

Trabalho de Conclusão de Curso

Curso de Graduação em Geologia

**TRANSPORTE DE SOLUTOS EM DIFERENTES CENÁRIOS GEOLÓGICOS GERADOS
POR MODELOS ESTOCÁSTICOS DE CADEIAS DE MARKOV: ESTUDO APLICADO AO
AQUÍFERO RESENDE**

Letícia Barbosa de Aguiar

Orientador: Prof. Dr. Chang Hung Kiang

Coorientador: Dr. Elias Hideo Teramoto

Rio Claro (SP)

2021

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Instituto de Geociências e Ciências Exatas

Câmpus de Rio Claro

LETÍCIA BARBOSA DE AGUIAR

TRANSPORTE DE SOLUTOS EM DIFERENTES CENÁRIOS GEOLÓGICOS
GERADOS POR MODELOS ESTOCÁSTICOS DE CADEIAS DE MARKOV:
ESTUDO APLICADO AO AQUÍFERO RESENDE

Trabalho de Conclusão de Curso 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 Geóloga.

Rio Claro - SP

2021

LETÍCIA BARBOSA DE AGUIAR

TRANSPORTE DE SOLUTOS EM DIFERENTES CENÁRIOS
GEOLÓGICOS GERADOS POR MODELOS ESTOCÁSTICOS DE
CADEIAS DE MARKOV: ESTUDO APLICADO AO AQUÍFERO
RESENDE

Trabalho de Conclusão de Curso 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 Geóloga.

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Chang Hung Kiang (orientador)

MSc. Roger Dias Gonçalves

MSc. Luana Fernandes do Nascimento

Rio Claro, 15 de Março de 2021.

Assinatura do(a) aluno(a)

Assinatura do(a) orientador(a)

Dedico aos meus pais, Lia e João

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente aos meus pais, Lia e João, que são a razão principal de todo meu esforço e dedicação em busca de um futuro mais justo através dos estudos. Obrigado por terem acreditado em mim e depositarem tanta confiança em minhas escolhas, embora eu sabia o quão difícil tenha sido entender o porquê eu deixava São Paulo para cursar uma graduação longe de casa.

Agradeço aos meus queridos professores do Fernando Gasparian, em especial à Leandra Monteiro, Marcelo Chiconi, Gilmar, Lea Sandoval, Conceição e Daiane professores com quem aprendi a enxergar a educação como caminho para construção de uma sociedade menos desigual. Obrigada por continuarem tão presentes em minha vida e contribuírem para minha formação pessoal e profissional. E também aos professores da ETEC e amigos, em especial a Renata Wendel, professora querida e inspiração profissional.

Agradeço aos meus amigos da Geologia 015, Turmalindos, com os quais tive o prazer de conviver ao longo desses anos, seja em sala de aula, seja nas viagens de campo realizadas. Levo todos no coração. Mas gostaria de agradecer especialmente aqueles com quem criei os laços mais verdadeiros de amizade. Ao Ponce, Caxaxa, Silte, Priscila e Bigode que sempre estiveram presentes e me ajudaram em diversos momentos dessa empreitada. Ao meu grupo de mapeamento, Chaguri e Samara, por aguentarem minhas cobranças e chatices ao longo desse trabalho tão puxado (e claro, pelos inúmeros momentos divertidos que vivemos). E por fim, ao Caio Novais que se tornou minha dupla inseparável dos trabalhos da graduação e hoje é a amizade que terei de “aturar” para o resto da vida.

À moradia estudantil da UNESP que foi a minha primeira casa em Rio Claro e sem qual eu de forma alguma teria conseguido me graduar hoje. Às meninas da república Help, pelos dias de convivência e aprendizado, em especial a Zeia e Dani, duas mulheres que admiro profundamente.

Por fim agradeço à Luana Fernandes por ceder os dados para o desenvolvimento desse trabalho e por todo conhecimento transferido durante os meses de estágio em sua empresa. Ao Prof. Dr. Chang por aceitar a orientação do meu TCC e ao Dr. Elias Teramoto pela sugestão de tema, disposição, paciência e ótimos conselhos sobre a vida profissional e acadêmica.

“A utopia está lá no horizonte. Me aproximo dois passos, ela se afasta dois passos. Caminho dez passos e o horizonte corre dez passos. Por mais que eu caminhe, jamais alcançarei. Para que então serve a utopia? Serve para isso: para que eu não deixe de caminhar.”

Eduardo Galeano

RESUMO

Grande parte dos estudos envolvendo simulações de fluxo de água subterrânea e transporte de solutos em meios porosos negligencia a importante influência que a heterogeneidade geológica do aquífero pode exercer sobre o comportamento e destino de solutos dissolvidos em água subterrânea. Ao desconsiderar as inúmeras incertezas associadas ao meio geológico, o modelador pode realizar previsões errôneas sobre a migração de contaminantes e até mesmo conduzir a escolha de sistemas de remediação inapropriados. Sabendo-se disso, o presente trabalho propõe-se a investigar a influência da heterogeneidade geológica no transporte e destino de contaminantes dissolvidos em águas subterrâneas numa área do Aquífero Resende, na região de Guarulhos. Este aquífero apresenta uma forte heterogeneidade litológica, o que acarreta em um elevado grau de incerteza quanto ao arranjo espacial dos litotipos e dos parâmetros hidráulicos, tornando a previsão da migração de contaminantes mais complexa. Além disso a presença de corpos arenosos com elevada permeabilidade neste aquífero é um fator de extremo interesse para este estudo, visto que uma possível conectividade destes corpos pode levar a formação de caminhos de fluxo preferenciais, por onde o transporte de soluto é mais eficiente. Para se atingir o objetivo proposto, foram gerados diferentes cenários geológicos igualmente prováveis baseados no método estocástico de cadeias de Markov, utilizando o programa computacional T-PROGS. Estes cenários foram então utilizados como parâmetros de entrada nos *softwares* MODFLOW e MT3DMS, com intuito de simular o fluxo e transporte de contaminante em cada um dos cenários gerados. As simulações estocásticas resultaram em um conjunto de cenários amplamente discrepantes, os quais são constituídos por litotipos com diferentes distribuições espaciais e corpos arenosos de baixa conectividade. As simulações de transporte de soluto, por sua vez, produziram plumas de contaminante cujas dimensões, formas e valores de massa mostraram-se bastante variáveis a depender do cenário analisado. Esta variabilidade de resultados reforça o caráter heterogêneo do aquífero e aponta para um elevado grau de incerteza quanto às propriedades hidrogeológicas da área de estudo.

Palavras-chave: Modelos estocásticos. Cadeias de Markov. Heterogeneidade geológica. Transporte de soluto

ABSTRACT

Most studies involving groundwater flow simulation and solute transports in a porous environment have neglected the important influence that geological heterogeneity can exert on the behavior and final destination transport of dissolved solutes in groundwater. By disregarding innumerable uncertainties associated with geological environment, the hydrogeological modeler can make wrong forecasts about the contaminant migration, and even lead to an inappropriate remediation system choice. Considering this, the purpose of this study is to investigate the influence of geological heterogeneities on the transport and underground migration of dissolved pollutants of an area inside Resende Aquifer, at the city of Guarulhos municipality, São Paulo State, Brazil. The Resende Aquifer has a strong lithological heterogeneity, which can generate a high degree of uncertainty when it comes to spatial arrangement of lithotypes and hydraulic parameters, turning more complex the pollutant migration forecast. Besides, the presence of sandy portions with high permeability in the aquifer is a factor of extreme interest for this study, since the possible connection between portions of geological layers can lead to preferential flow paths, where the solute transportations are more efficient. To achieve this objective, many different geological scenarios were generated equally likely, based on the stochastic Markov chain method, using the T-PROGS software. Those scenarios were used as entry parameters on the softwares MODFLOW and MT3DMS, in order to simulate flow and direction of transport in each one scenario. The stochastic simulation presented in this study resulted in a set of widely discrepant scenarios which are formed by lithotypes with different spatial distributions and sandy portions of low connectivity. The solute transport simulations, on the other hand, yielded pollutant plumes whose dimensions, shapes and mass values would vary depending on the scenario analysis. This variability of results fortifies the heterogeneous character of the aquifer and it is suitable for a high degree of uncertainty regarding the hydrogeological properties of the study area.

