

Trabalho de Conclusão de Curso

Curso de Graduação em Geologia

Simulação Estocástica Aplicada como Subsídio à Avaliação da Eficiência do Método de  
Remediação ISCO na Região Industrial de Cubatão/SP.

Igor Suzuki

Orientador: Prof. Dr. Chang Hung Kiang

Coorientador: Dr. Elias Hideo Teramoto

Rio Claro (SP)

2016

IGOR SUZUKI

SIMULAÇÃO ESTOCÁSTICA APLICADA COMO  
SUBSÍDIO À AVALIAÇÃO DA EFICIÊNCIA DE MÉTODOS  
DE REMEDIAÇÃO ISCO NA REGIÃO INDUSTRIAL DE  
CUBATÃO/SP.

Trabalho de Formatura apresentado ao  
Instituto de Geociências e Ciências  
Exatas - Câmpus de Rio Claro, da  
Universidade Estadual Paulista Júlio de  
Mesquita Filho, para obtenção do grau de  
Geólogo.

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Chang Hung Kiang(orientador)

Geólogo Dr. Marco Aurelio Zequim Pede

Geólogo Msc. Roger Dias Gonçalves

Rio Claro, 1 de Dezembro de 2016.

Assinatura do(a) aluno(a)

assinatura do(a) orientador(a)

550.028 Suzuki, Igor

S968s Simulação estocástica aplicada como subsídio à avaliação da eficiência do método de remediação ISCO na região industrial de Cubatão/SP / Igor Suzuki. - Rio Claro, 2016  
58 f. : il., figs., tabs.

Trabalho de conclusão de curso (Geologia) - Universidade Estadual Paulista, Instituto de Geociências e Ciências Exatas  
Orientador: Chang Hung Kiang  
Coorientador: Elias Hideo Teramoto

1. Geologia - métodos estatísticos. 2. Geoestatística. 3. Heterogeneidade. 4. Incertezas. I. Título.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço primeiramente meus orientadores Prof. Dr. Chang Hung Kiang e Dr. Elias Hideo Teramoto por todo auxílio dado durante a elaboração do trabalho. Agradeço também aos outros professores da graduação pelos anos de aprendizagem, aos meus familiares pelo suporte e compreensão durante esses anos e por último aos meus amigos socialmente inaptos da graduação.

## ÍNDICE

|                                                                                             |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| INTRODUÇÃO .....                                                                            | 10 |
| 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....                                                               | 12 |
| 2.1. Compostos de Fase Líquida Densa Não Aquosa (DNAPL) .....                               | 12 |
| 2.2. Remediação ISCO (In Situ Chemical Oxidation).....                                      | 12 |
| 2.3. Aproximações Estocásticas .....                                                        | 15 |
| 3. CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO .....                                                   | 20 |
| 3.1. Hidrologia .....                                                                       | 20 |
| 3.2 . Hidrogeologia local .....                                                             | 20 |
| 3.3. Geologia e Geomorfologia .....                                                         | 23 |
| 4. MATERIAIS E MÉTODOS.....                                                                 | 30 |
| 4.1. Revisão bibliográfica, Organização e Análise dos dados .....                           | 30 |
| 4.2. Simulações Sequenciais Gaussianas.....                                                 | 30 |
| 4.3. Simulação numérica do ISCO .....                                                       | 31 |
| 4.4. Análise da Eficiência do ISCO .....                                                    | 31 |
| 5. RESULTADOS .....                                                                         | 32 |
| 5.1. Análise de dados e Simulações Gaussianas Sequenciais Utilizando o Software SGeMS ..... | 32 |
| 5.2. Cenários de condutividade hidráulica gerados .....                                     | 35 |
| 5.3. Simulações de Fluxo e Transporte.....                                                  | 41 |
| 7 – DISCUSSÕES E CONCLUSÕES.....                                                            | 51 |
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....                                                            | 53 |

## ÍNDICE DE FIGURAS

|                                                                                                                                                                                                         |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 1- Figura de localização da área de estudo.....                                                                                                                                                  | 10 |
| Figura 2 - Figura Representação de remediação empregando ISCO (RAMSBURG et al., 2005).....                                                                                                              | 13 |
| Figura 3 - A) Distribuição de contaminante (DNAPL, TCE) em meio heterogêneo. B) Distribuição do DNAPL no meio 3 meses após a injeção de oxidante (permanganato de potássio) (CONRAD et al., 2002). .... | 14 |
| Figura 4 - Modelo de varredura para a coleta de pares de amostras (ISAAKS e SRIVASTAVA, 1989). ....                                                                                                     | 18 |
| Figura 5 - Variograma e parâmetros obtidos do mesmo (CORREIA, 2010). ....                                                                                                                               | 19 |
| Figura 6 - Distribuição das unidades aquíferas SAC E SASL na região de estudo (DAEE/IG/IPT/CPRM, 2005). ....                                                                                            | 22 |
| Figura 7 - Mapa Geológico Regional. (ALBERTO, 2010). ....                                                                                                                                               | 24 |
| Figura 8 - Litofácies arenosa apresentando granodecrescência ascendente (ALBERTO, 2010).....                                                                                                            | 26 |
| Figura 9 - Sedimento arenoso (litofácies arenosa) interdigitada com debris flow (ALBERTO, 2010). ....                                                                                                   | 27 |
| Figura 10 - Litofácies argilosa com abundância de matéria orgânica (ALBERTO, 2010). ....                                                                                                                | 28 |
| Figura 11 - Depósito de debris flow com seixos decimétricos em encosta da Serra do Mar (ALBERTO, 2010). ....                                                                                            | 29 |
| Figura 12 – Distribuição das sondagens SPT empregadas no presente estudo. ....                                                                                                                          | 32 |
| Figura 13 - Distribuição tridimensional dos valores de condutividade hidráulica baseado na descrição litológicas das sondagens SPT.....                                                                 | 34 |

|                                                                                                                    |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 14 -- Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 1. ....                           | 35 |
| Figura 15 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 2.....                             | 36 |
| Figura 16 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 3.....                             | 36 |
| Figura 17 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 4.....                             | 37 |
| Figura 18 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 5.....                             | 37 |
| Figura 19 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 6.....                             | 38 |
| Figura 20 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 7.....                             | 38 |
| Figura 21 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 8.....                             | 39 |
| Figura 22 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 9.....                             | 39 |
| Figura 23 - Histograma do cenário 1.....                                                                           | 40 |
| Figura 24 – Domínio do Modelo e Distribuição das Condições de Contorno de Primeiro Tipo.....                       | 42 |
| Figura 25 - Figura apresentando a área contaminada. ....                                                           | 43 |
| Figura 26 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 1..... | 44 |
| Figura 27 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 2..... | 45 |
| Figura 28 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 3..... | 45 |
| Figura 29 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 4..... | 46 |

|                                                                                                                    |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 30 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 5..... | 46 |
| Figura 31 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 6..... | 47 |
| Figura 32- Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 7.....  | 47 |
| Figura 33 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 8..... | 48 |
| Figura 34 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 9..... | 48 |
| Figura 35 - Histograma da porcentagem do volume contaminado atingido pelo oxidante (persulfato).....               | 50 |



## ÍNDICE DE TABELAS

|                                                                                            |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Tabela 1 -Características dos sistemas aquíferos presentes na UGRHI 7 (ALBERTO, 2010)..... | 20 |
| Tabela 2 - Relação das litologias consideradas e as suas condutividades hidráulicas. ..    | 33 |
| Tabela 3 - Volumes atingidos pelo persulfato. ....                                         | 49 |

## RESUMO

O presente trabalho busca avaliar a utilização de um método geoestatístico (estocástico) como avaliador da eficiência de sistemas de remediação in situ (através da injeção de oxidantes químicos, ISCO) em uma área marcada por forte heterogeneidade litológica, contaminada por DNAPL. Para o estudo foi escolhida uma área no município de Cubatão/SP, devido a forte heterogeneidade presente, que gera incertezas quanto ao método de remediação, e por ser um pólo químico e petroquímico, considerando-se uma contaminação hipotética na área, próxima ao rio Cubatão. Para a área foram discriminadas 5 litologias e atribuídos diferentes valores de condutividade hidráulica: argila, silte, *debris flow*, areia com finos e areia limpa. Com a finalidade de se diminuir tais incertezas, com base em informações obtidas de sondagens, foram realizadas simulações estocásticas do meio através do software SGeMS, obtendo-se 9 cenário distintos e equiprováveis. Com os resultados das simulações estocásticas foram realizadas simulações de fluxo com o software Visual MODFLOW e de transporte com o software MT3DMS, onde se pôde constatar uma baixa eficiência do método de remediação ISCO, atingindo em média apenas 41,4% do volume contaminada. Em geral, devido ao fato de proporcionar uma visão ampla das possibilidades, o uso do método estocástico para a avaliação de métodos de remediação ISCO pode ser avaliado positivamente.

**Palavras chave:** geoestatística; estocástico; heterogeneidade; incertezas; ISCO

## ABSTRACT

The presente work evaluates the use of geostatistical method (stochastic) as evaluator of the efficiency of the ISCO remediation systems in a geologically heterogeneous area contaminated by DNAPL. For the study was chosen an area of Cubatão city, because there is a strong heterogeneity there, which creates uncertainties towards the remediation method. Also because it is a chemical and petrochemical pole, considering a hypothetical contamination in the area, next to Cubatão river. In the area were discriminated 5 lithologies and attributed different hydraulic conductivity values: clay, silt, debris flow, impure sand and pure sand. With the purpose of reducing the uncertainties, stochastic simulations were performed using SGeMS software, based on drilling wells information, obtaining 9 different and equiprobable scenarios. With the stochastic simulation result flow simulations were performed using the software MODFLOW and transport also, performed using the software MT3DMS, it was possible to verify a low efficiency of the ISCO remediation method, reaching in average 41,4% of the contaminated area. In general it provides a broad view of the possibilities, the use of the stochastic method for the evaluation of ISCO remediation methods can be evaluated positively.

**Key words:** geostatistics; stochastic; heterogeneity; uncertainties; ISCO

## INTRODUÇÃO

O município de Cubatão/SP, localizado a 40 km da capital do estado de São Paulo (Figura 1), é considerado o maior pólo químico e petroquímico da América Latina. Sua industrialização se iniciou na década de 50, época em que não havia muita preocupação com questões ambientais, com as instalações e construções sendo realizadas sem se levar em consideração possíveis contaminações, tornando-as potencialmente nocivos ao meio ambiente. A forma indevida com que processos de produção ocorreram acarretou em grandes problemas ambientais no município, que chegou a ser considerado o mais poluído do mundo na década de 80.

Devido à presença do pólo industrial, o gerenciamento de áreas contaminadas demonstra grande importância para a região de Cubatão.

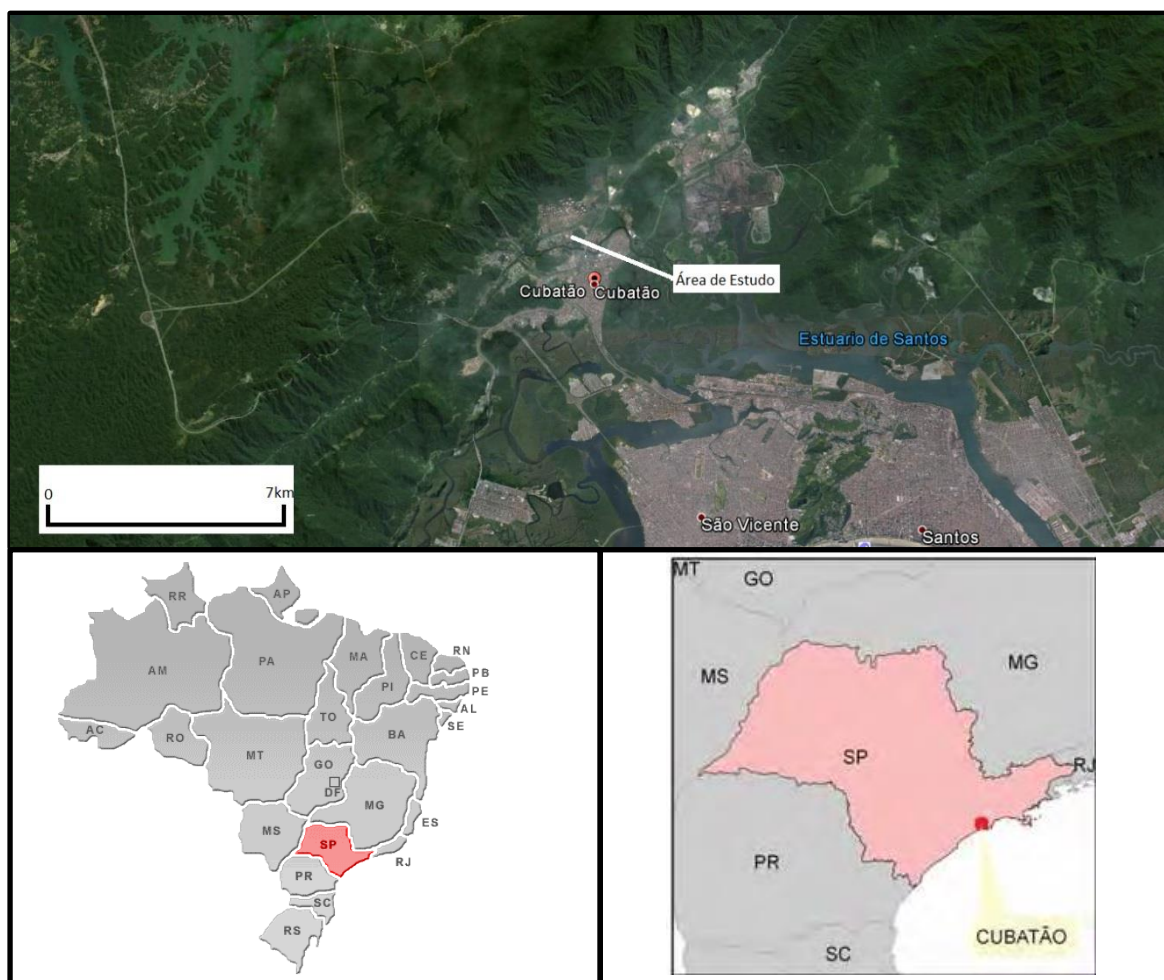


Figura 1- Figura de localização da área de estudo.

Segundo a CETESB (2001), o gerenciamento de áreas contaminadas, que objetiva minimizar riscos à população e ao meio ambiente, se constitui de dois processos: o processo de identificação de áreas contaminadas e o processo de recuperação de áreas contaminadas. O segundo tem por objetivo a adoção de medidas corretivas, processo que se constitui de seis etapas: investigação detalhada, avaliação de risco, investigação para remediação, projeto de remediação, remediação e monitoramento, sendo a modelagem matemática umas das etapas de investigação para a remediação.

Em estudos de investigação e remediação de áreas contaminadas deve-se atentar para o comportamento físico dos contaminantes que, dentre outros fatores, é condicionada à heterogeneidade litológica da área de interesse. A existência das citadas heterogeneidades é responsável pela existência de incertezas, que refletem na dificuldade de se planejar e dimensionar sistemas de remediação de áreas contaminadas. Diante do cenário aqui exposto, menciona-se que os sistemas de remediação possuem eficiência limitada por serem implantados apoiando-se na premissa de que a composição litológica do aquífero é homogênea e permeável.

O presente trabalho utiliza métodos geoestatísticos (estocásticos) para modelar heterogeneidades geológicas, prática que segundo Lee et al. (2007) tem se tornado cada vez mais comum, frequentemente utilizando-se o modelo gaussiano, baseado na suposição de que condutividade hidráulica, parâmetro utilizado para a modelagem, possui uma distribuição multivariada log-normal, sendo o trabalho de Bianchi et al. (2015) um exemplo recente da utilização do método para a modelagem de heterogeneidade.

Yamamoto (2008) afirma que os valores simulados reproduzem o modelo de covariância, resultando em imagens equiprováveis, ou seja, gera diferentes resultados (diferentes cenários) com base em um mesmo conjunto de dados, diminuindo as incertezas inerentes à heterogeneidade do meio. Porém, segundo Olea (1999), a simulação gaussiana sequencial, que é uma alternativa para eliminar o efeito de suavização, apresenta limitações, por esta não estar livre de erros, ou seja, as incertezas são reduzidas, mas não eliminadas.

Levando-se em conta o exposto acima, o presente trabalho tem por objetivo avaliar a utilização de métodos estocásticos como ferramentas para avaliar a eficiência dos sistemas de remediação de oxidação química *in situ* (ISCO) de áreas contaminadas por DNAPL em uma área caracterizada por forte heterogeneidade geológica.

## **2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA**

### **2.1. Compostos de Fase Líquida Densa Não Aquosa (DNAPL)**

DNAPLs (dense non-aqueous phase liquid) são substâncias químicas que possuem a densidade superior a da água. Devido a tais características os DNAPLs podem migrar para profundidades maiores, movendo-se através de solos e água subterrânea até atingir uma camada de baixa permeabilidade.

Segundo Cohen & Mercer (1993) os principais tipos de DNAPLs são os solventes halogenados, creosoto e óleos PCBs (bifenil policlorados), já a ITRC (2002) cita como mais comuns os solventes clorados, como o tricloroetileno (TCE), o tetracloroetileno (PCE) e o tetracloreto de carbono ( $\text{CCl}_4$ ). Os PCEs e os TCEs tem sido utilizados em lavagem a seco e como solventes em diversos processos industriais e comerciais, também são comumente empregados em produtos de limpeza como removedores de manchas.

### **2.2. Remediação ISCO (In Situ Chemical Oxidation)**

A técnica de remediação de oxidação de contaminante *in situ* (ISCO) é uma tecnologia de remediação *in situ*, que visa remover contaminantes sem remover o solo em si, baseando-se na injeção de oxidantes químicos como peróxido de hidrogênio, permanganato de potássio, persulfato ou ozônio. A injeção destes agentes químicos visa

a ocorrência de reações de óxido-redução entre os compostos oxidantes injetados e o contaminante presente, com a geração de subprodutos neutros e de baixo grau de toxicidade, sendo este um método eficiente de destruir compostos organoclorados (SCIULLI, 2008). O ISCO possui como vantagens a relativa rapidez na aplicação do método e a possibilidade de se utilizar processos complementares como o de redução (ISCR, *in situ chemical reduction*), e uma desvantagem seria a dependência do contato entre o oxidante e o contaminante, que face à heterogeneidade, torna-se um empecilho a uma maior eficiência do método.

