem migra. Ácidos húmicos e carboxílicos de baixo peso molecular são possíveis ligantes, comumente encontrados em lixiviados de aterros.

É responsabilidade do usuário determinar se o processo de complexação é provável de ocorrer no ambiente a ser modelado e prover a informação apropriada.

A sub-rotina de complexação emprega uma equação não linear que precisa ser resolvida numericamente, usando os mesmos processos iterativos como no ciclo geral dos poluentes para simulações mensais. É necessária a inclusão de dados sobre a constante de estabilidade ou dissociação para o complexo formado e a relação molar do ligante com o metal. Também são necessários os pesos moleculares do contaminante metálico e do ligante orgânico. As equações usadas para esta sub-rotina estão baseadas nos trabalhos de Giesy e Alberts (1984), Brinkman e Bellama (1978), e Sposito (1981). O modelo não considera a competição com íons metálicos no solo, os quais podem ter maior afinidade pelo ligante [5].

Caso o usuário escolha modelar tanto a troca catiônica quanto a complexação metálica, assume-se que o processo de troca catiônica ocorre primeiro; os íons envolvidos nesse tipo de troca estão então indisponíveis para a complexação. Os processos de adsorção em geral são modelados como sendo competitivos com aqueles de complexação.

#### **3.1.4.3.7. Contaminantes no *Runoff* Superficial e no Lixiviado**

Os poluentes podem ser removidos do solo através de simulação pelo SESOIL via *runoff* superficial e lixiviação. O contaminante no *runoff* superficial é simplesmente aquele anteriormente computado no ciclo hidrológico, em base mensal, multiplicando-se pela concentração do contaminante na umidade do solo da camada superficial (para cada passo). O resultado deste cálculo é multiplicado por outro parâmetro provido pelo usuário chamado ISRM, que controla a quantidade de substâncias químicas particionadas no *runoff* [5].

A princípio não há bases para estimar ISRM; pode ser registrado de 0.0 a “desligado” com relação à participação do contaminante no *runoff*, ou usado essencialmente como um parâmetro de ajuste se os dados estiverem disponíveis. Em um exercício de validação/calibração usado para prever o *runoff* da antrazina em uma área na Geórgia, o parâmetro ISRM foi estabelecido em 0.06 [5].

A perda de contaminante via lixiviação é calculada multiplicando-se os sedimentos produzidos durante o ciclo de lixiviação pela concentração de poluentes na camada superficial.

#### **3.1.4.3.8. Temperatura do Solo**

O modelo SESOIL original assumia que a temperatura do solo era igual à do ar e foi modificado por Hetrick et al. (1989) para prever a temperatura do solo a partir da temperatura do ar de acordo com as seguintes equações de regressão que variam de acordo com a estação do ano [5]:

$$Y = 16.115 + 0.856 * X, \text{ durante o verão} \quad (3.18)$$

$$Y = 1.578 + 1.023 * X, \text{ durante o outono} \quad (3.19)$$

$$Y = 15.322 + 0.656 * X, \text{ durante o inverno} \quad (3.20)$$

$$Y = 0.179 + 1.052 * X, \text{ durante a primavera} \quad (3.21)$$

Onde:

- Y, temperatura média mensal do solo (°F);
- X, temperatura média mensal do ar (°F).

As equações de regressão ainda são muito incipientes e não dependem da profundidade. Entretanto, complexidades adicionais não são necessárias desde que a temperatura do solo seja usada somente na equação (3.7) e não afete significativamente os resultados. Alguns parâmetros e processos químicos são dependentes da temperatura como a solubilidade, a constante da Lei de Henry e as constantes de biodegradação e hidrólise; as considerações implícitas desses efeitos estão incluídas no SESOIL e o usuário deve ajustar os valores de entrada para tais parâmetros caso as influências dos efeitos da temperatura sejam julgadas importantes [5].

#### **3.1.4.3.9. O Ciclo do Contaminante em Linhas Gerais**

O usuário freqüentemente deve avaliar a confiança e a utilidade de um modelo ambiental. Existem aproximações tais como verificação, calibração, sensibilidade e incerteza de análises e validação. A verificação estabelece que os resultados a partir de

cada algoritmo do modelo estão corretos. A calibração é o processo de ajustar os parâmetros do modelo em uma faixa aceitável até que as diferenças entre as predições do modelo e as observações de campo estejam dentro de um critério de desempenho selecionado. A sensibilidade analítica está focalizada no impacto relativo que cada parâmetro ou termo tem no modelo de saída, no sentido de determinar o efeito da qualidade dos dados de confiança na saída. A incerteza analítica busca a quantificação da incerteza do modelo de saída como uma função na entrada e operação. A validação também compara valores medidos com resultados previstos, mas inclui a análise de fundamentos teóricos do modelo, focando no desempenho do modelo na simulação do comportamento real de substâncias químicas no ambiente objeto do estudo.

O termo validação tem sido amplamente usado para representar uma variedade de possibilidades, incluindo todas as cinco técnicas mencionadas acima.

### **3.2. O Modelo AT123D**

O AT123D é um modelo analítico de transporte do contaminante que analisa a maneira pela qual a concentração espacial-temporal do poluente se distribui ao longo do aquífero e prediz a movimentação transiente de uma pluma do contaminante. Os processos de destino e transporte considerados pelo AT123D são [6]:

- Advecção de substâncias químicas no fluxo de água pelo aquífero;
- Dispersão de substâncias químicas, incluindo dispersão hidrodinâmica e difusão molecular;
- Adsorção;
- Degradação.

A velocidade no aquífero é estimada utilizando os dados fornecidos pelo usuário referentes à condutividade e gradiente hidráulicos. A dispersão das substâncias químicas resulta em uma distribuição de pluma que segue um determinado formato. Irregularidades no fluxo do aquífero propiciarão uma distorção na pluma e podem ser consideradas em três componentes: horizontal, transversal e vertical. A adsorção de substâncias químicas por materiais sólidos e a taxa de degradação no aquífero são

incorporadas pelo modelo através do coeficiente de adsorção e da taxa de degradação de primeira ordem definidos pelo usuário.

O AT123D assume que o aquífero é homogêneo e isotrópico com fluxo quase horizontal, implicando em um reduzido gradiente. O modelo não identifica as mudanças de propriedades do aquífero de um ponto para outro. O fluxo no aquífero e o deslocamento de contaminante ocorrem principalmente na direção “x”. O eixo “y” descreve a largura da fonte de lançamento ou a pluma nas direções horizontal e/ou transversal. A profundidade da pluma contendo o composto químico na superfície é descrita usando o eixo z.

O modelo AT123D trabalha com [6]:

- Dois tipos de fontes de lançamento: a instantânea e a contínua, a primeira representa um vazamento constante e a segunda um lançamento que varia com tempo;
- Três tipos de perdas: radioativas, de substâncias químicas e de calor;
- Quatro tipos de configurações de fonte: ponto, linha paralela aos eixos x, y e z, área perpendicular ao eixo z e volume; e
- Quatro variações nas dimensões do aquífero: profundidade e largura finitas, profundidade finita e largura infinita, profundidade infinita e largura finita e profundidade infinita e largura infinita.

### 3.2.1. Dados Requeridos

Os dados de entrada no AT123D podem ser agrupados em três categorias: simulação de parâmetros, configurações de fonte e propriedades do solo e dos contaminantes.

A simulação de parâmetros inclui o comprimento total de simulação, o passo, o grau de tolerância e controles de saída. O controle de saída especifica as coordenadas ou pontos a serem selecionados no passo de saída [6].

As configurações de fonte descrevem: as características da fonte como dimensão e tipo de lançamentos (carregamentos, tipo de substância química e taxas de carregamento); e a dimensão do aquífero [6].

As propriedades do solo incluem a porosidade e permeabilidade do material, gradiente hidráulico na direção horizontal e dispersões nas direções x, y e z, sendo que esses valores são assumidos constantes ao longo do aquífero [6].

O coeficiente de distribuição (coeficiente de adsorção) e a taxa de degradação de primeira ordem são dados de entrada requeridos para descrever as propriedades dos poluentes [6].

### **3.2.2. Dados de Saída**

O AT123D prediz concentrações especificadas pelo usuário para um conjunto de posições (coordenadas x, y e z) em tempos de saída estabelecidos. Os perfis temporais para as concentrações no ponto selecionado ou a distribuição espacial em determinado instante também podem ser gerados pelo modelo.

O AT123D estima a sorção e a degradação das substâncias químicas. A concentração dos contaminantes dissolvidos é reportada pelo programa em partes por milhão (ppm), que equivale a miligramas por litro (mg/L). Nos dados de saída, a concentração do poluente químico sorvido não é diretamente calculada, o modelo faz uma relação calculando a concentração sorvida acima de cada tabela do programa contendo as concentrações dissolvidas [6].

### **3.2.3. Limitações Dimensionais do Modelo AT123D**

O AT123D é um modelo que apresenta certas limitações dimensionais no seu desenvolvimento. Essas limitações são [6]:

- Número de pontos na direção x: máximo de quinze;
- Número de pontos na direção y: máximo de dez;
- Número de pontos na direção z: máximo de dez;
- Número total de pontos de saída: máximo de vinte.

### **3.2.4. A Equação que Governa o Modelo AT123D**

A principal equação que governa a distribuição do contaminante no modelo AT123D é mostrada a seguir (3.22) [6]:

$$(\partial(n_e * C_d) / \partial t) = \text{div}(n_e * D_h * \text{div}(C_d)) - \text{div}(C_d * q) + M - K_d' * n_e * C_d - \lambda' * n_e * C_d - \{(\partial(\rho_b * C_s) / \partial t + (\lambda' * \rho_b * C_s))\} \quad (3.22)$$

Onde,

- $a_1 = (\partial(n_e * C_d) / \partial t)$ ;
- $b_1 = \text{div}(n_e * D_h * \text{div}(C_d))$ , densidade do aquífero;
- $c_1 = \text{div}(C_d * q)$  ;
- $d_1 = M$ , taxa de lançamento da fonte (Kg/h);
- $e_1 = K_d' * n_e * C_d$ ;
- $f_1 = \lambda' * n_e * C_d$ ;
- $g_1 = \{(\partial(\rho_b * C_s) / \partial t + (\lambda' * \rho_b * C_s))\}$ ;
- $q$ , vetor velocidade de Darcy (m/s);
- $D_h$ , coeficiente de dispersão hidráulica (m<sup>2</sup>/s);
- $C_d$ , concentração dissolvida de soluto (µg/mL);
- $C_s$ , concentração adsorvida no sólido (µg/g);
- $n_e$ , porosidade efetiva;
- $\lambda'$ , constante de degradação radioativa (h<sup>-1</sup>);
- $K_d'$ , taxa de degradação (h<sup>-1</sup>).

O termo  $a_1$  na equação acima representa a taxa temporal da perda de massa de soluto por unidade de volume de água no aquífero;  $b_1$  é o efeito combinado da dispersão hidráulica e da difusão molecular;  $c_1$  corresponde aos efeitos do transporte advectivo;  $d_1$  é a contribuição da fonte de contaminante;  $e_1$  indica os efeitos da taxa de degradação de primeira ordem, química e biológica;  $f_1$  caracteriza os efeitos do decaimento radioativo; e o termo  $g_1$  representa os efeitos de troca iônica reversível ou sorção [6].

Na solução da equação (3.22), o teorema de *Green's* é aplicado para otimizar o processo através de simplificações e assumindo uma condição inicial e de contorno. Não há praticamente limitações na configuração e situação dos lançamentos das fontes e tipos de condição de contorno.

A programação contém quatrocentas e cinquenta opções, sendo duzentas e oitenta e oito para casos tridimensionais, setenta e duas para cenários bidimensionais nos planos “x-y” e “x-z”, respectivamente, e dezoito para situações unidimensionais na direção longitudinal.

O AT123D é uma ferramenta para avaliações preliminares a respeito da disposição dos poluentes no *site* [6].

### 3.2.5. A Interface do AT123D

A Interface do modelo AT123D consiste em um total de cinco telas que cobrem todos os dados que o modelo requer. Em geral, a interface é dividida em três dados de componentes: parâmetros de simulação; configuração de fonte; solo e propriedades dos contaminantes. Os parâmetros de simulação definem as variáveis de controle e de saída, assim como o número de pontos nas direções x, y e z. As configurações de fonte contêm opções de definição do tipo de lançamento, de contaminante, do tipo de fonte e dimensões do aquífero. Existem dois tipos de lançamentos: instantâneo ou contínuo, os despejos instantâneos são aplicados quando uma dada massa de contaminante é lançada durante um pequeno período relativo às taxas de migração e o carregamento intermitente é aquele na qual a massa de contaminante é emitida a uma taxa temporal constante ou, então, variando no tempo [6].

As taxas de carregamento contínuas são frequentemente selecionadas quando a entrada do AT123D é criada a partir dos resultados do SESOIL. Isso significa que os carregamentos de massa estimados para o aquífero a partir dos dados de saída do SESOIL serão usados como entrada para o AT123D [6].

O solo e as propriedades do contaminante são entradas definidas pelo usuário. Valores típicos de porosidade efetiva, condutividade hidráulica, e as dispersões para areia, silte e argila estão listados na Tabela 3.2.



**Tabela 3.2** – Valores Típicos das Propriedades do Solo usados no AT123D [6].

PARÂMETRO	UNIDADE	AREIA	SILTE	ARGILA
Porosidade Efetiva		0.1 - 0.3	0.05 - 0.1	0.03 - 0.05
		0.16 - 0.46	0.11 - 0.39	0.11 - 0.18
Condutividade Hidráulica	m/h	$36^{-2}$ - $36^{-4}$	$36^{-5}$ - $36^{-6}$	$36^{-7}$ - $36^{-8}$
	m/h	$36^{-2}$ - $36^{-6}$	$36^{-5}$ - $36^{-9}$	$36^{-9}$ - $36^{-11}$
Dispersividade Longitudinal	m	10-100	1 - 10	0.1 - 1.0
Dispersividade Transversal	m	1 - 10	0.1 - 1.0	0.01 - 0.1
Dispersividade Vertical	m	1- 10	0.1 - 1.0	0.01 - 0.1
Densidade	Kg/m <sup>3</sup>	1180 - 1580	1290 - 1800	1400 - 2200
	Kg/m <sup>3</sup>	1270 - 1930	1010 - 1790	1180 - 1720

### 3.2.6. Link SESOIL-AT123D

No RISKPRO, o SESOIL e o AT123D estão conectados pelo carregamento de massa para o aquífero que pode ser transferido para o AT123D. O “*link*” entre AT123D e SESOIL consiste em obter valores estimados de variáveis a partir do SESOIL e combiná-los a dados específicos do sítio, criando, assim, um arquivo de entrada que apresentará as seguintes informações [6]:

- Tempo de simulação total (horas);
- Densidade do solo (Kg/m<sup>3</sup>);
- Taxa de degradação química (1/hora);
- Intervalo de tempo ou passo (horas) = 730;
- Condutividade hidráulica (m/s);
- Porosidade do solo;
- Coeficiente de Distribuição (m<sup>3</sup>/Kg).

### 3.2.7. O AT123D *Post-processor*

O AT123D *Post-Processor* permite ao usuário processar as informações de saída do AT123D para obter um subconjunto de dados que são mais apropriados para o estudo usando gráficos, estatísticas ou programas de contagem.

O AT123D *Post-Processor* é composto por duas telas. A primeira define o critério de seleção e a segunda apresenta o formato dos dados gráficos. Há quatro opções para criação de um arquivo de dados gráficos: planos XY, XZ, YZ e séries temporais. As primeiras três opções são referentes ao perfil de concentração ou plotagem tridimensional para um dado período. O gráfico no plano XY representa um plano do aquífero com os valores de concentração na direção z. O plano XZ é um perfil do aquífero com as concentrações na direção y. O plano YZ representa uma seção cruzada do aquífero com os valores de concentração na direção x. A série temporal representa concentração versus curva do tempo para uma ou mais localidades receptoras selecionadas [6].

## CAPITULO 4 – METODOLOGIA

Como mencionado no CAPÍTULO 1, para cumprir os objetivos do trabalho, foi eleita uma área no município do Rio de Janeiro contaminada com despejos de gasolina, provenientes do vazamento de um SASC em um posto de abastecimento e serviços. Nesse sítio foram realizados dois levantamentos de campo, um em 2003 e outro em 2005, gerando dois relatórios de avaliação ambiental. Esses relatórios foram executados por diferentes empresas de consultoria. O relatório de 2003 serviu como base para dados de entrada do programa e o segundo foi usado como controle para as simulações.

Tais simulações foram realizadas para o período compreendido entre as datas dos relatórios. Contudo, nem todos os dados requisitados pelos modelos foram encontrados nas avaliações ambientais e em função disso utilizaram-se dados *default* do programa, outras fontes e algumas aproximações.

O SESOIL requer do usuário a entrada de dados climáticos, de solo, de contaminante, de aplicação e lixiviação, enquanto o AT123D requer, além dos dados utilizados pelo SESOIL, valores como dispersividade, tipos e taxas de lançamento, fonte e contaminante, e dimensões do aquífero.

### 4.1. Levantamento dos Dados Requeridos pelo SESOIL

#### 4.1.1. Dados Climáticos

Os dados climatológicos estão entre aqueles que não foram apurados integralmente pelas investigações ambientais. Inicialmente, foram obtidos de fontes diversas de acordo com a disponibilidade de cada parâmetro na literatura consultada.

No *site* do INMET – Instituto Nacional de Meteorologia – foram consultados os valores médios para o município do Rio de Janeiro referentes aos seguintes parâmetros: temperatura do ar, evapotranspiração e precipitação, valores médios disponíveis para o período de 1973 a 1990; e umidade do ar, para o período de 1961 a 1990 [35].

Para as variáveis duração e número de tempestades, sem as quais o programa não é executável, não foram encontrados dados regionais ou nacionais e, por essa razão, utilizaram-se valores adaptados de acordo com o seguinte critério:

- **Consideração 01:** optou-se pela combinação mais severa possível entre os parâmetros duração e número de tempestades, ou seja, uma condição extrema para ambas as variáveis na qual o programa ofereceu alguma resposta sem apresentar erros. Essa consideração foi adotada para superestimar as diluições de contaminante obtidas pelo programa.

Além desses dados citados, o *software* pode requerer mais dois parâmetros: fração do céu nublado e albedo. Porém, essas variáveis somente são necessárias quando a evapotranspiração não é conhecida [5], que não é o caso do Rio de Janeiro, onde essas taxas estão disponíveis. Os valores apurados constam na Tabela 4.1.

Inicialmente o parâmetro duração da estação chuvosa foi aproximado como o número de dias com chuva no Município do Rio de Janeiro, dados coletados do site do CPTEC [36]. Porém, usando esses valores, o programa apresentou erro de execução no ciclo hidrológico. Assim, optou-se por fazer uma nova consideração:

- **Consideração 02:** utilizaram-se os valores *default* do programa para duração da estação chuvosa, 30,4 dias (Tabela 4.1).

Face à **Consideração 02**, o programa foi executado sem indicações de erro.

Tabela 4.1 - Sumário para os dados climáticos de entrada.

Parâmetros	Fonte	Local	Meses											
			Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago	Set	Out	Nov	Dez
Temperatura do ar (°C)	INMET	RJ	26,2	26,5	26,0	24,5	23,0	21,5	21,3	21,8	21,8	22,8	24,2	25,2
Fração de céu nublado	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Umidade do ar	INMET	RJ	0,79	0,79	0,80	0,80	0,80	0,79	0,77	0,77	0,79	0,80	0,79	0,80
Albedo	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Evap. (cm/dia)	INMET	RJ	0,47	0,42	0,40	0,36	0,29	0,22	0,21	0,22	0,25	0,30	0,35	0,45
Precip. (cm/mês)	INMET	RJ	11,40	10,50	10,30	13,70	8,60	8,00	5,60	5,00	8,70	8,80	9,60	16,90
Duração de tempestades (dias)	Adaptação	-	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00
Número de tempestades	Adaptação	-	5,00	5,00	5,00	5,00	5,00	5,00	5,00	5,00	5,00	5,00	5,00	5,00
Duração da est. chuvosa (dias)	CPTEC	RJ	13,5	10,5	10,5	7,50	7,50	2,00	10,50	10,50	10,50	7,50	13,50	12,00
	Default	EUA	30,4	30,4	30,4	30,4	30,4	30,4	30,4	30,4	30,4	30,4	30,4	30,4

#### 4.1.2. Dados de Solo

Os dados de campo disponíveis referentes ao solo areno-argiloso da área, segundo informações geológicas do relatório de 2003 e outras fontes, estão listados na Tabela 4.2.