Keywords: Stochastic models. Markov chain. Geological heterogeneity. Solute transport

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	11
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	13
2. 1 Classificação dos aquíferos	13
2.2 Modelagem hidrogeológica	14
<i>2.2.1 O modelo estocástico de Cadeias de Markov e o software T-PROGS.....</i>	<i>17</i>
2.3 Transporte de solutos em meios porosos	20
<i>2.3.1 Advecção.....</i>	<i>21</i>
<i>2.3.2 Dispersão hidrodinâmica</i>	<i>22</i>
<i>2.3.3 Difusão molecular</i>	<i>22</i>
<i>2.3.4 Dispersão mecânica</i>	<i>23</i>
<i>2.3.5 Retardamento</i>	<i>25</i>
<i>2.3.6 Biodegradação</i>	<i>26</i>
3 CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO	27
3.1 Localização	27
3.2 Clima.....	27
3.3 Hidrologia e Hidrogeologia.....	28
3.4 Geomorfologia.....	30
3.5 Geologia Regional	32
3.6 Contexto geológico do município de Guarulhos	34
4 MATERIAIS E MÉTODOS	37
4.1 Revisão bibliográfica e compilação de informações litológicas.....	37
4.2 Definição dos litotipos e associação com os valores de condutividade hidráulica	38
4.3 Simulação das heterogeneidades geológicas.....	38

4.3.1 Criação do grid - GMS.....	38
4.3.2 Geração dos cenários geológicos no software T-PROGS.....	40
4.4 Simulações de fluxo de água subterrânea - MODFLOW	41
4.5 Simulações de transporte de soluto- MT3DMS	42
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES	44
5. 1 Caracterização e distribuição dos litotipos identificados na área de estudo.....	44
5.2 Cenários geológicos	45
5.3 Simulações de transporte de contaminante.....	50
6 CONCLUSÃO.....	57
7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	58
APÊNDICE A – Cenários Geológicos.....	66
APÊNDICE B – Simulações de transporte	81
APÊNDICE C – Tabelas	96

1 INTRODUÇÃO

Modelos matemáticos têm se consolidado cada vez mais como uma ferramenta estratégica no setor de gerenciamento de áreas contaminadas, pois a partir deles é possível realizar previsões do comportamento de contaminantes em subsuperfície. Dentre os tipos de modelos matemáticos empregados em simulações de fluxo e transporte de contaminantes destacam-se os modelos determinísticos e estocásticos (ou probabilísticos). Os modelos determinísticos são, historicamente, o tipo de abordagem mais utilizada em estudos dessa natureza. Entretanto, apesar de sua ampla utilização, configuram-se como modelos limitados e insuficientes, uma vez que são incapazes de incorporar as heterogeneidades geológicas do meio físico que, por sua vez, influenciam diretamente a migração de contaminantes dissolvidos em águas subterrâneas. Diante disso, as previsões de transporte de contaminante utilizando abordagens determinísticas podem produzir previsões não condizentes com a realidade, levando a ineficiência dos métodos de remediação empregados.

Alternativamente aos tradicionais modelos determinísticos, surgem então os modelos estocásticos e com eles a possibilidade de se incorporar à modelagem as incertezas associadas a heterogeneidade geológicas presente em muitos aquíferos. Desde a década de 1980, uma variedade de artigos foi publicada abordando a aplicação de modelos estocásticos em simulações numéricas de fluxo e transporte de solutos. Entre os diversos métodos de simulações estocásticas surgidos a partir de então, a técnica probabilística de cadeias de Markov tornou-se referência. As cadeias de Markov são aplicadas em geologia para modelar variáveis discretas como fácies e litologias e utilizam como base o conceito de probabilidade de transição entre os diferentes materiais geológicos. Como produto final, a abordagem Markoviana produz “n” cenários geológicos equiprováveis, caracterizados por diferentes arranjos estratigráficos e, consequentemente, diferentes padrões de distribuição dos parâmetros hidráulicos.

Entretanto, apesar de os modelos estocásticos reproduzirem de maneira satisfatória a variabilidade dos valores de condutividade hidráulica (K) ao longo de um aquífero, muitos autores apontam que o transporte de solutos está, para além da distribuição aleatória de condutividade hidráulica, fortemente condicionado a presença de caminhos de fluxos preferências, os quais são denominados de canais (FOGG, 1986; KOLTERMAN & GORELOCK, 1996; MAXWELL et al., 2008; BIANCHI et al., 2011). Esses canais correspondem a fácies de alto K, como os corpos de areia interconectados ao longo do aquífero, por onde o transporte de soluto se dá de maneira mais eficiente. De acordo com Fogg (1986), por exemplo, em aquíferos de origem fluvial, o transporte

de solutos ao longo de fácies arenosas desconectadas é cerca de 10 a 1000 vezes menor em comparação as porções do aquífero onde estas fácies estão interconectadas. Nesse sentido, a avaliação da interconectividade de fácies altamente permeáveis, a qual pode ser feita por meio das simulações estocásticas, constitui uma etapa fundamental para o entendimento da migração de solutos em meios geológicos heterogêneos.

Diante do exposto, o presente trabalho propõe-se a investigar o efeito da heterogeneidade geológica no transporte e destino de contaminantes dissolvidos em águas subterrâneas em uma área do Aquífero Resende, localizada no município de Guarulhos (SP). A escolha do aquífero em questão é devido a sua constituição litológica heterogênea e pela presença de corpos arenosos altamente permeáveis, o que dificulta a previsão do comportamento da pluma de contaminação e, por consequência, a escolha do sistema de remediação mais adequado a situação apresentada. Para isso, foram utilizados dados litológicos de 13 sondagens realizadas na área de estudo que serviram como dados de entrada no T-PROGS (CARLE & FOGG, 1997). O T-PROGS é um *software* utilizado para modelar a heterogeneidade litológica através do método estocástico de cadeias de Markov. Por meio desse aplicativo, foram gerados 30 cenários geológicos igualmente prováveis para esta área do Aquífero Resende. Por fim, estes cenários foram utilizados como parâmetros de entrada no *software* MODFLOW e MT3DMS, gerando-se ao final uma solução de fluxo e transporte de massa para cada um dos cenários gerados.

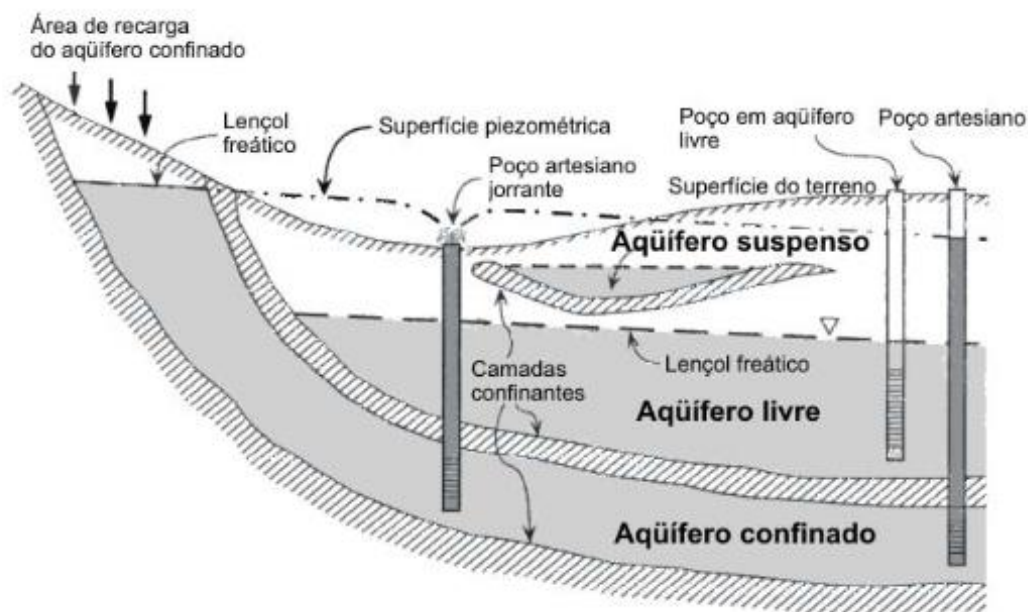
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Classificação dos aquíferos

Apesar de sua ampla utilização dentro do campo de hidrogeologia, o termo “aquífero” pode apresentar uma variedade de significados a depender do contexto em que é aplicado e até mesmo de quem o utiliza. Dentre os diversos contextos de aplicação desse termo, pode-se citar seu uso para se referir a camadas geológicas, grupos e até mesmo formações geológicas (FREEZE & CHERRY, 1979).

De acordo com Fetter (2000), um aquífero pode ser entendido como uma unidade geológica que apresenta capacidade de armazenar e transmitir água em condições naturais, propiciando a movimentação de significativa quantidade de água. São classificados de acordo com sistema de pressão das águas nas suas superfícies limítrofes e também em função da capacidade de transmissão de água das respectivas camadas que os delimitam no topo e na base (FEITOSA et al., 2000). Nesse contexto são conhecidos quatro tipos de aquíferos: livres, confinados, mistos e suspensos (Figura 1).

Figura 1-Classificação dos diferentes tipos de aquíferos de acordo com o sistema de pressão de suas águas e com a natureza das camadas que o delimitam no topo e na base.



Fonte: Kresic, 2007.