Na Figura 2 apresenta-se esquematicamente de forma simplista a remediação por oxidação *in situ*.

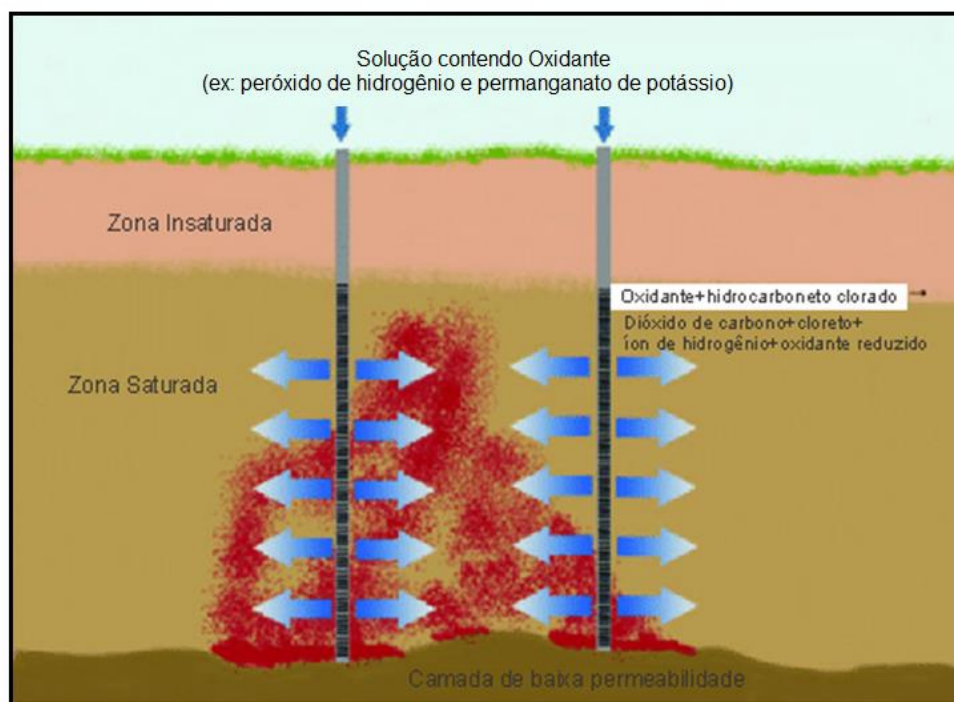
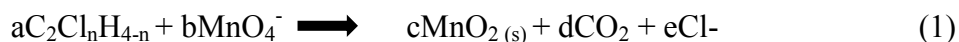


Figura 2 - Figura Representação de remediação empregando ISCO (RAMSBURG et al., 2005).

Em estudos realizados sobre remediação de solo utilizando persulfato e peróxido de hidrogênio, Fernandes & Filho (2014) verificaram uma grande eficiência deste método de remediação em solo arenoso contaminado com diesel, com a mineralização de 90% do carbono em menos de um dia. O oxidante mais utilizado em tratamento de águas e efluentes ao longo da história é o permanganato (potássio e sódio), cujas soluções se mostram eficientes na destruição de DNAPLs contendo os solventes tetracloreto e tricloroeteno. Na Equação 1 é apresentada a reação de oxidação de

tetracloroeteno (TCE) e seus produtos de degradação natural (tricloroeteno, dicloroeteno e cloreto de vinila) por permanganato, onde, segundo Yan et al. (1999), o permanganato destrói a ligação presente nos eteno clorados e gera dióxido de manganês, dióxido de carbono e cloro como produtos:



A fórmula  $aC_2Cl_nH_{4-n}$  representa os eteno clorados e seus produtos de degradação natural. Na reação observa-se que produto da mesma é neutro, não apresentando grau de periculosidade à saúde humana.

A heterogeneidade geológica influencia de forma bastante significativa a eficiência do método, possuindo taxas de remoção superiores a 95% em aquíferos homogêneos (BROWN et al., 1999). Em aquíferos heterogêneos a remediação empregando a técnica do ISCO é incompleta ou ineficiente (CONRAD et al., 2002).

A figura 3 ilustra o resultado dos experimentos conduzidos por Conrad et al. (2002), mostrando a influência da heterogeneidade do meio na eficiência do método de remediação por oxidação in situ.

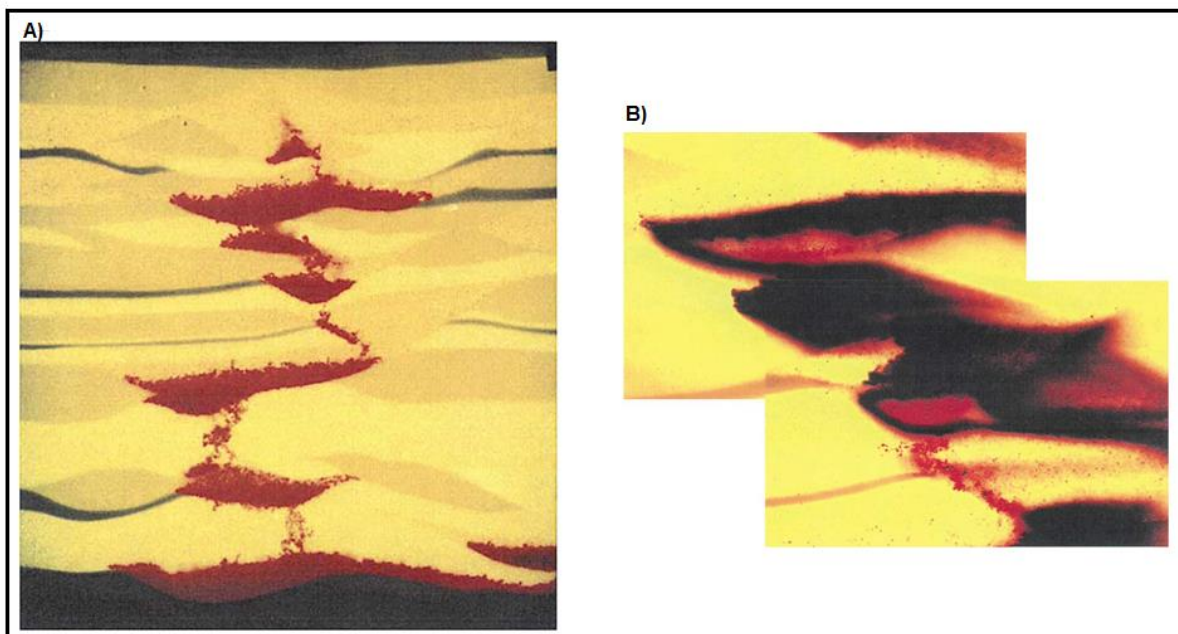


Figura 3 - A) Distribuição de contaminante (DNAPL, TCE) em meio heterogêneo. B) Distribuição do DNAPL no meio 3 meses após a injeção de oxidante (permanganato de potássio) (CONRAD et al., 2002).



Na Figura 3A é notável o controle da heterogeneidade litológica sobre a distribuição do contaminante no meio, com a formação de lentes do contaminante. Na Figura 3 B, representativa do meio após três meses após uma remediação por oxidação, a porção mais escura é a oxidada e a mais clara, o contaminante que não reagiu. A oxidação incompleta observada no experimento comprova a menor eficiência do método em meio litologicamente heterogêneo.

### 2.3. Aproximações Estocásticas

Os modelos determinísticos produzem somente um resultado de uma simulação feita segundo uma base de dados e os mesmos parâmetros. Os modelos estocásticos utilizam variáveis aleatórias e geram diferentes resultados de um mesmo banco de dados e parâmetros. O fato de apresentar diversos resultados tende a diminuir as incertezas presentes, porém, não as elimina.

Considerando a distribuição no campo  $A$  de um ou mais atributos  $z(u)$ ,  $u \in A$ . A simulação estocástica é o processo de construção de modelos alternativos, igualmente prováveis, de alta resolução da distribuição espacial de  $z(u)$ . Cada realização é denotada com o sobrescrito  $l$ :  $\{z^{(l)}(u) \mid u \in A\}$ . A simulação é classificada como "condicional" quando as realizações resultantes honrarem valores de dados existentes em suas localizações (DEUTSCH & JOURNEL, 1992).

$$z^{(l)}(u_\alpha) = z(u_\alpha), \forall l \quad (2)$$

Na maioria dos algoritmos de interpolação, incluindo a krigagem, o objetivo é fornecer a melhor estimativa local, portanto única, da variável ou de qualquer de suas componentes de tendência, sem considerar especificamente as estatísticas espaciais resultantes das estimativas tomadas em conjunto. Na simulação, a reprodução de características globais e estatísticas (histograma, covariância) toma o procedimento sobre a precisão local. A krigagem fornece um conjunto de representações locais, digamos  $z^*(u)$ ,  $u \in A$ , onde predomina a precisão local. A simulação fornece

representações globais alternativas,  $z(l)(u)$ ,  $u \in A$ , onde predomina a reprodução de padrões de continuidade espacial.

Exceto se um modelo gaussiano para erros é assumido, a krigagem fornece apenas uma medida incompleta de precisão e nenhuma apreciação da precisão conjunta quando vários locais são considerados juntos. Simulações são projetadas especificamente para fornecer tais medidas de precisão, tanto local e envolvendo vários locais. Estas medidas são dadas pelas diferenças entre  $l$  valores simulados alternativos em qualquer local.

### 2.3.1. Simulação Gaussiana Sequencial

A simulação gaussiana sequencial é a aplicação do procedimento de simulação sequencial para funções aleatórias multigaussianas (GOOVAERTS, 1997).

Segundo Olea (1999), a simulação gaussiana sequencial objetiva reproduzir propriedades da distribuição multivariada gaussiana de uma população amostral nas estimativas por meio do uso de funções que descrevem a distribuição probabilística de uma determinada variável aleatória. É utilizada como uma alternativa para se eliminar o efeito de suavização, porém, apresenta erros, um deles a menor representação dos valores simulados em relação a valores reais, devido ao fato dos valores reproduzirem o modelo de covariância. As simulações gaussianas sequenciais resultam em imagens equiprováveis, representando a variabilidade espacial dos dados (YAMAMOTO, 2008).

Segundo Goovaerts (1998), uma distribuição multivariada de  $N$  pontos pode ser desmembrada em um conjunto de  $N$  funções de distribuição acumulada (CDFs), matematicamente escrita da seguinte forma:

$$F(x_1, x_2, \dots, x_N; t_1, t_2, \dots, t_N|n) = F(x_1; t_1|n) F(x_2; t_2|n+1) \dots F(x_N; t_N|n+N-1)$$

Onde são geradas  $N$  funções levando em consideração o conjunto de valores originais. É tal decomposição da distribuição que possibilita a geração de uma imagem a partir de cada nó sequencialmente.

Considerando a simulação de  $N$  variáveis aleatórias definidas em  $N$  localidades  $x_j$  de um conjunto  $Z(x_j)$ , uma simulação gaussiana sequencial é obtida da seguinte forma (GOOVAERTS, 1997):

- A distribuição da variável  $Z(x)$  é transformada para uma distribuição normal por meio de  $Y(x)=\phi(Z(x))$ , sendo  $\phi$  a função de transformação para a distribuição normal, com média nula,  $E[Y(x)]=0$ , e variância unitária,  $\text{Var}[Y(x)]=1$ . Após a transformação o variograma da variável transformada  $Y(x)$  é calculado e obtém-se o modelo de correlação espacial  $\gamma_Y(h)$ , que posteriormente é utilizado na simulação.
- No processo seguinte a simulação sequencial é feita para a variável  $Y(x)$ , onde se define um caminho para a sequência de simulação dos nós da malha. Procede-se ao nó  $(x_0)$  da sequência para o qual são escolhidos  $(n)$  pontos de dados mais próximos. Após isso, estima-se em  $(x_0)$ , por krigagem, em que valor estimado  $y^*_{KS}(x_0)=\sum_{i=1}^n \lambda_i y(x_i)$  será a média condicional e a variância de krigagem  $\sigma^2_{KS}(x_0)=C(0) - \sum_{i=1}^n \lambda_i C(x_i-x_0)$ , a variância condicional, que definem a função de distribuição acumulada condicional (FDAC).
- Após a definição da FDAC em  $(x_0)$ , o valor  $y^1(x_0)$  é extraído aleatoriamente. O valor é adicionado ao conjunto de pontos de dados. O algoritmo é repetido para outro nó, definido pelo caminho aleatório, assim sucessivamente, simulando todos os nós da malha.
- Ao final da simulação gaussiana sequencial, os valores simulados, que possuem uma distribuição gaussiana, devem ser transformados para a escala original da variável:  $z^1(x_i)=\phi^{-1}(y^1(x_i))$ ,  $i=1, N$

Os modelos estocásticos gaussianos, assim como a Krigagem, se baseia na estruturação espacial fornecida pelos Variogramas. Segundo Correia (2010) variograma é uma função que nos dá uma medida da continuidade espacial de um parâmetro, medindo a variação do valor de uma variável em relação ao restante da amostragem.

No processo para a elaboração do variograma os pontos amostrais, separados por uma distância  $h$ , que varia segundo a malha amostral, são analisados considerando-se o ângulo de varredura (ou tolerância angular) para agrupá-los. Quando o ângulo de varredura não é considerado o variograma é denominado omnidirecional, quando possui um ângulo de varredura ele é denominado direcional. A figura 2.3 apresenta esquematicamente dois pontos separados por uma distância ( $h$ ) de 5m com um ângulo de 20°.

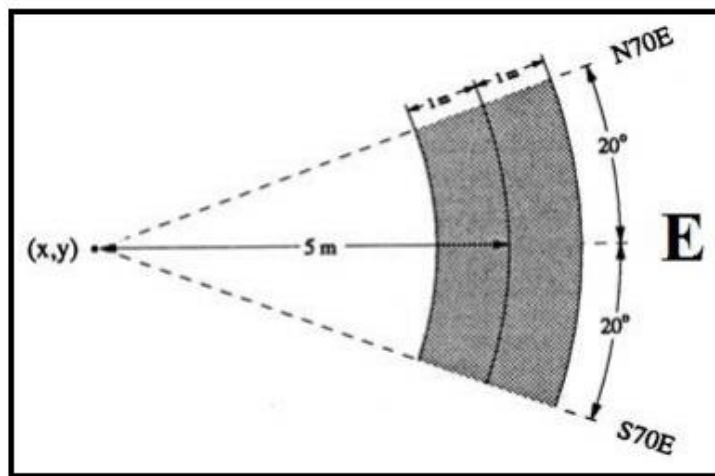


Figura 4 - Modelo de varredura para a coleta de pares de amostras (ISAACS e SRIVASTAVA, 1989).

A Equação 3 apresenta o cálculo da semivariância em função distância, empregado para a construção do semivariograma.

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{\alpha=1}^{N(h)} [Z(x_{\alpha}) - Z(x_{\alpha} + h)]^2 \quad (3)$$

Onde  $h$  é a distância em que se pretende estimar o valor,  $N(h)$  é o número de pares de pontos para cada valor de  $h$ ,  $x$  corresponde as coordenadas da posição  $\alpha$  e  $Z(x_{\alpha})$  o valor atribuído à localização.

Para estimar o valor é necessário impor uma função ou modelo que melhor se ajuste aos pontos do variograma. Os modelos mais utilizados são: esférico, exponencial e o gaussiano.

Com os modelos ajustados, é possível a obtenção de parâmetros, utilizados nas simulações. A figura 2.4 mostra os parâmetros obtidos a partir de um modelo ajustado a um variograma.

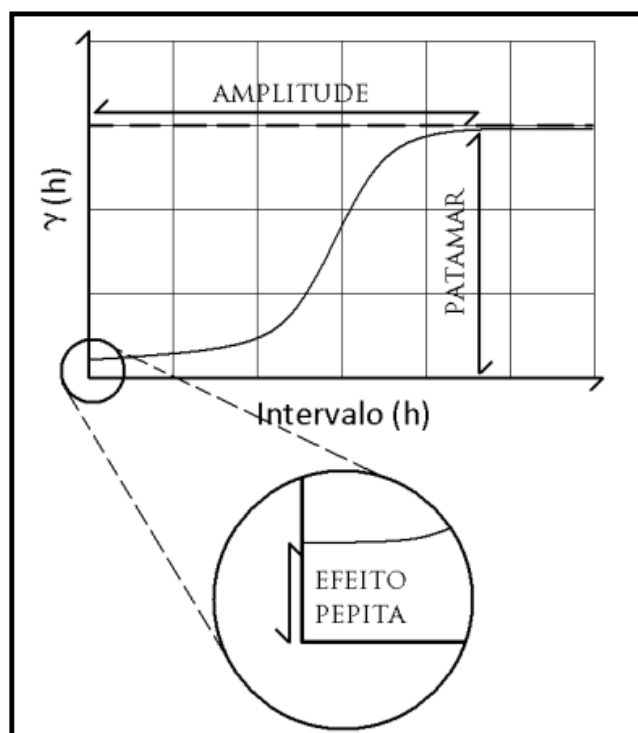


Figura 5 - Variograma e parâmetros obtidos do mesmo (CORREIA, 2010).

Patamar (*sill*): segundo Yamamoto & Landim (2013), é representado pela soma do efeito pepita e da variância espacial, ou a distância segundo a qual  $\gamma(h)$  atinge um certo nível.

Amplitude (*range*): distância da origem ao ponto onde o modelo toca o patamar.

Efeito pepita (*nugget effect*): o efeito pepita (variância aleatória) reflete a incerteza. Ao extrapolarmos a curva ajustada para uma amplitude zero, a curva pode não apresentar um valor nulo de semi-variância, este valor não nulo se denomina efeito pepita (ou *nugget effect*).

