

Uso de programas de simulação de contaminação ambiental voltado ao ensino de química

Jefferson F. Pinto¹ (PQ), Glaucia M. F. Pinto² (PQ)* glauciamaria@puc-campinas.edu.br

¹ - Protimu – Produtos, Softwares e Serviços Ltda.; ² – Faculdade de Química, CEATEC, PUC-Campinas

Palavras Chave: Simulação computacional, contaminação ambiental.

Introdução

A modelagem, a simulação e a análise de sensibilidade tem tido uma crescente popularidade como uma técnica de excelente relação custo/benefício para a melhoria e o entendimento do desempenho de processos químicos e ambientais.

Modelagem é o processo no qual é criado, através de equações matemáticas, uma representação do sistema físico considerado. Esta representação matemática pode ser implementada como um programa de computador, e a execução deste programa corresponde a simulação do processo.

Os estudos ambientais envolvendo simulação computacional permitem avaliar quais os impactos ambientais causados pela movimentação de compostos químicos, podendo ser realizadas para um longo período de tempo e/ou condições ambientais extremas.

Neste trabalho foi utilizado o programa CHEMFLO-2000 para simular o movimento de água e compostos químicos para e dentro do solo, sendo útil para o gerenciamento, a utilização e a proteção dos recursos naturais. A facilidade de uso torna este *software* uma excelente ferramenta para o ensino da interação entre compostos químicos, água e solo. Foram utilizados exemplos para ilustrar os efeitos da movimentação de água e do coeficiente de partição no transporte de compostos químicos através do solo.

Resultados e Discussão

A figura 1 apresenta os perfis da movimentação de água e concentração de composto químico para um solo que não apresenta interação com o composto. Pode-se observar o teor mínimo de umidade do solo (0,20 v/v) e o perfil de distribuição do composto químico para um tempo de 6 horas, onde a frente de percolação atinge uma profundidade de 20 cm.

A figura 2 apresenta as diferenças nos perfis de concentração total e no fluxo de compostos químicos em função da diferença no coeficiente de partição. Pode-se observar que o aumento do coeficiente de partição causa a retenção do composto químico, retardando seu deslocamento para as camadas mais profundas.

Figura 1. Perfis de conteúdo de água (gráfico superior) e concentração de composto químico (gráfico inferior).

Unicamp, Campinas, SP, de 24 a 27 de julho de 2006.

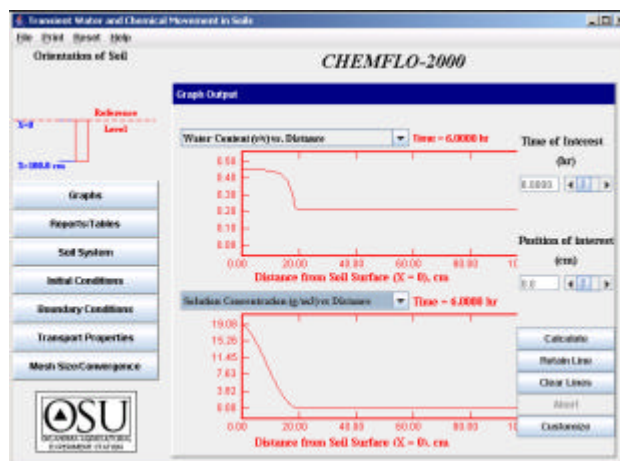
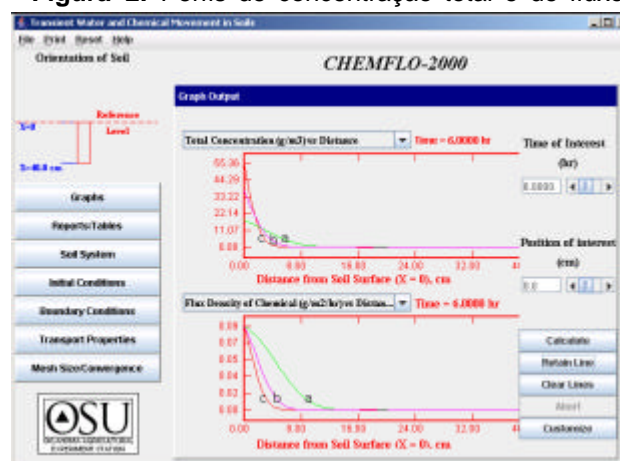


Figura 2. Perfis de concentração total e de fluxo



de composto químico para diferentes coeficientes de partição: a = 0,4; b = 1,6 e c = 3,2 m³/ton de solo.

Conclusões

A utilização do software CHEMFLO-2000 nos exemplos acima permite que o usuário observe, de forma rápida e intuitiva, o efeito de diferentes propriedades no movimento de água e de transporte de compostos químicos no solo.

Agradecimentos

PUC-Campinas.

<http://www.epa.gov/ada/csmos/models/chemflo2000.html>