Um aquífero livre ou também denominado aquífero freático é aquele cujo o nível freático corresponde ao limite superior e encontra-se sob pressão atmosférica. O aquífero confinado, por sua vez, é definido como formação geológica permeável limitada abaixo e acima por estratos relativamente impermeáveis ou de baixa permeabilidade e que são submetidos a pressões maiores do que a pressão atmosférica (CLEARY, 2007). Aquíferos mistos representam uma junção dos aquíferos citados acima. Por fim, o aquífero suspenso constitui um caso especial de aquífero livre formado sobre uma camada impermeável ou semipermeável de extensão limitada e situada entre a superfície freática regional e o nível do terreno (FEITOSA et al., 2000).

2.2 Modelagem hidrogeológica

Um modelo consiste na representação de um sistema real. Para Bear e Cheng (2010), a “arte” da modelagem tem por objetivo simplificar a descrição de um sistema real e prever comportamentos de modo a facilitar o planejamento e tomada de decisões em casos específicos.

Entretanto, ao se optar pela modelagem é necessário que sejam previamente traçados os objetivos do estudo para o qual esta será utilizada, tendo em vista que isso possibilitará o melhor aperfeiçoamento do modelo a ser gerado (ALMEIDA & SERRA, 2017). Nesse sentido, Anderson & Woessner (1992) argumentam que é fundamental que as seguintes perguntas sejam respondidas com intuito de se definir claramente os propósitos da modelagem: (1) O modelo a ser construído é para previsão, interpretação do sistema ou um exercício de modelagem genérico? (2) O que você quer aprender com o modelo? (3) Que perguntas você deseja que o modelo responda?

No campo da hidrogeologia, a modelagem é utilizada principalmente com intuito de se obter previsões de condições futuras através de simulações, o que auxilia profissionais e pesquisadores em suas atividades de avaliação, planejamento e gerenciamento dos recursos hídricos subterrâneos. Cabe destacar nesse contexto, o uso da modelagem como ferramenta estratégica no gerenciamento de áreas contaminadas, onde são empregados na quantificação do risco à saúde humana e escolha de sistemas de remediação.

Entre as diferentes classificações de modelos hidrogeológicos, destacam-se os grupos de modelos conceituais e modelos dinâmicos (FETTER, 2001). Os modelos conceituais são aqueles que descrevem a situação atual de um sistema hidrogeológico, sendo também conhecidos como modelos estáticos. Os modelos dinâmicos, por sua vez, realizam previsões de comportamento

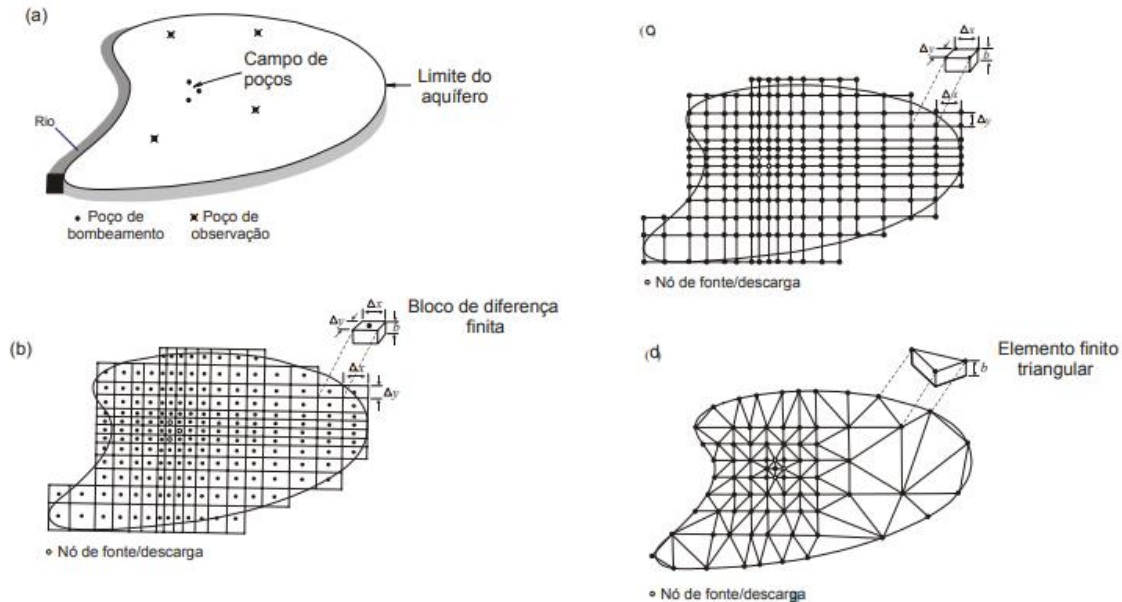
futuro (FETTER, 2001) e são subdivididos em outras três categorias: modelos em escala física, modelos analógicos e modelos matemáticos. No presente trabalho será utilizado um tipo de modelo matemático e, dessa forma, na sequência será dado foco para caracterização deste tipo de modelo.

Modelos matemáticos de fluxo de água subterrânea são constituídos por três pilares principais: (1) uma equação governante responsável por representar os processos dentro do domínio da área de trabalho; (2) condições de contornos que representam processos atuantes nos limites do modelo; e (3) condições iniciais que especificam valores da variável dependente (isto é, carga) no início da simulação para problemas dependentes do tempo (ANDERSON & WOESSNER, 1992).

A depender do tipo de solução adotada, os modelos matemáticos podem ainda ser diferenciados entre modelos do tipo analíticos e modelos numéricos. Modelos analíticos utilizam soluções matemáticas deduzidas para representar situações simplificadas, fornecendo valores exatos do problema. Todavia, tais modelos pressupõe meios isotrópicos, homogêneos e de geometrias simplistas.

Os modelos numéricos utilizam uma forma aproximada da equação governante para calcular a altura manométrica em locais de interesse. Contrapõe-se as soluções analíticas, uma vez que as soluções numéricas não são contínuas no espaço ou no tempo e a carga hidráulica é obtida para pontos discretos (nós) e para determinados intervalos de tempo (ANDERSON & WOESSNER, 1992). Entre os principais tipos de modelos numéricos, o método de diferenças finitas e o método de elementos finitos são os mais empregados na modelagem de águas subterrâneas. A diferença principal entre os dois métodos consiste basicamente na estruturação de suas malhas (Figura 2). No método de diferenças finitas os nós são posicionados no espaço tridimensional através de índices (i, j, k , respectivamente) que representam as colunas, linhas e camadas de uma malha regular (ANDERSON & WOESSNER, 1992), cujas linhas são sempre ortogonais entre si. O método de elementos finitos é composto por uma malha estruturada por elementos poligonais, frequentemente triangulares e os nós nesta malha são identificadas por coordenadas espaciais (x, y, z).

Figura 2- Representação de diferenças finitas e elementos finitos da região de um aquífero. Em **(a)** vista do mapa do aquífero exibindo o campo de poços de observação e seus limites; **(b)** Grid de diferenças finitas com nós centrados no bloco, no qual Δx é o espaçamento na direção x, Δy é o espaçamento na direção y, e b é a espessura do aquífero; **(c)** Grid de diferenças finitas com nós centrados na malha; **(d)** Malha de elementos finitos com elementos triangulares, onde b é a espessura do aquífero



Fonte: Adaptado de MERCER & FAUST, 1980 apud WANG & ANDERSON, 1992.

Para aplicação de qualquer um dos métodos numéricos, é necessária a utilização de um algoritmo computacional (código) que é escolhido em função do problema a ser resolvido. Para construção do modelo fluxo deste trabalho, etapa precedente ao desenvolvimento do modelo transporte de soluto, optou-se pelo algoritmo computacional Modflow. O Modflow é um modelo numérico 3D, baseado no método numérico de diferenças finitas com bloco centrado desenvolvido pelo Serviço Geológico dos Estados Unidos (USGS – sigla em inglês- United States Geological Survey).

Por fim, durante a construção de um modelo numérico, duas abordagens distintas podem ser seguidas: determinística ou estocástica. Nos modelos ditos determinísticos a partir de uma base de dados de entrada produz-se um único resultado, sendo este resultado expresso através de soluções exatas. Os parâmetros são tratados independentemente da teoria das probabilidades e, dessa forma, a influência de variáveis aleatórias é ignorada. Comumente, estes modelos recebem também a designação “caixa branca”, isto porque os parâmetros de entrada, estruturas e condições de contorno são conhecidos e controlados pelo modelador, que se baseia no conhecimento físico do processo para assim determiná-lo (MANZIONE, 2014).

Os modelos estocásticos são empíricos e baseiam-se em leis de probabilidade e estatística. Nesse sentido, os dados de campo, por exemplo, são compreendidos como resultados de um processo aleatório e as técnicas de simulação empregadas no modelo permitem a obtenção de várias soluções equiprováveis para o problema (WOTTRICH, 2012). As equações governantes de fluxo são representadas por equações diferenciais parciais estocásticas, cujas soluções não são mais números determinísticos, mas distribuições de probabilidade das variáveis dependentes (ZHANG, 2001). Embora as técnicas determinísticas sejam tradicionalmente as mais utilizadas, as simulações estocásticas ganharam destaque a partir da década de 1980, uma vez que são capazes de incorporar e quantificar as incertezas relacionadas ao meio físico, sendo utilizadas, principalmente, na caracterização de aquíferos com arcabouço geológico heterogêneo (GELHAR, 1993).