### 3. CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO

#### 3.1. Hidrologia

A área de estudo se localiza na Bacia Hidrográfica do Rio Cubatão, localmente instalada na Bacia Hidrográfica do Rio Pilões, que apresenta um formato irregular, alongado na direção NE-SW. Rodrigues (1992) afirma que as drenagens do local são estruturalmente controladas por antigos lineamentos, que as fazem assumir um padrão dendrítico-retangular, ortogonal aos taludes da serra. Na figura 3.1 é apresentado o sistema hidrográfico da região. Os principais tributários do Rio Cubatão são os rios Cubatão de Cima, Passareúva, Pilões, Perequê e Mogi, tendo o complexo hidrográfico, como desembocadura, o Complexo Estuarino de Santos-São Vicente.

Na região do presente estudo, o Rio Cubatão possui um alto gradiente hidráulico aproximado de 46 m/km, o que resulta em um curso de característica torrencial durante e imediatamente após eventos de alta precipitação, podendo diminuir em dez vezes sua vazão após a precipitação. Segundo Rodrigues (1992) o rio Cubatão possui uma vazão média de 7,4 m<sup>3</sup>/s.

#### 3.2 . Hidrogeologia local

A região estudada é dividida em dois sistemas hidrogeológicos cujas características são apresentadas na tabela 1: Sistema Aquífero Cristalino (SAC) e Sistema Aquífero Sedimentar Litorâneo (SASL) (CETEC, 2002).

Na Figura 6, do mapa hidrogeológico do estado de São Paulo está ilustrada a presença dos dois sistemas aquíferos citados.

Tabela 1 -Características dos sistemas aquíferos presentes na UGRHI 7 (ALBERTO, 2010).

| Sistema<br>Aquífero | Extensão | Espessura | Porosidade<br>Efetiva | Recarga  | Transmissividade      | Vazão<br>Específica   |
|---------------------|----------|-----------|-----------------------|----------|-----------------------|-----------------------|
|                     | (Km)     | (m)       | (%)                   | (mm/ano) | (m <sup>2</sup> /dia) | (m <sup>3</sup> /h/m) |
| Cristalino          | 1.588,0  | 50,0      | 3,0                   | 661,0    | 15,0                  | 3,77                  |
| Sedimentar          | 1.299,0  | 50,0      | 15,0                  | 661,0    | 205,0                 | 1,20                  |

O local de estudo esta inserido no contexto do Sistema Aquífero Sedimentar Litorâneo, que é distribuído irregularmente ao longo da costa paulista, segmentado por rochas do embasamento cristalino. É caracterizado por depósitos da Planície Litorânea, com larguras de até setenta quilômetros nas planícies do rio Ribeira de Iguape, com redução para nordeste, apresentando pequenos bolsões isolados de trezentos metros de extensão a partir de Santos, Itanhaém e Bertioga (DAEE/IG/IPT/CPRM, 2005).

Segundo Alberto (2010) o sistema é de porosidade granular, livre, de extensão limitada e transmissividade média a elevada com a presença de aquíferos lenticulares formados por camadas de areia intercaladas a camadas argilosas e siltosas.

Em investigações ambientais realizadas na área foram obtidos valores de condutividade hidráulica ( $k$ ) através de *slug tests*, interpretados pelo método Hvorslev (1951), para litologias dos sedimentos flúvio-costeiros, descritos no próximo capítulo. Os testes de condutividade hidráulica foram realizados em argila ( $2,2682 \times 10^{-6}$  cm/s), silte ( $3,72 \times 10^{-5}$  cm/s), *debris flow* ( $3,601 \times 10^{-4}$  cm/s), areia com finos ( $2,8033 \times 10^{-3}$ ) e areia limpa ( $1,98 \times 10^{-2}$  cm/s).

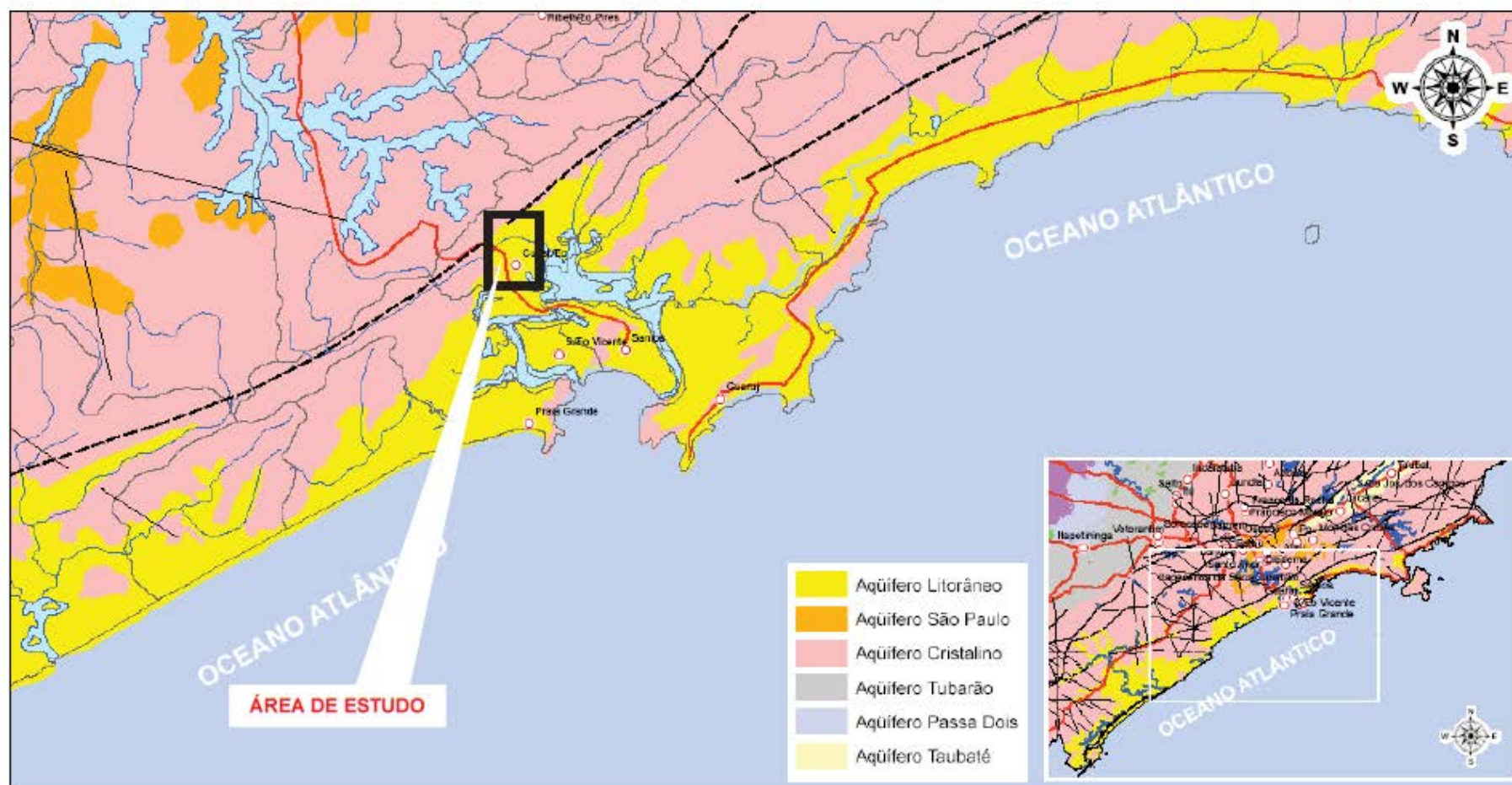


Figura 6 - Distribuição das unidades aquíferas SAC E SASL na região de estudo (DAEE/IG/IPT/CPRM, 2005).



### 3.3. Geologia e Geomorfologia

Na década de 1970 foram realizados diversos estudos e investigações geológico-geotécnicas na área devido à realização de várias obras de vias de acesso para o litoral, com destaque para os trabalhos de Sadowski (1974) e Hasui & Sadowski (1976) sobre a estratigrafia da Serra do Mar, de Fúlfaro & Suguio (1974) e Chang et al. (1992) para a caracterização geotectônica e de Coutinho (1971) de caracterização petrológica e mapeamento geológico. Nos anos de 1980 aos anos 2000 estudos sobre a evolução geológico-geomorfológica foram realizados por Cruz (1980), Riccomini (1987), Sadowski (1991) e Machado Filho (2000).

A área estudada localiza-se na Serra do Mar (Bloco São Paulo), mais precisamente na interface da Serra de Cubatão (denominação local) com a Planície Costeira, situada no contexto do “Sistema Rife do Leste Brasileiro” – SRLB (CHANG et al., 1992), que constitui o segmento setentrional do “Sistema Rift do Atlântico Sul” (RICCOMINI, 1987), formado durante o Mesozóico no processo de separação do Supercontinente Gondwana. Segundo Chang et al. (1992) o SRLB seria resultante de uma tectônica divergente (extensivo) que originou um sistema de horsts e grabens formando vales de subsidências de paredes paralelas, alongadas e íngremes com direção de lineamento predominante NE-NNE (N55-60E na Serra de Cubatão).

Na província geomorfológica da Serra do Mar (Domínio Serra do Mar), segundo Alberto (2010), predominam encostas íngremes com declividades médias, com picos de altitude máximos entre 750 e 770 metros. O autor também afirma que há uma predominância de relevos de escarpas festonadas com vertentes de perfil retilíneo, onde altas declividades e altas amplitudes predominam, alongando-se para a Planície Costeira e interdigitando-se com a mesma.

Quanto às unidades geológicas, segundo Hasui et al (1994), estão divididas em Embasamento Cristalino e por Sedimentos Terciários-Quaternários (figura 3.3).

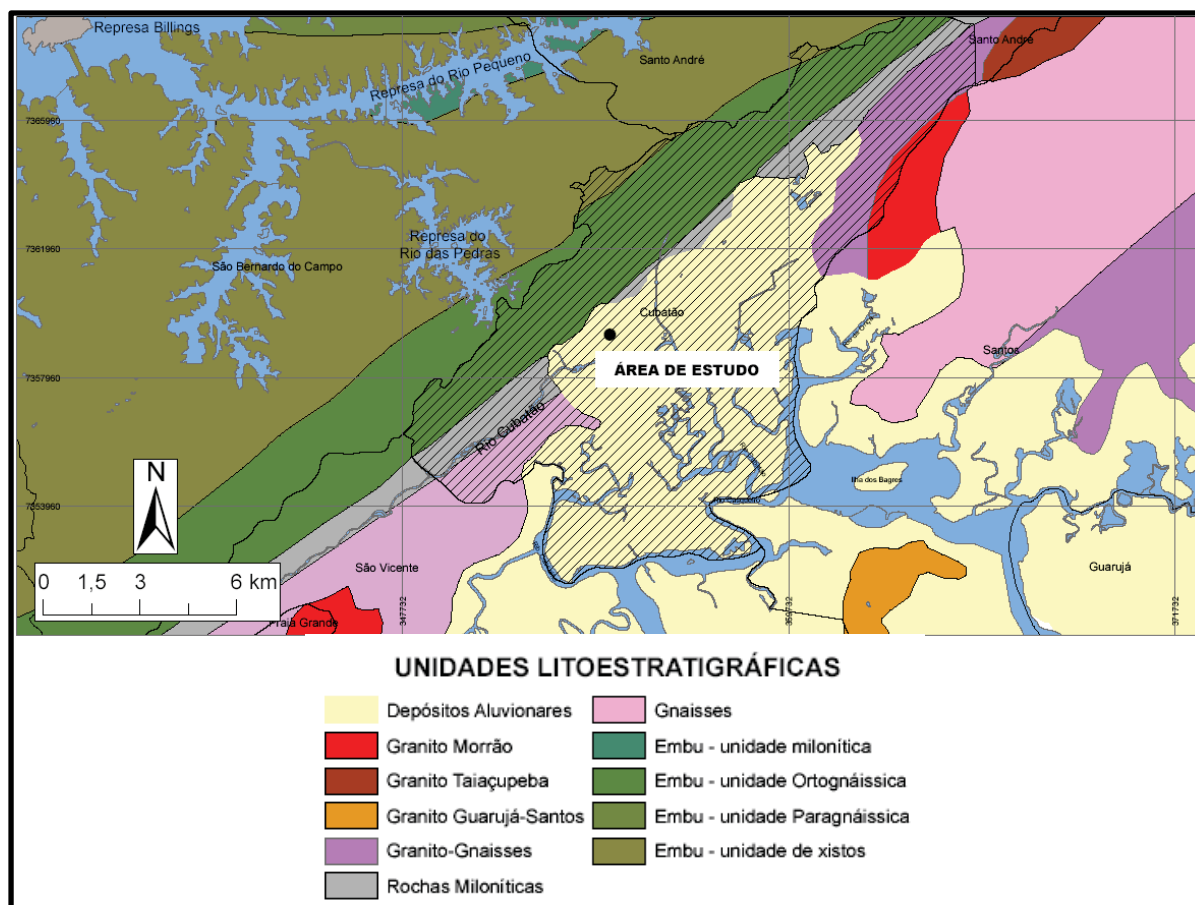


Figura 7 - Mapa Geológico Regional. (ALBERTO, 2010).

Segundo Hasui (1994), o Embasamento Cristalino é representado por dois conjuntos litológicos de idade pré-cambriana, o Complexo Piaçaguera, constituído de rochas metamórficas de alto grau, como gnaisses (diversos tipos) e rochas tonalíticas a graníticas (em parte migmatizadas), e o Grupo Paraibuna, formado por rochas metassedimentares como rochas cálcio-silicáticas, mármore, micaxistos, quartzitos e alguns corpos anfibolíticos ocorrendo sob forma de faixas e lentes intercaladas às rochas do Complexo Piaçaguera. Devido às características climáticas, o Embasamento Cristalino apresenta um manto de alteração espesso, sendo ele dividido em tálus, solo coluvionar, solo saprolítico e saprolito.

Os Sedimentos Fanerozoicos, segundo Alberto (2010), são representados por Sedimentos Cenozoicos pertencentes às formações Sete Barras e Pariquera-Açu, Sedimentos Quaternários das formações Morro de Icapara, Cananéia e Ilha Comprida e Sedimentos Aluvionares e Coluvionares e depósitos de movimentação de massa recentes, com o local sendo favorável a formação de debris flows.

O local de estudo apresenta elevada complexidade geológica, com características de zona de transição entre as encostas da Serra do Mar e a Planície Sedimentar. As encostas são sustentadas por rochas pré-cambrianas (migmatitos, gnaisses e xistos). Os sedimentos da Planície Costeira são formados basicamente por depósitos quaternários (ambiente marinho ou flúvio-lagunar) e por depósitos detríticos de encosta (rampas de colúvio e leques aluviais), que recobrem de modo irregular o sopé e a meia vertente, constituindo registros de movimentos de massa. Os depósitos detríticos ainda são sobrepostos por depósitos de mangues e aluviões atuais.

#### *Depósitos Sedimentares da Planície Costeira*

A Planície Costeira da Baixada Santista mostra depósitos sedimentares representantes da interação de ambientes continentais, marinhos e mistos, tendo sofrido grande influência das variações do nível eustático durante o Quaternário. Limitada nas suas extremidades pela Serra de Monguaguá (ao sul) e pela parte rochosa da Ilha de Santo Amaro (norte), possui uma extensão de 40 km e uma largura máxima de 15 km (SUGUIO & MARTIN, 1978).

Episódios transgressivos se relacionam a maior parte dos depósitos sedimentares das planícies costeiras, na Baixada Santista teriam ocorrido ao menos dois ciclos de sedimentação associados aos eventos.

Segundo Suguio & Martin (1978) os eventos transgressivos geraram dois tipos distintos de sedimentos. Um primeiro de idade Pleistocênica, depositado em ambiente misto apresentando texturas argilosas e arenosas na base e arenosas no topo, denominadas Areias Transgressivas. Um segundo, de idade Holocênica, assim como o primeiro, constituído por argilas e areias, apresentam conchas e fragmentos vegetais, depositados em feições como canais, lagunas, baías ou estuários. Além dos citados

sedimentos, ocorrem na área uma sedimentação mais recente como argilas e areias de mangues e aluviões, além de areias marinhas da faixa litorânea. A grande heterogeneidade apresentada nesses depósitos acaba por refletir em propriedades físicas e hidráulicas, como a condutividade hidráulica por exemplo.

Seguindo a divisão feita por Alberto (2010) as litologias foram separadas em dois grandes grupos, a serem descritos a seguir: Sedimentos Flúvio-Costeiros e Fluxo Detríticos (*Debris Flow*).

As fácies arenosas são representadas por sedimentos relacionados a diferentes processos deposicionais, o que reflete em uma variação textural do mesmo. Há uma predominância de areias finas a médias (pouco a muito siltosas), por vezes intercaladas com lentes de sedimentos mais finos (argila e silte), com a existência de perfis com granodecrescência ascendente (Figura 8). A litofácies arenosa possui uma espessura variável, pode ter alguns centímetros em alguns pontos e em outros pode superar 5 metros, estando interdigitada com lentes argilosas e com depósitos de fluxo de detritos (*debris flow*), como mostra a Figura 9.

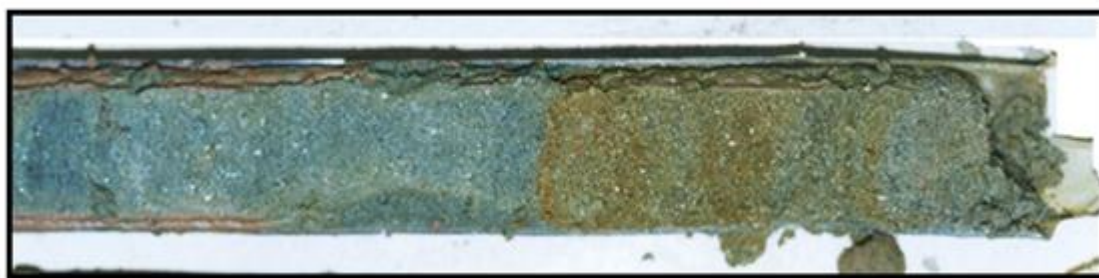


Figura 8 - Litofácies arenosa apresentando granodecrescência ascendente (ALBERTO, 2010).