**Tabela 4.2** - Parâmetros de solos areno-argilosos requeridos pelo SESOIL.

PARÂMETROS	UNIDADES	VALORES	FONTE
Densidade	g/cm <sup>3</sup>	2,74	Relatório, 2003
Permeabilidade Intrínseca	cm <sup>2</sup>	1,50E-09	<i>Default</i>
Índice de Desconectividade	-	6,00	<i>Default</i>
Porosidade Efetiva	-	0,24	<i>Default</i>
Teor de Carbono Orgânico	%	0,94	Relatório, 2003
Capacidade de troca catiônica	meq/100g	18,00	DRAGUN, 1998
Expoente de <i>Freundlich</i>	-	1,00	<i>Default</i>

Os parâmetros densidade e teor de carbono orgânico de solo foram retirados diretamente do relatório de 2003. Para as variáveis permeabilidade intrínseca, índice de desconectividade e porosidade efetiva, utilizaram-se os valores *default* do modelo SESOIL para solos areno-argilosos.

Não foram encontrados no relatório e nem em literatura específica, valores para o expoente de *Freundlich* que correspondessem a tal estudo de caso e, por recomendação do manual do programa, utilizou-se o valor *default*. A variável capacidade de troca catiônica não foi mencionada no relatório e, o valor aproximado para solos areno-argilosos encontrado na literatura foi 18 meq/100g [13].

#### 4.1.3. Dados do Contaminante

A proposta inicial do trabalho era realizar simulações para os quatro hidrocarbonetos monoaromáticos do grupo BTEX. Porém, não foi registrado pelos relatórios de avaliação ambiental concentrações de benzeno e xilenos no solo do sítio estudado, apenas tolueno e etilbenzeno. Os dados de entrada para esses dois contaminantes encontram-se nas Tabelas 4.3 e 4.4. Esses parâmetros foram fornecidos pelo banco de substâncias químicas existentes no arquivo do modelo SESOIL.

**Tabela 4.3** – Sumário dos parâmetros químicos do tolueno fornecido pelo SESOIL.

PROPRIEDADES	UNIDADES	VALORES	FONTE
Solubilidade	mg/L	5260,00	<i>Default</i>
Coefficiente de difusão no ar	cm <sup>2</sup> /s	0,09912	<i>Default</i>
Constante de Henry	m <sup>3</sup> -atm/mol	0,00664	<i>Default</i>
Coefficiente de adsorção de carbono orgânico (CO)	(μg/g-CO)/(μg/mL)	95,00	<i>Default</i>
Massa molecular	g/mol	92,14	<i>Default</i>

**Tabela 4.4** – Sumário dos parâmetros químicos do etilbenzeno fornecido pelo SESOIL.

PROPRIEDADES	UNIDADES	VALORES	FONTE
Solubilidade	mg/L	152,00	<i>Default</i>
Coefficiente de difusão no ar	cm <sup>2</sup> /s	0,09234	<i>Default</i>
Constante de Henry	m <sup>3</sup> -atm/mol	0,0079	<i>Default</i>
Coefficiente de adsorção de carbono orgânico (CO)	(μg/g-CO)/( μg/mL)	250,00	<i>Default</i>
Massa molecular	g/mol	106,17	<i>Default</i>

- **Consideração 03:** Os outros parâmetros ligados aos contaminantes como coeficiente de adsorção, constantes de hidrólise neutra, ácida e básica; as taxas de biodegradação nas fases líquida e sólida, a constante de estabilidade do ligante, mols de ligante por mol do contaminante, e o massa molecular de ligante, foram desconsideradas tanto para o tolueno como para o etilbenzeno, por não existirem tais dados específicos para a área estudada.

#### 4.1.4. Dados de Aplicação

Os dados de aplicação são apresentados na tabela 4.5 com suas respectivas fontes e observações.

**Tabela 4.5** – Dados de aplicação da área contaminada.

Parâmetros	Valor	Unidade	FONTE
Número de anos	2	Anos	Período entre os dois relatórios
Número de camadas	4		Determinado pelos perfis dos poços, Relatório de 2003
Número de subcamadas por cada camada	1		Consideração adotada
Área de aplicação	8890000	cm <sup>2</sup>	Relatório de 2005
Latitude do sítio	22,6	°	<i>Google Earth</i> , para o Rio de Janeiro

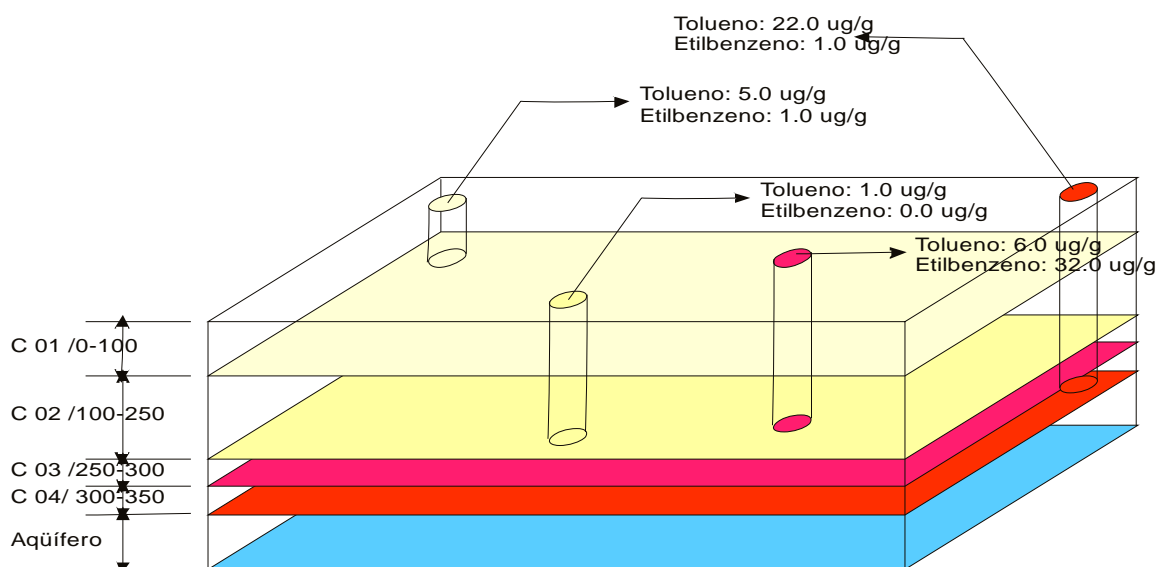
- **Consideração 04:** o ciclo de lixiviação foi desconsiderado, uma vez que neste é feito o cálculo das quantidades de solo erodido e de contaminante perdido na

superfície do solo e no presente trabalho se estuda uma área quase totalmente impermeabilizada, ou seja, sem erosão superficial.

- **Consideração 05:** o lançamento de contaminantes foi considerado contínuo ( $\mu\text{g}/\text{cm}^2/\text{mês}$ ), dado que o posto permaneceu operando durante o período estudado (2003/2005).

De acordo com o relatório ambiental de 2003, foram realizadas sondagens em quatro pontos diferentes do posto. Em cada perfuração coletou-se uma amostra em uma dada profundidade, a saber: 100, 250, 300 e 350 cm. Apesar das amostragens serem pontuais, fez-se a seguinte consideração:

- **Consideração 06:** para cada uma das profundidades citadas considerou-se o mesmo valor de concentração para toda a área do posto. Assim, por exemplo, a concentração medida no poço onde foi coletada amostra a 100 m será a mesma para qualquer ponto do solo na área do posto a essa cota. A Figura 4.1 ilustra essa consideração.



**Figura 4.1** – Perfil esquemático das concentrações de tolueno e etilbenzeno por camada.

A tabela 4.6, apresenta as concentrações iniciais de tolueno e etilbenzeno para as quatro camadas analisadas fornecidas pelo relatório de 2003.



**Tabela 4.6** – Concentrações iniciais de tolueno e etilbenzeno para as camadas 1, 2, 3 e 4 do solo.

Camadas	Profundidade (cm)	Espessura (cm)	Tolueno (ug/g)	Etilbenzeno (ug/g)
1	100	100	5	1
2	250	150	1	0
3	300	50	6	32
4	350	50	22	1

Fonte: Relatório de Investigação Ambiental, 2003.

Para cada uma das quatro camadas analisadas, foram utilizados os valores *default* (1.0) recomendados pelo programa relacionados às taxas de biodegradação nas fases líquida e sólida, o teor de carbono orgânico e o coeficiente de troca catiônica. Os parâmetros pH e permeabilidade intrínseca foram desconsiderados pelo programa para cada uma das quatro referidas camadas. O SESOIL considera a média ponderada da permeabilidade para todo o compartimento do solo.

- **Consideração 07:** As taxas de carregamento mensais para todas as camadas foram desconsideradas, assim como os fluxos de transferência de massa e ligantes e os índices de *runoff*. Para o parâmetro volatilização, considerou-se que todo o contaminante transferiu-se para as zonas do solo, assumindo-se o valor *default* 1.0 recomendado pelo programa.

## 4.2. Levantamento dos Dados Requeridos pelo AT123D

### 4.2.1. Parâmetros de Simulação

O passo de simulação adotado foram 730 horas (valor indicado pelo *software*) com a análise de quatro pontos nas direções longitudinal e transversal, coordenadas -15, 15, -100 e 100 m e três pontos na direção vertical com distâncias estabelecidas em 1 m para as coordenadas 0, 1 e 2 m. Esses pontos foram definidos a fim de avaliar-se a evolução da contaminação nas imediações do posto e externamente a ele. Os intervalos de tempo selecionados para as avaliações de concentrações da pluma dos contaminantes foram no instante inicial de lançamento, um e dois anos após esse despejo contínuo.

### 4.2.2. Propriedades do Solo e Contaminante

Parâmetros como densidade, porosidade efetiva e condutividade hidráulica do solo são os mesmos de entrada do SESOIL e o programa contém um *link* com o modelo

AT123D para fornecer automaticamente esses dados. Da mesma forma, o coeficiente de adsorção do contaminante é também registrado automaticamente pelo modelo. O gradiente hidráulico foi obtido diretamente do relatório de 2003.

Além desses parâmetros, o AT123D necessita das dispersividades longitudinal, transversal e vertical do contaminante no solo, do gradiente hidráulico e do coeficiente de difusão molecular do poluente.

O cálculo da dispersividade depende da escala de observação do problema. Diversos pesquisadores têm estudado este assunto e observado que quando se passa da escala local para regional, a dispersividade aumenta, talvez pelo fato do poluente encontrar mais heterogeneidades no aquífero [31]. Por essa razão e pela ausência de dados no relatório a respeito da dispersividade do contaminante ou que permitissem o seu cálculo, foi feita a consideração 08.

- **Consideração 08:** foram utilizados os máximos valores de dispersividade disponibilizados pelo programa.
- **Consideração 09:** O coeficiente de difusão molecular foi desconsiderado na análise, pois se apresentou em ordem de grandeza desprezível para ambos os contaminantes, não influenciando nos resultados obtidos. Além disso, a taxa de decaimento é considerada nula (*valor default*) pelo programa.

A tabela 4.7 mostra um sumário com os valores adotados com suas respectivas referências.

**Tabela 4.7** - Parâmetros de entrada de solo e contaminante para o modelo AT123D

PARÂMETROS	UNIDADES	VALORES	FONTES
Densidade	Kg/m <sup>3</sup>	2,74x10 <sup>3</sup>	SESOIL
Porosidade Efetiva		0,24	SESOIL
Condutividade Hidráulica	m/h	5,292x10 <sup>-3</sup>	SESOIL
Gradiente Hidráulico	m/m	7,845x10 <sup>-2</sup>	RELATÓRIO, 2003
Coefficiente de Adsorção	m <sup>3</sup> /Kg	8,93x10 <sup>-4</sup>	SESOIL
Dispersividade Longitudinal	m	200,00	Máximo valor <i>default</i>
Dispersividade Transversal	m	100,00	Máximo valor <i>default</i>
Dispersividade Vertical	m	10,00	Máximo valor <i>default</i>

### 4.2.3. Taxas de Lançamento da Fonte

Além dos dados citados anteriormente, são requeridas também pelo AT123D, as taxas de lançamento do contaminante no aquífero.

- **Consideração 10:** Foram consideradas as concentrações dissolvidas calculadas pelo SESOIL para a camada mais inferior da zona insaturada do solo (camada 4), que é aquela de contato com o aquífero local. Essas taxas são médias supostamente iguais para todos os meses do primeiro ano e, da mesma forma, assume um outro valor médio para o segundo ano de simulação, com dados também retirados pelo SESOIL (Apêndices A e B).

## CAPÍTULO 5 – RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo serão apresentados e discutidos os resultados obtidos a partir dos modelos SESOIL e AT123D do programa RISKPRO.

### 5.1. Modelo SESOIL

Para o primeiro ano de análise (2003/2004), foram obtidos os valores médios de concentração dos contaminantes tolueno e etilbenzeno nas fases líquida, sólida e gasosa para as camadas 1, 2, 3 e 4 descritas na metodologia do trabalho, segundo a Tabela 5.1., e as concentrações detalhadas mensais constam nos Apêndices A e B.

**Tabela 5.1** - Concentração média de tolueno e etilbenzeno por camadas para o período de 2003/2004.

FASES	SUBST.	UNIDADES	CAMADA 1	CAMADA 2	CAMADA 3	CAMADA 4
Líquida (Umidade)		µg/mL	2,946	2,617	8,797	12,820
Sólida (Adsorvida)	Tolueno	µg/g	2,631	2,337	7,856	11,450
Gasosa		µg/cm <sup>3</sup>	0,803	0,713	2,398	3,493
Líquida (Umidade)		µg/mL	0,359	0,972	12,190	0,840
Sólida (Adsorvida)	Etilbenzeno	µg/g	0,843	2,284	28,640	1,975
Gasosa		µg/cm <sup>3</sup>	0,116	0,315	3,952	0,273

**Fonte:** Modelo SESOIL

Os mais acentuados níveis de contaminação por tolueno registrados no SESOIL foram para a camada mais inferior do solo (camada 4) e que correspondem a 12,820 µg/mL, 11,450 µg/g e 3,493 µg/mL, respectivamente para as fases úmida, adsorvida e gasosa do solo.

Os níveis máximos de contaminação registrados para o etilbenzeno nas fases úmida, adsorvida e gasosa do solo foram, respectivamente: 12,190 µg/mL, 28,640 µg/g e 3,952 µg/cm<sup>3</sup>. Diferentemente das concentrações de tolueno, as maiores concentrações de etilbenzeno foram evidenciadas para a camada 3, fato que pode ser explicado pelo maior nível de contaminação inicial nessa camada, segundo o relatório de 2003.

Para o segundo ano avaliado (2004/2005), foram obtidos valores médios de concentração dos contaminantes tolueno e etilbenzeno conforme a Tabela 5.2. Esses níveis em escala mensal podem ser observados em detalhes nos Apêndices A e B deste projeto.

Assim como o primeiro ano de simulação, os maiores níveis de contaminação observados de tolueno para a camada 4 e do etilbenzeno os referentes a camada 3.

**Tabela 5.2** - Concentração média de tolueno e etilbenzeno por camadas para o período de 2004/2005.

FASES	SUBST.	UNIDADES	CAMADA 1	CAMADA 2	CAMADA 3	CAMADA 4
Líquida (Umidade)		µg/mL	1,364	3,139	9,014	10,730
Sólida (Adsorvida)	Tolueno	µg/g	1,218	2,803	8,050	9,581
Gasosa		µg/cm <sup>3</sup>	0,372	0,856	2,457	2,924
Líquida (Umidade)		µg/mL	0,406	1,518	11,300	1,506
Sólida (Adsorvida)	Etilbenzeno	µg/g	0,955	3,568	26,560	3,540
Gasosa		µg/cm <sup>3</sup>	0,132	0,492	3,665	0,488

**Fonte:** Modelo SESOIL

Os máximos valores de concentração do tolueno foram 10,730 µg/mL; 9,581 µg/g e 2,924 µg/cm<sup>3</sup>, respectivamente para as fases líquida, sólida e gasosa do solo, enquanto que para o etilbenzeno foram 11,300 µg/mL, 26,560 µg/g e 3,665 µg/cm<sup>3</sup>.

Ao compararem-se os resultados do modelo SESOIL com aqueles fornecidos pelo relatório de 2005 (Tabela 5.3), percebem-se discrepâncias consideráveis nos níveis de contaminação por tolueno. Segundo o relatório, não foi identificada contaminação nas camadas 1, 2 e 3; no entanto, o SESOIL obteve concentrações para todas as camadas estudadas. Cabe destacar que para a camada 4, a concentração adsorvida calculada pelo *software* foi 9,581 µg/g, enquanto o relatório fornece um valor cerca de 10 vezes menor (0,174 µg/g).

Assim como para o tolueno, de acordo com o relatório de 2005 (Tabela 5.3), somente foi detectada concentração adsorvida de etilbenzeno na camada 4 com valor de 5,988 µg/g, que, nesse caso, está relativamente próxima aquela calculada pelo SESOIL (3,540 µg/g).

**Tabela 5.3** - Resultados das concentrações de tolueno e etilbenzeno segundo Relatório de 2005.

FASES	SUBST.	UNIDADES	CAMADA 1	CAMADA 2	CAMADA 3	CAMADA 4
Líquida (Umidade)	Tolueno	µg/mL	-	-	-	-
Sólida (Adsorvida)		µg/g	n.d.	n.d.	n.d.	0,174
Líquida (Umidade)	Etilbenzeno	µg/mL	-	-	-	-
Sólida (Adsorvida)		µg/g	n.d.	n.d.	n.d.	5,988

**Fonte:** Relatório de Investigação Ambiental, 2005.

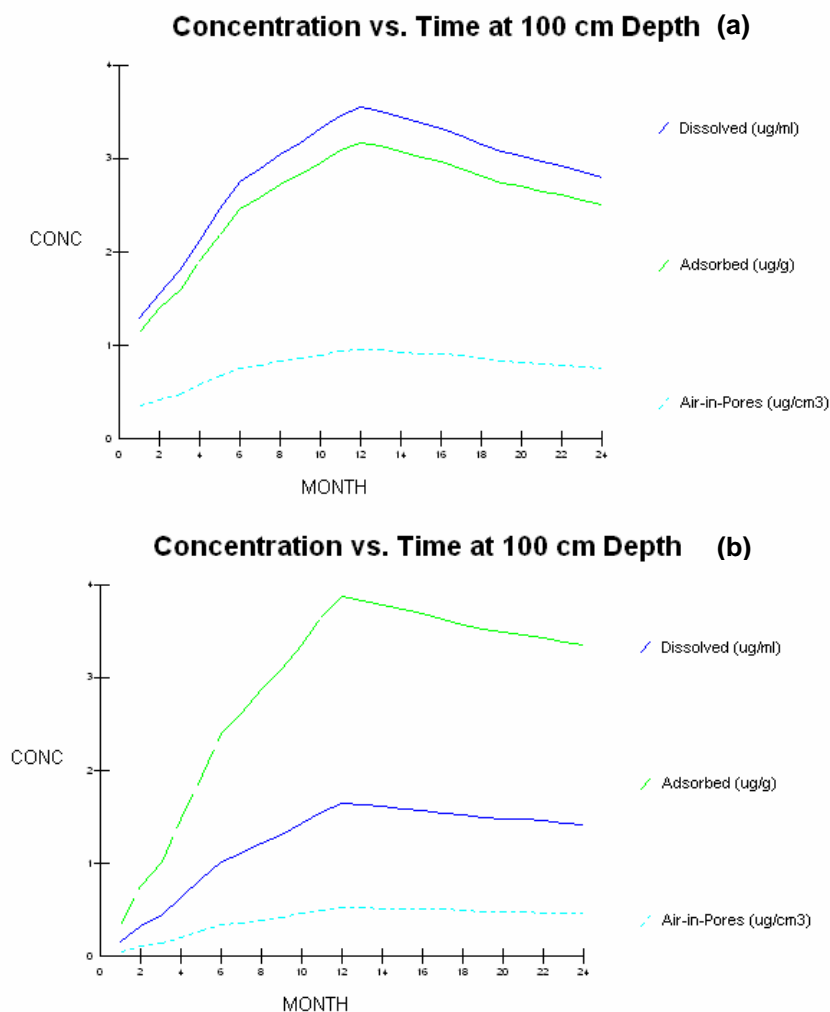
(-) não avaliado / (n.d.) não detectado

Comparando-se os valores estabelecidos pelo modelo com os limites de contaminação preconizados pela DZ-1841 R2 da FEEMA [37], verificou-se que nenhuma das concentrações adsorvidas de tolueno ou etilbenzeno atingiu os níveis de intervenção. O maior valor estimado para o tolueno foi 11,450  $\mu\text{g/g}$ , enquanto seu valor de intervenção é 130  $\mu\text{g/g}$  e o de alerta, 65  $\mu\text{g/g}$ . No caso do etilbenzeno foi simulado o valor máximo de 28,640  $\mu\text{g/g}$ , o qual está abaixo do nível de intervenção, 50  $\mu\text{g/g}$ , porém acima do valor de alerta, 25  $\mu\text{g/g}$ .