Com a finalidade de se compreender o transporte de contaminantes sob a influência da heterogeneidade litológica, no presente trabalho foram gerados diferentes cenários geológicos empregando-se o método estocástico de cadeias de Markov por meio do *software* T-PROGS.

2.2.1 O modelo estocástico de Cadeias de Markov e o software T-PROGS

A cadeia de Markov é um caso particular de modelo estocástico que, quando aplicado ao tempo, define que a probabilidade de qualquer evento futuro ocorrer depende exclusivamente do estado atual, desprezando-se os estados passados. Em termos matemáticos, um processo estocástico é dito ser um processo Markoviano se:

$$P [X_{n+1} = i_{n+1} | X_n = i_n, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_1 = i_1, X_0 = i_0] = P [X_{n+1} = i_{n+1} | X_n = i_n] \quad (2.1)$$

De modo sucinto, essa definição significa que a probabilidade de estarmos no estado i_{n+1} no momento X_{n+1} não depende do passado ($X_0, X_1, \dots, X_{n-1}$), mas sim do estado presente X_n . (CASTRO, 2015).

Nos modelos Markovianos as probabilidades são conhecidas como probabilidades de transição (p_{ij}) e representam, portanto, a probabilidade de se estar no estado i e ir para o estado j . Além disso, é conveniente escrever as probabilidades de transição em forma de uma matriz $n \times n$, $P = [p_{ij}]$, chamada matriz de transição (Figura 3).

Figura 3- Exemplo de uma matriz de probabilidade de transição genérica.

$$P = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \dots & p_{1j} & \dots \\ p_{21} & p_{22} & \dots & p_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \\ p_{i1} & p_{i2} & \dots & p_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Fonte: Elaborado pela autora

Sabendo que p_{ij} representa uma probabilidade, duas propriedades são assumidas:

1. os elementos da matriz P são não-negativos e estão compreendidos no intervalo de 0 a 1 ($0 \leq p_{ij} \leq 1$);
2. a soma de cada uma de suas linhas é igual a 1.

Quando aplicada em termos de distribuição espacial de materiais, a variável “tempo” no processo Markoviano é substituída pela distância entre pares de dados (*lag*) e, dessa forma, a ocorrência de uma categoria/material é inteiramente dependente da ocorrência mais próxima ou da mesma categoria/material (WALKER, 2002).

As cadeias de Markov empregadas para representar sistemas de variabilidade espacial são comumente representadas por cadeias unidimensionais (1D), entretanto, é possível realizar a manipulação de cadeias 1D de modo a estendê-las para as demais dimensões. Dessa forma, a partir das cadeias de Markov 3D resultantes, é possível então analisar a variabilidade espacial de determinados materiais/categorias ao longo das direções X e Y, com base na variabilidade observada na direção vertical (Z). É a partir de tal premissa que se fundamenta o *software* T-PROGS.

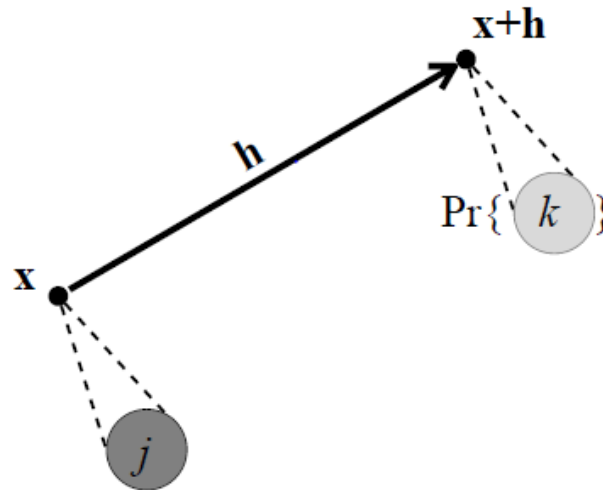
O *software* T-PROGS, desenvolvido por CARLE & FOGG (1997) tem por objetivo realizar simulações geoestatísticas de variáveis categóricas (fácies, unidades geológicas etc) através do conceito de probabilidade de transição. Segundo Carle (1999), o T-PROGS simplifica a relação entre atributos observáveis básicos (comprimentos médios, proporção de litologias, anisotropia e justa-posição) e os parâmetros do modelo, por meio da incorporação de interpretações subjetivas durante o processo de desenvolvimento do modelo. Como principal simplificação, nesse sentido,

o autor sugere para a medida da variabilidade espacial a utilização da probabilidade de transição ou abordagem Markoviana ao invés da abordagem tradicional que se utiliza de variogramas cruzados.

A probabilidade de transição aplicada a distribuição dos materiais geológicos define simplesmente que a probabilidade da litologia k ocorrer na localização $x+h$ depende tão somente da litologia presente na posição x (TERAMOTO, CHANG & CAETANO CHANG, 2017). A probabilidade de transição $t_{j,k}(h)$ pode então ser definida através da equação abaixo e representada graficamente pela Figura 4.

$$t_{jk}(h) = Pr \{k \text{ ocorre em } x + h \mid j \text{ ocorrer em } x\} \quad (2.2)$$

Figura 4- Representação gráfica da transição de probabilidade entre j e k



Fonte: Carle (1999).

Onde k e j correspondem a categorias mutuamente exclusivas, como unidades geológicas ou fácies; x é um vetor de localização espacial e h é um vetor de separação (*lag*) ou passo. A probabilidade de transição origina-se da definição de uma probabilidade condicional, como segue:

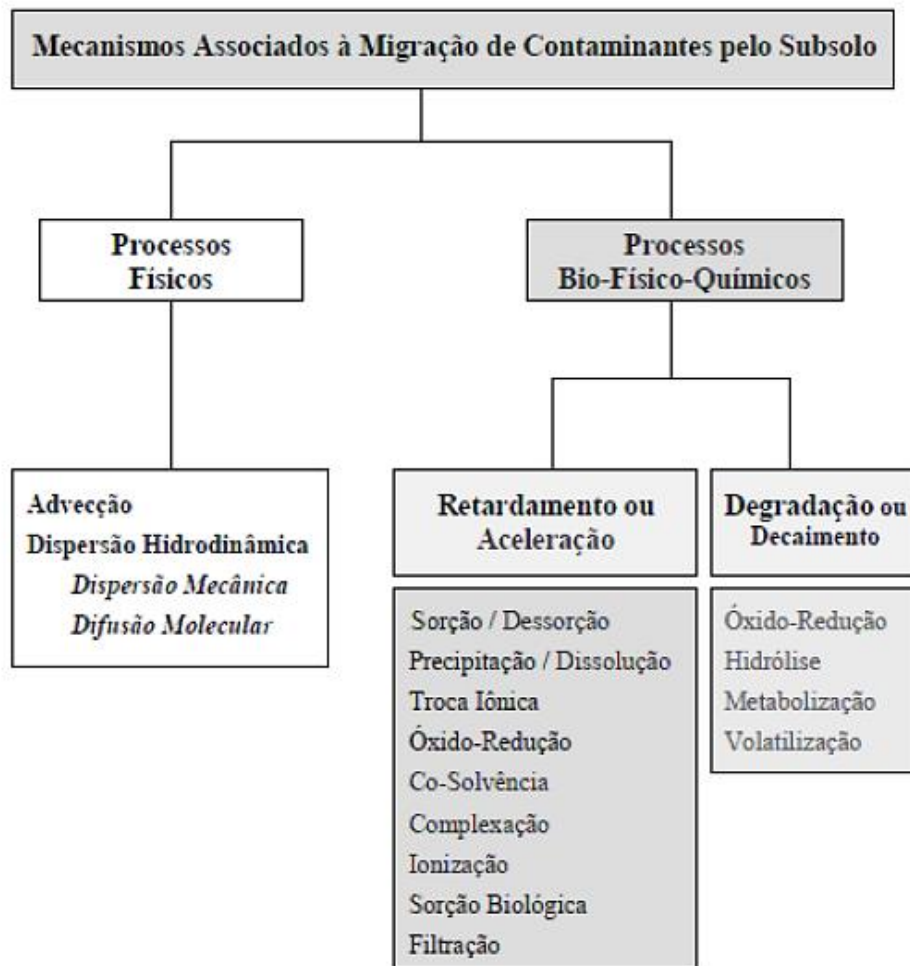
$$Pr \{B' \mid A\} = \frac{Pr \{A \text{ e } B'\}}{Pr \{A\}} \quad (2.3)$$

Sendo que “A” representa { j ocorrer em x } e “B” representa { k ocorrer em $x+h$ }.