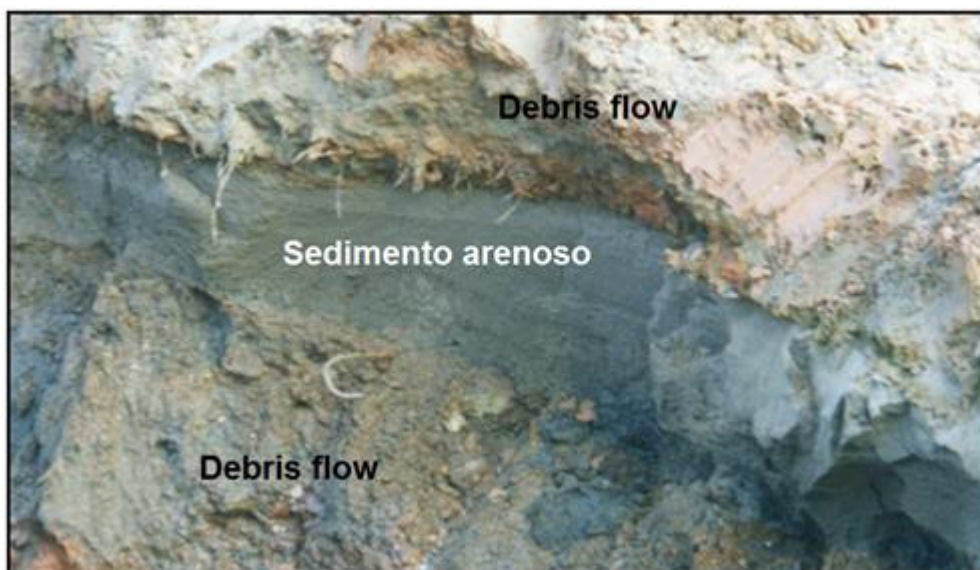


Figura 9 - Sedimento arenoso (litofácies arenosa) interdigitada com debris flow (ALBERTO, 2010).

Quanto à composição mineralógica dos sedimentos presentes nessas litofácies, além do quartzo, ocorre em uma grande quantidade de muscovita e albita (feldspato), o que denota um baixo grau de maturidade sedimentar, se assemelhando com a composição do produto da alteração do Embasamento Cristalino, o que permite concluir que a área-fonte está próxima aos locais de deposição.

As litofácies pelíticas são representadas por sedimentos siltosos e argilosos. As litofácies siltosas são constituídas por sedimentos silto-arenosos de coloração cinza, sendo provável representante de depósitos de planícies de inundação associados a sedimentos arenosos de canais. As litofácies argilosas representam sedimentos argilo-siltosos, silto-argilosos ou argilo-arenosos, possui coloração escura (cinza, preta ou esverdeada) e apresenta quantidades grandes de matéria orgânica e detritos vegetais (Figura 10).

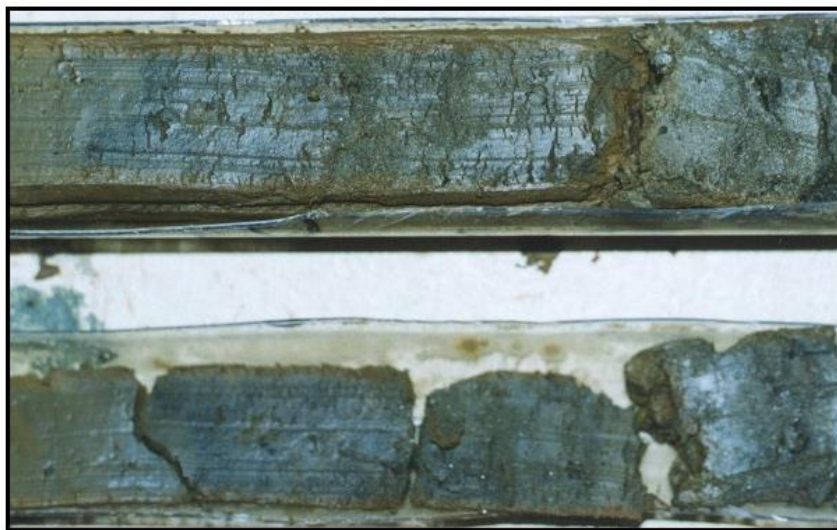


Figura 10 - Litofácies argilosa com abundância de matéria orgânica (ALBERTO, 2010).

As litofácies de Debris flow estão associadas a processos gravitacionais e a eventos de alta precipitação (ou elevado índice pluviométrico), juntamente a altas declividades. Estes fatores são responsáveis por movimentos de massa que mobilizam grandes volumes de massas detriticas.

Fluxos detriticos (*debris flows*) são fluxos de sedimentos saturados com água misturados homogeneamente com detritos variados, com alta porcentagem de materiais

mais grosseiros. Estes fluxos são de grandes proporções e ocorrem, normalmente, quando há uma instabilização de materiais não consolidados saturados com água, deslocando-se por grandes distâncias, podendo atingir velocidades muito elevadas.

Os fluxos detríticos acompanham a morfologia das encostas, e este fato se reflete em sua disposição, onde se observa a formação de rampas mais suaves que se interdigitam com depósitos fluviais e estuarinos nas proximidades da base da serra e na planície aluvionar (regiões mais planas) (ALBERTO, 2010).

Os depósitos de *debris flow* (Figura 11) são representados por sedimentos arenosos conglomeráticos mal selecionados, contendo seixos de dimensões variadas (centimétricas a decimétricas) em meio a uma matriz mais fina (argilosa – siltosa).



Figura 11 - Depósito de debris flow com seixos decimétricos em encosta da Serra do Mar (ALBERTO, 2010).



## **4. MATERIAIS E MÉTODOS**

### **4.1. Revisão bibliográfica, Organização e Análise dos dados**

O trabalho se iniciou com revisões bibliográficas de relevância no que se refere à caracterização da local de estudo e aos métodos de análise empregados, além dos referentes à utilização dos softwares empregados para as modelagens realizadas, realizadas até o final do presente trabalho.

Concomitante à revisão bibliográfica dos temas de relevância para o desenvolvimento do trabalho, foram compiladas informações litológicas provenientes de sondagens SPT (*standard penetration test*) realizadas na área e suas localizações, bases topográficas e de condutividades hidráulicas, provenientes de investigações ambientais conduzidas na área cedidas pela empresa instalada no local do estudo, sendo a organização das informações a etapa seguinte do trabalho.

### **4.2. Simulações Sequenciais Gaussianas**

A organização do citado conjunto de dados foi feita segundo informações litológicas e de condutividade hidráulica, com as informações das sondagens dispostas em intervalos de profundidade. Tal organização é feita para a análise em software no software SGeMS - *Stanford Geostatistical Modeling Software* (REMY, 2003).

A partir da associação dos valores médios dos valores de condutividade hidráulica com dados de cunho geológicos são geradas informações com a distribuição tridimensional de condutividade hidráulica. Após a organização dos dados, os mesmos são utilizados para o ajuste de variogramas para cada amostra através da utilização do software SGeMS, obtendo-se parâmetros a serem utilizados na simulação gaussiana sequencial.

O passo seguinte consiste na realização de simulações gaussianas sequenciais, sendo realizadas pelo mesmo software empregado na obtenção dos variogramas (SGeMS), que são feitos através da análise do conjunto de dados, com a utilização de



todos os algoritmos matemáticos realizado pelo programa. Tais simulações geram diferentes realizações com distribuição tridimensional condutividade hidráulica. Cada cenário distinto gerado pela Simulação Sequencial Gaussiana será inserido como campo de condutividade hidráulica.

#### **4.3. Simulação numérica do ISCO**

No trabalho a análise da eficiência do método de remediação ISCO é feita com base no volume da área contaminada atingida por oxidante químico (no caso persulfato). Para tal análise, com o resultado das simulações gaussianas sequenciais, são feitas simulações numéricas de fluxo, no software Visual MODFLOW (MCDONALD & HARBAUGH, 1988), da USGS (*United States Geological Survey*), e de transporte, no software MT3DMS (ZHENG, 1990) para cada cenário distinto gerado pela simulação sequencial gaussiana.

Os aspectos operacionais do ISCO, tais como a massa de oxidante injetada e o tempo de duração da injeção se basearam em informações fornecidas por especialistas técnicos consultados e informações obtidas das referências bibliográficas consultadas. Baseando-se na operação do ISCO para o contexto de contaminação hipotético admitido, foram adotadas as aproximações descritas abaixo com o intuito de reproduzir numericamente a operação do ISCO.

#### **4.4. Análise da Eficiência do ISCO**

De posse dos resultados gerados pelas simulações numéricas de fluxo e de transporte para cada cenário estocástico, são calculados os volumes atingidos pelo persulfato na região contaminada. Com base nestes resultados é possível prever a probabilidade de eficiência das técnicas de remediação empregada.

## 5. RESULTADOS

### 5.1. Análise de dados e Simulações Gaussianas Sequenciais Utilizando o Software SGeMS

Com as informações acerca das litologias, provenientes de 39 das sondagens SPT (Figura 12) realizadas na área de estudo, inicia-se o trabalho, distinguindo-se as litofácies arenosa, litofácies siltosa, litofácies argilosa e litofácies *debris flow*, apresentadas em subcapítulos anteriores (Sedimentos Flúvio Costeiros e Litofácies de *Debris Flow*).

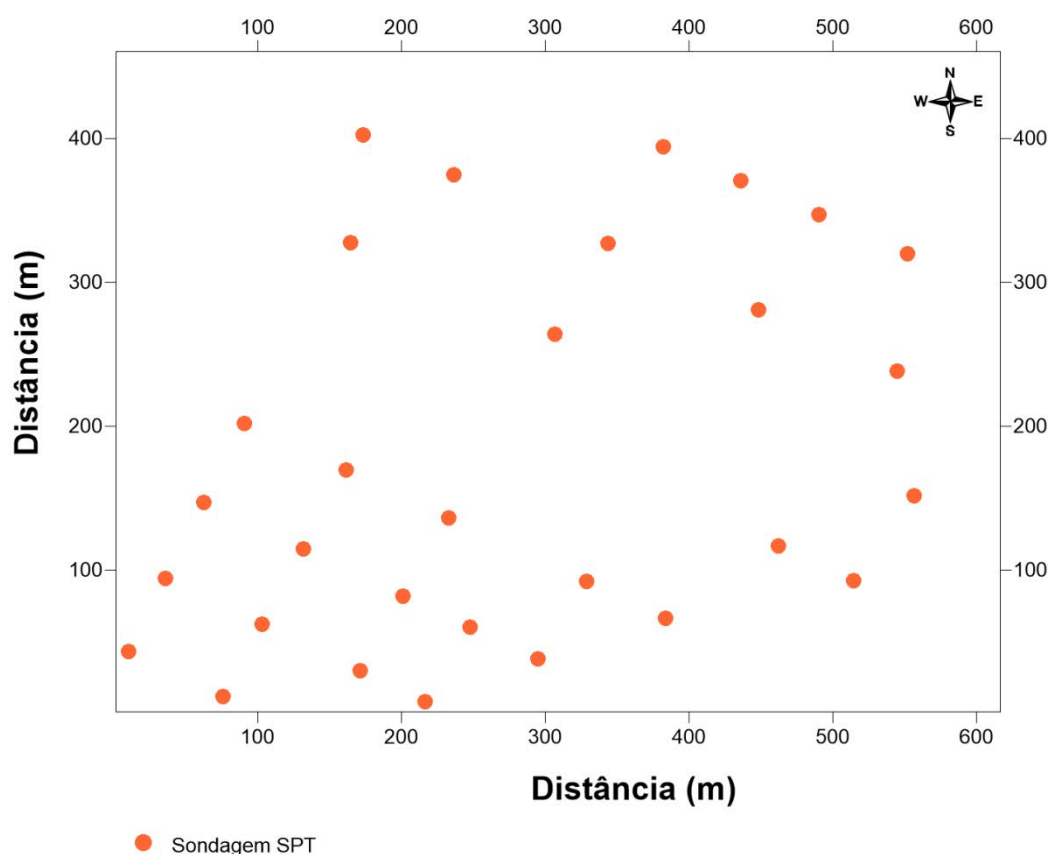


Figura 12 – Distribuição das sondagens SPT empregadas no presente estudo.

A etapa posterior consistiu na determinação da correspondência entre tipos litológicos e valores médios de condutividade hidráulica (Tabela 2). À ocorrência de determinadas litologias nos perfis descritivos das sondagens SPT foi atribuído valores

correspondente de condutividade hidráulica, baseando-se nos valores expostos na Tabela 2. Nesta etapa foram gerados arquivos do tipo ASCII contendo as informações de posição espacial das sondagens (X,Y,Z) e os valores de condutividade hidráulica para cada intervalo de profundidade especificado.

Tabela 2 - Relação das litologias consideradas e as suas condutividades hidráulicas.

| <b>Litologia</b>   | <b>Condutividade hidráulica (m/s)</b> |
|--------------------|---------------------------------------|
| Argila             | $2,26 \times 10^{-8}$                 |
| Silte              | $3,72 \times 10^{-7}$                 |
| <i>Debris Flow</i> | $3,60 \times 10^{-6}$                 |
| Areia com finos    | $2,80 \times 10^{-5}$                 |
| Areia limpa        | $1,98 \times 10^{-4}$                 |

Devido a variação de várias ordens de grandeza dos valores de condutividade hidráulica foram submetidos a uma função logarítmica  $Y(x) = \ln(Z(x))$  para promover a linearização.

O formato escolhido para a análise foi o .txt, onde a identificação de cada coluna fica separada em linhas ao invés de ficar logo acima da coluna que a mesma nomeia. Na tabela a primeira coluna é a identificação ou nome, a segunda, terceira e quarta são referentes às coordenadas x, y e z, respectivamente, e a última coluna representa a variável a ser trabalhada.

Após a adequação do arquivo, as informações das sondagens podem ser carregadas no aplicativo SGeMS, onde criou-se um *grid* representativo da região a ser simulada (618m na direção x, 462m na direção y e 22m na direção z, com celas de 3m nas direções x e y e 1m na direção z, com origem o ponto  $x = 0, y = 0, z = -17,5$ ), ao final do passo o resultado é a área a ser simulada com as informações (sondagens) a serem trabalhadas para a simulação do meio já espacialmente plotadas, como mostra a Figura 13

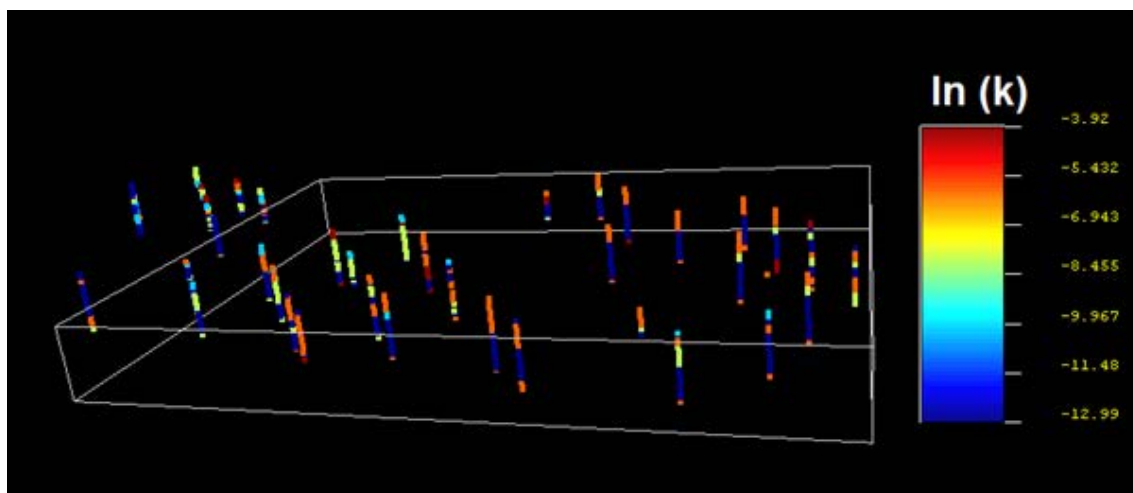


Figura 13 - Distribuição tridimensional dos valores de condutividade hidráulica baseado na descrição litológicas das sondagens SPT.

Os variogramas utilizados para a realização das simulações gaussianas também foram produzidas pelo software SGeMS, utilizando o modelo esférico, as curvas foram ajustadas para a determinação de parâmetros necessários para as simulações estocásticas (ajuste feito simultaneamente em mais de um variograma, pelo fato de apresentar covariância).

A partir dos variogramas feitos é obtido o modelo de correlação espacial, utilizado na simulação gaussiana sequencial, onde a aplicação de todas as funções matemáticas inerentes ao método são feitas pelo software (SGeMS), conferindo uma menor complexidade para a modelagem. É necessário somente selecionar o *grid*, o modelo variográfico (variograma experimental) para a obtenção dos parâmetros a serem utilizados na simulação e o número de realizações (no trabalho foram realizadas 9).

As simulações realizadas pelo SGeMS geram apenas um arquivo de saída (*output*) contendo as informações de todos os cenários simulados, tornando-se necessária a adequação dos dados para a análise nos softwares MODFLOW e MT3DMS.

As simulações gaussianas sequencias realizadas no SGeMS demonstram a esperada complexidade litológica da área estudada.

Dos variogramas ajustados foram adquiridos os seguintes valores: efeito pepita=3, amplitude máxima=72, média=54 e mínima=54 e um patamar=8.

## 5.2. Cenários de condutividade hidráulica gerados

Abaixo são apresentados os nove cenários simulados, onde as cores mais frias representam as condutividades hidráulicas mais baixas e as cores mais quentes as mais altas (Figuras 14 a 22).