Foram elaborados, através do SESOIL, oito gráficos (Figuras 5.1 a 5.4) que exibem a variação de concentrações do tolueno e do etilbenzeno em função do tempo, para a profundidade limite de cada camada de solo considerada.

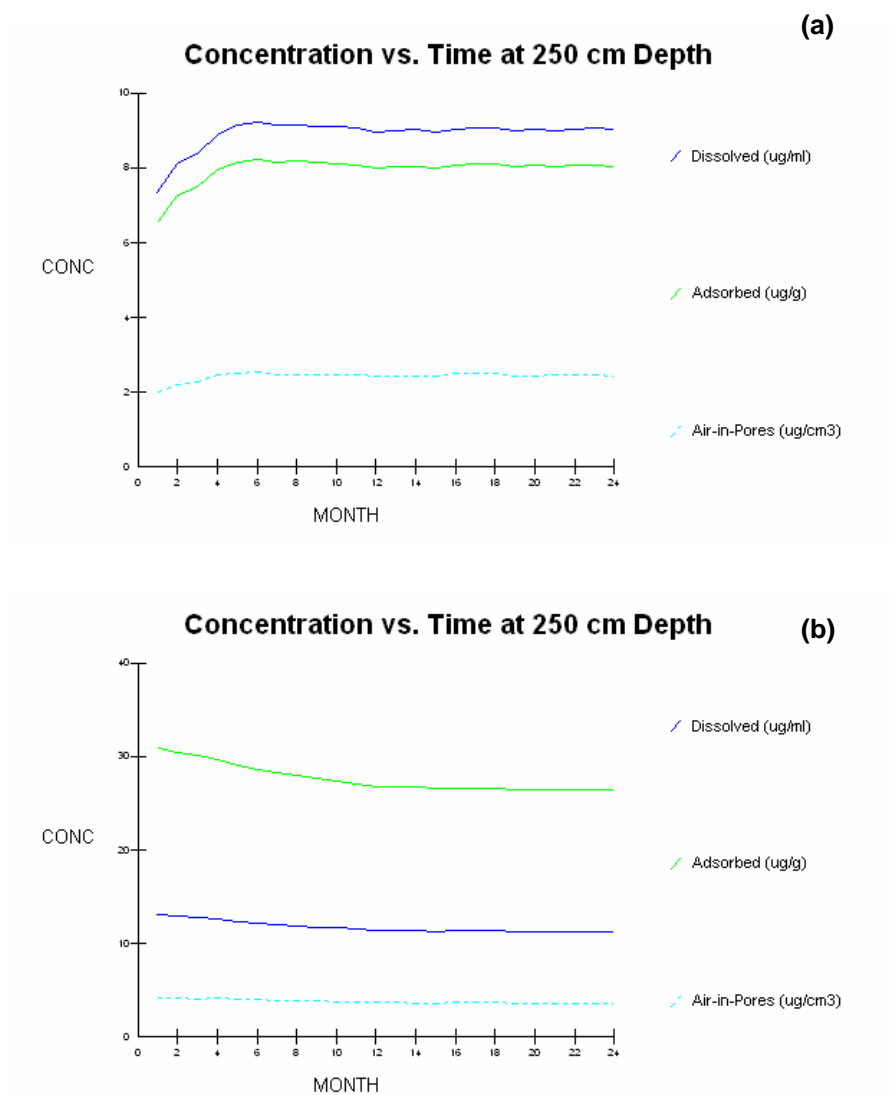
A Figura 5.1 apresenta o comportamento da concentração dos contaminantes ao longo de dois anos a uma profundidade em relação à superfície de 100 cm. Nota-se que esses valores aumentam no primeiro ano e a partir desse momento começam a decrescer consideravelmente. Por exemplo, no caso da concentração dissolvida de tolueno, que apresentou os níveis mais acentuados, decresceu da faixa de 3,5  $\mu\text{g/mL}$  para cerca de 2,8  $\mu\text{g/ml}$  no segundo ano. Já a concentração dissolvida de etilbenzeno sofre um acréscimo considerável até 4,0  $\mu\text{g/mL}$  no primeiro ano e, posteriormente, reduz-se para aproximadamente 3,5  $\mu\text{g/mL}$  ao final do período de dois anos.

Tanto através dos valores das Tabelas 5.1 e 5.2, quanto por meio das Figuras 5.1 a 5.4, percebe-se que a quantidade de tolueno dissolvida é superior à concentração adsorvida. Para o etilbenzeno, verifica-se o comportamento inverso. Infere-se, indubitavelmente, que o programa contempla as diferenças de solubilidade dos contaminantes em água: o tolueno, mais solúvel (53 mg/100mL) e o etilbenzeno, menos solúvel (15 mg/mL).



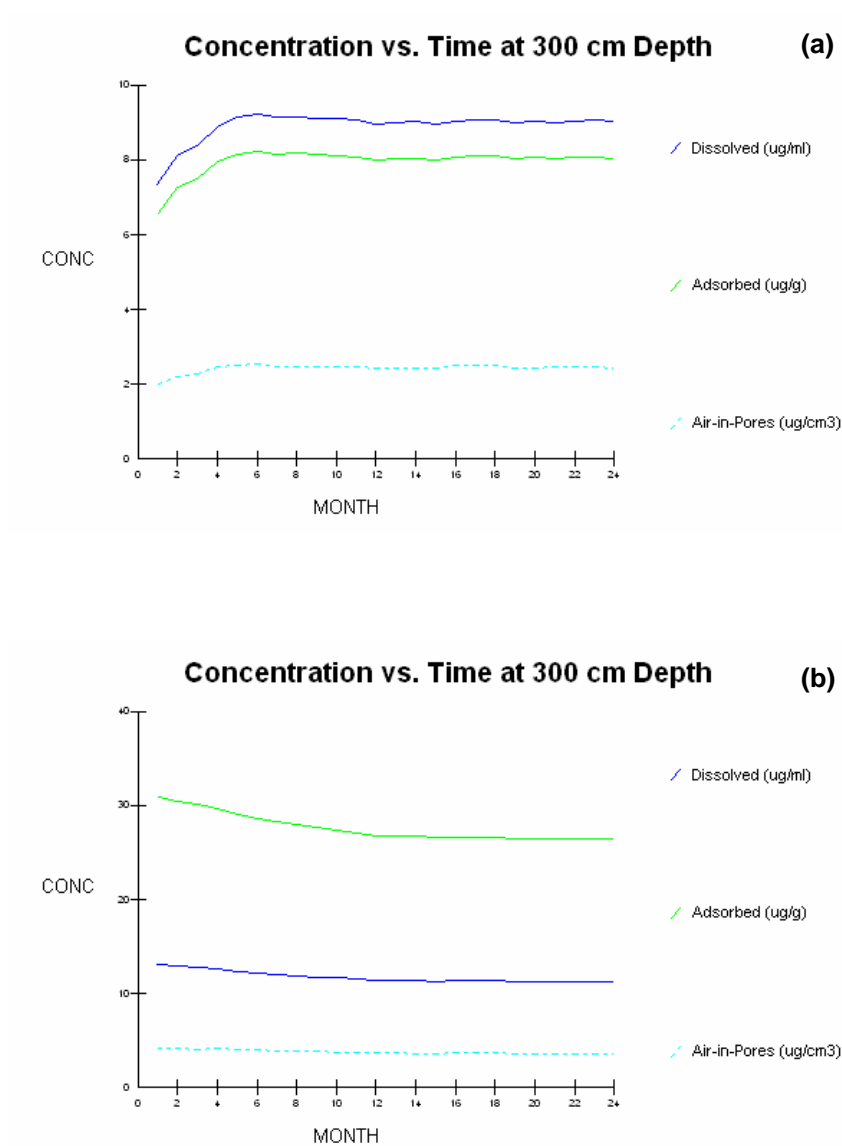
**Figura 5.1** – Perfil de concentração dos contaminantes tolueno (a) e etilbenzeno (b) na profundidade de 100 cm para o período de 2 anos.

Segundo as figuras 5.2, 5.3 e 5.4, as concentrações de tolueno mostram-se crescentes até o sexto mês e, posteriormente, atingem um patamar até o final da simulação. No caso das concentrações de etilbenzeno, o perfil é contrário, isto é, os níveis de contaminação decrescem até o final do primeiro ano e a partir desse período estabilizam-se.

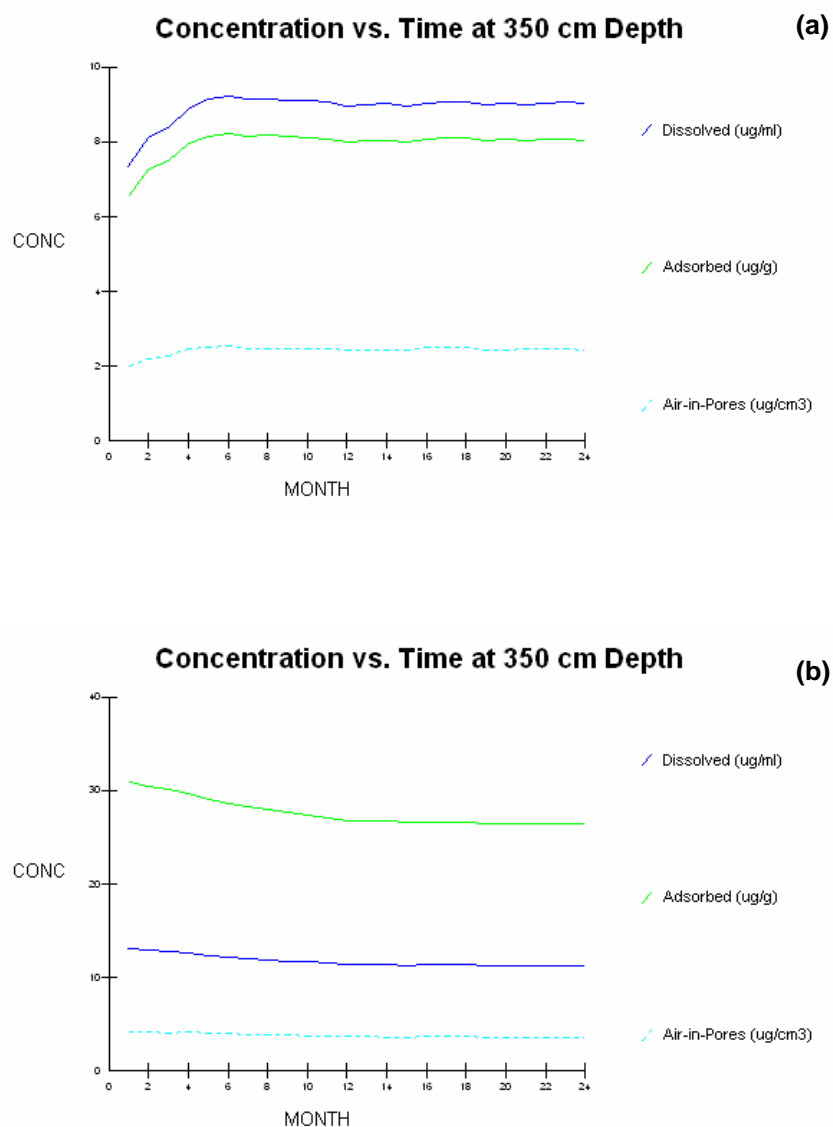


**Figura 5.2** – Perfil de concentração dos contaminantes tolueno (a) e etilbenzeno (b) na profundidade de 250 cm para o período de 2 anos.





**Figura 5.3** – Perfil de concentração dos contaminantes tolueno (a) e etilbenzeno (b) na profundidade de 300 cm para o período de 2 anos.



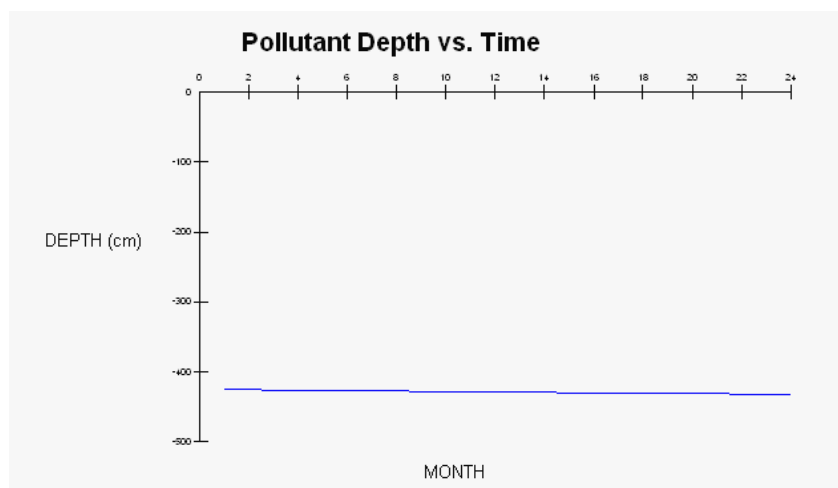
**Figura 5.4** – Perfil de concentração dos contaminantes tolueno (a) e etilbenzeno (b) na profundidade de 350 cm para o período de 2 anos.

Especificamente para o etilbenzeno, as concentrações não sofrem alterações significativas mantendo-se em torno de uma mesma faixa durante os dois anos simulados pelo SESOIL.

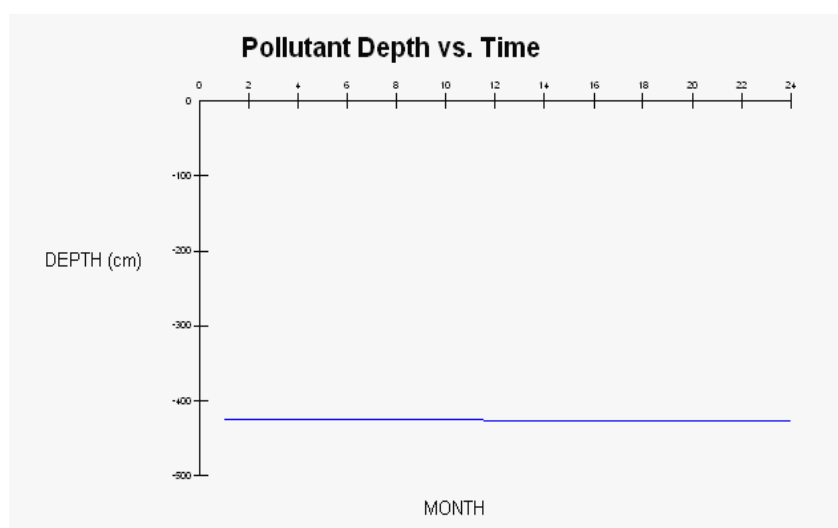
Analisando os gráficos relativos ao tolueno, nas Figuras 5.2, 5.3 e 5.4, verifica-se que as máximas concentrações atingidas em todos os casos (profundidades de 250 cm, 300 cm e 350 cm) foram 9  $\mu\text{g}/\text{mL}$ , 8  $\mu\text{g}/\text{g}$  e 2  $\mu\text{g}/\text{cm}^3$ , para as fases dissolvida, adsorvida e gasosa, respectivamente. Para o etilbenzeno os níveis máximos observados estão em torno de 12  $\mu\text{g}/\text{mL}$ , 30  $\mu\text{g}/\text{g}$  e 5  $\mu\text{g}/\text{cm}^3$ . Da mesma maneira que para a profundidade

inicial de 100cm, verificou-se maior concentração dissolvida de tolueno do que etilbenzeno.

As Figuras 5.5 e 5.6 mostram as profundidades alcançadas pelos contaminantes tolueno e etilbenzeno no período de dois anos. A profundidade alcançada pelo tolueno é maior que a de etilbenzeno e, de acordo com os Apêndices A e B, esses níveis de profundidade são 432,2cm (tolueno) e 427,8cm (etilbenzeno). Esse cenário indica uma contaminação em potencial do aquífero local, zona saturada do solo, uma vez que o lençol freático está localizado a 370 cm de profundidade segundo informações do relatório de investigação ambiental de 2005. Essa análise será realizada em detalhes pelo modelo AT123D.



**Figura 5.5** – Profundidade alcançada pela contaminação por tolueno no período de dois anos.



**Figura 5.6** - Profundidade alcançada pela contaminação por etilbenzeno no período de dois anos.

## 5.2. Modelo AT123D

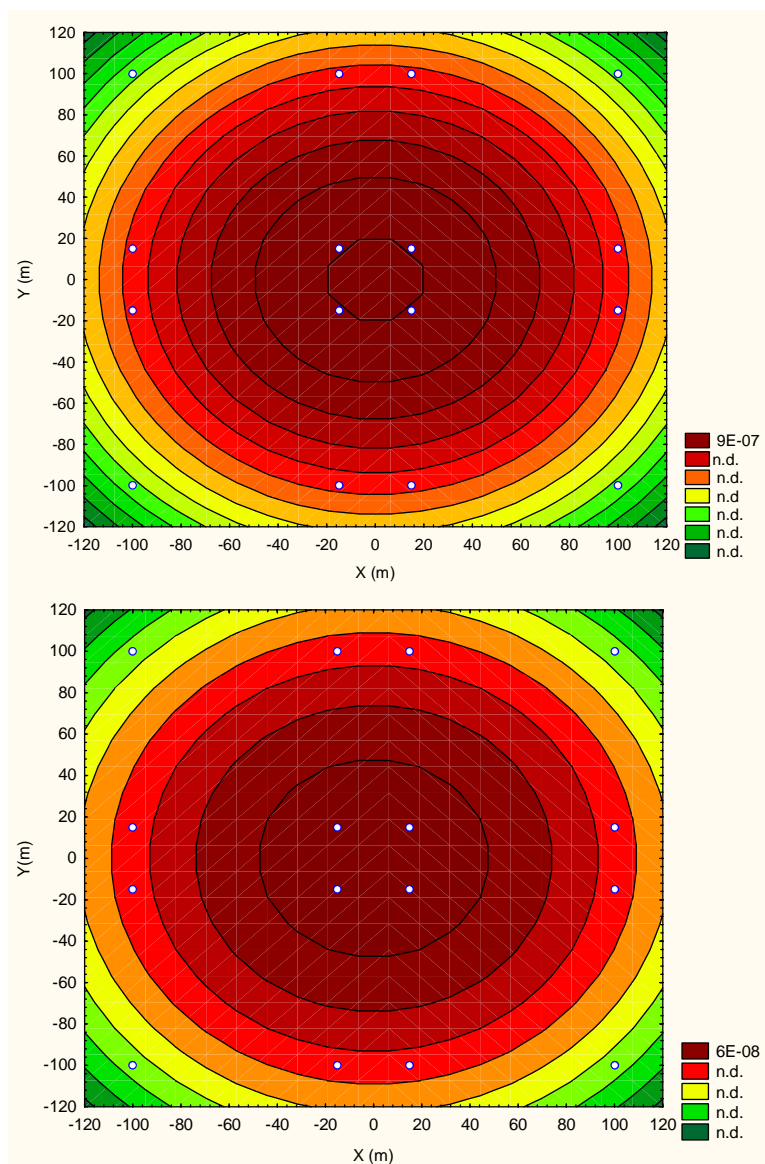
Conforme os dados de concentração dissolvida para os eixos longitudinal, transversal e vertical gerados pelo AT123D (vide Apêndices C e D), foram elaborados gráficos (Figuras 5.7 e 5.8) representativos do perfil das plumas de contaminação do tolueno e etilbenzeno correspondentes a cada ano simulado.