2.3 Transporte de solutos em meios porosos

Previamente à realização das simulações de transporte de solutos em águas subterrâneas, é necessário compreender os processos físicos, químicos e biológicos que governam o comportamento dos contaminantes em meio subterrâneo. Na Figura 5 é apresentado um esquema apontando os principais processos físicos e bio-físico-químicos envolvidos no transporte e transformação de solutos. Na sequência é realizada uma breve definição dos parâmetros principais.

Figura 5- Mecanismos associados à migração de contaminantes no subsolo



Fonte: Thome, 2005.

2.3.1 Advecção

Advecção é um mecanismo transporte de soluto no qual a migração do contaminante ocorre, em função da existência de um gradiente hidráulico, através do fluxo de água subterrânea. Dessa forma, considerando-se apenas a influência da advecção, o soluto se moverá na mesma direção e com igual velocidade da água no meio poroso. Esta velocidade, conhecida como velocidade média linear do fluxo, está diretamente relacionada das propriedades do aquífero, como a porosidade, e pode ser obtida através da equação (FETTER, 2001):

$$v_x = \frac{k}{n_e} \frac{dh}{dl} \quad (2.4)$$

Onde:

v_x = velocidade linear média;

k = condutividade hidráulica;

n_e = porosidade efetiva do meio poroso;

dh/dl = gradiente hidráulico.

Conhecendo-se a velocidade média do fluxo de água subterrânea, bem como a concentração do soluto e a porosidade efetiva, é possível obter, a partir da fórmula abaixo (2.5), o fluxo de massa unidimensional por advecção:

$$F_x = v_x n_e C \quad (2.5)$$

Onde:

F_x = fluxo de massa de soluto [$M/L^2/T$];

v_x = velocidade linear média do fluxo [L/T];

n_e = porosidade efetiva;

C = concentração do soluto dissolvido em água subterrânea [M/L^3].

Por sua vez, a equação de transporte advectivo unidimensional é representada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.6)$$

Onde:

$\partial C / \partial t$ = variação da concentração no tempo (T);

v_x = velocidade linear média;

$\partial C / \partial x$ = variação da concentração no espaço.

2.3.2 Dispersão hidrodinâmica

A dispersão hidrodinâmica é um mecanismo de transporte que combina os processos difusão molecular e dispersão mecânica, os quais promovem, conjuntamente, o espalhamento longitudinal e transversal em relação à direção de migração da pluma de contaminação (FETTER, 1994). Esses dois processos quando combinados definem a variável D, denominada coeficiente de dispersão hidrodinâmica, conforme segue:

$$D_L = a_L v_i + D^* \quad (2.7)$$

$$D_T = a_T v_i + D^* \quad (2.8)$$

Onde:

D_L = coeficiente de dispersão hidrodinâmica paralelo à direção de fluxo (longitudinal) [L²/T];

D_T = coeficiente de dispersão hidrodinâmica perpendicular à direção de fluxo (transversal) [L²/T];

a_L = dispersividade dinâmica longitudinal [L];

a_T = dispersividade dinâmica transversal [L];

D^* = coeficiente de difusão efetiva.

2.3.3 Difusão molecular

A difusão molecular, ou simplesmente difusão, é o processo pelo qual as espécies iônicas e moleculares dissolvidas em água migram de uma área de maior concentração para uma área de menor concentração (FETTER, 1999). Para situações em que não existe variação de concentração

do contaminante ao longo do tempo e o fluxo é unidimensional, a difusão é definida através da 1ª Lei de Fick. O sinal negativo representa o movimento das áreas de grande concentração para as áreas de menor concentração:

$$F_x = -D^* \frac{dC}{dx} \quad (2.9)$$

Onde:

F_x = fluxo de massa do soluto por unidade de área por unidade de tempo [M/L^2];

D^* = coeficiente de difusão efetiva [L^2/T];

C = concentração do soluto [M/L^3];

dC / dx = gradiente de concentração ($M/L^3/L$).

Entretanto em sistemas onde ocorre a variação de concentração em função do tempo, deve-se utilizar para cálculo da difusão molecular a 2ª Lei de Fick, dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.10)$$

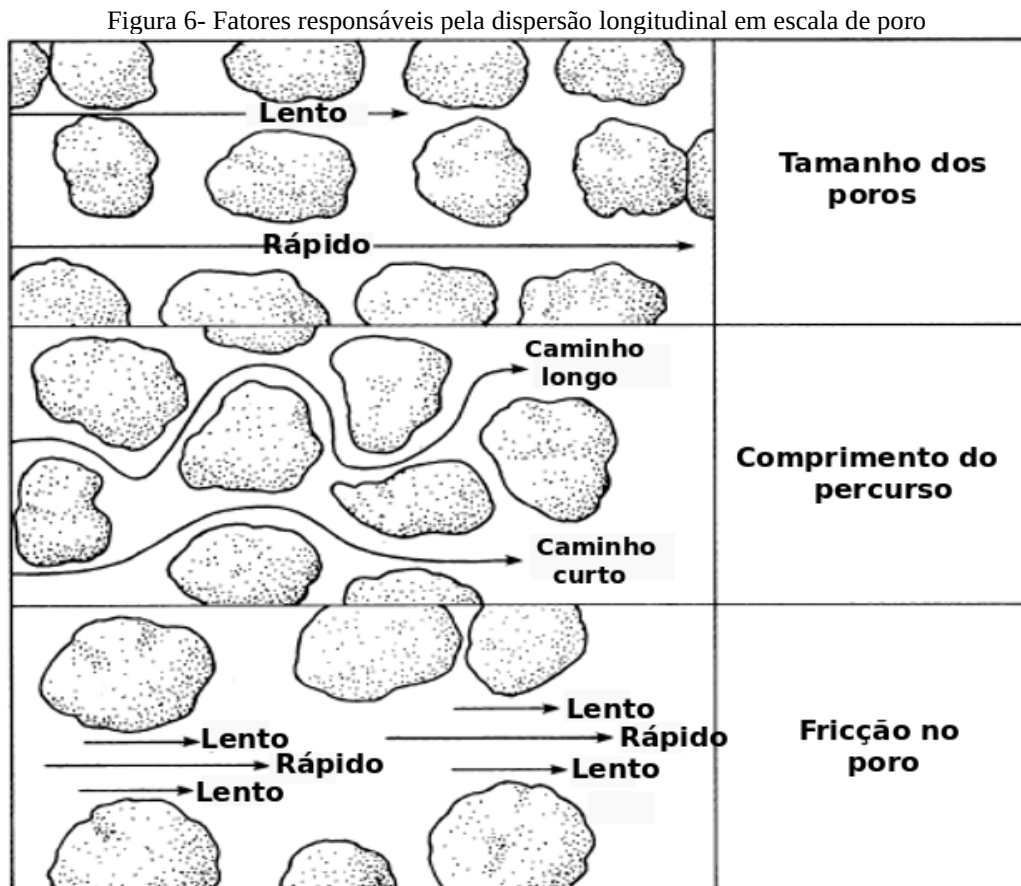
Onde:

$\partial C / \partial t$ = mudança de concentração no tempo ($M/L^3/T$)

2.3.4 Dispersão mecânica

Quando um fluido contaminado flui através de um meio poroso e mistura-se com água não contaminada, ocorre a diluição desse contaminante. Este processo é conhecido como dispersão ou dispersão mecânica. A mistura que ocorre ao longo da direção do caminho de fluxo é chamada dispersão longitudinal (α_x), ao passo que a dispersão perpendicular à direção de fluxo é denominada dispersão transversal (α_y) (FETTER, 2018). De modo geral, a dispersividade longitudinal é sempre maior que a dispersividade transversal e como consequência a pluma de contaminante possui uma forma mais alongada no sentido do fluxo de água subterrânea.

Existem três principais fatores que explicam o fenômeno da dispersividade longitudinal (Figura 6): (1) A medida que a água subterrânea move-se através dos poros, esta adquire maior velocidade no centro do poros do que nas bordas devido à fricção; (2) algumas partículas de fluido percorrem caminhos menos tortuosos (mais rápidos) em relação a outras que atravessam caminhos mais sinuosos (mais lentos); (3) a existência de poros maiores, faz com que o fluido que ao atravessar tais poros movimente-se mais rapidamente (FETTER, 2018).



Fonte: Adaptado de Fetter, 2018.

O cálculo da dispersividade longitudinal é comumente realizado através de relações empíricas. Existe atualmente mais de uma relação matemática por meio da qual é possível se determinar α_x em função do comprimento da pluma (L). No Tabela 1 são destacadas algumas das relações mais utilizadas para obtenção deste parâmetro:

Tabela 1-Principais relações empíricas para determinação da dispersividade longitudinal

Equação (α_x em função do tamanho da pluma)	Autores
$\alpha_x = 0,1L$	Lallemand-Barres e Peaudecerf (1978)
$\alpha_x = 0,0175 * L^{1,46}$	Neuman (1990)
$\alpha_x = 0,83 * [\log_{10}(L)]^{2,414}$	Xu e Eckstein (1995)

Fonte: Elaborado pela autora

De modo semelhante à dispersividade longitudinal, o cálculo da dispersividade transversal (α_y) e da dispersividade vertical (α_z) também pode ser realizado através de relações empíricas. Tais relações relacionam tanto (α_y) quanto (α_z) em função da dispersividade longitudinal, conforme apresentado nas Tabelas 2 e 3.