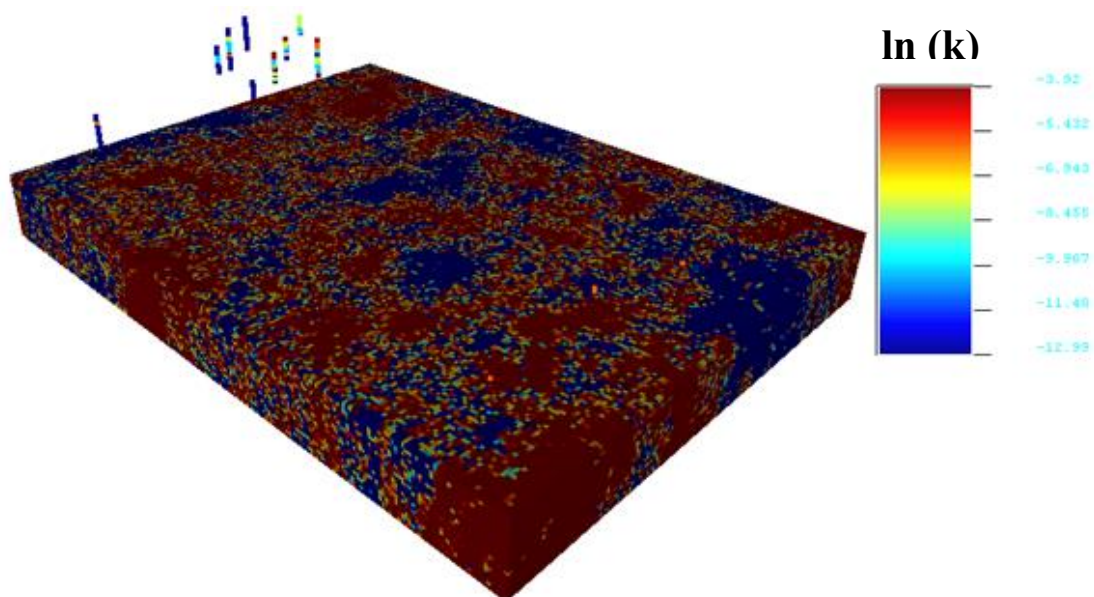


Figura 14 -- Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 1.

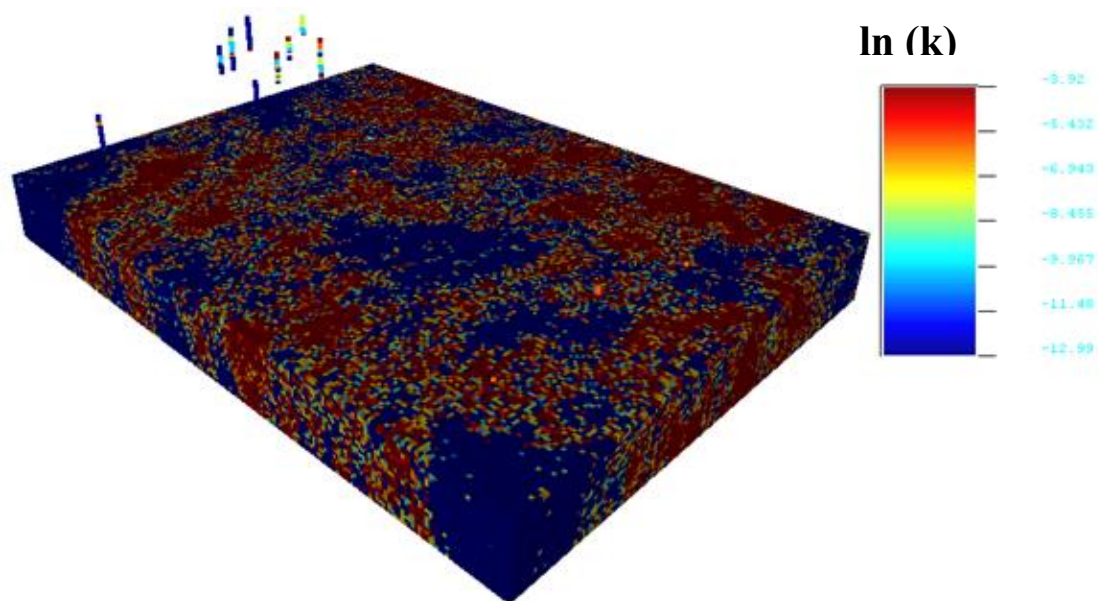


Figura 15 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 2.

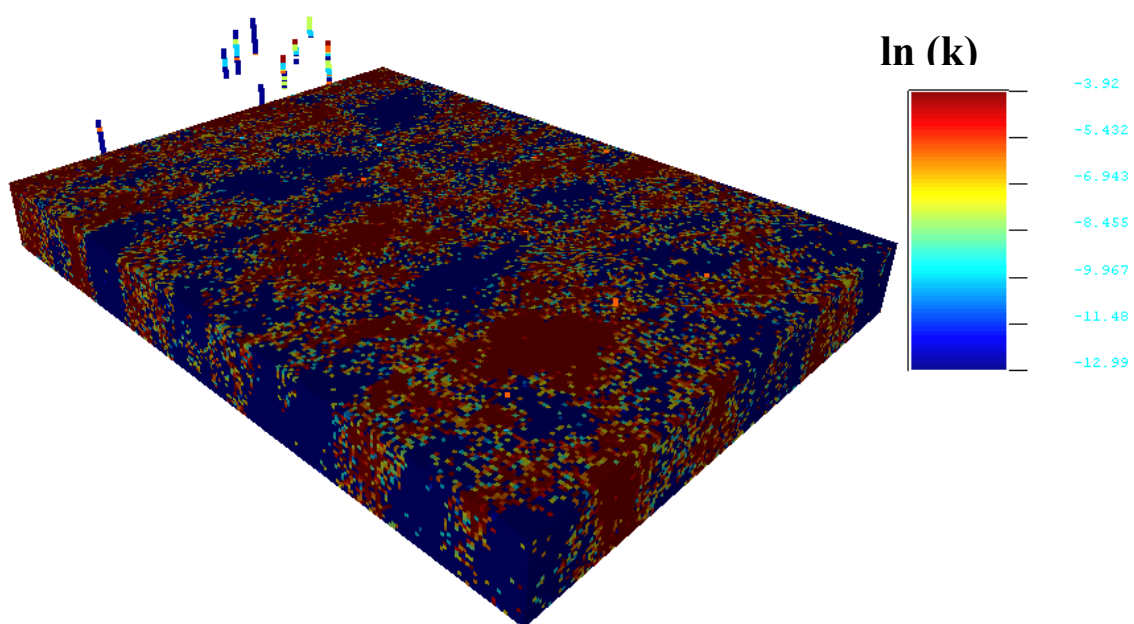


Figura 16 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 3.

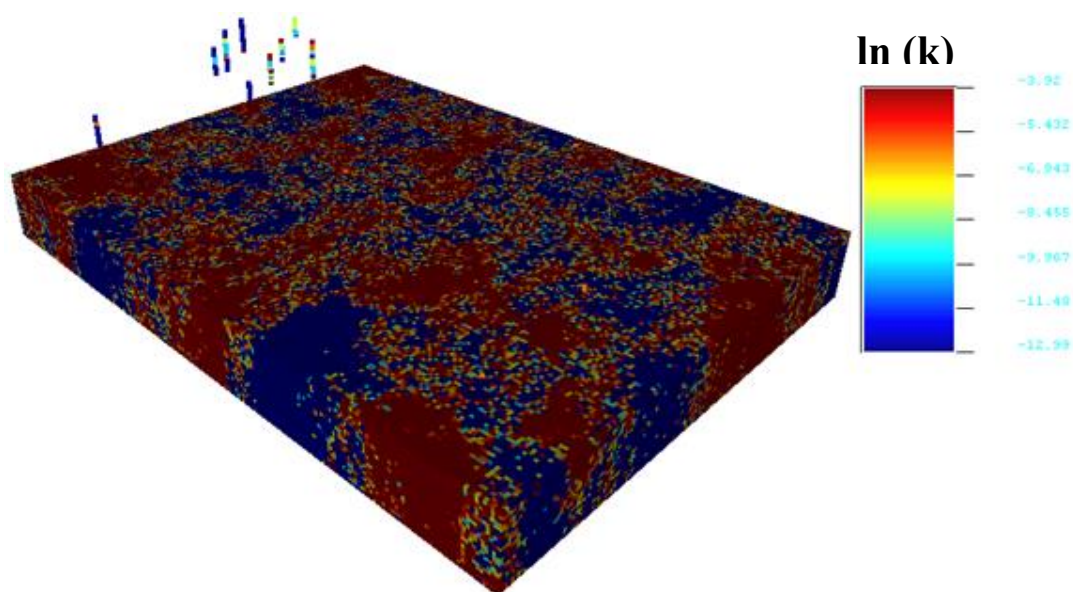


Figura 17 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 4.

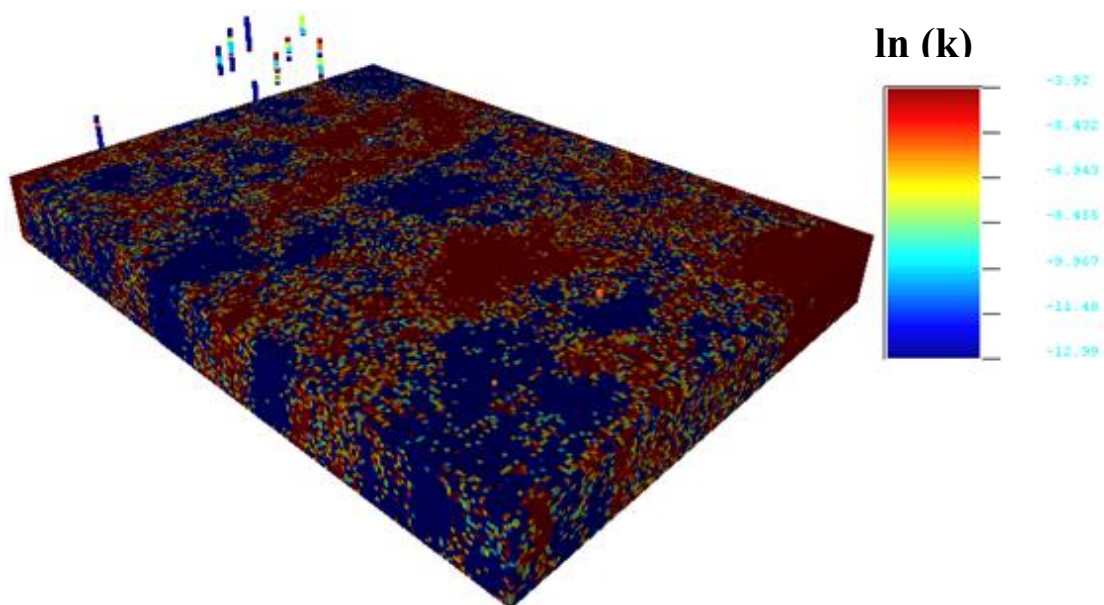


Figura 18 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 5.



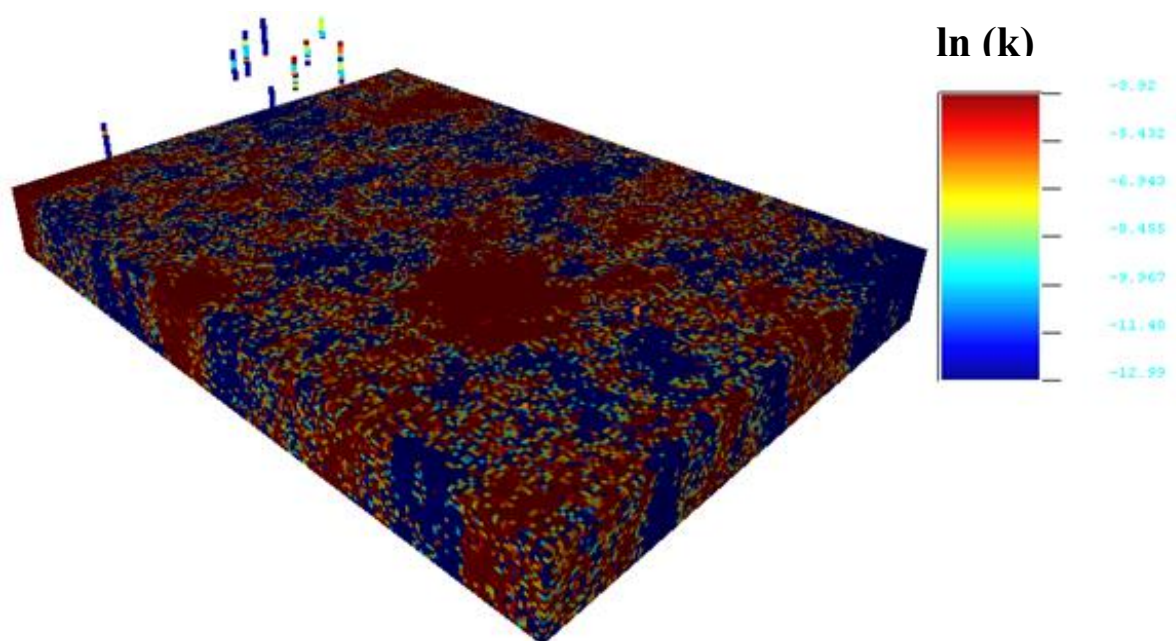


Figura 19 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 6.

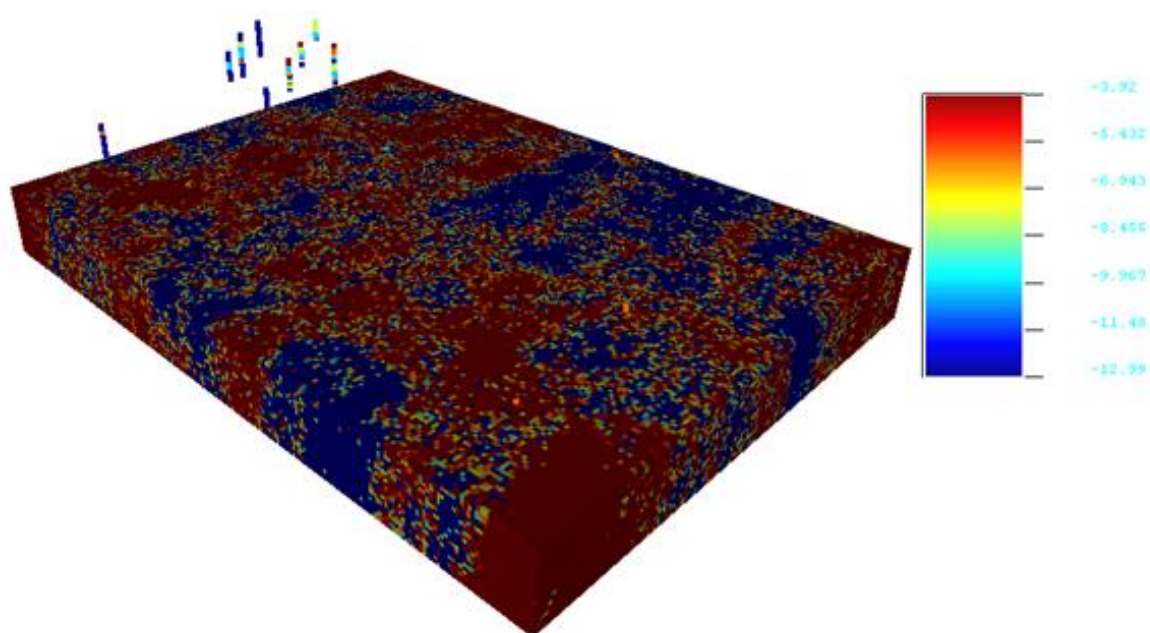


Figura 20 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 7



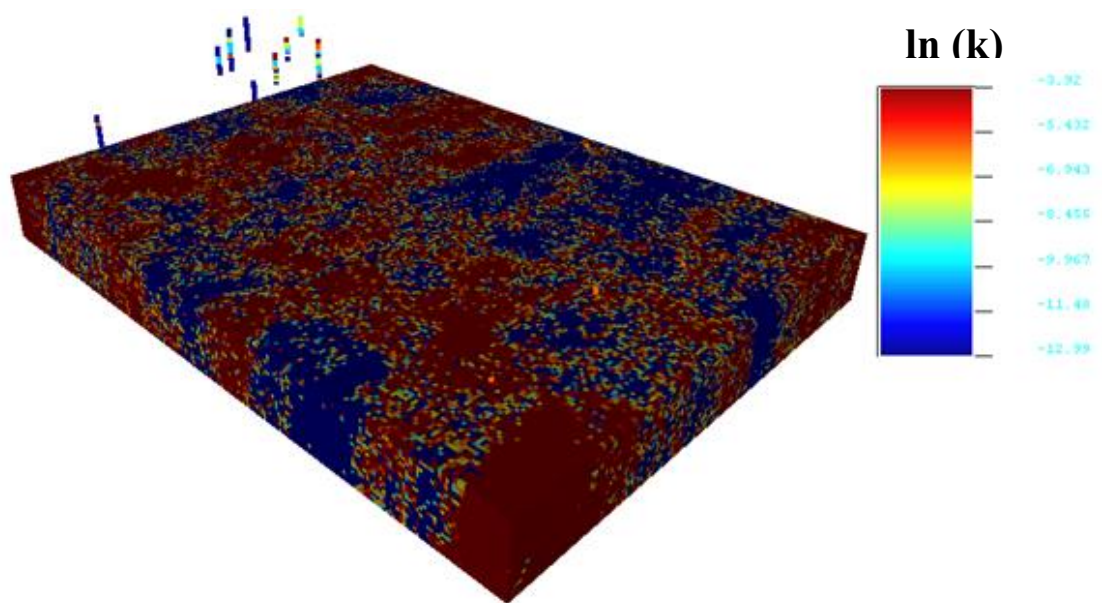


Figura 21 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 8

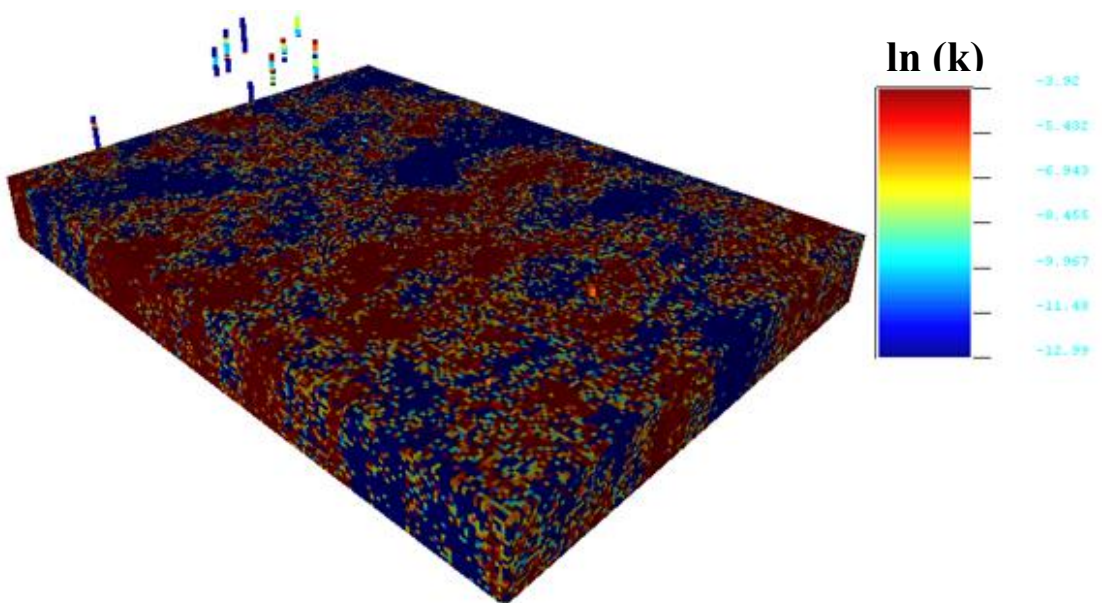


Figura 22 - Distribuição dos valores de condutividade hidráulica para o Cenário 9.