O primeiro ano de simulação resultou em uma pluma de contaminação, obtida através do programa Statistica 7.0, que não transcendeu os limites cartesianos do posto. A contaminação esteve restrita a um diâmetro de 15 m em relação ao centro geométrico do posto, onde foram detectadas concentrações máximas de tolueno: 0,184E-05, 0,150E-05 e 0,095E-05 ppm, respectivamente para as profundidades estimadas: 0, 1 e 2 m (Apêndice C). Para o etilbenzeno, os níveis simulados para as mesmas condições foram 0,121E-06, 0,099E-06 e 0,062E-06 ppm (Apêndice D).

O perfil das plumas de contaminação do tolueno e etilbenzeno foi praticamente o mesmo para todas as profundidades analisadas.

A primeira inferência que se faz a partir dos dados resultantes da simulação é a redução das concentrações com o aumento da profundidade, o que se verifica para ambos contaminantes. O segundo ponto a se destacar são as diferenças entre as concentrações de tolueno e etilbenzeno, de uma ordem de grandeza, oriundas obviamente da maior solubilidade do tolueno em água.

Ao final do segundo ano de avaliação, as concentrações ultrapassaram os limites do posto e atingiram um raio de 100 m a partir de seu centro geométrico. Nesta região foram verificadas as concentrações máximas de tolueno: 0,879E-11, 0,857E-11 e 0,794E-11 ppm, respectivamente para as profundidades 0, 1 e 2 m (Apêndice C). Para o etilbenzeno, nas mesmas condições, os valores simulados foram 0,576E-12, 0,561E-12 e 0,521E-12 ppm (Apêndice D).

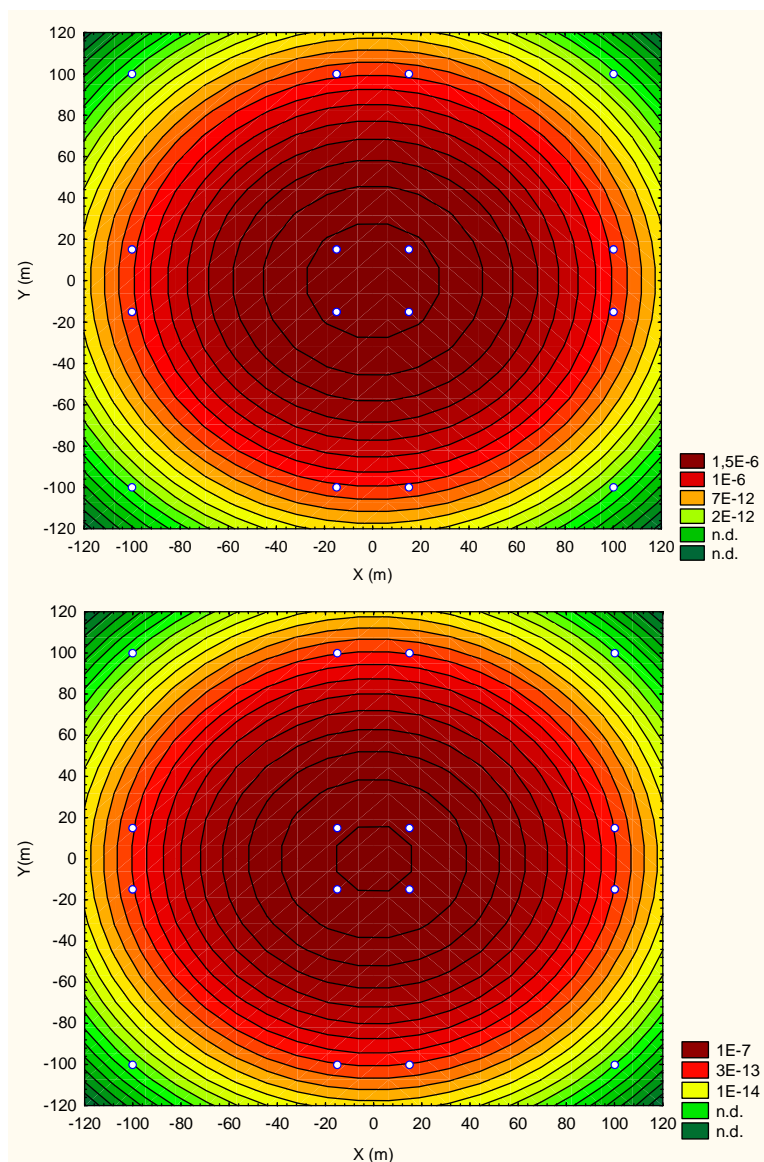


**Figura 5.7** - Plumas de concentração dissolvida, em ppm, de tolueno (acima) e etilbenzeno (abaixo) no plano XY para  $z = 0, 1$  e  $2$  m no primeiro ano

Analisando a região circunscrita num raio de 15 m a partir do ponto central do posto, após dois anos de simulação, verificaram-se os seguintes valores para tolueno:  $0,239E-05$ ,  $0,208E-05$  e  $0,154E-05$  ppm (profundidades de 0, 1 e 2 m, Apêndice C). Já o etilbenzeno resultou nas seguintes respostas:  $0,274E-06$ ,  $0,233E-06$  e  $0,162E-06$  ppm (Apêndice D).

No segundo ano de simulação, o perfil da pluma também foi semelhante para ambos os contaminantes em todas as profundidades estudadas.

A frente da pluma, a qual atinge o raio de 100 m, apresenta concentrações reduzidas face aos valores obtidos à distância de 15 m. Assim como registrado para o primeiro ano de simulação, as concentrações também decrescem com o aumento da profundidade. Além disso, a análise dos dados dos Apêndices C e D, revela que as concentrações no sentido positivo do eixo transversal são maiores que as do sentido contrário.



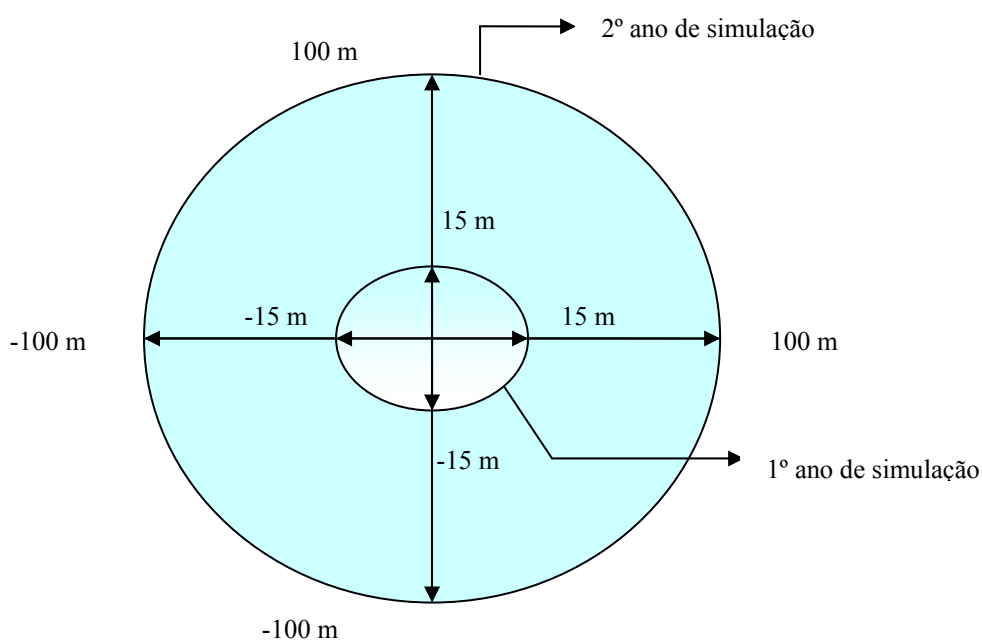
**Figura 5.8** - Pluma de concentração dissolvida, em ppm, de tolueno (acima) e etilbenzeno (abaixo) no plano XY para  $z = 0, 1$  e  $2$  m no segundo ano.

De acordo com os dados fornecidos pelos relatórios de investigação ambiental, de 2003 e 2005, a circunvizinhança do posto é ocupada por residências e instalações comerciais, além de um corpo hídrico superficial, uma lagoa costeira, situada a nordeste do posto em uma distância de 100 m. Assim, pelas projeções do programa, a pluma de

contaminação atinge a lagoa, embora com concentrações irrisórias diante dos valores padrões determinados pela DZ 1841 R2 [37], tolueno, 0,17 ppm, e etilbenzeno, 0,20 ppm.

No relatório de 2005 foram delimitadas plumas de contaminação para ambos contaminantes. A direção de propagação dessas plumas coincide com a elevação das concentrações na direção leste (sentido positivo do eixo transversal). Porém, os valores medidos no relatório são cerca de cinco ordens de grandeza superiores aos previstos pelo modelo.

A Figura 5.9 é uma representação esquemática da evolução da pluma de contaminação de acordo com os anos simulados.



**Figura 5.9** – Evolução do perfil da pluma de contaminação de ambos os contaminantes.

## CAPÍTULO 6 – CONCLUSÕES

O programa RISKPRO não se apresentou como uma boa opção para a modelagem do comportamento de contaminantes no solo em sítios brasileiros. Inúmeras dificuldades foram vislumbradas para compatibilizar as necessidades de entrada do *software* aos dados que são comumente apurados no Brasil.

Os modelos SESOIL e AT123D estão baseados em dados de entrada disponíveis para sítios nos Estados Unidos. Muitos dos aspectos geológicos, hidrogeológicos e, principalmente, climatológicos, não se adequam à realidade brasileira. No campo dos dados climáticos, por exemplo, parâmetros como albedo, fração de céu nublado, número e duração de tempestades, não estão disponíveis para o Brasil, pois não são avaliados pelos institutos de pesquisas espaciais e meteorológicos do país.

O programa apresenta uma série de limitações que concorrem para desviar suas predições de resultados e/ou dificultam a aplicação do sistema no estudo de postos de abastecimento, a saber:

- O programa somente faz predições para uma substância química, quando em casos de contaminação o que se verifica é o lançamento de misturas complexas, nas quais a interação entre os inúmeros compostos interfere no comportamento deles individualmente. Por exemplo, a gasolina brasileira é acrescida de porcentagens elevadas de etanol que alteram determinadamente o comportamento dos hidrocarbonetos do grupo BTEX no solo.
- O programa RISKPRO não pode ser utilizado como uma ferramenta de análise de riscos, pois não calcula riscos carcinogênicos e/ou toxicológicos. O programa apenas modela um cenário de contaminação;
- Na zona insaturada do solo, o modelo SESOIL somente avalia o perfil de concentração do contaminante na direção vertical, desconsiderando as demais contribuições nas componentes longitudinal e transversal;
- Há restrições quanto à aplicação do SESOIL na zona insaturada de solos cuja variação no perfil é grande. De acordo com a equação (3.3) a permeabilidade do solo é calculada pela média ponderada das permeabilidades das camadas e,



assim, uma grande variação nas propriedades verticais pode provocar erros na determinação da permeabilidade;

- O modelo SESOIL considera uma única fonte de contaminação, o que não é comumente observado. Por exemplo, em um posto de abastecimento, mais de um tanque de armazenamento pode lançar seu conteúdo ao subsolo, caracterizando mais de uma fonte de contaminante;
- Aparentemente o AT123D não considera a direção do fluxo do aquífero na projeção das plumas de contaminantes;
- No modelo AT123D a pluma de contaminação não é determinada por um conjunto contínuo de dados, mas sim por alguns dados discretos. O número máximo de pontos que podem ser avaliados é: quinze para a direção “x”, dez para a direção y e dez para a direção z. Esse número de dados levantados pelo programa determina a resolução da pluma;
- O modelo AT123D não gera gráficos que ilustrem as plumas de contaminação, apenas exibe tabelas com os valores das concentrações dissolvidas do poluente. Há a necessidade de outros recursos computacionais para a visualização de tais plumas.

Além das limitações inerentes ao programa e da dificuldade de acesso a determinados dados de entrada, as considerações e simplificações explicitadas no CAPÍTULO 4, tornam os resultados muito afastados do real cenário de contaminação da área estudada. Em função disso, a comparação de resultados feita no CAPÍTULO 5 pode ser considerada apenas de caráter ilustrativo com o objetivo de verificar como tais limitações computacionais e simplificações assumidas distanciavam os valores obtidos daqueles fornecidos pelo relatório de investigação ambiental de 2005.

Vale ressaltar que a elaboração dos relatórios de 2003 e 2005, bem como as outras fontes de dados pesquisadas para este trabalho, também consideram simplificações em suas medidas. Esse fato, por si só, já implica em desvios do que seria o real diagnóstico de contaminação da área.

Outra dificuldade encontrada durante o trabalho foram as referências bibliográficas do programa. São muito raras as referências, nacionais ou internacionais, de utilização do

programa RISKPRO e, nesse sentido, também não se encontram facilmente no Brasil os guias dos modelos SESOIL e AT123D. O detalhamento matemático dos modelos está ausente, inclusive, dos manuais impressos e eletrônicos que acompanham o *software*. Por vezes, mensagens de erro e de verificação de determinadas equações foram impressas nos resultados e não puderam ser conferidos por falta de material de apoio específico.

Sugere-se para trabalhos futuros buscar uma análise mais completa dos modelos, utilizando-se a literatura específica recomendada pelos manuais, o que permitirá um entendimento melhor dos mecanismos de cálculo utilizados pelo programa e, assim, uma melhor adequação aos cenários nacionais.

Além disso, convém ressaltar que importar soluções para a análise de uma realidade brasileira não deve ser encarada como a perspectiva ideal para a ciência deste país. Deve-se viabilizar a construção de soluções internas, que se adequem o mais próximo possível às características do Brasil. Assim, sugere-se o desenvolvimento de modelos nacionais.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1]. SINDICOM. Site do Sindicato Nacional das Empresas Distribuidoras de Combustíveis e de Lubrificantes: [http://www.sindicom.com.br/pub\\_sind/cgi/cgilua.exe/sys/start.htm?tpl=home](http://www.sindicom.com.br/pub_sind/cgi/cgilua.exe/sys/start.htm?tpl=home). Consultado em: ago/2007.
- [2]. SILVA, R. L. B., “*Contaminação de Poços Rasos no Bairro Brisamar, Itaguaí, RJ, por derramamento de gasolina: Concentração de BTEX e Avaliação da Qualidade da Água Consumida pela População*”, Tese de Doutorado apresentada à Escola Nacional de Saúde Pública da Fundação Oswaldo Cruz, 2002.
- [3]. MINISTÉRIO DA SAÚDE. *Portaria n.º 518, de 25 de março de 2004*. Estabelece os procedimentos e responsabilidades relativos ao controle e vigilância da qualidade da água para consumo humano e o seu padrão de potabilidade, e dá outras providências.
- [4]. GUIMARÃES, C. H. D. “*Avaliação de Risco Ambiental de Sítios Contaminados por Hidrocarbonetos de Petróleo*”. (Dissertação de Mestrado em Engenharia Civil). COPPE/UFRJ (Universidade Federal do Rio de Janeiro), Rio de Janeiro, 2003.
- [5]. SAIC-GSC. *SESOIL: Reference Guide and User’s Guide*. Beltsville, 2003.
- [6]. SAIC-GSC. *AT123D: Reference Guide and User’s Guide*. Beltsville, 1998.
- [7]. CNPq, Edital MCT/CNPq/MS-SCTIE-DECIT n.º 024/2006: “*Seleção Pública de Propostas para Apoio Às Atividades de Pesquisa Direcionadas a Estudos em Populações Expostas à Contaminação Ambiental*”, 2006.
- [8]. SILVA, M. A. B. “*Sistema de Classificação de Fuzzy para Áreas Contaminadas*”. (Tese de Doutorado em Ciências em Engenharia Civil) – COOPE/UFRJ (Universidade Federal do Rio de Janeiro), Rio de Janeiro, 2005.
- [9]. RODRIGUES, M. R. O. “*Risco Ambiental: avaliação da aderência das Tabelas de Referência do documento CETESB/SP (ACBR) ao exemplo apresentado no item X.2 da norma E1739-95 (RBCA/ASTM)*”. (Dissertação de Mestrado em Ciências em Tecnologia de Processos Químicos e

- Bioquímicos) – EQ/UFRJ (Universidade Federal do Rio de Janeiro), Rio de Janeiro, 2006.
- [10]. GOUVEIA, J. L. N. “*Atuação de Equipes de Atendimento Emergencial em Vazamentos de Combustíveis em Postos e Sistemas Retalhistas*”. (Dissertação de Mestrado em Saúde Pública). Faculdade de Saúde Pública / USP (Universidade de São Paulo), São Paulo, 2004.
- [11]. CETESB, “*Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas*”. São Paulo, SP, 2001.
- [12]. MELO Jr, H. R.; COSTI, A. C. Z. “*Avaliação da Contaminação das Águas Subterrâneas por Hidrocarbonetos Provenientes de Abastecimento de Combustível na Vila Tupi, Porto Velho (Ro)*”. Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas, Porto Velho, 2004.
- [13]. DRAGUN, J. “*The soil chemistry of hazardous materials*” 2<sup>nd</sup> Ed. Amherst Scientific Publishers, Amherst, Massachusetts, 1998.
- [14]. SALLES, I. H. “*Conceitos de Geografia Física*”. Ed. Ícone, 1997.
- [15]. PREVEDELLO, C. L. “*Física dos Solos com Problemas Resolvidos*”. Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 1996.
- [16]. ESPOSITO, E. “*Biorremediação de Solos Contaminados*”, Apostila do IV Curso de Tratamento Biológico de Resíduos, Florianópolis, 1999.
- [17]. ABAS (Associação Brasileira de Águas Subterrâneas). Disponível em: [http://abas.org.br/index.php?PG=aguas\\_subterraneas&SPG=aguas\\_subterraneas\\_as](http://abas.org.br/index.php?PG=aguas_subterraneas&SPG=aguas_subterraneas_as). Acessado em: ago/2007.
- [18]. FERREIRA, S. M. F. “*Relação Entre a Espessura Real e Aparente da Gasolina pura em Colunas de Laboratório*”. Tese (Doutorado – Pós-graduação em Recursos Hídricos Minerais e Hidrogeologia) – Instituto de Geociências/USP (Universidade de São Paulo), 2003.
- [19]. TAKASHITA, E. V. “*Adulteração da Gasolina por Adição de Solventes: Análise dos Parâmetros Físico-químicos*”. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) Programa de Pós-graduação em Engenharia Química / CT / UFSC (Centro Tecnológico / Universidade Federal de Santa Catarina), Florianópolis, 2006.