Tabela 2-Relações empíricas utilizadas para determinação da dispersividade transversal

Equação (α_y em função de α_x)	Autores
$\alpha_x = 0,1L$	Gelhar et al (1992)
$\alpha_y = 0,33\alpha_x$	ASTM (1995), EPA (1986)
$\alpha_y = 0,05\alpha_x$ até $\alpha_y = 0,167\alpha_x$	Anderson (1979) e Klotz (1980)

Fonte: Elaborado pela autora.

Tabela 3-Relações empíricas utilizadas para determinação da dispersividade vertical

Equação (α_y em função de α_x)	Autores
$\alpha_x = 0,1L$	Gelhar et al (1992)
$\alpha_y = 0,33\alpha_x$	ASTM (1995), EPA (1986)
$\alpha_y = 0,05\alpha_x$ até $\alpha_y = 0,167\alpha_x$	Anderson (1979) e Klotz (1980)

Fonte: Elaborado pela autora.

2.3.5 Retardamento

Segundo Bear & Cheng (2010), a sorção é um mecanismo no qual parte da massa de um contaminante (íon molécula) presente no líquido adere aos vazios ou sobre parte da matriz sólida do meio poroso. Esse fenômeno é responsável pelo efeito de retardamento (redução da velocidade de movimento do soluto), pois ao “aderirem” à superfície sólida do meio no qual está inserido, o contaminante passa a se mover mais lentamente em relação à velocidade da água subterrânea que

o transporta. Os processos de sorção incluem diferentes mecanismos como a adsorção física, adsorção química, absorção e troca iônica (FETTER, 2018). Comumente, o termo “sorção” é empregado em diversos estudos de transporte de contaminante de forma genérica para representar estes três diferentes mecanismos.

2.3.6 Biodegradação

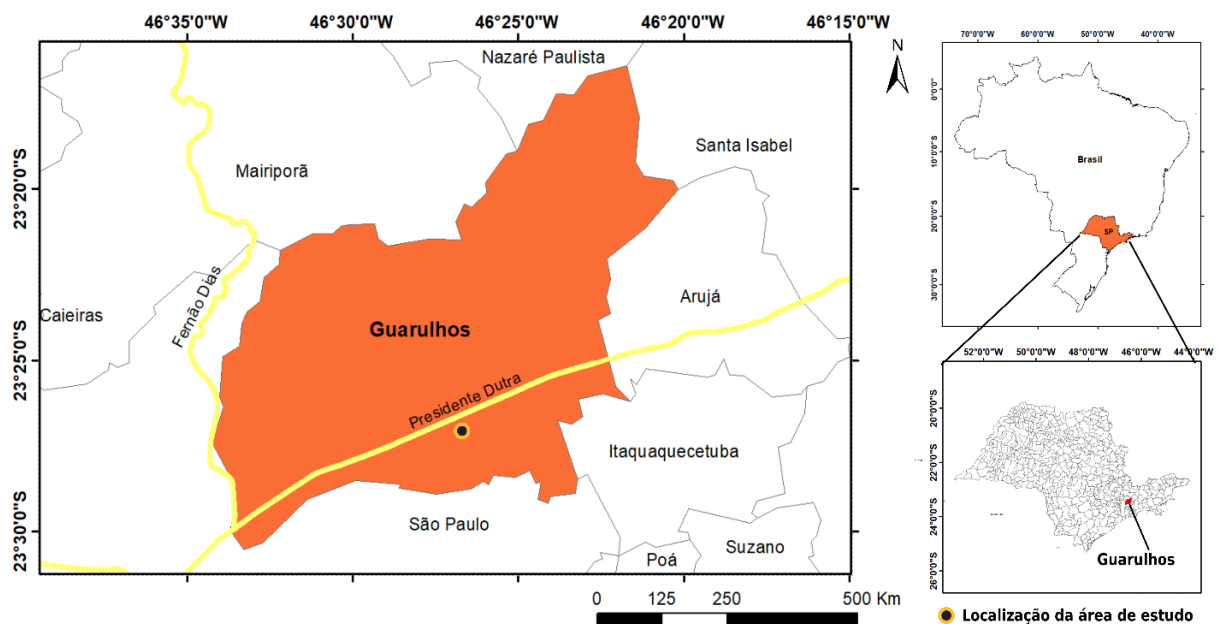
A biodegradação é um termo utilizado para representar as diversas reações biológicas responsáveis pelas quebras de cadeias orgânicas por meio da atividade metabólica de microrganismos presentes no meio subterrâneo. Se estes microorganismos utilizam do oxigênio para realizar a decomposição da matéria orgânica, a biodegradação é do tipo aeróbica. Entretanto, se o oxigênio não é necessário para o processo, a biodegradação é anaeróbica.

3 CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO

3.1 Localização

A área de estudo está localizada no município de Guarulhos (SP), porção nordeste da Região Metropolitana de São Paulo (RMSP) (Figura 7). Guarulhos apresenta como limite os municípios de Nazaré Paulista, Mairiporã, Arujá, Itaquaquecetuba e São Paulo. No que se refere à extensão territorial, o município possui cerca de 320 km² de extensão (CESAR, CAMPOS e OLIVEIRA, 2011) e apresenta localização estratégica, por estar posicionado entre a cidade de São Paulo e importantes eixos rodoviários como a Rodovia Fernão Dias (BR-381, liga São Paulo a Belo Horizonte) e Rodovia Presidente Dutra (BR-116, que liga São Paulo a Rio de Janeiro).

Figura 7- Localização do município de Guarulhos e da área de estudo



Fonte: Elaborado pela autora.

3.2 Clima

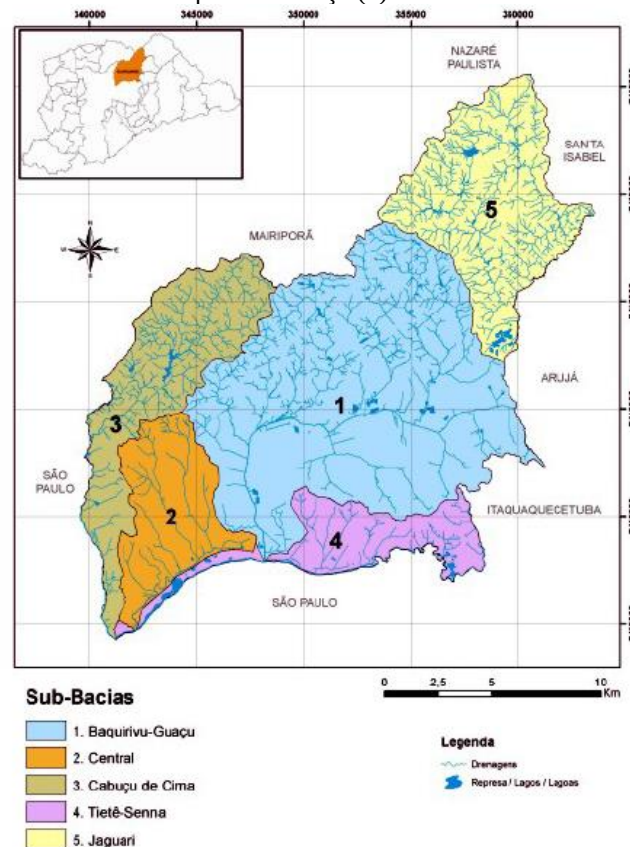
De acordo com a classificação do clima pelo sistema internacional de Koppen Geiger, o clima da região de Guarulhos é do tipo Cwa, clima subtropical de inverno seco e verão quente. Em relação a temperatura, a região de Guarulhos apresenta inverno frio e seco, com temperaturas

médias de 15°C, ao passo que nos meses de verão a média pode variar entre 23°C e 24°C (GRAÇA et al., 2007). O índice pluviométrico anual do município está entre 1.250 e 1.500mm (TORRESANI et al., 2016) e evaporação média de aproximadamente de 840mm (GUARULHOS, 2008).

3.3 Hidrologia e Hidrogeologia

No contexto regional, de acordo com o Plano de Recursos do Estado de São Paulo, a cidade de Guarulhos está inserida no domínio de duas Unidades de Gerenciamento de Recursos Hídricos (UGRHs): Alto Tietê (UGRHI - 06) e do Paraíba do Sul (UGRHI - 02). Dentre as duas UGRHs, a maior parte do município é englobada pela Bacia do Alto Tietê, abrangendo cerca de 14% em área (SANTOS, 2005). De modo específico, no território de Guarulhos localizam-se as seguintes bacias hidrográficas: Bacia do rio Jaguari, Bacia do rio Cabuçu de Cima, Bacia do Canal de Circunvalação, Bacia do rio Baquirivu-Guaçu e Bacia do rio Tietê (Figura 8).