Nos nove cenários simulados é notável a heterogeneidade do meio estudado bem como as diferenças entre os cenários em si. Apesar da grande variação apresentada pelos valores de condutividade hidráulica, cenários simulados predominam os valores das duas extremidades, ou seja, valores altos (litologias mais arenosas), representados por tons avermelhados, e valores baixos (litologias mais argilosas), representados por tons azuis, como mostram os histogramas dos cenários (Figura 23), mesmo com a evidente diferença nas distribuições espaciais entre as simulações feitas.

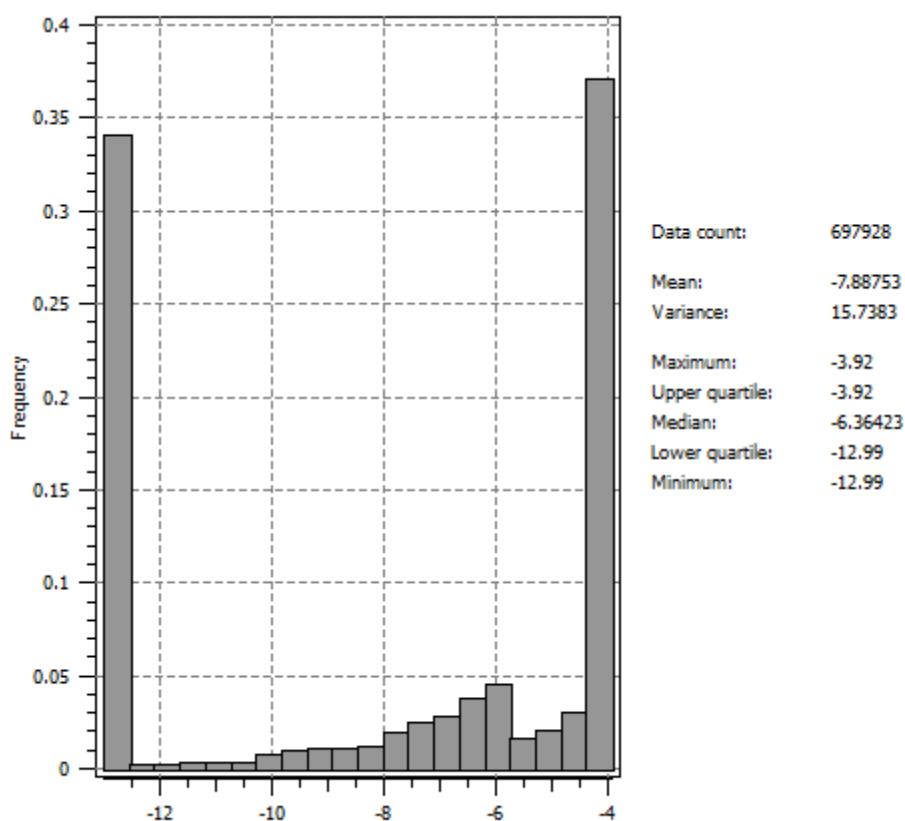


Figura 23 - Histograma do cenário 1.

### 5.3. Simulações de Fluxo e Transporte

Após a simulação do arcabouço geológico, que forneceu os valores tridimensionais de condutividade hidráulica, são realizadas as simulações de fluxo, utilizando o software Visual MODFLOW (MCDONALD & HARBAUGH, 1988), da USGS (*United States Geological Survey*), e de transporte, no software MT3DMS (ZHENG, 1990), do persulfato.

Os dados obtidos das simulações estocásticas são separados por simulações. Cada cenário simulado, que por sua vez é separado por camadas (*layers*) em diferentes arquivos do tipo .xls (utilizado pelo software excel), e os valores obtidos das simulações, transformados para uma distribuição normal, são transformados novamente para a sua escala original. Para tal transformação foi utilizada a função inversa a da utilizada para a obtenção da distribuição normal:  $Z(x) = e^{Y(x)}$ .

Para as simulações de fluxo e transporte é necessária a criação de um *grid* igual ao utilizado nas simulações gaussianas sequenciais (com dimensões de 618m x 462m x 22m).

No software Visual MODFLOW, os arquivos contendo as informações dos *layers* de cada um dos nove cenários são inseridos no aplicativo um a um, assim, carregando todas as simulações tridimensionais de condutividade hidráulica (*k*) obtidas.

#### 5.3.1. Domínio do Modelo e condições de contorno

A área simulada possui 285516 m<sup>2</sup>, possuindo 206 colunas, 154 colunas e 22 camadas, dentro desta área considerou-se uma contaminada menor (Figura 24), de 46200 m<sup>2</sup>, possuindo um volume contaminado de 138600 m<sup>3</sup>, com 210 colunas (coluna 90 até a 300), 220 linhas (linha 120 até a linha 340) e 3 camadas (-2,5 até 0,5). As simulações de fluxo em regime transiente foram realizadas para um período de 15 dias. Na área contaminada são colocados 45 pontos (poços) de injeção, com espaçamento de 50m na direção EW e de 25m na direção NS, para a simulação de transporte, sendo

injetado nas camadas contaminadas (de -2,5 a 0,5), com o término da injeção após 1,99 dias após seu início.

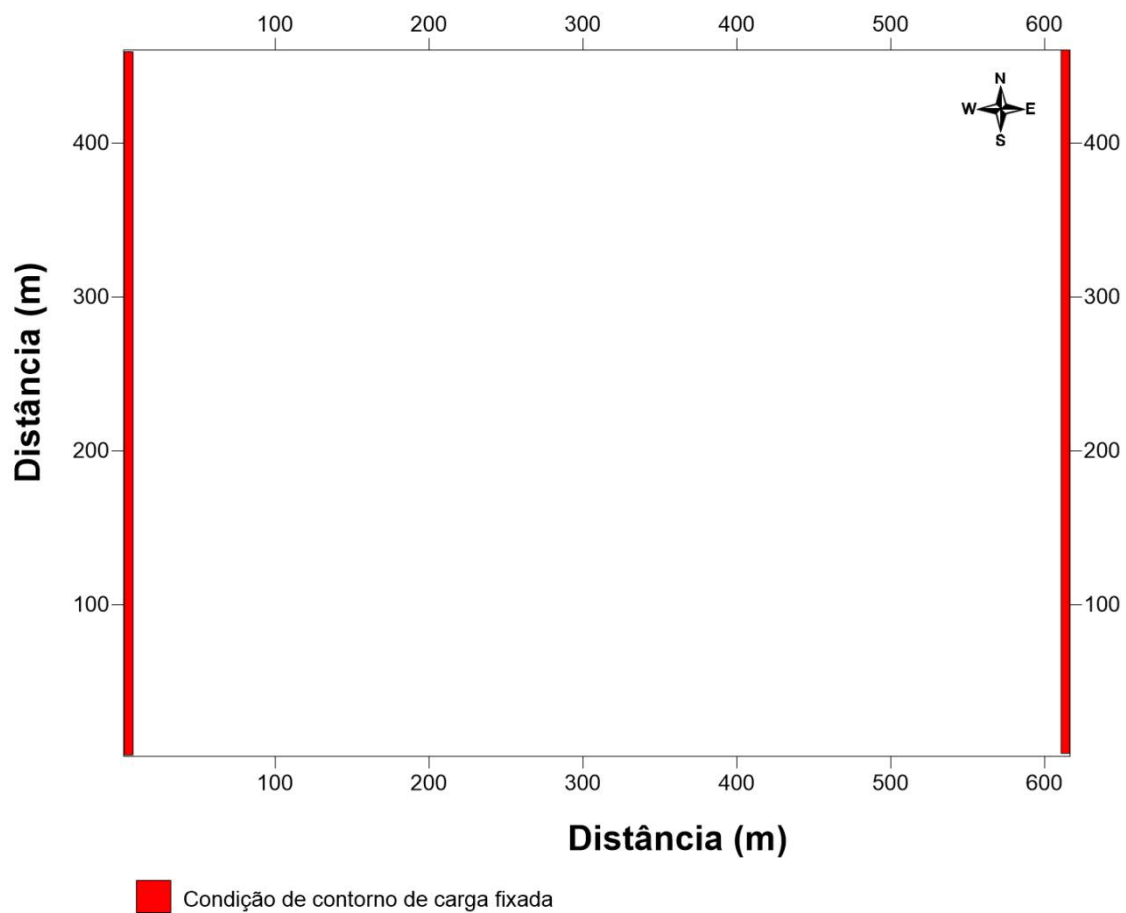


Figura 24 – Domínio do Modelo e Distribuição das Condições de Contorno de Primeiro Tipo.

### 5.3.2. Simulação da injeção

Admita um volume contaminado do aquífero com 220 m de largura, 210 metros de comprimento e 3 metros de espessura, foi elaborado uma malha com 45 pontos de injeção (Figura 25).

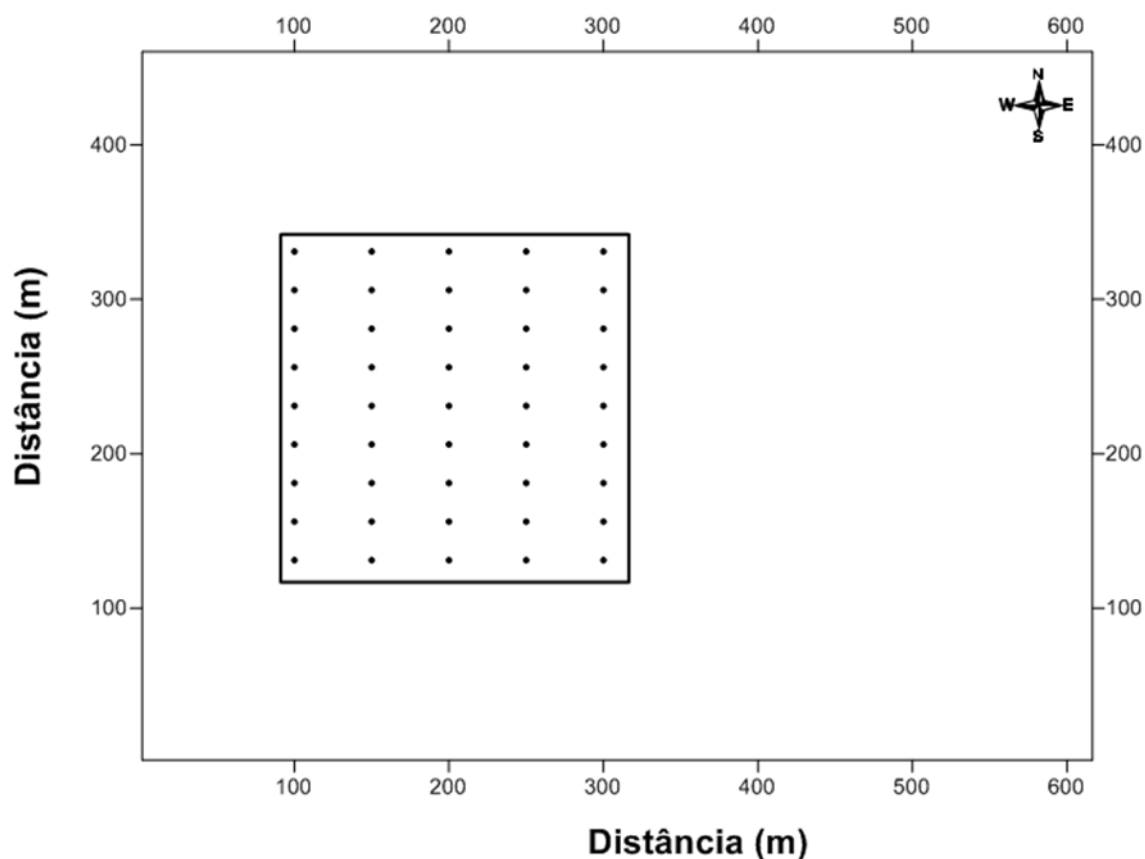


Figura 25 - Figura apresentando a área contaminada.

Para simular o processo de injeção de solutos foram representados poços de injeção nos pontos onde irá ser simulada a injeção de solutos dentro do modelo. As seções filtrantes dos poços de injeção foram posicionadas apenas no intervalo de profundidade correspondente à porção contaminada do aquífero. No aplicativo VISUAL MODFLOW foi imposta a injeção de um volume pré-fixado de água ( $0,7 \text{ m}^3/\text{h}$ ) por intermédio destes poços por um período de duas horas.

Para reproduzir o ingresso de oxidantes para o interstício poroso do aquífero contaminado foram inseridas condições de contorno de concentração especificada nos pontos de injeção no aplicativo MT3MS. As concentrações nas condições de contorno que precederam a execução do ISCO foram impostas como nulas e durante a operação do ISCO, foram impostas valores de concentração baseando-se na massa de solutos injetada. Uma vez encerrada a injeção, foi novamente imposta valores de concentrações nulas nos pontos de injeção para reproduzir a interrupção da injeção de oxidantes.

Os resultados das simulações numéricas de fluxo e transporte, realizadas no MODFLOW e no MT3DMS, respectivamente, ressaltam ainda mais a influência da heterogeneidade na dispersão do persulfato, apresentando diferenças não muito grandes entre os nove cenários simulados. A distribuição do persulfato em cada um dos cenários, após a simulação de fluxo e transporte, é apresentada tridimensionalmente a seguir (Figuras 26 a 34).

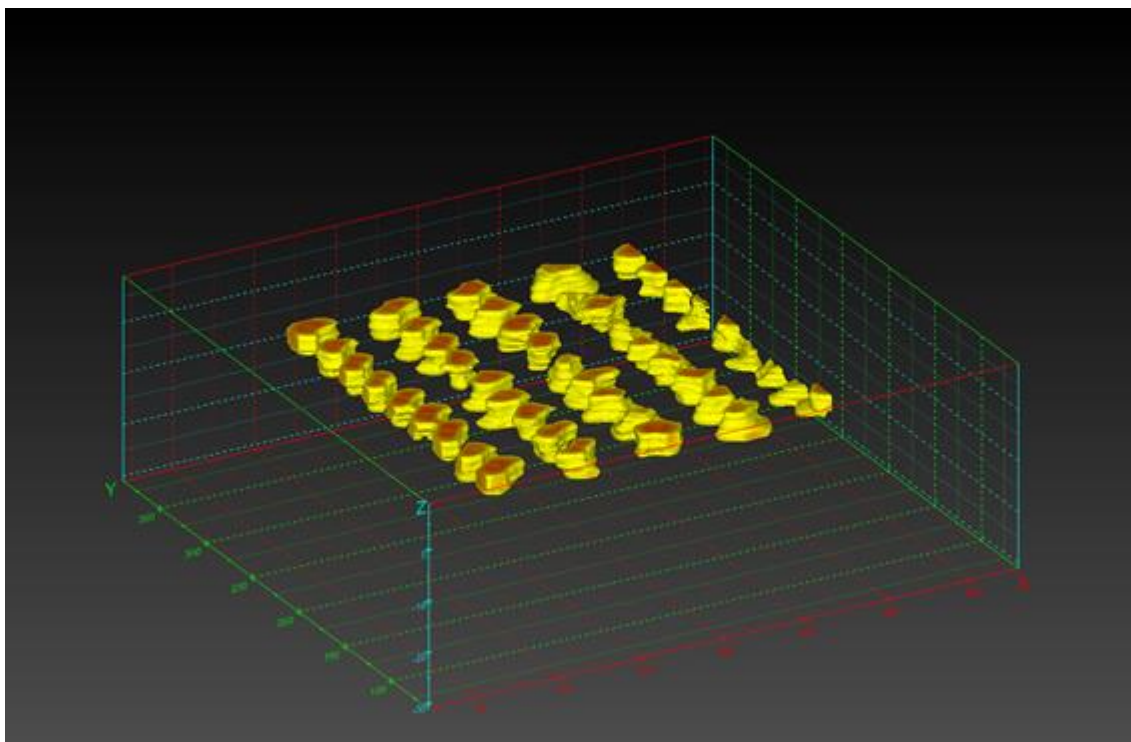


Figura 26 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 1.