- [20]. OLIVEIRA, E. *“Contaminação de Aquíferos por Hidrocarbonetos Provenientes de Vazamentos de Tanques de Armazenamento Subterrâneo”*. Dissertação de Mestrado. Instituto de Geociências da Universidade de São Paulo, São Paulo, 1992.
- [21]. CORSEUIL, H. X. & MARINS, M. D. M. *“Contaminação de Água Subterrânea por Derramamento de Gasolina: O Problema é Grave?”*. Engenharia Sanitária e Ambiental, 2, 50-53, 1997.
- [22]. SANTOS, A.H.P. *Simulação Composicional para Transporte de Hidrocarbonetos em Aquíferos*. (Dissertação de Mestrado em Engenharia de Petróleo). Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, 1998.
- [23]. CHARBENEAU, R. J., WEAVER, J. W. *Modeling Contaminant Transport Through Subsurface Systems*, Journal of Hazardous Materials, Vol. 32, p. 293-311, 1992.
- [24]. FAUST, C. R. *Transport of Immiscible Fluids within and Below the Unsaturated Zone: A Numerical Model*, Water Resources Res., Vol. 21, p. 587-596, 1985.
- [25]. FETTER, C.W., *Contaminant Hydrogeology*, Prentice – Hall, New Jersey, 1993.
- [26]. BEDIENT, P.B.; RIFAI, H.S. & NEWELL, C.J., *Groundwater contamination – Transport and Remediation*, 2<sup>nd</sup> ed., 604p. 1999.
- [27]. MAIDMENT, D.R. *GIS and hydrologic modeling*. In: Goodchild, M.F.; PARKS, B.O.; STEYAERT, L.T.; ed. Environmental modeling with GIS. New York, Oxford University Press, 1993. Cap. 14, p. 147-167.
- [28]. STEYAERT, L.T. *A perspective on the state of environmental simulation modeling*. In: Goodchild, M.F.; Parks, B.O.; STEYAERT, L.T.; ed. Environmental modeling with GIS. New York, Oxford University Press, 1993. Cap. 3, p. 16-30.
- [29]. PROMMER, H.; BARRY, D.A., DAVIS, G.B. *Numerical modeling for design and evaluation of groundwater remediation schemes Ecological Modeling*, 128, 181-195, 2000.
- [30]. GUIGUER, N. *Poluição das Águas Subterrâneas e do Solo Causada por Vazamentos em Postos de Abastecimento*, ABAS, 1996.

- [31]. FEITOSA, F.A.C., FILHO, J.M. *Hidrogeologia: Conceitos e Aplicações.*; ed. CPRM – Serviço Geológico do Brasil. 1997. Cap. 2, p.13 -15.
- [32]. AGRITEMPO. Sistema de Monitoramento Agrometeorológico: <http://www.agritempo.gov.br/modules.php?name=Encyclopedia&op=content&tid=50>. Consultado em: set/2007.
- [33]. P. W. ATKINS, *Físico-Química*, Vol 3. LTC Editora, Rio de Janeiro (1999). Capítulo 5.
- [34]. SANSIGOLO, C.A., ROQUE, R.O. *Estimativas de evapotranspiração regional em Presidente Prudente, SP, usando o modelo conceitual de relação complementar de Morton*. Divisão de Ciências Meteorológicas, INPE, São José dos Campos, SP. 1998.
- [35]. INMET. Instituto Nacional de Meteorologia: [www.inmet.gov.br](http://www.inmet.gov.br). Consultado em: ago/2007.
- [36]. CPTEC. Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos: <http://www.cptec.inpe.br/>. Consultado em: ago/2007.
- [37]. FEEMA. DZ 1841 R 2 - *Diretriz para o licenciamento ambiental e para a autorização do encerramento das atividades de postos de serviço que disponham de sistemas de condicionamento ou armazenamento de combustíveis, graxas, lubrificantes e seus respectivos resíduos*. Rio de Janeiro, 2002.

## APÊNDICE A – Modelo SESOIL - Tolueno

\*\*\*\*\* MONTHLY SESOIL MODEL OPERATION \*\*\*\*\*  
MONTHLY SITE SPECIFIC SIMULATION

REGION : RJ  
SOIL TYPE : SANDY CLAY - GENERIC  
COMPOUND : Toluene (Benzene, methyl-)

## GENERAL INPUT PARAMETERS

=====

## -- SOIL INPUT PARAMETERS --

SOIL DENSITY (G/CM**3):	2.74
INTRINSIC PERMEABILITY (CM**2):	.150E-08
DISCONNECTEDNESS INDEX (-):	6.00
POROSITY (-):	.240
ORGANIC CARBON CONTENT (%):	.940
CATION EXCHANGE CAPACITY (MILLI EQ./100G DRY SOIL):	18.0
FREUNDLICH EXPONENT (-):	1.00

## -- CHEMICAL INPUT PARAMETERS --

SOLUBILITY (UG/ML):	.526E+04
DIFFUSION COEFFICIENT IN AIR (CM**2/SEC):	.991E-01
HENRYS LAW CONSTANT (M**3-ATM/MOLE):	.664E-02
ADSORPTION COEFFICIENT ON ORGANIC CARBON(KOC):	95.0
ADSORPTION COEFFICIENT ON SOIL (K):	.000
MOLECULAR WEIGHT (G/MOL):	92.1

VALENCE (-):	.000
NEUTRAL HYDROLYSIS CONSTANT (/DAY):	.000
BASE HYDROLYSIS CONSTANT (L/MOL-DAY):	.000
ACID HYDROLYSIS CONSTANT (L/MOL-DAY):	.000
DEGRADATION RATE IN MOISTURE (/DAY):	.000
DEGRADATION RATE ON SOIL (/DAY):	.000
LIGAND-POLLUTANT STABILITY CONSTANT (-):	.000
NO. MOLES LIGAND/MOLE POLLUTANT (-):	.000
LIGAND MOLECULAR WEIGHT (G/MOL):	.000

## -- APPLICATION INPUT PARAMETERS --

NUMBER OF SOIL LAYERS:	4			
YEARS TO BE SIMULATED:	2			
AREA (CM**2):	0.890E+07			
APPLICATION AREA LATITUDE (DEG.):	22.6			
SPILL (1) OR STEADY APPLICATION (0):	0			
MODIFIED SUMMERS MODEL USED (1) OR NOT (0) FOR GWR. CONC.:	0			
INITIAL CHEMICAL CONCENTRATIONS GIVEN (1) OR NOT GIVEN (0)	1			
DEPTHS (CM):	0.10E+03	0.15E+03	50.	50.
NUMBER OF SUBLAYERS/LAYER	1	1	1	1
PH (CM):	0.00	0.00	0.00	0.00
INTRINSIC PERMEABILITIES (CM**2):	0.00	0.00	0.00	0.00
KDEL RATIOS (-):	1.0	1.0	1.0	
KDES RATIOS (-):	1.0	1.0	1.0	
OC RATIOS (-):	1.0	1.0	1.0	
CEC RATIOS (-):	1.0	1.0	1.0	
FRN RATIOS(-):	1.0	1.0	1.0	
ADS RATIOS(-):	1.0	1.0	1.0	



## YEAR - 1 MONTHLY INPUT PARAMETERS

=====

## -- CLIMATIC INPUT PARAMETERS --

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
TEMP. (DEG C)	22.800	24.200	25.200	26.200	26.500	26.000	24.500	23.000	21.500	21.300	21.800	21.800
CLOUD CVR (FRAC.)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
REL. HUM. (FRAC.)	0.800	0.790	0.800	0.790	0.790	0.800	0.800	0.800	0.790	0.770	0.770	0.790
ALBEDO (-)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
EVAPOT. (CM/DAY)	0.300	0.350	0.450	0.470	0.420	0.400	0.360	0.290	0.220	0.210	0.220	0.250
PRECIP. (CM)	8.800	9.600	16.900	11.400	10.500	10.300	13.700	8.600	8.000	5.600	5.000	8.700
M.TIME RAIN (DAYS)	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000
M. STORM NO. (-)	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000
M. SEASON (DAYS)	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400

INITIAL POLLUTANT CONCENTRATIONS IN UG/ML, INPUT FOR MONTH 1 OF YEAR 1

LAYER 1:  
 SUBLAYER 1  
 INITIAL CONC. (UG/ML) 1.37E+01

LAYER 2:  
 SUBLAYER 1  
 INITIAL CONC. (UG/ML) 2.74E+00

LAYER 3:  
 SUBLAYER 1  
 INITIAL CONC. (UG/ML) 1.64E+01

LAYER 4:  
 SUBLAYER 1  
 INITIAL CONC. (UG/ML) 6.03E+01

-- POLLUTANT INPUT PARAMETERS --

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
POL. INP-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
LIG.INPUT-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
VOLATILIZATION MULT.-1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
SURFACE RUNOFF MULT.	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
POL. IN RAIN (FRAC-SL)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
POL. INP-2 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-2 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-2 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
LIG.INPUT-2 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
VOLATILIZATION MULT.-2	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
POL. INP-3 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-3 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-3 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
LIG.INPUT-3 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
VOLATILIZATION MULT.-3	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
POL. INP-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
LIG.INPUT-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
VOLATILIZATION MULT.-L	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00

YEAR - 2 MONTHLY INPUT PARAMETERS  
 =====

-- CLIMATIC INPUT PARAMETERS ARE SAME AS LAST YEAR

-- POLLUTANT INPUT PARAMETERS --

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
POL. INP-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
LIG.INPUT-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

VOLATILIZATION MULT.-1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
------------------------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

SURFACE RUNOFF MULT.	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
----------------------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

POL. IN RAIN (FRAC-SL)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
------------------------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
POL. INP-2 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

TRANSFORMD-2 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
-------------------------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

SINKS-2 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
--------------------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

LIG.INPUT-2 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
------------------------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

VOLATILIZATION MULT.-2	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
------------------------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
POL. INP-3 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-3 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-3 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
LIG.INPUT-3 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
VOLATILIZATION MULT.-3	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
POL. INP-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
LIG.INPUT-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
VOLATILIZATION MULT.-L	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

YEAR - 1 MONTHLY RESULTS (OUTPUT)  
 =====

-- HYDROLOGIC CYCLE COMPONENTS --

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
MOIS. IN L1 (%)	10.317	9.933	11.589	8.997	8.685	8.781	11.325	10.557	11.061	10.197	9.381	10.773
MOIS. BELOW L1 (%)	10.317	9.933	11.589	8.997	8.685	8.781	11.325	10.557	11.061	10.197	9.381	10.773
PRECIPATION (CM)	8.844	9.678	16.772	11.486	10.579	10.204	13.630	8.650	7.929	5.650	5.042	8.620
NET INFILT. (CM)	8.844	9.678	16.771	11.486	10.579	10.204	13.630	8.650	7.929	5.650	5.042	8.620
EVAPOTRANS. (CM)	9.120	10.640	13.680	14.288	12.768	12.160	10.944	8.816	6.688	6.384	6.688	7.600
MOIS. RETEN (CM)	-0.018	-0.144	0.621	-0.972	-0.117	0.036	0.954	-0.288	0.189	-0.324	-0.306	0.522
SUR. RUNOFF (CM)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
GRW. RUNOFF (CM)	-0.258	-0.818	2.470	-1.830	-2.072	-1.992	1.732	0.122	1.052	-0.410	-1.340	0.498
YIELD (CM)	-0.258	-0.818	2.471	-1.830	-2.072	-1.992	1.732	0.122	1.052	-0.410	-1.340	0.498

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
PAU/MPA (GZU)	1.005	1.008	0.992	1.008	1.008	0.991	0.995	1.006	0.991	1.009	1.008	0.991
PA/MPA (GZ)	1.005	1.008	0.992	1.008	1.008	0.991	0.995	1.006	0.991	1.009	1.008	0.991

-- POLLUTANT MASS INPUT TO COLUMN (UG) - INCLUDES INITIAL POLLUTANT CONCENTRATIONS --

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
PRECIP.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD UPPER	1.219E+10	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD ZONE 2	3.658E+09	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD ZONE 3	2.195E+10	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD LOWER	2.682E+10	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
TOTAL INPUT	6.462E+10	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00



POLLUTANT MASS DISTRIBUTION IN COLUMN (UG) -- NOTE: IF COMPONENT IS ZERO EACH MONTH, IT IS NOT PRINTED  
-----

UPPER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1

VOLATILIZED

7.208E+08 7.168E+08 4.248E+08 7.388E+08 6.966E+08 6.007E+08 2.842E+08 3.213E+08 2.651E+08 3.091E+08 3.529E+08 2.385E+08

IN SOIL MOI

4.448E+08 3.884E+08 4.096E+08 2.824E+08 2.397E+08 2.135E+08 2.507E+08 2.172E+08 2.135E+08 1.859E+08 1.614E+08 1.758E+08

ADS ON SOIL

1.055E+10 9.566E+09 8.647E+09 7.680E+09 6.752E+09 5.949E+09 5.416E+09 5.035E+09 4.722E+09 4.462E+09 4.211E+09 3.992E+09

IN SOIL AIR

1.604E+08 1.488E+08 1.183E+08 1.302E+08 1.168E+08 1.024E+08 7.572E+07 7.506E+07 6.811E+07 6.843E+07 6.830E+07 5.859E+07

SOIL ZONE 2:  
SUBLAYER 1

DIFFUSED UP

0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 9.063E+04 1.630E+07 5.172E+07 6.921E+07 1.113E+08 1.663E+08 1.376E+08

IN SOIL MOI

1.777E+08 2.070E+08 2.773E+08 2.555E+08 2.845E+08 3.226E+08 4.367E+08 4.298E+08 4.677E+08 4.508E+08 4.340E+08 5.098E+08

ADS ON SOIL

4.215E+09 5.100E+09 5.855E+09 6.948E+09 8.016E+09 8.987E+09 9.434E+09 9.962E+09 1.035E+10 1.082E+10 1.132E+10 1.158E+10

IN SOIL AIR

6.409E+07 7.933E+07 8.009E+07 1.178E+08 1.387E+08 1.547E+08 1.319E+08 1.485E+08 1.492E+08 1.659E+08 1.836E+08 1.699E+08

SOIL ZONE 3:  
 SUBLAYER 1

DIFFUSED UP

5.420E+08 6.582E+08 4.473E+08 8.827E+08 9.461E+08 9.049E+08 4.622E+08 5.521E+08 4.755E+08 5.734E+08 6.721E+08 4.644E+08

IN SOIL MOI

1.013E+09 1.077E+09 1.298E+09 1.067E+09 1.058E+09 1.079E+09 1.381E+09 1.290E+09 1.345E+09 1.238E+09 1.133E+09 1.288E+09

ADS ON SOIL

2.402E+10 2.652E+10 2.741E+10 2.902E+10 2.981E+10 3.007E+10 2.984E+10 2.989E+10 2.974E+10 2.970E+10 2.955E+10 2.926E+10

IN SOIL AIR

3.652E+08 4.126E+08 3.749E+08 4.921E+08 5.156E+08 5.175E+08 4.173E+08 4.456E+08 4.290E+08 4.555E+08 4.793E+08 4.294E+08

LOWER SOIL ZONE:  
 SUBLAYER 1

DIFFUSED UP

4.131E+09 3.264E+09 1.646E+09 2.399E+09 1.725E+09 1.159E+09 4.897E+08 5.216E+08 3.967E+08 4.215E+08 4.159E+08 2.584E+08

IN SOIL MOI

9.074E+08 7.522E+08 8.134E+08 5.560E+08 4.827E+08 4.520E+08 5.684E+08 5.133E+08 5.263E+08 4.719E+08 4.220E+08 4.766E+08

ADS ON SOIL

2.152E+10 1.853E+10 1.717E+10 1.512E+10 1.360E+10 1.259E+10 1.228E+10 1.190E+10 1.164E+10 1.132E+10 1.101E+10 1.082E+10

IN SOIL AIR

3.272E+08 2.882E+08 2.349E+08 2.564E+08 2.352E+08 2.167E+08 1.717E+08 1.773E+08 1.679E+08 1.737E+08 1.785E+08 1.589E+08

POLLUTANT CONCENTRATIONS (UG/ML) OR (UG/G) -- NOTE: IF CONCENTRATIONS ARE ZERO FOR EACH MONTH, THEY ARE NOT PRINTED

-----

UPPER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1

MOISTURE

4.844E+00 4.393E+00 3.971E+00 3.527E+00 3.101E+00 2.732E+00 2.487E+00 2.312E+00 2.168E+00 2.049E+00 1.934E+00 1.833E+00

%SOLUBILITY

9.209E-02 8.351E-02 7.549E-02 6.705E-02 5.895E-02 5.193E-02 4.728E-02 4.396E-02 4.122E-02 3.895E-02 3.676E-02 3.485E-02

ADSORBED

4.326E+00 3.923E+00 3.546E+00 3.149E+00 2.769E+00 2.439E+00 2.221E+00 2.065E+00 1.936E+00 1.830E+00 1.727E+00 1.637E+00

SOIL AIR

1.317E+00 1.189E+00 1.071E+00 9.754E-01 8.570E-01 7.558E-01 6.713E-01 6.274E-01 5.915E-01 5.571E-01 5.250E-01 4.978E-01

SOIL ZONE 2:  
SUBLAYER 1

MOISTURE

1.290E+00 1.561E+00 1.793E+00 2.127E+00 2.454E+00 2.751E+00 2.888E+00 3.050E+00 3.167E+00 3.311E+00 3.465E+00 3.544E+00

%SOLUBILITY

2.453E-02 2.968E-02 3.408E-02 4.044E-02 4.665E-02 5.231E-02 5.491E-02 5.798E-02 6.021E-02 6.295E-02 6.588E-02 6.738E-02

ADSORBED

1.152E+00 1.394E+00 1.601E+00 1.899E+00 2.191E+00 2.457E+00 2.579E+00 2.723E+00 2.828E+00 2.957E+00 3.095E+00 3.165E+00

SOIL AIR

3.508E-01 4.225E-01 4.834E-01 5.883E-01 6.783E-01 7.613E-01 7.795E-01 8.275E-01 8.640E-01 9.002E-01 9.409E-01 9.623E-01

SOIL ZONE 3:  
SUBLAYER 1

MOISTURE

7.354E+00 8.119E+00 8.392E+00 8.884E+00 9.125E+00 9.206E+00 9.136E+00 9.151E+00 9.106E+00 9.091E+00 9.047E+00 8.958E+00

%SOLUBILITY

1.398E-01 1.544E-01 1.595E-01 1.689E-01 1.735E-01 1.750E-01 1.737E-01 1.740E-01 1.731E-01 1.728E-01 1.720E-01 1.703E-01

ADSORBED

6.567E+00 7.251E+00 7.494E+00 7.933E+00 8.149E+00 8.221E+00 8.158E+00 8.172E+00 8.131E+00 8.118E+00 8.079E+00 7.999E+00

SOIL AIR

1.999E+00 2.197E+00 2.263E+00 2.457E+00 2.522E+00 2.547E+00 2.466E+00 2.483E+00 2.484E+00 2.472E+00 2.456E+00 2.432E+00

LOWER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1

MOISTURE

1.976E+01 1.702E+01 1.577E+01 1.389E+01 1.249E+01 1.157E+01 1.128E+01 1.092E+01 1.069E+01 1.040E+01 1.011E+01 9.941E+00

%SOLUBILITY

3.758E-01 3.235E-01 2.999E-01 2.640E-01 2.374E-01 2.199E-01 2.144E-01 2.077E-01 2.033E-01 1.977E-01 1.922E-01 1.890E-01

ADSORBED

1.765E+01 1.520E+01 1.408E+01 1.240E+01 1.115E+01 1.033E+01 1.007E+01 9.756E+00 9.548E+00 9.286E+00 9.026E+00 8.877E+00

SOIL AIR

5.374E+00 4.605E+00 4.253E+00 3.841E+00 3.452E+00 3.200E+00 3.044E+00 2.964E+00 2.917E+00 2.827E+00 2.744E+00 2.699E+00

POL DEP CM

4.251E+02 4.252E+02 4.265E+02 4.265E+02 4.265E+02 4.265E+02 4.274E+02 4.276E+02 4.282E+02 4.282E+02 4.282E+02 4.286E+02

YEAR - 1 ANNUAL SUMMARY REPORT

=====

-- TOTAL INPUTS (UG) --

UPPER SOIL ZONE	1.219E+10
SOIL ZONE 2	3.658E+09
SOIL ZONE 3	2.195E+10
LOWER SOIL ZONE	2.682E+10

-- HYDROLOGIC CYCLE COMPONENTS --

AVERAGE SOIL MOISTURE ZONE 1 (%)	10.133
AVERAGE SOIL MOISTURE BELOW ZONE 1 (%)	10.133
TOTAL PRECIPITATION (CM)	117.082
TOTAL INFILTRATION (CM)	117.081
TOTAL EVAPOTRANSPIRATION (CM)	119.776
TOTAL SURFACE RUNOFF (CM)	0.000
TOTAL GRW RUNOFF (CM)	-2.848
TOTAL MOISTURE RETENTION (CM)	0.153
TOTAL YIELD (CM)	-2.846