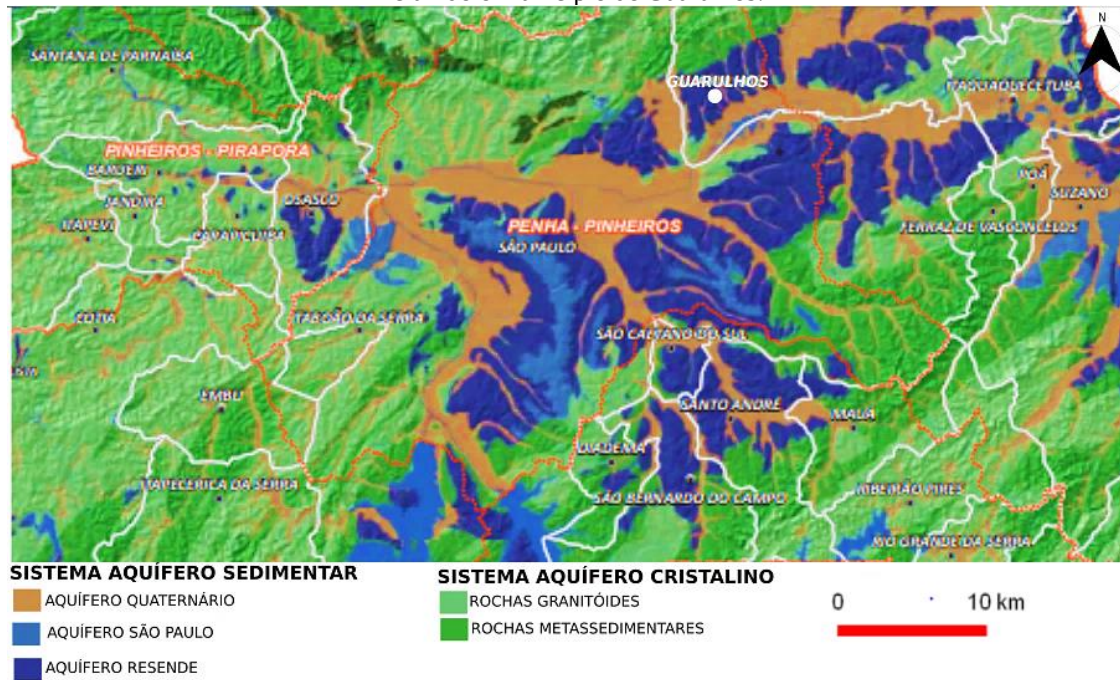
Figura 8- As sub-bacias hidrográficas do município de Guarulhos. A área de estudo está situada na sub-bacia do Baquirivu- Guaçu (1)



Fonte: Andrade et al., 2008

Quanto ao contexto hidrogeológico, em Guarulhos são identificados dois tipos de sistemas aquíferos de expressão regional denominados Sistema Aquífero Cristalino (SAC) e Sistema Aquífero Sedimentar (SAS) (Figura 9).

Figura 9- Distribuição dos Sistemas Aquíferos Sedimentar e Cristalino na Região Metropolitana de São Paulo, incluindo o município de Guarulhos.



Fonte: Modificado de FABHAT-SERVMAR (2012).

O SAC perfaz uma área de aproximadamente 60% do município e está associado ao manto de alteração e sistema de fissuras presentes em rochas ígneas e metamórficas. É caracterizado pela sua vasta heterogeneidade e baixas vazões (DINIZ,1996). De modo geral, as vazões no aquífero fissural possuem valor médio em torno de 2 a 6 m³/h, podendo alcançar raramente vazões em torno de 30 m³/h em áreas com presença de descontinuidades que possibilitam a circulação de um volume considerável de água (DINIZ, 1996).

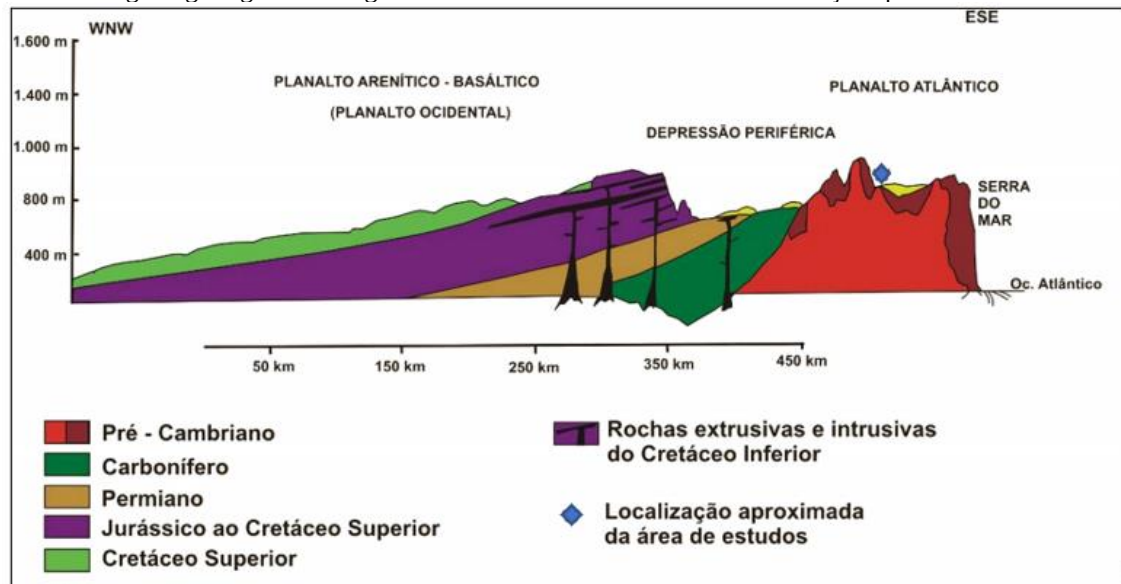
O SAS é formado pelos litotipos da Bacia de São Paulo, representado na área de estudo pela Formação Resende e aluviões quaternários que preenchem uma feição estrutural denominada Gráben do Baquirivu. O Aquífero Resende, unidade pertencente ao SAS, é frequentemente classificado como um aquífero de natureza predominantemente livre (DINIZ,1996), embora devido à forte heterogeneidade de seu arcabouço geológico, composto por sucessões de lentes e camadas

de areias intercaladas a corpos argilosos, este possa ser localmente definido como um aquífero de natureza semi-confinada (VIVIANI-LIMA, 2007). Ainda de acordo Diniz (1996) os poços situados no domínio do aquífero sedimentar, apresentam de modo geral maior produtividade que os poços instalados no aquífero cristalino, fornecendo em média 25 m³/h e podendo atingir até 120m³/h no Gráben do Baquirivu-Guaçu.

3.4 Geomorfologia

A área de estudo , à nível regional, está inserida no domínio da Província do Planalto Atlântico (ALMEIDA,1964) (Figura 10). Dentro do território de Guarulhos, especificamente, o relevo é relativamente plano em virtude da ocorrência dos sedimentos da Bacia de São Paulo (porção meridional), com predomínio de colinas e planícies aluviais. Na parte norte, o relevo é bastante acidentado, com importantes elevações como a Serra de Itaberaba e do Bananal, onde afloram rochas metassedimentares, metavulcânicas, graníticas e granodioríticas (DINIZ,1996).

Figura 10-Perfil geológico-geomorfológico do Estado de São Paulo com a localização aproximada da área de estudo