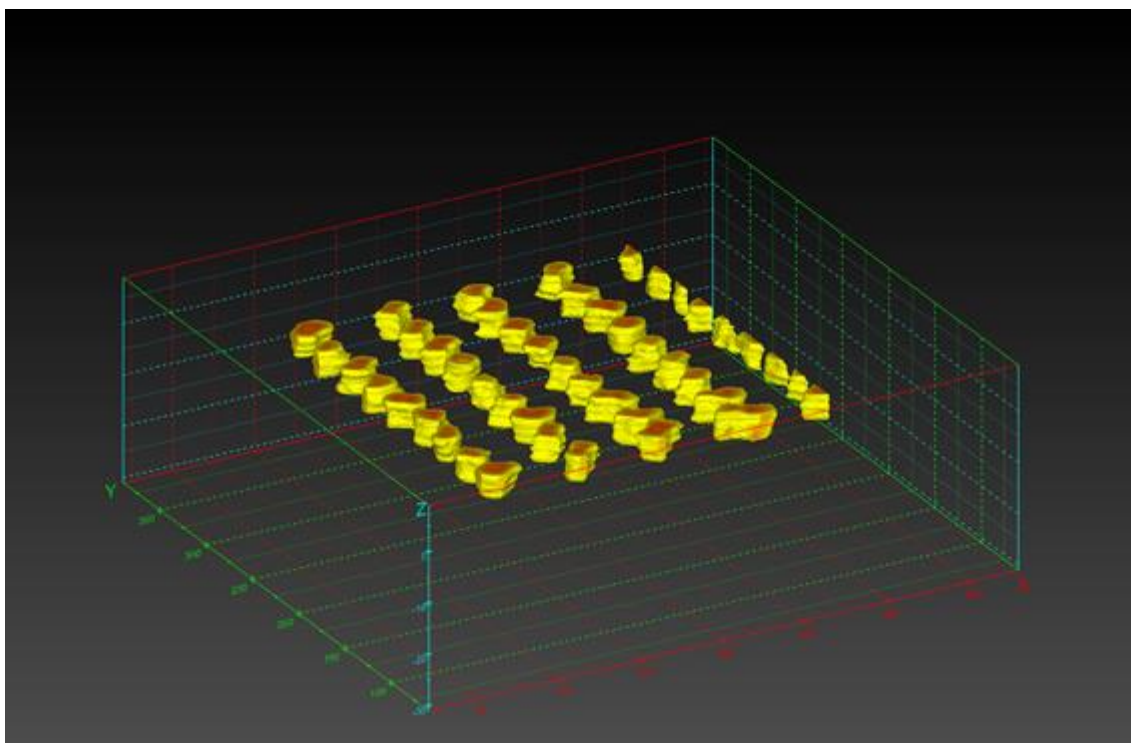


Figura 27 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 2.

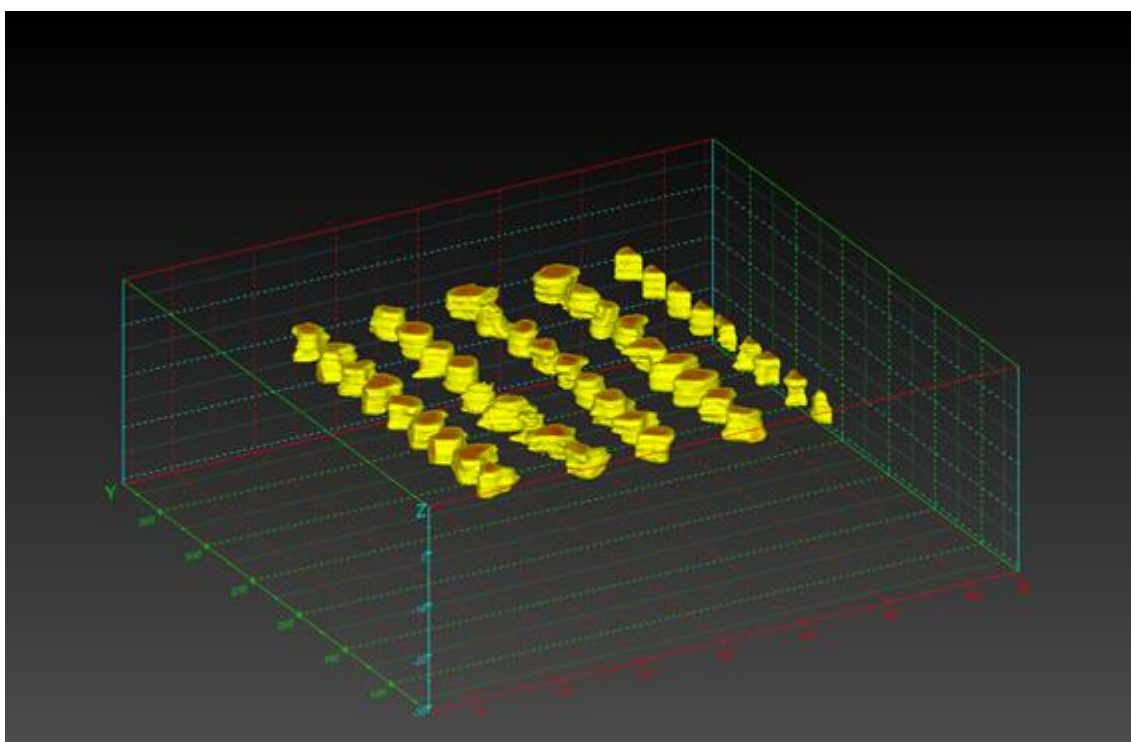


Figura 28 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 3.



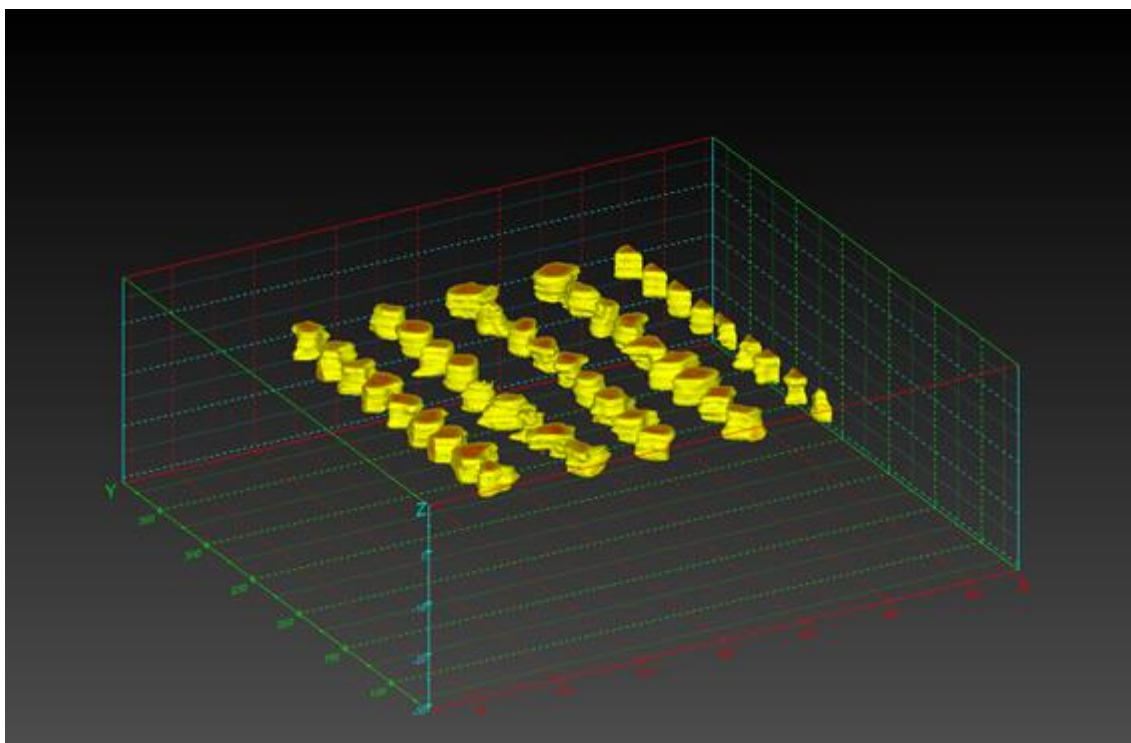


Figura 29 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 4.

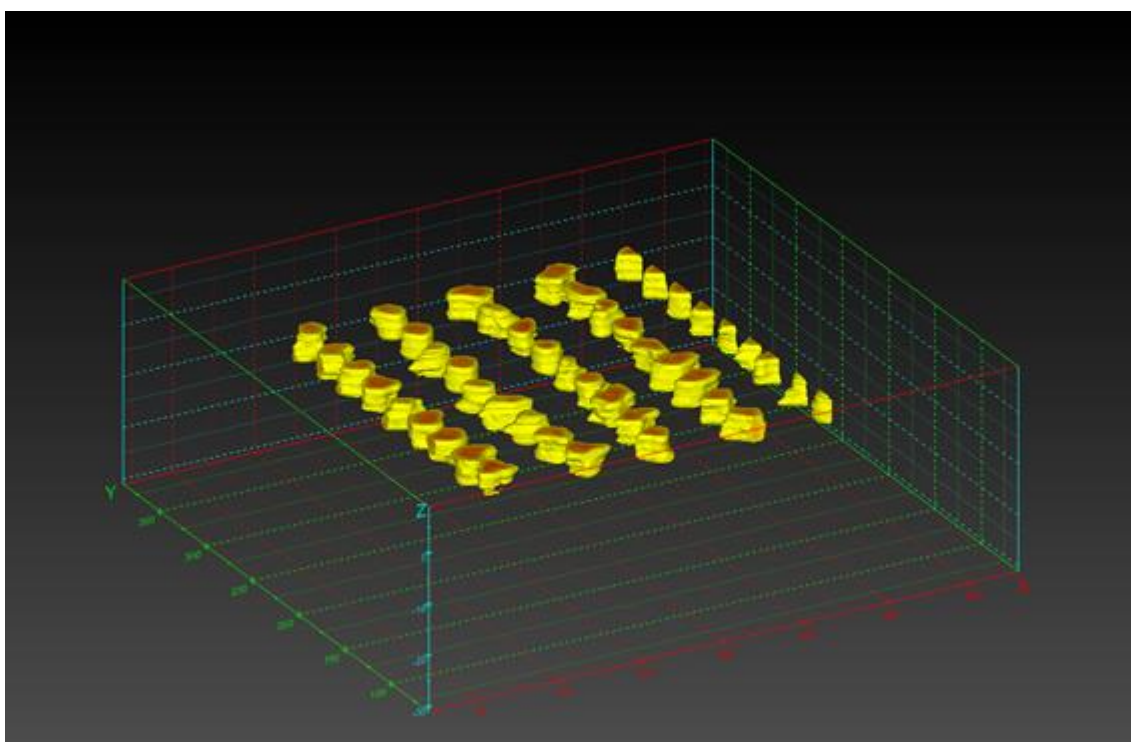


Figura 30 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 5.



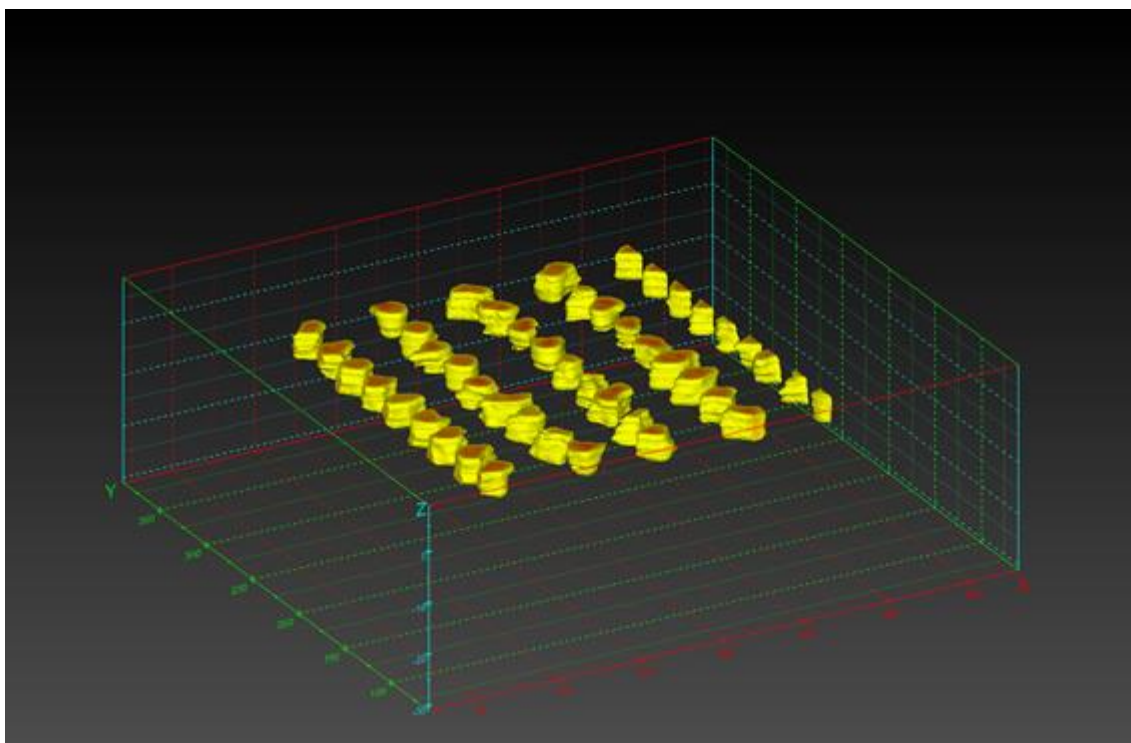


Figura 31 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 6.

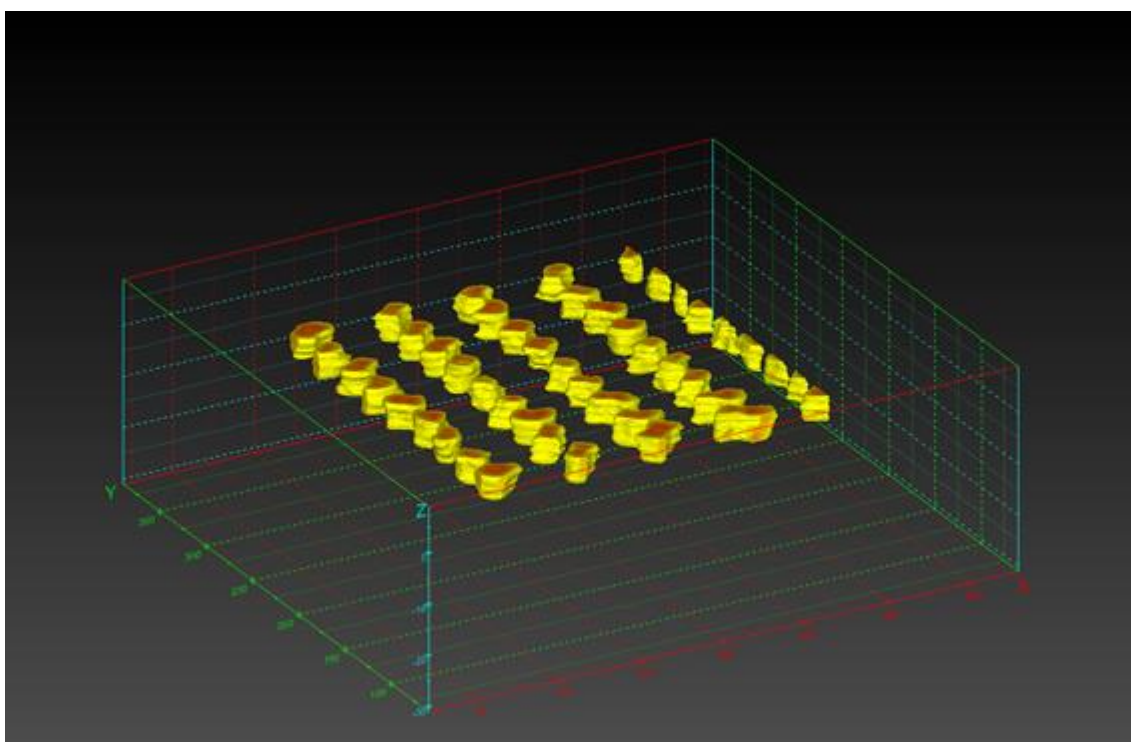


Figura 32- Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 7.

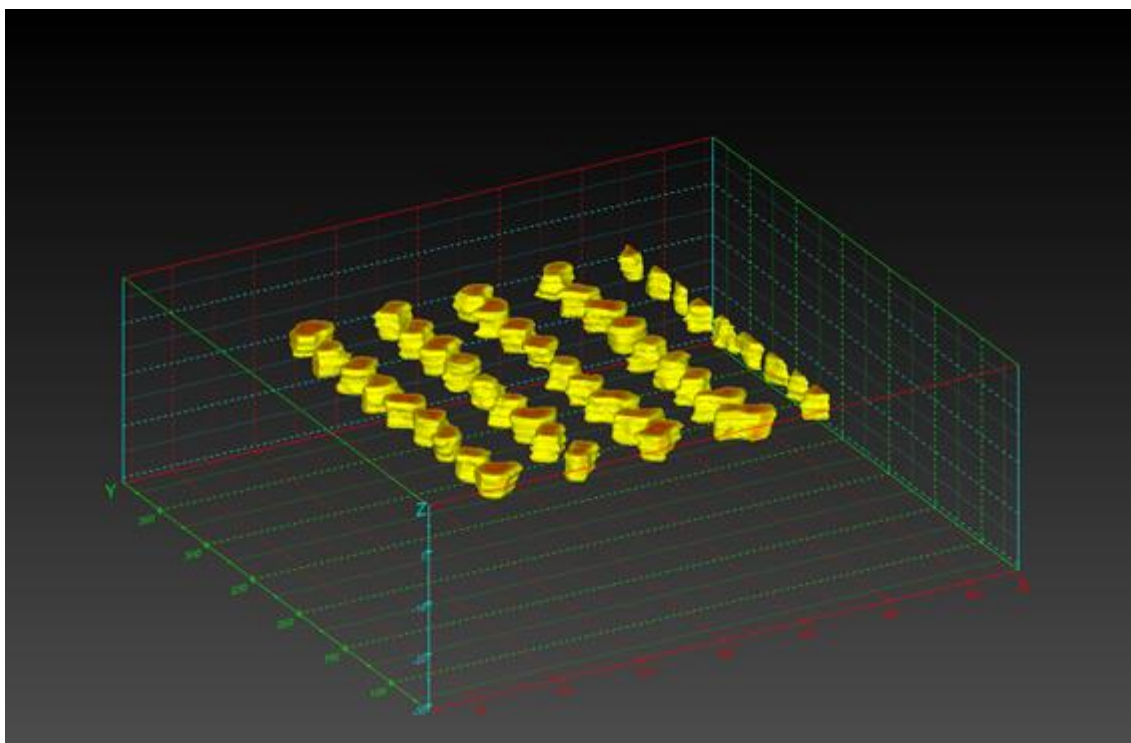


Figura 33 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 8.