-- POLLUTANT MASS DISTRIBUTION IN COLUMN (UG) -- NOTE: IF COMPONENT IS ZERO EACH MONTH, IT IS NOT PRINTED

-----  
FOR FINAL MASS IN SOIL MOI., ADS. ON SOIL, SOIL AIR, IMMOBIL CEC, COMPLEXED, AND PURE PHASE FOR EACH SUBLAYER, SEE  
ABOVE (MONTH SEP)  
-----

UPPER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1  
TOTAL VOLATILIZED 5.670E+09

SOIL ZONE 2:  
SUBLAYER 1  
TOTAL DIFFUSED (UP) 5.525E+08

SOIL ZONE 3:  
SUBLAYER 1  
TOTAL DIFFUSED (UP) 7.581E+09

LOWER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1  
TOTAL DIFFUSED (UP) 1.683E+10

-- AVERAGE POLLUTANT CONCENTRATIONS -- NOTE: ONLY NON-ZERO VALUES ARE PRINTED --  
-----

UPPER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1  
SOIL MOISTURE (UG/ML) 2.946E+00  
ADSORBED SOIL (UG/G) 2.631E+00  
SOIL AIR (UG/ML) 8.029E-01

SOIL ZONE 2:  
SUBLAYER 1  
SOIL MOISTURE (UG/ML) 2.617E+00  
ADSORBED SOIL (UG/G) 2.337E+00  
SOIL AIR (UG/ML) 7.132E-01

SOIL ZONE 3:  
 SUBLAYER 1  
 SOIL MOISTURE (UG/ML) 8.797E+00  
 ADSORBED SOIL (UG/G) 7.856E+00  
 SOIL AIR (UG/ML) 2.398E+00

LOWER SOIL ZONE:  
 SUBLAYER 1  
 SOIL MOISTURE (UG/ML) 1.282E+01  
 ADSORBED SOIL (UG/G) 1.145E+01  
 SOIL AIR (UG/ML) 3.493E+00

MAX. POLL. DEPTH (M) 4.286E+00

YEAR - 2 MONTHLY RESULTS (OUTPUT)  
 =====

-- HYDROLOGIC CYCLE COMPONENTS --

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
MOIS. IN L1 (%)	10.413	9.957	11.589	8.997	8.685	8.781	11.325	10.557	11.061	10.197	9.381	10.773
MOIS. BELOW L1 (%)	10.413	9.957	11.589	8.997	8.685	8.781	11.325	10.557	11.061	10.197	9.381	10.773
PRECIPATION (CM)	8.874	9.682	16.763	11.486	10.579	10.204	13.630	8.650	7.929	5.650	5.042	8.620

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
NET INFILT. (CM)	8.874	9.682	16.762	11.486	10.579	10.204	13.630	8.650	7.929	5.650	5.042	8.620
EVAPOTRANS. (CM)	9.120	10.640	13.680	14.288	12.768	12.160	10.944	8.816	6.688	6.384	6.688	7.600
MOIS. RETEN (CM)	-0.135	-0.171	0.612	-0.972	-0.117	0.036	0.954	-0.288	0.189	-0.324	-0.306	0.522
SUR. RUNOFF (CM)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
GRW. RUNOFF (CM)	-0.111	-0.787	2.470	-1.830	-2.072	-1.992	1.732	0.122	1.052	-0.410	-1.340	0.498
YIELD (CM)	-0.111	-0.787	2.471	-1.830	-2.072	-1.992	1.732	0.122	1.052	-0.410	-1.340	0.498
PAU/MPA (GZU)	1.008	1.009	0.992	1.008	1.008	0.991	0.995	1.006	0.991	1.009	1.008	0.991
PA/MPA (GZ)	1.008	1.009	0.992	1.008	1.008	0.991	0.995	1.006	0.991	1.009	1.008	0.991



-- POLLUTANT MASS INPUT TO COLUMN (UG) --

-----

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
PRECIP.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD UPPER	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD ZONE 2	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD ZONE 3	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD LOWER	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
TOTAL INPUT	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00

-- POLLUTANT MASS DISTRIBUTION IN COLUMN (UG) -- NOTE: IF COMPONENT IS ZERO EACH MONTH, IT IS NOT PRINTED

-----

UPPER SOIL ZONE:  
 SUBLAYER 1

VOLATILIZED	2.491E+08	2.635E+08	1.635E+08	2.990E+08	3.035E+08	2.832E+08	1.425E+08	1.683E+08	1.447E+08	1.753E+08	2.081E+08	1.450E+08
-------------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------

IN SOIL MOI

1.620E+08 1.473E+08 1.602E+08 1.183E+08 1.085E+08 1.047E+08 1.282E+08 1.163E+08 1.186E+08 1.074E+08 9.697E+07 1.080E+08

ADS ON SOIL

3.808E+09 3.619E+09 3.383E+09 3.217E+09 3.057E+09 2.917E+09 2.770E+09 2.696E+09 2.623E+09 2.577E+09 2.529E+09 2.453E+09

IN SOIL AIR

5.749E+07 5.620E+07 4.628E+07 5.455E+07 5.289E+07 5.020E+07 3.873E+07 4.020E+07 3.784E+07 3.953E+07 4.102E+07 3.600E+07

SOIL ZONE 2:

SUBLAYER 1

DIFFUSED UP

1.611E+08 1.827E+08 1.226E+08 2.416E+08 2.583E+08 2.509E+08 1.314E+08 1.603E+08 1.401E+08 1.712E+08 2.032E+08 1.424E+08

IN SOIL MOI

4.868E+08 4.583E+08 5.222E+08 3.985E+08 3.751E+08 3.693E+08 4.645E+08 4.261E+08 4.381E+08 3.973E+08 3.582E+08 4.024E+08

ADS ON SOIL

1.144E+10 1.126E+10 1.103E+10 1.084E+10 1.057E+10 1.029E+10 1.003E+10 9.875E+09 9.690E+09 9.533E+09 9.343E+09 9.140E+09

IN SOIL AIR

1.727E+08 1.749E+08 1.508E+08 1.838E+08 1.828E+08 1.771E+08 1.403E+08 1.472E+08 1.398E+08 1.462E+08 1.516E+08 1.341E+08

SOIL ZONE 3:

SUBLAYER 1

IN SOIL MOI

1.249E+09 1.198E+09 1.385E+09 1.085E+09 1.050E+09 1.063E+09 1.359E+09 1.271E+09 1.328E+09 1.228E+09 1.133E+09 1.296E+09

ADS ON SOIL

2.934E+10 2.943E+10 2.924E+10 2.950E+10 2.958E+10 2.962E+10 2.937E+10 2.945E+10 2.937E+10 2.946E+10 2.955E+10 2.942E+10

IN SOIL AIR

4.430E+08 4.570E+08 4.000E+08 5.003E+08 5.117E+08 5.097E+08 4.106E+08 4.390E+08 4.237E+08 4.519E+08 4.793E+08 4.318E+08

LOWER SOIL ZONE:

SUBLAYER 1

IN SOIL MOI

4.643E+08 4.481E+08 5.336E+08 4.211E+08 4.105E+08 4.184E+08 5.467E+08 5.142E+08 5.441E+08 5.049E+08 4.675E+08 5.395E+08

ADS ON SOIL

1.091E+10 1.101E+10 1.127E+10 1.145E+10 1.156E+10 1.166E+10 1.181E+10 1.192E+10 1.204E+10 1.212E+10 1.219E+10 1.225E+10

IN SOIL AIR

1.647E+08 1.710E+08 1.541E+08 1.942E+08 2.000E+08 2.007E+08 1.651E+08 1.776E+08 1.736E+08 1.858E+08 1.978E+08 1.798E+08

POLLUTANT CONCENTRATIONS (UG/ML) OR (UG/G) -- NOTE: IF CONCENTRATIONS ARE ZERO FOR EACH MONTH, THEY ARE NOT PRINTED

-----

UPPER SOIL ZONE:

SUBLAYER 1

MOISTURE

1.748E+00 1.662E+00 1.554E+00 1.477E+00 1.404E+00 1.339E+00 1.272E+00 1.238E+00 1.205E+00 1.184E+00 1.161E+00 1.127E+00

%SOLUBILITY

3.324E-02 3.159E-02 2.954E-02 2.808E-02 2.669E-02 2.546E-02 2.419E-02 2.354E-02 2.290E-02 2.250E-02 2.208E-02 2.142E-02

ADSORBED

1.561E+00 1.484E+00 1.387E+00 1.319E+00 1.254E+00 1.196E+00 1.136E+00 1.106E+00 1.076E+00 1.057E+00 1.037E+00 1.006E+00

SOIL AIR

4.754E-01 4.497E-01 4.190E-01 4.085E-01 3.880E-01 3.706E-01 3.434E-01 3.360E-01 3.286E-01 3.218E-01 3.153E-01 3.058E-01

SOIL ZONE 2:  
SUBLAYER 1

MOISTURE

3.502E+00 3.447E+00 3.375E+00 3.318E+00 3.235E+00 3.150E+00 3.072E+00 3.023E+00 2.967E+00 2.918E+00 2.860E+00 2.798E+00

%SOLUBILITY

6.657E-02 6.554E-02 6.417E-02 6.308E-02 6.150E-02 5.989E-02 5.840E-02 5.747E-02 5.640E-02 5.548E-02 5.438E-02 5.320E-02

ADSORBED

3.127E+00 3.079E+00 3.014E+00 2.963E+00 2.889E+00 2.813E+00 2.743E+00 2.700E+00 2.649E+00 2.606E+00 2.554E+00 2.499E+00

SOIL AIR

9.521E-01 9.329E-01 9.102E-01 9.177E-01 8.942E-01 8.717E-01 8.292E-01 8.203E-01 8.093E-01 7.935E-01 7.766E-01 7.597E-01

SOIL ZONE 3:  
SUBLAYER 1

MOISTURE

8.982E+00 9.009E+00 8.952E+00 9.032E+00 9.056E+00 9.067E+00 8.991E+00 9.016E+00 8.992E+00 9.019E+00 9.046E+00 9.008E+00

%SOLUBILITY

1.708E-01 1.713E-01 1.702E-01 1.717E-01 1.722E-01 1.724E-01 1.709E-01 1.714E-01 1.710E-01 1.715E-01 1.720E-01 1.712E-01

ADSORBED

8.021E+00 8.045E+00 7.994E+00 8.066E+00 8.087E+00 8.097E+00 8.029E+00 8.051E+00 8.030E+00 8.054E+00 8.078E+00 8.044E+00

SOIL AIR

2.442E+00 2.438E+00 2.414E+00 2.498E+00 2.503E+00 2.509E+00 2.427E+00 2.446E+00 2.453E+00 2.452E+00 2.456E+00 2.446E+00

LOWER SOIL ZONE:  
 SUBLAYER 1

MOISTURE  
 1.002E+01 1.011E+01 1.035E+01 1.052E+01 1.062E+01 1.071E+01 1.085E+01 1.094E+01 1.105E+01 1.113E+01 1.120E+01 1.125E+01

%SOLUBILITY  
 1.905E-01 1.923E-01 1.967E-01 2.000E-01 2.019E-01 2.036E-01 2.062E-01 2.081E-01 2.101E-01 2.115E-01 2.129E-01 2.139E-01

ADSORBED  
 8.948E+00 9.030E+00 9.239E+00 9.392E+00 9.484E+00 9.562E+00 9.687E+00 9.773E+00 9.871E+00 9.936E+00 1.000E+01 1.005E+01

SOIL AIR  
 2.724E+00 2.736E+00 2.790E+00 2.909E+00 2.935E+00 2.963E+00 2.928E+00 2.970E+00 3.015E+00 3.025E+00 3.041E+00 3.055E+00

POL DEP CM  
 4.288E+02 4.288E+02 4.301E+02 4.301E+02 4.301E+02 4.301E+02 4.310E+02 4.312E+02 4.318E+02 4.319E+02 4.319E+02 4.322E+02

YEAR - 2 ANNUAL SUMMARY REPORT  
 =====

-- TOTAL INPUTS (UG) --

UPPER SOIL ZONE	0.000E+00
SOIL ZONE 2	0.000E+00
SOIL ZONE 3	0.000E+00
LOWER SOIL ZONE	0.000E+00

## -- HYDROLOGIC CYCLE COMPONENTS --

AVERAGE SOIL MOISTURE ZONE 1 (%)	10.143
AVERAGE SOIL MOISTURE BELOW ZONE 1 (%)	10.143
TOTAL PRECIPITATION (CM)	117.108
TOTAL INFILTRATION (CM)	117.107
TOTAL EVAPOTRANSPIRATION (CM)	119.776
TOTAL SURFACE RUNOFF (CM)	0.000
TOTAL GRW RUNOFF (CM)	-2.669
TOTAL MOISTURE RETENTION (CM)	0.000
TOTAL YIELD (CM)	-2.668

POLLUTANT MASS DISTRIBUTION IN COLUMN (UG) -- NOTE: IF COMPONENT IS ZERO EACH MONTH, IT IS NOT PRINTED FOR FINAL MASS IN SOIL MOI., ADS. ON SOIL, SOIL AIR, IMMOBIL CEC, COMPLEXED, AND PURE PHASE FOR EACH SUBLAYER, SEE ABOVE (MONTH SEP)

-----

UPPER SOIL ZONE:  
 SUBLAYER 1  
 TOTAL VOLATILIZED 2.546E+09

SOIL ZONE 2:  
 SUBLAYER 1  
 TOTAL DIFFUSED (UP) 2.166E+09

SOIL ZONE 3:  
 SUBLAYER 1

LOWER SOIL ZONE:  
 SUBLAYER 1

-- AVERAGE POLLUTANT CONCENTRATIONS -- NOTE: ONLY NON-ZERO VALUES ARE PRINTED --

## UPPER SOIL ZONE:

SUBLAYER 1

SOIL MOISTURE (UG/ML)	1.364E+00
ADSORBED SOIL (UG/G)	1.218E+00
SOIL AIR (UG/ML)	3.718E-01

## SOIL ZONE 2:

SUBLAYER 1

SOIL MOISTURE (UG/ML)	3.139E+00
ADSORBED SOIL (UG/G)	2.803E+00
SOIL AIR (UG/ML)	8.556E-01

## SOIL ZONE 3:

SUBLAYER 1

SOIL MOISTURE (UG/ML)	9.014E+00
ADSORBED SOIL (UG/G)	8.050E+00
SOIL AIR (UG/ML)	2.457E+00

## LOWER SOIL ZONE:

SUBLAYER 1

SOIL MOISTURE (UG/ML)	1.073E+01
ADSORBED SOIL (UG/G)	9.581E+00
SOIL AIR (UG/ML)	2.924E+00

MAX. POLL. DEPTH (M)	4.322E+00
----------------------	-----------

\*\*\*\*\*EXECUTION COMPLETED\*\*\*\*\*

## APÊNDICE B – Modelo SESOIL - Etilbenzeno

\*\*\*\*\* MONTHLY SESOIL MODEL OPERATION \*\*\*\*\*  
MONTHLY SITE SPECIFIC SIMULATION

REGION : RJ  
SOIL TYPE : SANDY CLAY - GENERIC  
COMPOUND : Ethylbenzene

## GENERAL INPUT PARAMETERS

=====

## -- SOIL INPUT PARAMETERS --

SOIL DENSITY (G/CM\*\*3): 2.74  
INTRINSIC PERMEABILITY (CM\*\*2): .150E-08  
DISCONNECTEDNESS INDEX (-): 6.00  
POROSITY (-): .240  
ORGANIC CARBON CONTENT (%): .940  
CATION EXCHANGE CAPACITY (MILLI EQ./100G DRY SOIL): 18.0  
FREUNDLICH EXPONENT (-): 1.00

## -- CHEMICAL INPUT PARAMETERS --

SOLUBILITY (UG/ML): 152.  
DIFFUSION COEFFICIENT IN AIR (CM\*\*2/SEC): .923E-01  
HENRYS LAW CONSTANT (M\*\*3-ATM/MOLE): .790E-02  
ADSORPTION COEFFICIENT ON ORGANIC CARBON(KOC): 250.  
ADSORPTION COEFFICIENT ON SOIL (K): .000  
MOLECULAR WEIGHT (G/MOL): 106.



VALENCE (-):	.000
NEUTRAL HYDROLYSIS CONSTANT (/DAY):	.000
BASE HYDROLYSIS CONSTANT (L/MOL-DAY):	.000
ACID HYDROLYSIS CONSTANT (L/MOL-DAY):	.000
DEGRADATION RATE IN MOISTURE (/DAY):	.000
DEGRADATION RATE ON SOIL (/DAY):	.000
LIGAND-POLLUTANT STABILITY CONSTANT (-):	.000
NO. MOLES LIGAND/MOLE POLLUTANT (-):	.000
LIGAND MOLECULAR WEIGHT (G/MOL):	.000

## -- APPLICATION INPUT PARAMETERS --

NUMBER OF SOIL LAYERS:	4			
YEARS TO BE SIMULATED:	2			
AREA (CM**2):	0.890E+07			
APPLICATION AREA LATITUDE (DEG.):	22.6			
SPILL (1) OR STEADY APPLICATION (0):	0			
MODIFIED SUMMERS MODEL USED (1) OR NOT (0) FOR GWR. CONC.:	0			
INITIAL CHEMICAL CONCENTRATIONS GIVEN (1) OR NOT GIVEN (0)	1			
DEPTHS (CM):	0.10E+03	0.15E+03	50.	50.
NUMBER OF SUBLAYERS/LAYER	1	1	1	1
PH (CM):	0.00	0.00	0.00	0.00
INTRINSIC PERMEABILITIES (CM**2):	0.00	0.00	0.00	0.00
KDEL RATIOS (-):	1.0	1.0	1.0	
KDES RATIOS (-):	1.0	1.0	1.0	
OC RATIOS (-):	1.0	1.0	1.0	
CEC RATIOS (-):	1.0	1.0	1.0	
FRN RATIOS(-):	1.0	1.0	1.0	
ADS RATIOS(-):	1.0	1.0	1.0	

YEAR - 1 MONTHLY INPUT PARAMETERS  
 =====

-- CLIMATIC INPUT PARAMETERS --

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
TEMP. (DEG C)	22.800	24.200	25.200	26.200	26.500	26.000	24.500	23.000	21.500	21.300	21.800	21.800
CLOUD CVR (FRAC.)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
REL. HUM. (FRAC.)	0.800	0.790	0.800	0.790	0.790	0.800	0.800	0.800	0.790	0.770	0.770	0.790
ALBEDO (-)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
EVAPOT. (CM/DAY)	0.300	0.350	0.450	0.470	0.420	0.400	0.360	0.290	0.220	0.210	0.220	0.250
PRECIP. (CM)	8.800	9.600	16.900	11.400	10.500	10.300	13.700	8.600	8.000	5.600	5.000	8.700
M.TIME RAIN (DAYS)	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000	3.000
M. STORM NO. (-)	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000
M. SEASON (DAYS)	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400	30.400