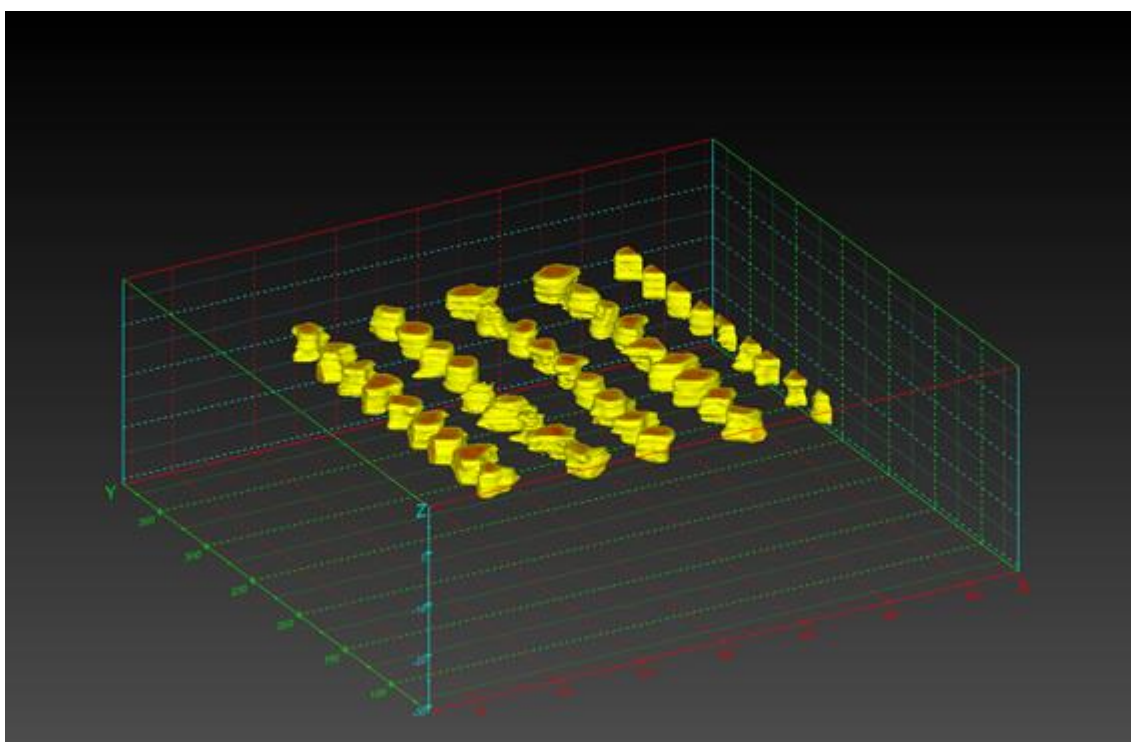


Figura 34 - Visualização tridimensional da abrangência de oxidante após o término da injeção para o Cenário 9.

Visualmente nota-se que em nenhum dos cenários o persulfato chega a atingir mais da metade do volume contaminado (o volume total considerado contaminado é de 138.600 m<sup>3</sup>). Em geral apresenta baixa dispersão, não alcançando uma distância superior à 7,5 m do ponto de injeção.

Na tabela 3 estão os volumes atingidos pelo persulfato e a porcentagem do volume contaminado.

Tabela 3 - Volumes atingidos pelo persulfato.

| <b>Cenário</b> | <b>Volume (m<sup>3</sup>)</b> | <b>Volume contaminado atingido (%)</b> |
|----------------|-------------------------------|----------------------------------------|
| 1              | 6837,4                        | 49,332%                                |
| 2              | 5667                          | 40,887%                                |
| 3              | 5403,1                        | 38,983%                                |
| 4              | 5428,8                        | 39,169%                                |
| 5              | 5416,3                        | 39,079%                                |
| 6              | 5327,6                        | 38,439%                                |
| 7              | 5738,1                        | 41,4%                                  |
| 8              | 5722,2                        | 41,286%                                |
| 9              | 5458,9                        | 39,386%                                |

Na figura abaixo (5.28) é apresentado um histograma da porcentagem de volume contaminado atingido pelo oxidante nas simulações de transporte.

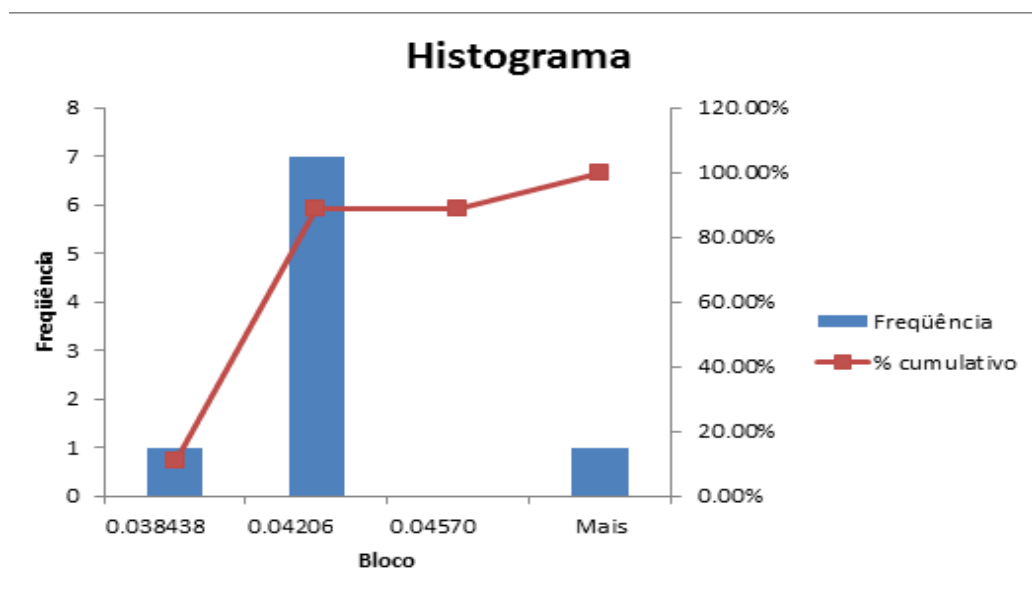


Figura 35 - Histograma da porcentagem do volume contaminado atingido pelo oxidante (persulfato).

Em média o persulfato atinge cerca de 42% do volume contaminado, com o cenário 3 como o mais pessimista, onde apenas 38,4% do volume contaminado seria atingido, o cenário 1 apresentou o resultado mais otimista, com cerca de 49% do volume contaminado sendo atingido pelo persulfato.

Apesar da nítida diferença entre os cenários simulados pelo software SGeMS (figuras 5.1 a 5.9), os volumes atingidos mostram resultados bastante consistentes, apresentando um desvio padrão de 3.3%.

## 7 – DISCUSSÕES E CONCLUSÕES

O planejamento das técnicas de remediação ISCO pressupõe que o aquífero contaminado a ser remediado é homogêneo e permeável, condições não observadas na maioria dos casos. Em decorrência das heterogeneidades geológicas a eficiência do ISCO será limitada, resultando na destruição incompleta dos contaminantes orgânicos em sub-superfície. Apoiando-se na premissa que a eficiência do ISCO é função do grau de heterogeneidade do aquífero, este trabalho objetivou avaliar a utilização de um método estocástico, no caso a simulação gaussiana sequencial, para prever a probabilidade da eficiência de uma remediação ISCO em um aquífero fortemente heterogêneo.

As simulações realizadas reproduzem a esperada complexidade geológica, no que se refere à heterogeneidade, tendo como consequência a baixa eficiência do método de remediação ISCO na área, como demonstrado experimentalmente por Conrad et al. (2002). Entretanto, deve-se ressaltar que as estimativas de eficiência são superestimado, uma vez que a injeção em litologias pouco permeáveis não é possível mesmo com a aplicação de pressões elevadas de injeção. Por outro lado, nas simulações numéricas empreendidas, a totalidade do volume injetado ingressou no aquífero pela imposição de um gradiente hidráulico irreal.

Analisando as simulações realizadas no presente trabalho (nove no total), é possível notar que a presença de litologias com condutividade hidráulica bastante distintas, como as presentes na área (principalmente as litofácies arenosa, siltosa e argilosa), e sua disposição espacial, como a presença de camadas interdigitadas, acabam restringindo bastante a dispersão do persulfato, em geral, refletindo em uma variação não muito grande no volume contaminado atingido.

As simulações estocásticas, por apresentarem diferentes cenários equiprováveis, demonstram ser uma ferramenta bastante útil, principalmente por fornecer uma visão mais ampla dos resultados que se pode obter, sendo possível analisar não somente o resultado mais provável, mas também os cenários mais pessimistas, no caso o cenário 6.

Dotado de um caráter puramente exploratório, a proposta deste trabalho foi propor uma metodologia para avaliar a eficiência das técnicas de remediação ISCO com base em modelos estocásticos. Diante do contexto apresentado, foram simulados apenas nove cenários, número que não oferece uma avaliação representativa dos cenários possíveis. Para a obtenção de uma avaliação estatisticamente mais representativa da probabilidade de sucesso da remediação baseada no ISCO, é necessária a avaliação de um número maior de cenários.

É possível concluir que os modelos estocásticos apresenta potencialidade para ser utilizada na escolha do método de remediação a ser implantado em uma área caracterizada por uma forte heterogeneidade geológica, no caso para uma contaminação por DNAPL, sobretudo em áreas com escassez de informações geológicas. Entretanto, deve-se ressaltar que o tempo demandado para a realização das simulações é um empecilho para a utilização da ferramenta para tal prática.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALBERTO, M.C. Fluxo da água subterrânea em sistema de encosta-rio, município de Paulínia: caracterização e simulação numérica. Dissertação de Mestrado, UNESP/IGCE/Rio Claro (SP), 117p., 2005.

ALBERTO, M.C. Heterogeneidades Geológicas e o Gerenciamento de Áreas Contaminadas em Local Situado na Interface da Serra do Mar com a Planície Aluvionar do Rio Cubatão (Cubatão/SP). 2010. 218 f. Tese de Doutorado. Universidade Estadual Paulista (UNESP), Rio Claro, 2010.

BIANCHI, M. et al. Integrating deterministic lithostratigraphic models in stochastic realizations of subsurface heterogeneity. Impact on predictions of lithology, hydraulic heads and groundwater fluxes. **Jornal of Hydrology**, vol. 531, parte 3, p. 557-573, 2015.

BROWN, C. L. et al. Demonstration of surfactante flooding on an aluvial aquifer contaminated wif dense nonaqueous phase liquid. In: Innovative Subsurface Remediation: Field Testing of Physical, Chemical, and Characterization Technologies. ACS Symposium Series N. 725. Washington, DC: American Chemical Society, 1999, p. 65-85.

CETEC. Diagnóstico da situação dos recursos hídricos do Tietê/Batalha – UGRHI-16. São Paulo, p. 13-16 e 22-25, 2002.

CETESB – COMPANHIA DE TECNOLOGIA E SANEAMENTO AMBIENTAL DO ESTADO DE SÃO PAULO. Manual para o Gerenciamento de Áreas Contaminadas. Convênio CETESB/GTZ, 1999/2001.

CHANG, H.K.; KOWSMANN, R.O.; FIGUEREDO, A.M.F.; BENDER, A.A. 1992. *Tectonics and stratigraphy of the East Brazil rift system: an overview*. Tectonophysics, 213: 97–138.

COHEN, R. & MERCER, J. DNAPL Site Evaluation. EPA 600/R-93/022. Office of Research and Development. US. EPA. 1993.

CONRAD, S. H. et al. Bench-scale visualization of DNAPL remediation process in analog heterogeneous aquifers: surfactante floods and in situ oxidation using permanganate. **Journal of Contaminant Hydrology**. Albuquerque, v. 58, p. 13-49, 2002.

CORREIA, P. **Modelo e Estimação: Uma introdução à geoestatística**. Universidade Federal do Paraná (UFPR), 2010.

COUTINHO, J.M.V. O falhamento de Cubatão. Anais do XXV Congresso Brasileiro de Geologia, Boletim Especial nº 1, p. 130-131 (Resumo), 1971.

CRUZ, O. Contribuição geomorfológica ao estudo de escarpas da Serra do Mar. Revista do Instituto Geológico, 8-10, 11(1): p. 9-20, 1980.

DAEE – Departamento de Águas e Energia Elétrica; IG – Instituto Geológico; IPT – Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo; CPRM – Serviço Geológico do Brasil. Mapa das águas subterrâneas do Estado de São Paulo. Escala 1:1.000.000 nota explicativa/[coordenação geral Gerônimo Rocha]. Obra em 3v. Inclui CD-ROM e mapa escala, São Paulo, 2005.

DEUTSCH, C.V.; JOURNEL, A.G. **GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide**. Nova Iorque: Oxford University Press, p. 189, 1998.

FERNANDES, H. G.; FILHO, O. C. Avaliação Técnica da Remediação de Solo Utilizando Persulfato/Peróxido de Hidrogênio. **Periódico Científico RUnPetro**. Lagoa Nova, n. 2, p. 31-38, 2014.

FÚLFARO, V.J. & SUGUIO, K. O cenozóico paulista: gênese e idade. Anais do XXVIII Congresso Brasileiro de Geologia, v.3, SBG, Porto Alegre, 1974.

GOOVAERTS, P. Accounting for Estimation Optimality Criteria in Simulated Annealing. **Mathematical Geology**, v. 30, n. 5, p. 511-534, 1998.

GOOVAERTS, P. Chapter 7 – Assessment of Local Uncertainty. In: **Geostatistics for Natural Resources Evaluation**. Oxford University Press, 496p. 1997.

HASUI, Y. & SADOWSKI, G.R. Evolução geológica do Pré-Cambriano na região sudeste do Estado de São Paulo. Revista Brasileira de Geociências v. 6(3): p.180-200, 1976.

HASUI, Y. et al. Geologia do Pré-Cambriano. In: Associação Brasileira de Mecânica dos Solos. Solos do Litoral de São Paulo, cap. 2, p. 41-68, 1994.



HVORSLEV, M. J. Time lag and soil permeability in ground water observations. Buletim Army Corps of Engineers Waterway Experimentation Station, U. S. n. 36, 1951.

INSTITUTO DE PESQUISAS TECNOLÓGICAS – IPT. Programa Serra do Mar – Estudos Geotécnicos dos Principais Mecanismos de Instabilização na Serra do Mar. Relatório nº 25.957, 1976.

ISAAKS, E. H.; SRIVASTAVA, R. M. **An introduction to applied geostatistics**. Nova Iorque: Oxford University Press, 1989.

LEE, S. Y. et al. Geologic heterogeneity and a comparison of two geostatistical models: Sequential Gaussian and transition probability-based geostatistical simulation. **Advances in Water Resources**. v. 30. p. 1914-1932, 2007.

MACHADO FILHO, J.G. Estabilidade de encostas e condicionantes geológicos, geomorfológicos e estruturais num trecho da Serra de Cubatão, Dissertação de Mestrado, Instituto de Geociências/USP, 172p., 2000.

McDONALD, M. G.; HARBAUGH, B. R. A Modular Three-Dimensional Finite-Difference Ground-Water Flow Model. Techniques of Groundwater of Water-Resources Investigations of the United States Geological Survey, Book 6, Chapter A1. Washington: US Government Printing Office, 1988.

MYLOPOULOS, Y. A.; THEODOSIOU, N.; MYLOPOULOS, N. A. A stochastic optimization approach in the design of an aquifer remediation under hydrogeologic uncertainty. **Water Resources Management**, v. 13, n. 5, p. 335-351, 1999.

OLEA, R. A., 1999. **Geostatistics for Engineers and Earth Scientists**. Kluwer Academic Publishers. 303p.

PARKER, B.L. et al. Review na Analysis of Chlorinated Solvent Dense Nonaqueous Phase Liquid Distributions in Five Sandy Aquifers. **Vadose Zone Journal**. Ontário, , n. 2, p. 116-137, 2003.

RAMSBURG et al. Coupling Aggressive Mass Removal with Microbial Reductive Dechlorination for Remediation of DNAPL Source Zones: A Review and Assessment. **Environmental Health Perspectives**. Pacific Grove, California, n. 4, v. 113, abril, 2005.

REMY, N. Algorithmic and Software Methods for a Better Integration of the Geological Information Into Numerical Models. 2004. 274f. Dissertação (Doutorado) – Stanford University, Stanford, 2004.

RICCOMINI, C. Tectônica e sedimentação no sistema de rifts continentais da Serra do mar (bacias de Volta Redonda, Resende, Taubaté e São Paulo). In: Simpósio de Geologia, 1. Anais... Rio de Janeiro, SBG, p. 253-298, 1987.

RODRIGUES, R. Características Geológicas e Geotécnicas Intervenientes na Estabilidade de Massas Coluviais da Serra do Mar. Dissertação. EESC-USP. São Carlos-SP, 116p. 1992.

SADOWSKI, G. R. Tectônica da Serra do Cubatão, SP. São Paulo. Instituto de Geociências/USP. Tese de Doutorado, 1974.

SADOWSKI, G. R. A Megafalha de Cubatão no Sudeste Brasileiro. Boletim IG-USP, Série Científica, vol 22: p. 15-28, 1991.

SCIULLI, B. E. Remediação do Composto Tetracloroeteno em Subsuperfície através do Processo de Oxidação Química In Situ (ISCO). 2008. 129 f. Dissertação (Mestrado em Hidrogeologia e Meio Ambiente) – Universidade de São Paulo (USP), São Paulo, 2008.

SUGUIO, K. & MARTIN, L. Formações Quaternárias Marinhas do Litoral Paulista e Sul Fluminense. Publicação Especial nº 1. In: International Symposium on Coastal Evolution in the Quaternary, 55p., São Paulo/SP, 1978.

VARGAS, M. Revisão histórico-conceitual dos escorregamentos da Serra do Mar. Revista Solos e Rochas, v.22 (1): p. 53-83, 1999.

YAMAMOTO, J.K. LANDIM, P.M.B. **Geoestatística: conceitos e aplicações**. São Paulo: Editora Oficina de Textos, 2013.

YAMAMOTO, J. K. A Review of numerical methods for the interpolation of geological data. Anais da Academia Brasileira de Ciências, v. 70, n. 1, p. 91-116, 1998.

YAMAMOTO, J. K., 2008. Estimation or Simulation? That is the Question. **Comput. Geosci.**, vol. 12, p. 573-591.

YAN, Y. E. et al. Oxidative degradation and kinetics of chlorinated ethylenes by potassium permanganate. **Journal of Contaminant Hydrology**, vol. 37, p. 343-365, 1999.

ZHENG, C.. MT3D, A modular three-dimensional transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems, Report to the U.S. Environmental Protection Agency, 170 p. 1990.