INITIAL POLLUTANT CONCENTRATIONS IN UG/ML, INPUT FOR MONTH 1 OF YEAR 1

LAYER 1:  
 SUBLAYER 1  
 INITIAL CONC. (UG/ML) 2.74E+00

LAYER 2:  
 SUBLAYER 1  
 INITIAL CONC. (UG/ML) 0.00E+00

LAYER 3:  
 SUBLAYER 1  
 INITIAL CONC. (UG/ML) 8.77E+01

LAYER 4:  
 SUBLAYER 1  
 INITIAL CONC. (UG/ML) 2.74E+00

-- POLLUTANT INPUT PARAMETERS --

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
POL. INP-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
LIG.INPUT-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
VOLATILIZATION MULT.												
-1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
SURFACE RUNOFF MULT.												
	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
POL. IN RAIN (FRAC-SL)												
	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
POL. INP-2 (UG/CM**2)												
	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-2 (UG/CM**2)												
	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-2 (UG/CM**2)												
	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
LIG.INPUT-2 (UG/CM**2)												
	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
VOLATILIZATION MULT.-2												
	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
POL. INP-3 (UG/CM**2)												
	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-3 (UG/CM**2)												
	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-3 (UG/CM**2)												
	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
LIG.INPUT-3 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
VOLATILIZATION MULT.-3	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
POL. INP-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
LIG.INPUT-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
VOLATILIZATION MULT.-L	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00

YEAR - 2 MONTHLY INPUT PARAMETERS  
 =====

-- CLIMATIC INPUT PARAMETERS ARE SAME AS LAST YEAR

-- POLLUTANT INPUT PARAMETERS --

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
POL. INP-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
LIG.INPUT-1 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
VOLATILIZATION MULT.-1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
SURFACE RUNOFF MULT.	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
POL. IN RAIN (FRAC-SL)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
POL. INP-2 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-2 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-2 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
LIG.INPUT-2 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
VOLATILIZATION MULT.-2	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
POL. INP-3 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-3 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-3 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
LIG.INPUT-3 (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
VOLATILIZATION MULT.-3	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
POL. INP-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
TRANSFORMD-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
SINKS-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
LIG.INPUT-L (UG/CM**2)	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
VOLATILIZATION MULT.-L	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

YEAR - 1 MONTHLY RESULTS (OUTPUT)

=====

-- HYDROLOGIC CYCLE COMPONENTS --

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
MOIS. IN L1 (%)	10.317	9.933	11.589	8.997	8.685	8.781	11.325	10.557	11.061	10.197	9.381	10.773
MOIS. BELOW L1 (%)	10.317	9.933	11.589	8.997	8.685	8.781	11.325	10.557	11.061	10.197	9.381	10.773
PRECIPITATION (CM)	8.844	9.678	16.772	11.486	10.579	10.204	13.630	8.650	7.929	5.650	5.042	8.620
NET INFILT. (CM)	8.844	9.678	16.771	11.486	10.579	10.204	13.630	8.650	7.929	5.650	5.042	8.620



	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
EVAPOTRANS. (CM)	9.120	10.640	13.680	14.288	12.768	12.160	10.944	8.816	6.688	6.384	6.688	7.600
MOIS. RETEN (CM)	-0.018	-0.144	0.621	-0.972	-0.117	0.036	0.954	-0.288	0.189	-0.324	-0.306	0.522
SUR. RUNOFF (CM)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
GRW. RUNOFF (CM)	-0.258	-0.818	2.470	-1.830	-2.072	-1.992	1.732	0.122	1.052	-0.410	-1.340	0.498
YIELD (CM)	-0.258	-0.818	2.471	-1.830	-2.072	-1.992	1.732	0.122	1.052	-0.410	-1.340	0.498
PAU/MPA (GZU)	1.005	1.008	0.992	1.008	1.008	0.991	0.995	1.006	0.991	1.009	1.008	0.991
PA/MPA (GZ)	1.005	1.008	0.992	1.008	1.008	0.991	0.995	1.006	0.991	1.009	1.008	0.991

-- POLLUTANT MASS INPUT TO COLUMN (UG) - INCLUDES INITIAL POLLUTANT CONCENTRATIONS --

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
PRECIP.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD UPPER	2.439E+09	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
LOAD ZONE 2	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD ZONE 3	1.171E+11	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD LOWER	1.219E+09	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
TOTAL INPUT	1.207E+11	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00

POLLUTANT MASS DISTRIBUTION IN COLUMN (UG) -- NOTE: IF COMPONENT IS ZERO EACH MONTH, IT IS NOT PRINTED

-----

UPPER SOIL ZONE:  
 SUBLAYER 1

VOLATILIZED  
 6.443E+07 6.761E+07 4.254E+07 7.896E+07 8.175E+07 7.877E+07 4.136E+07 5.055E+07 4.503E+07 5.649E+07 7.007E+07 5.143E+07

IN SOIL MOI  
 3.679E+07 3.399E+07 3.806E+07 2.842E+07 2.674E+07 2.678E+07 3.420E+07 3.207E+07 3.386E+07 3.184E+07 3.021E+07 3.535E+07

ADS ON SOIL  
 2.296E+09 2.203E+09 2.115E+09 2.034E+09 1.982E+09 1.963E+09 1.945E+09 1.956E+09 1.971E+09 2.011E+09 2.073E+09 2.113E+09

IN SOIL AIR  
 1.578E+07 1.549E+07 1.308E+07 1.559E+07 1.550E+07 1.528E+07 1.229E+07 1.318E+07 1.285E+07 1.394E+07 1.520E+07 1.402E+07

SOIL ZONE 2:  
SUBLAYER 1

DIFFUSED UP

0.000E+00 0.000E+00 1.396E+06 2.538E+07 6.021E+07 8.945E+07 5.875E+07 8.188E+07 8.112E+07 1.110E+08 1.491E+08 1.161E+08

IN SOIL MOI

2.132E+07 4.298E+07 6.716E+07 7.585E+07 9.653E+07 1.194E+08 1.678E+08 1.719E+08 1.938E+08 1.941E+08 1.950E+08 2.364E+08

ADS ON SOIL

1.331E+09 2.786E+09 3.731E+09 5.428E+09 7.157E+09 8.753E+09 9.539E+09 1.049E+10 1.128E+10 1.226E+10 1.338E+10 1.413E+10

IN SOIL AIR

9.148E+06 1.960E+07 2.307E+07 4.162E+07 5.597E+07 6.810E+07 6.030E+07 7.067E+07 7.358E+07 8.498E+07 9.816E+07 9.376E+07

SOIL ZONE 3:  
SUBLAYER 1

DIFFUSED UP

1.384E+09 1.472E+09 9.414E+08 1.772E+09 1.831E+09 1.733E+09 8.917E+08 1.069E+09 9.253E+08 1.120E+09 1.321E+09 9.222E+08

IN SOIL MOI

1.810E+09 1.719E+09 1.978E+09 1.514E+09 1.436E+09 1.427E+09 1.816E+09 1.676E+09 1.737E+09 1.585E+09 1.440E+09 1.635E+09

ADS ON SOIL

1.130E+11 1.115E+11 1.099E+11 1.083E+11 1.065E+11 1.047E+11 1.033E+11 1.022E+11 1.011E+11 1.001E+11 9.885E+10 9.773E+10

IN SOIL AIR

7.765E+08 7.839E+08 6.798E+08 8.305E+08 8.326E+08 8.143E+08 6.528E+08 6.890E+08 6.595E+08 6.941E+08 7.249E+08 6.484E+08

LOWER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1

IN SOIL MOI

2.095E+07 2.217E+07 3.399E+07 2.865E+07 2.963E+07 3.183E+07 4.659E+07 4.529E+07 5.063E+07 4.778E+07 4.497E+07 5.389E+07

ADS ON SOIL

1.307E+09 1.437E+09 1.889E+09 2.050E+09 2.196E+09 2.334E+09 2.649E+09 2.762E+09 2.947E+09 3.017E+09 3.086E+09 3.221E+09

IN SOIL AIR

8.987E+06 1.011E+07 1.168E+07 1.572E+07 1.718E+07 1.816E+07 1.674E+07 1.862E+07 1.922E+07 2.092E+07 2.263E+07 2.137E+07

POLLUTANT CONCENTRATIONS (UG/ML) OR (UG/G) -- NOTE: IF CONCENTRATIONS ARE ZERO FOR EACH MONTH, THEY ARE NOT PRINTED

-----

UPPER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1

MOISTURE

4.006E-01 3.844E-01 3.690E-01 3.549E-01 3.459E-01 3.426E-01 3.393E-01 3.413E-01 3.439E-01 3.509E-01 3.618E-01 3.687E-01

%SOLUBILITY

2.636E-01 2.529E-01 2.428E-01 2.335E-01 2.276E-01 2.254E-01 2.232E-01 2.245E-01 2.263E-01 2.308E-01 2.380E-01 2.426E-01

ADSORBED

9.415E-01 9.034E-01 8.671E-01 8.340E-01 8.129E-01 8.052E-01 7.974E-01 8.020E-01 8.082E-01 8.246E-01 8.502E-01 8.665E-01

SOIL AIR

1.296E-01 1.238E-01 1.184E-01 1.168E-01 1.137E-01 1.128E-01 1.090E-01 1.102E-01 1.116E-01 1.135E-01 1.169E-01 1.191E-01

SOIL ZONE 2:  
SUBLAYER 1

MOISTURE

1.548E-01 3.241E-01 4.341E-01 6.315E-01 8.325E-01 1.018E+00 1.110E+00 1.220E+00 1.312E+00 1.426E+00 1.557E+00 1.644E+00

%SOLUBILITY

1.019E-01 2.132E-01 2.856E-01 4.155E-01 5.477E-01 6.699E-01 7.301E-01 8.025E-01 8.635E-01 9.379E-01 1.024E+00 1.081E+00

ADSORBED

3.638E-01 7.617E-01 1.020E+00 1.484E+00 1.956E+00 2.393E+00 2.608E+00 2.866E+00 3.084E+00 3.350E+00 3.659E+00 3.863E+00

SOIL AIR

5.008E-02 1.043E-01 1.393E-01 2.078E-01 2.738E-01 3.352E-01 3.564E-01 3.938E-01 4.260E-01 4.612E-01 5.030E-01 5.310E-01

SOIL ZONE 3:  
SUBLAYER 1

MOISTURE

1.314E+01 1.297E+01 1.279E+01 1.260E+01 1.238E+01 1.218E+01 1.201E+01 1.189E+01 1.177E+01 1.164E+01 1.150E+01 1.137E+01

%SOLUBILITY

8.646E+00 8.530E+00 8.413E+00 8.291E+00 8.148E+00 8.010E+00 7.904E+00 7.825E+00 7.740E+00 7.661E+00 7.566E+00 7.480E+00

ADSORBED

3.088E+01 3.047E+01 3.005E+01 2.962E+01 2.910E+01 2.861E+01 2.823E+01 2.795E+01 2.765E+01 2.736E+01 2.702E+01 2.672E+01

SOIL AIR

4.251E+00 4.174E+00 4.103E+00 4.147E+00 4.073E+00 4.008E+00 3.858E+00 3.840E+00 3.818E+00 3.767E+00 3.715E+00 3.672E+00

LOWER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1

MOISTURE

4.563E-01 5.016E-01 6.591E-01 7.155E-01 7.665E-01 8.145E-01 9.244E-01 9.639E-01 1.029E+00 1.053E+00 1.077E+00 1.124E+00

## %SOLUBILITY

3.002E-01 3.300E-01 4.336E-01 4.707E-01 5.043E-01 5.359E-01 6.082E-01 6.342E-01 6.767E-01 6.927E-01 7.087E-01 7.396E-01

## ADSORBED

1.072E+00 1.179E+00 1.549E+00 1.681E+00 1.801E+00 1.914E+00 2.172E+00 2.265E+00 2.417E+00 2.474E+00 2.531E+00 2.642E+00

## SOIL AIR

1.476E-01 1.615E-01 2.115E-01 2.354E-01 2.521E-01 2.681E-01 2.969E-01 3.112E-01 3.338E-01 3.406E-01 3.479E-01 3.631E-01

## POL DEP CM

4.251E+02 4.251E+02 4.256E+02 4.256E+02 4.256E+02 4.256E+02 4.259E+02 4.260E+02 4.262E+02 4.263E+02 4.263E+02 4.264E+02

## YEAR - 1 ANNUAL SUMMARY REPORT

=====

## -- TOTAL INPUTS (UG) --

UPPER SOIL ZONE	2.439E+09
SOIL ZONE 2	0.000E+00
SOIL ZONE 3	1.171E+11
LOWER SOIL ZONE	1.219E+09

## -- HYDROLOGIC CYCLE COMPONENTS --

AVERAGE SOIL MOISTURE ZONE 1 (%)	10.133
AVERAGE SOIL MOISTURE BELOW ZONE 1 (%)	10.133
TOTAL PRECIPITATION (CM)	117.082
TOTAL INFILTRATION (CM)	117.081
TOTAL EVAPOTRANSPIRATION (CM)	119.776
TOTAL SURFACE RUNOFF (CM)	0.000
TOTAL GRW RUNOFF (CM)	-2.848
TOTAL MOISTURE RETENTION (CM)	0.153
TOTAL YIELD (CM)	-2.846

POLLUTANT MASS DISTRIBUTION IN COLUMN (UG) -- NOTE: IF COMPONENT IS ZERO EACH MONTH, IT IS NOT PRINTED FOR FINAL MASS IN SOIL MOI., ADS. ON SOIL, SOIL AIR, IMMOBIL CEC, COMPLEXED, AND PURE PHASE FOR EACH SUBLAYER, SEE ABOVE (MONTH SEP)

-----

UPPER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1  
TOTAL VOLATILIZED 7.290E+08

SOIL ZONE 2:  
SUBLAYER 1  
TOTAL DIFFUSED (UP) 7.744E+08

SOIL ZONE 3:  
SUBLAYER 1  
TOTAL DIFFUSED (UP) 1.538E+10

LOWER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1

AVERAGE POLLUTANT CONCENTRATIONS -- NOTE: ONLY NON-ZERO VALUES ARE PRINTED

-----

UPPER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1  
  
SOIL MOISTURE (UG/ML) 3.586E-01  
ADSORBED SOIL (UG/G) 8.427E-01  
SOIL AIR (UG/ML) 1.163E-01

SOIL ZONE 2:  
 SUBLAYER 1

SOIL MOISTURE (UG/ML) 9.720E-01  
 ADSORBED SOIL (UG/G) 2.284E+00  
 SOIL AIR (UG/ML) 3.151E-01

SOIL ZONE 3:  
 SUBLAYER 1

SOIL MOISTURE (UG/ML) 1.219E+01  
 ADSORBED SOIL (UG/G) 2.864E+01  
 SOIL AIR (UG/ML) 3.952E+00

LOWER SOIL ZONE:  
 SUBLAYER 1

SOIL MOISTURE (UG/ML) 8.404E-01  
 ADSORBED SOIL (UG/G) 1.975E+00  
 SOIL AIR (UG/ML) 2.725E-01

MAX. POLL. DEPTH (M) 4.264E+00

YEAR - 2 MONTHLY RESULTS (OUTPUT)  
 =====

-- HYDROLOGIC CYCLE COMPONENTS --

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
MOIS. IN L1 (%)	10.413	9.957	11.589	8.997	8.685	8.781	11.325	10.557	11.061	10.197	9.381	10.773



	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
MOIS. BELOW L1 (%)	10.413	9.957	11.589	8.997	8.685	8.781	11.325	10.557	11.061	10.197	9.381	10.773
PRECIPATION (CM)	8.874	9.682	16.763	11.486	10.579	10.204	13.630	8.650	7.929	5.650	5.042	8.620
NET INFILT. (CM)	8.874	9.682	16.762	11.486	10.579	10.204	13.630	8.650	7.929	5.650	5.042	8.620
EVAPOTRANS. (CM)	9.120	10.640	13.680	14.288	12.768	12.160	10.944	8.816	6.688	6.384	6.688	7.600
MOIS. RETEN (CM)	-0.135	-0.171	0.612	-0.972	-0.117	0.036	0.954	-0.288	0.189	-0.324	-0.306	0.522
SUR. RUNOFF (CM)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
GRW. RUNOFF (CM)	-0.111	-0.787	2.470	-1.830	-2.072	-1.992	1.732	0.122	1.052	-0.410	-1.340	0.498
YIELD (CM)	-0.111	-0.787	2.471	-1.830	-2.072	-1.992	1.732	0.122	1.052	-0.410	-1.340	0.498
PAU/MPA (GZU)	1.008	1.009	0.992	1.008	1.008	0.991	0.995	1.006	0.991	1.009	1.008	0.991
PA/MPA (GZ)	1.008	1.009	0.992	1.008	1.008	0.991	0.995	1.006	0.991	1.009	1.008	0.991

-- POLLUTANT MASS INPUT TO COLUMN (UG) --

	OCT	NOV	DEC	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP
PRECIP.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD UPPER	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD ZONE 2	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD ZONE 3	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
LOAD LOWER	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
TOTAL INPUT	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00

POLLUTANT MASS DISTRIBUTION IN COLUMN (UG) -- NOTE: IF COMPONENT IS ZERO EACH MONTH, IT IS NOT PRINTED

UPPER SOIL ZONE:  
 SUBLAYER 1

VOLATILIZED  
 5.757E+07 6.541E+07 4.360E+07 8.529E+07 9.338E+07 9.340E+07 4.987E+07 6.128E+07 5.461E+07 6.815E+07 8.347E+07 6.020E+07

IN SOIL MOI

3.496E+07 3.417E+07 3.976E+07 3.161E+07 3.121E+07 3.214E+07 4.137E+07 3.891E+07 4.100E+07 3.825E+07 3.566E+07 4.105E+07

ADS ON SOIL

2.162E+09 2.210E+09 2.209E+09 2.262E+09 2.314E+09 2.356E+09 2.352E+09 2.373E+09 2.387E+09 2.415E+09 2.448E+09 2.453E+09

IN SOIL AIR

1.476E+07 1.552E+07 1.366E+07 1.735E+07 1.809E+07 1.833E+07 1.487E+07 1.600E+07 1.557E+07 1.675E+07 1.795E+07 1.628E+07

SOIL ZONE 2:

SUBLAYER 1

DIFFUSED UP

1.301E+08 1.414E+08 9.136E+07 1.729E+08 1.798E+08 1.713E+08 8.866E+07 1.068E+08 9.293E+07 1.130E+08 1.341E+08 9.412E+07

IN SOIL MOI

2.265E+08 2.139E+08 2.456E+08 1.881E+08 1.787E+08 1.779E+08 2.264E+08 2.091E+08 2.169E+08 1.981E+08 1.802E+08 2.047E+08

ADS ON SOIL

1.400E+10 1.383E+10 1.365E+10 1.346E+10 1.325E+10 1.304E+10 1.287E+10 1.275E+10 1.262E+10 1.251E+10 1.237E+10 1.223E+10

IN SOIL AIR

9.559E+07 9.713E+07 8.438E+07 1.032E+08 1.036E+08 1.015E+08 8.137E+07 8.594E+07 8.233E+07 8.673E+07 9.072E+07 8.118E+07

SOIL ZONE 3:

SUBLAYER 1

IN SOIL MOI

1.580E+09 1.511E+09 1.751E+09 1.362E+09 1.314E+09 1.328E+09 1.705E+09 1.589E+09 1.662E+09 1.533E+09 1.411E+09 1.617E+09

ADS ON SOIL

9.772E+10 9.772E+10 9.728E+10 9.746E+10 9.743E+10 9.737E+10 9.692E+10 9.694E+10 9.676E+10 9.681E+10 9.687E+10 9.664E+10

IN SOIL AIR

6.670E+08 6.861E+08 6.016E+08 7.472E+08 7.620E+08 7.576E+08 6.127E+08 6.533E+08 6.310E+08 6.713E+08 7.104E+08 6.412E+08

LOWER SOIL ZONE:  
 SUBLAYER 1

IN SOIL MOI

5.370E+07 5.312E+07 6.891E+07 5.559E+07 5.546E+07 5.780E+07 7.963E+07 7.601E+07 8.265E+07 7.729E+07 7.211E+07 8.498E+07

ADS ON SOIL

3.321E+09 3.435E+09 3.829E+09 3.978E+09 4.112E+09 4.238E+09 4.528E+09 4.636E+09 4.811E+09 4.880E+09 4.949E+09 5.079E+09

IN SOIL AIR

2.267E+07 2.412E+07 2.368E+07 3.050E+07 3.216E+07 3.298E+07 2.862E+07 3.125E+07 3.138E+07 3.384E+07 3.630E+07 3.370E+07

POLLUTANT CONCENTRATIONS (UG/ML) OR (UG/G) -- NOTE: IF CONCENTRATIONS ARE ZERO FOR EACH MONTH, THEY ARE NOT PRINTED

-----

UPPER SOIL ZONE:  
 SUBLAYER 1

MOISTURE

3.772E-01 3.856E-01 3.854E-01 3.948E-01 4.037E-01 4.112E-01 4.104E-01 4.141E-01 4.165E-01 4.214E-01 4.271E-01 4.281E-01

%SOLUBILITY

2.482E-01 2.537E-01 2.536E-01 2.597E-01 2.656E-01 2.705E-01 2.700E-01 2.725E-01 2.740E-01 2.773E-01 2.810E-01 2.816E-01

ADSORBED

8.865E-01 9.062E-01 9.058E-01 9.278E-01 9.487E-01 9.663E-01 9.645E-01 9.733E-01 9.788E-01 9.904E-01 1.004E+00 1.006E+00

SOIL AIR

1.220E-01 1.241E-01 1.237E-01 1.299E-01 1.328E-01 1.354E-01 1.318E-01 1.337E-01 1.352E-01 1.363E-01 1.380E-01 1.383E-01

SOIL ZONE 2:  
 SUBLAYER 1

## MOISTURE

1.629E+00 1.609E+00 1.587E+00 1.566E+00 1.542E+00 1.517E+00 1.498E+00 1.483E+00 1.469E+00 1.455E+00 1.439E+00 1.423E+00

## %SOLUBILITY

1.072E+00 1.059E+00 1.044E+00 1.030E+00 1.014E+00 9.983E-01 9.852E-01 9.759E-01 9.662E-01 9.573E-01 9.468E-01 9.364E-01

## ADSORBED

3.828E+00 3.782E+00 3.730E+00 3.681E+00 3.623E+00 3.566E+00 3.519E+00 3.486E+00 3.451E+00 3.419E+00 3.382E+00 3.345E+00

## SOIL AIR

5.270E-01 5.181E-01 5.093E-01 5.154E-01 5.069E-01 4.995E-01 4.809E-01 4.789E-01 4.766E-01 4.707E-01 4.648E-01 4.597E-01

## SOIL ZONE 3:

## SUBLAYER 1

## MOISTURE

1.137E+01 1.137E+01 1.132E+01 1.134E+01 1.133E+01 1.133E+01 1.128E+01 1.128E+01 1.126E+01 1.126E+01 1.127E+01 1.124E+01

## %SOLUBILITY

7.479E+00 7.479E+00 7.445E+00 7.459E+00 7.457E+00 7.452E+00 7.418E+00 7.419E+00 7.405E+00 7.410E+00 7.414E+00 7.396E+00

## ADSORBED

2.671E+01 2.671E+01 2.659E+01 2.664E+01 2.664E+01 2.662E+01 2.650E+01 2.650E+01 2.645E+01 2.647E+01 2.648E+01 2.642E+01

## SOIL AIR

3.678E+00 3.660E+00 3.631E+00 3.731E+00 3.727E+00 3.729E+00 3.621E+00 3.641E+00 3.653E+00 3.643E+00 3.640E+00 3.631E+00

## LOWER SOIL ZONE:

## SUBLAYER 1

## MOISTURE

1.159E+00 1.199E+00 1.336E+00 1.388E+00 1.435E+00 1.479E+00 1.580E+00 1.618E+00 1.679E+00 1.703E+00 1.727E+00 1.773E+00

## %SOLUBILITY

7.624E-01 7.886E-01 8.791E-01 9.134E-01 9.440E-01 9.731E-01 1.040E+00 1.064E+00 1.105E+00 1.120E+00 1.136E+00 1.166E+00

ADSORBED

2.723E+00 2.817E+00 3.140E+00 3.263E+00 3.372E+00 3.476E+00 3.713E+00 3.802E+00 3.946E+00 4.002E+00 4.059E+00 4.166E+00

SOIL AIR

3.749E-01 3.859E-01 4.287E-01 4.569E-01 4.719E-01 4.869E-01 5.074E-01 5.223E-01 5.449E-01 5.509E-01 5.580E-01 5.726E-01

POL DEP CM

4.265E+02 4.265E+02 4.270E+02 4.270E+02 4.270E+02 4.270E+02 4.274E+02 4.275E+02 4.277E+02 4.277E+02 4.277E+02 4.278E+02

YEAR - 2 ANNUAL SUMMARY REPORT

=====

-- TOTAL INPUTS (UG) --

UPPER SOIL ZONE	0.000E+00
SOIL ZONE 2	0.000E+00
SOIL ZONE 3	0.000E+00
LOWER SOIL ZONE	0.000E+00

-- HYDROLOGIC CYCLE COMPONENTS --

AVERAGE SOIL MOISTURE ZONE 1 (%)	10.143
AVERAGE SOIL MOISTURE BELOW ZONE 1 (%)	10.143
TOTAL PRECIPITATION (CM)	117.108
TOTAL INFILTRATION (CM)	117.107
TOTAL EVAPOTRANSPIRATION (CM)	119.776
TOTAL SURFACE RUNOFF (CM)	0.000
TOTAL GRW RUNOFF (CM)	-2.669
TOTAL MOISTURE RETENTION (CM)	0.000
TOTAL YIELD (CM)	-2.668

POLLUTANT MASS DISTRIBUTION IN COLUMN (UG) -- NOTE: IF COMPONENT IS ZERO EACH MONTH, IT IS NOT PRINTED FOR FINAL MASS IN SOIL MOI., ADS. ON SOIL, SOIL AIR, IMMOBIL CEC, COMPLEXED, AND PURE PHASE FOR EACH SUBLAYER, SEE ABOVE (MONTH SEP)

UPPER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1  
TOTAL VOLATILIZED 8.162E+08

SOIL ZONE 2:  
SUBLAYER 1  
TOTAL DIFFUSED (UP) 1.516E+09

SOIL ZONE 3:  
SUBLAYER 1

LOWER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1

-- AVERAGE POLLUTANT CONCENTRATIONS -- NOTE: ONLY NON-ZERO VALUES ARE PRINTED --  
-----

UPPER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1  
  
SOIL MOISTURE (UG/ML) 4.063E-01  
ADSORBED SOIL (UG/G) 9.548E-01  
SOIL AIR (UG/ML) 1.318E-01

SOIL ZONE 2:  
SUBLAYER 1  
  
SOIL MOISTURE (UG/ML) 1.518E+00  
ADSORBED SOIL (UG/G) 3.568E+00  
SOIL AIR (UG/ML) 4.923E-01

SOIL ZONE 3:  
SUBLAYER 1

SOIL MOISTURE (UG/ML) 1.130E+01  
ADSORBED SOIL (UG/G) 2.656E+01  
SOIL AIR (UG/ML) 3.665E+00

LOWER SOIL ZONE:  
SUBLAYER 1

SOIL MOISTURE (UG/ML) 1.506E+00  
ADSORBED SOIL (UG/G) 3.540E+00  
SOIL AIR (UG/ML) 4.884E-01

MAX. POLL. DEPTH (M) 4.278E+00

\*\*\*\*\*EXECUTION COMPLETED\*\*\*\*\*



## APÊNDICE C – Modelo AT123D - Tolueno

NO. OF POINTS IN X-DIRECTION .....	4
NO. OF POINTS IN Y-DIRECTION .....	4
NO. OF POINTS IN Z-DIRECTION .....	3
NO. OF ROOTS: NO. OF SERIES TERMS .....	400
NO. OF BEGINNING TIME STEP .....	13
NO. OF ENDING TIME STEP .....	25
NO. OF TIME INTERVALS FOR PRINTED OUT SOLUTION ....	12
INSTANTANEOUS SOURCE CONTROL = 0 FOR INSTANT SOURCE	1
SOURCE CONDITION CONTROL = 0 FOR STEADY SOURCE ....	24
INTERMITTENT OUTPUT CONTROL = 0 NO SUCH OUTPUT ....	1
CASE CONTROL =1 THERMAL, = 2 FOR CHEMICAL, = 3 RAD	2
AQUIFER DEPTH, = 0.0 FOR INFINITE DEEP (METERS) ...	0.0000E+00
AQUIFER WIDTH, = 0.0 FOR INFINITE WIDE (METERS) ...	0.0000E+00
BEGIN POINT OF X-SOURCE LOCATION (METERS) .....	-0.1492E+02
END POINT OF X-SOURCE LOCATION (METERS) .....	0.1492E+02
BEGIN POINT OF Y-SOURCE LOCATION (METERS) .....	-0.1492E+02
END POINT OF Y-SOURCE LOCATION (METERS) .....	0.1492E+02
BEGIN POINT OF Z-SOURCE LOCATION (METERS) .....	0.0000E+00
END POINT OF Z-SOURCE LOCATION (METERS) .....	0.0000E+00
POROSITY .....	0.2400E+00
HYDRAULIC CONDUCTIVITY (METER/HOUR) .....	0.5292E-02
HYDRAULIC GRADIENT .....	0.7850E-01
LONGITUDINAL DISPERSIVITY (METER) .....	0.2000E+03
LATERAL DISPERSIVITY (METER) .....	0.1000E+03
VERTICAL DISPERSIVITY (METER) .....	0.1000E+02
DISTRIBUTION COEFFICIENT, KD (M**3/KG) .....	0.2350E-02
HEAT EXCHANGE COEFFICIENT (KCAL/HR-M**2-DEGREE C)..	0.0000E+00
MOLECULAR DIFFUSION MULTIPLY BY POROSITY (M**2/HR)	0.0000E+00
DECAY CONSTANT (PER HOUR) .....	0.0000E+00

BULK DENSITY OF THE SOIL (KG/M\*\*3) ..... 0.2740E+04  
 ACCURACY TOLERANCE FOR REACHING STEADY STATE ..... 0.1000E-02  
 DENSITY OF WATER (KG/M\*\*3) ..... 0.1000E+04  
 TIME INTERVAL SIZE FOR THE DESIRED SOLUTION (HR) .. 0.7300E+03  
 DISCHARGE TIME (HR) ..... 0.1752E+05  
 WASTE RELEASE RATE (KCAL/HR), (KG/HR), OR (CI/HR) . 0.0000E+00

LIST OF TRANSIENT SOURCE RELEASE RATE

0.128E-07	0.128E-07	0.128E-07	0.128E-07	0.128E-07	0.128E-07	0.128E-07	0.128E-07	0.128E-07	0.128E-07
0.128E-07	0.128E-07	0.107E-07	0.107E-07	0.107E-07	0.107E-07	0.107E-07	0.107E-07	0.107E-07	0.107E-07
0.107E-07	0.107E-07	0.107E-07	0.107E-07						

RETARDATION FACTOR ..... 0.2783E+02  
 RETARDED DARCY VELOCITY (M/HR) ..... 0.6220E-04  
 RETARDED LONGITUDINAL DISPERSION COEF. (M\*\*2/HR) .. 0.1244E-01  
 RETARDED LATERAL DISPERSION COEFFICIENT (M\*\*2/HR) . 0.6220E-02  
 RETARDED VERTICAL DISPERSION COEFFICIENT (M\*\*2/HR). 0.6220E-03

DISTRIBUTION OF DISSOLVED CHEMICALS IN PPM AT 0.0000E+00 HRS  
 (ADSORBED CHEMICAL CONC. = 0.2350E+01 \* DISSOLVED CHEMICAL CONC.)

		Z =	0.00		
				X	
Y	-100.	-15.	15.	100.	
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
-15.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	

Z = 1.00

Y	-100.	-15.	15.	100.	X
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
-15.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	

Z = 2.00

Y	-100.	-15.	15.	100.	X
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
-15.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	

DISTRIBUTION OF DISSOLVED CHEMICALS IN PPM AT 0.8760E+04 HRS  
 (ADSORBED CHEMICAL CONC. = 0.2350E+01 \* DISSOLVED CHEMICAL CONC.)

Z = 0.00

Y	-100.	-15.	15.	100.	X
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.000E+00	0.178E-05	0.184E-05	0.000E+00	
-15.	0.000E+00	0.178E-05	0.184E-05	0.000E+00	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	

Z = 1.00

Y	-100.	-15.	15.	100.	X
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.000E+00	0.145E-05	0.150E-05	0.000E+00	
-15.	0.000E+00	0.145E-05	0.150E-05	0.000E+00	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	

Z = 2.00

Y	-100.	-15.	15.	100.	X
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.000E+00	0.913E-06	0.951E-06	0.000E+00	
-15.	0.000E+00	0.913E-06	0.951E-06	0.000E+00	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	

STEADY STATE SOLUTION HAS NOT BEEN REACHED BEFORE FINAL SIMULATING TIME

DISTRIBUTION OF DISSOLVED CHEMICALS IN PPM AT 0.1752E+05 HRS  
 (ADSORBED CHEMICAL CONC. = 0.2350E+01 \* DISSOLVED CHEMICAL CONC.)

Z = 0.00

Y	-100.	-15.	15.	100.	X
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.561E-11	0.229E-05	0.239E-05	0.879E-11	
-15.	0.561E-11	0.229E-05	0.239E-05	0.879E-11	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	

Z = 1.00

X

Y	-100.	-15.	15.	100.
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
15.	0.547E-11	0.199E-05	0.208E-05	0.857E-11
-15.	0.547E-11	0.199E-05	0.208E-05	0.857E-11
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00

Z = 2.00

X

Y	-100.	-15.	15.	100.
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
15.	0.507E-11	0.147E-05	0.154E-05	0.794E-11
-15.	0.507E-11	0.147E-05	0.154E-05	0.794E-11
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00

## APÊNDICE D – Modelo AT123D - Etilbenzeno

NO. OF POINTS IN X-DIRECTION .....	4
NO. OF POINTS IN Y-DIRECTION .....	4
NO. OF POINTS IN Z-DIRECTION .....	3
NO. OF ROOTS: NO. OF SERIES TERMS .....	400
NO. OF BEGINNING TIME STEP .....	13
NO. OF ENDING TIME STEP .....	25
NO. OF TIME INTERVALS FOR PRINTED OUT SOLUTION ....	12
INSTANTANEOUS SOURCE CONTROL = 0 FOR INSTANT SOURCE	1
SOURCE CONDITION CONTROL = 0 FOR STEADY SOURCE ....	24
INTERMITTENT OUTPUT CONTROL = 0 NO SUCH OUTPUT ....	1
CASE CONTROL =1 THERMAL, = 2 FOR CHEMICAL, = 3 RAD	2
AQUIFER DEPTH, = 0.0 FOR INFINITE DEEP (METERS) ...	0.0000E+00
AQUIFER WIDTH, = 0.0 FOR INFINITE WIDE (METERS) ...	0.0000E+00
BEGIN POINT OF X-SOURCE LOCATION (METERS) .....	-0.1492E+02
END POINT OF X-SOURCE LOCATION (METERS) .....	0.1492E+02
BEGIN POINT OF Y-SOURCE LOCATION (METERS) .....	-0.1492E+02
END POINT OF Y-SOURCE LOCATION (METERS) .....	0.1492E+02
BEGIN POINT OF Z-SOURCE LOCATION (METERS) .....	0.0000E+00
END POINT OF Z-SOURCE LOCATION (METERS) .....	0.0000E+00
POROSITY .....	0.2400E+00
HYDRAULIC CONDUCTIVITY (METER/HOUR) .....	0.5292E-02
HYDRAULIC GRADIENT .....	0.7850E-01
LONGITUDINAL DISPERSIVITY (METER) .....	0.2000E+03
LATERAL DISPERSIVITY (METER) .....	0.1000E+03
VERTICAL DISPERSIVITY (METER) .....	0.1000E+02
DISTRIBUTION COEFFICIENT, KD (M**3/KG) .....	0.2350E-02
HEAT EXCHANGE COEFFICIENT (KCAL/HR-M**2-DEGREE C)..	0.0000E+00

MOLECULAR DIFFUSION MULTIPLY BY POROSITY (M\*\*2/HR) 0.0000E+00  
 DECAY CONSTANT (PER HOUR) ..... 0.0000E+00  
 BULK DENSITY OF THE SOIL (KG/M\*\*3) ..... 0.2740E+04  
 ACCURACY TOLERANCE FOR REACHING STEADY STATE ..... 0.1000E-02  
 DENSITY OF WATER (KG/M\*\*3) ..... 0.1000E+04  
 TIME INTERVAL SIZE FOR THE DESIRED SOLUTION (HR) .. 0.7300E+03  
 DISCHARGE TIME (HR) ..... 0.1752E+05  
 WASTE RELEASE RATE (KCAL/HR), (KG/HR), OR (CI/HR) . 0.0000E+00

LIST OF TRANSIENT SOURCE RELEASE RATE

0.840E-09	0.840E-09	0.840E-09	0.840E-09	0.840E-09	0.840E-09	0.840E-09	0.840E-09	0.840E-09	0.840E-09
0.840E-09	0.840E-09	0.151E-08	0.151E-08	0.151E-08	0.151E-08	0.151E-08	0.151E-08	0.151E-08	0.151E-08
0.151E-08	0.151E-08	0.151E-08	0.151E-08						

RETARDATION FACTOR ..... 0.2783E+02  
 RETARDED DARCY VELOCITY (M/HR) ..... 0.6220E-04  
 RETARDED LONGITUDINAL DISPERSION COEF. (M\*\*2/HR) .. 0.1244E-01  
 RETARDED LATERAL DISPERSION COEFFICIENT (M\*\*2/HR) . 0.6220E-02  
 RETARDED VERTICAL DISPERSION COEFFICIENT (M\*\*2/HR). 0.6220E-03

DISTRIBUTION OF DISSOLVED CHEMICALS IN PPM AT 0.0000E+00 HRS  
 (ADSORBED CHEMICAL CONC. = 0.2350E+01 \* DISSOLVED CHEMICAL CONC.)

		Z = 0.00			
					X
Y	-100.	-15.	15.	100.	
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
-15.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	

Z = 1.00

Y	-100.	-15.	15.	100.	X
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
-15.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	

Z = 2.00

Y	-100.	-15.	15.	100.	X
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
-15.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	

DISTRIBUTION OF DISSOLVED CHEMICALS IN PPM AT 0.8760E+04 HRS  
 (ADSORBED CHEMICAL CONC. = 0.2350E+01 \* DISSOLVED CHEMICAL CONC.)

Z = 0.00

Y	-100.	-15.	15.	100.	X
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.000E+00	0.117E-06	0.121E-06	0.000E+00	
-15.	0.000E+00	0.117E-06	0.121E-06	0.000E+00	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	



Z = 1.00

Y	-100.	-15.	15.	100.	X
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.000E+00	0.951E-07	0.986E-07	0.000E+00	
-15.	0.000E+00	0.951E-07	0.986E-07	0.000E+00	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	

Z = 2.00

Y	-100.	-15.	15.	100.	X
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.000E+00	0.598E-07	0.623E-07	0.000E+00	
-15.	0.000E+00	0.598E-07	0.623E-07	0.000E+00	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	

STEADY STATE SOLUTION HAS NOT BEEN REACHED BEFORE FINAL SIMULATING TIME

DISTRIBUTION OF DISSOLVED CHEMICALS IN PPM AT 0.1752E+05 HRS  
(ADSORBED CHEMICAL CONC. = 0.2350E+01 \* DISSOLVED CHEMICAL CONC.)

Z = 0.00

Y	-100.	-15.	15.	100.	X
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	
15.	0.368E-12	0.264E-06	0.274E-06	0.576E-12	
-15.	0.368E-12	0.264E-06	0.274E-06	0.576E-12	
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	

Z = 1.00

X

Y	-100.	-15.	15.	100.
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
15.	0.358E-12	0.223E-06	0.233E-06	0.561E-12
-15.	0.358E-12	0.223E-06	0.233E-06	0.561E-12
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00

Z = 2.00

X

Y	-100.	-15.	15.	100.
100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
15.	0.332E-12	0.155E-06	0.162E-06	0.521E-12
-15.	0.332E-12	0.155E-06	0.162E-06	0.521E-12
-100.	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00