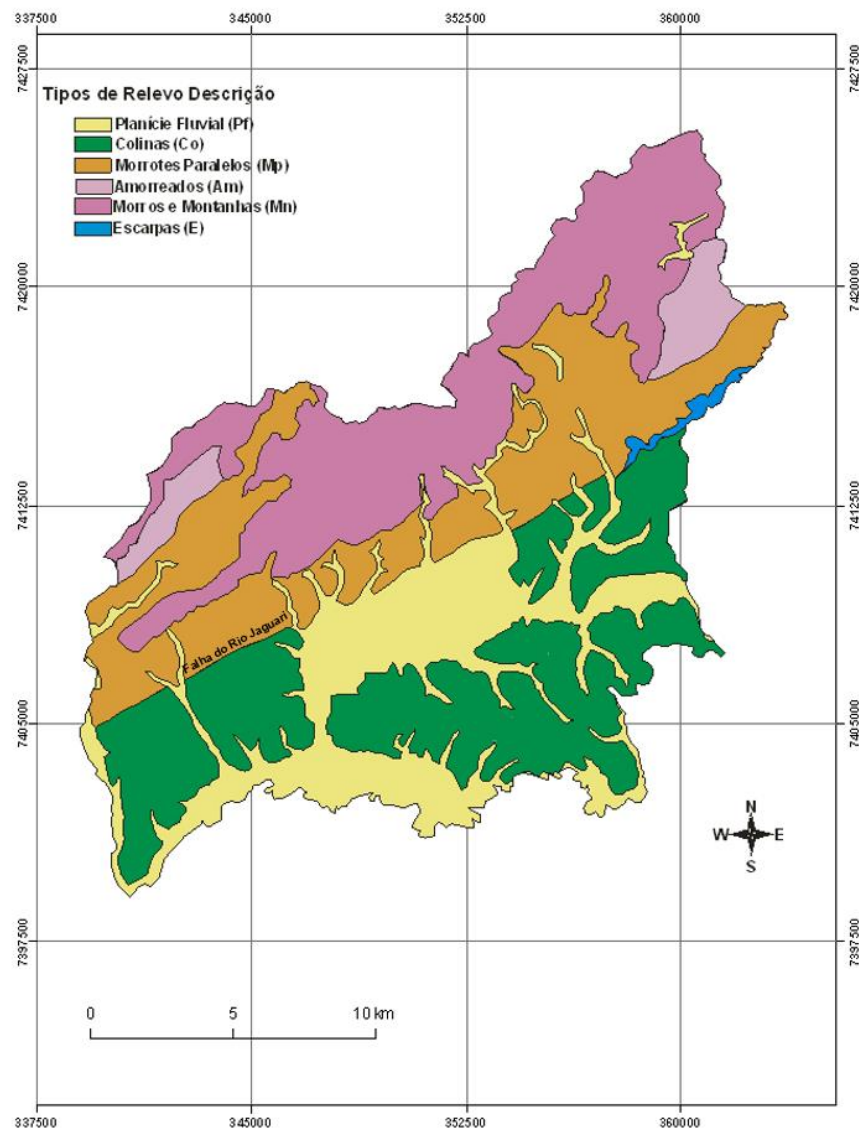
Fonte: Modificado de Andrade, 1999.

No que tange à altitude, as serras e morros da região ocorrem entre as cotas de 750m e 1200m, ao passo que o topo dos depósitos sedimentares situam-se entre as altitudes entre 720m e 820 m (DINIZ, 1996). Quanto à morfologia, as serras são caracterizadas por topos angulosos, com encostas retilíneas e vales fechados. O relevo de morros que contornam as serras alongadas

apresenta topos arredondados, vertentes de perfil convexo e retilíneo e vales fechados a abertos. Quanto ao relevo de colinas este possui forma de topo aplainada a arredondados, vales fechados e vertentes ravinadas com perfis convexos e retilíneos (PISSATO, 2009).

A partir de estudos geoambientais realizados em Guarulhos, Graça (2007) propôs uma nova classificação do relevo para área, separando o município em dois macrocompartimentos, norte e sul, em relação a Falha do Rio Jaguari. Esta divisão contempla formas e características distintas identificadas nas duas macro regiões (Figura 11).

Figura 11- Tipos de relevo da cidade de Guarulhos com base na classificação de Graça (2007).

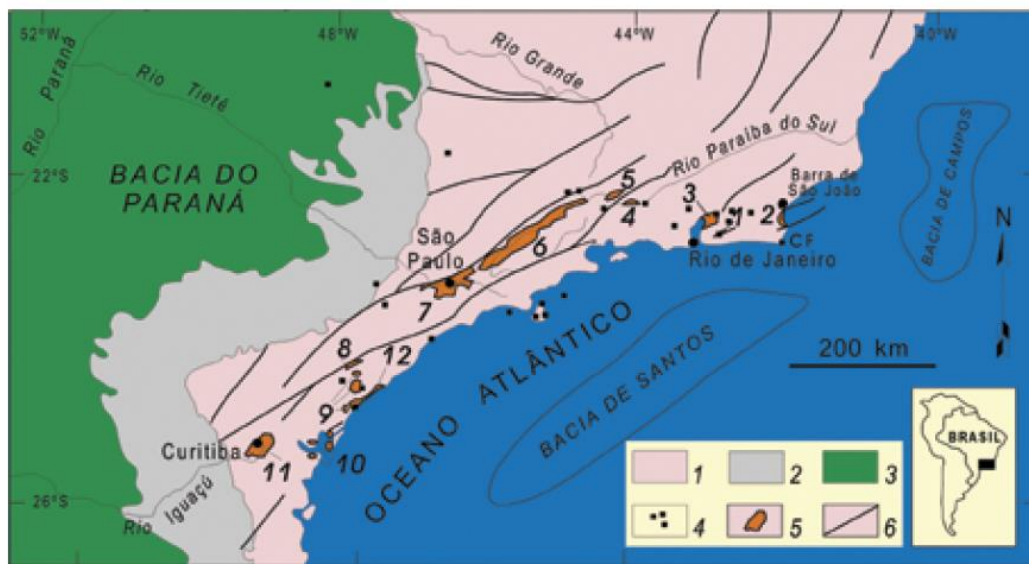


Fonte: Modificado de Oliveira *et al.*, 2005.

3.5 Geologia Regional

A Bacia sedimentar de São Paulo compõe juntamente como as bacias de Taubaté, Curitiba, Resende e Volta Redonda um conjunto de bacias tectogênicas localizadas no segmento central do *Rift* Continental do Sudeste do Brasil (RCSB) (RICCOMINI, 1989). Esta feição tectônica apresenta forma deprimida e alongada e estende-se entre as cidades de Curitiba (PR) e Barra de São João (RJ) ao longo de aproximadamente 800 km. Toda essa estrutura desenvolveu-se sobre terrenos policíclicos pré-cambrianos referíveis ao Cinturão de Dobramentos Ribeira (HASUI et al., 1975), sendo este constituído por rochas metamórficas, migmatitos e granitoides relacionados ao Ciclo Brasileiro (Figura 12).

Figura 12- Contexto geológico regional do *Rift* Continental do Sudeste do Brasil. Unidades em destaque: 1) embasamento pré-cambriano; 2) rochas sedimentares paleozoicas da Bacia do Paraná; 3) rochas vulcânicas toleíticas eocretáceas da Formação Serra Geral; 4) rochas relacionadas ao magmatismo alcalino mesozóico-cenozóico; 5) bacias cenozóicas do *rift* (1- Bacia de Itaboraí, 2- Gráben de Barra de São João, 3- Bacia do Macacu, 4- Bacia de Volta Redonda, 5- Bacia de Resende, 6- Bacia de Taubaté, 7- **Bacia de São Paulo (área de estudo)**, 8- Gráben de Sete Barras, 9- Formação Pariquera-Açu, 10- Formação Alexandra e Gráben de Guaraqueçaba, 11- Bacia de Curitiba, 12- Gráben de Cananéia)



Fonte: RICCOMINI et al., 2004.

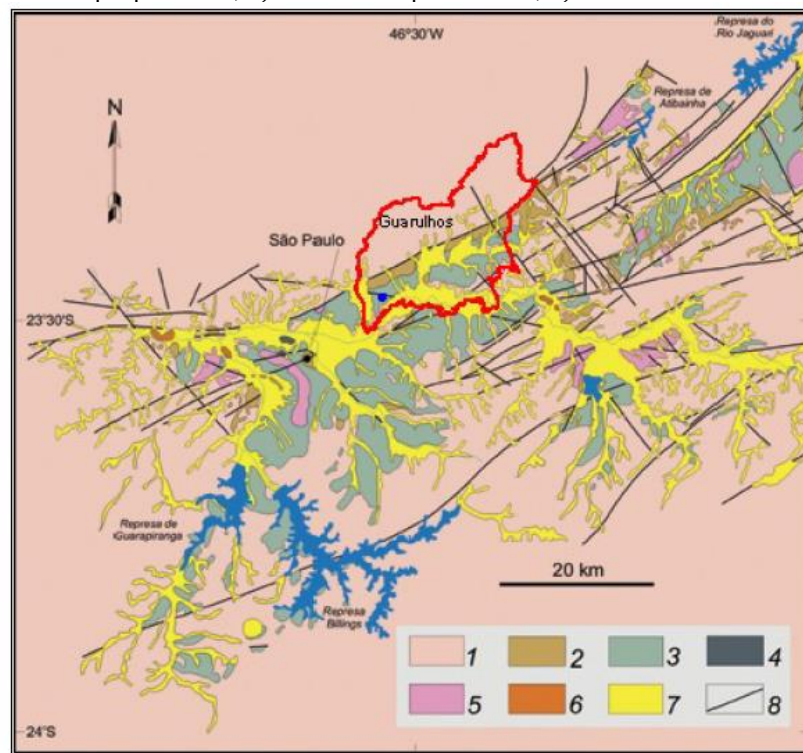
Segundo Riccomini & Coimbra (1992), a Bacia de São Paulo possui estrutura na forma de um hemi-gráben basculado para NNW e é controlada estruturalmente por um sistema de falhas normais reativadas ao longo das zonas de cisalhamento Taxaquara e Jaquari. Além desse sistema de falhas, destaca-se outra importante feição tectônica, inclusive sob o ponto de vista

hidrogeológico, que se refere ao Gráben do Baquirivu- Guaçu localizado na região do município de Guarulhos, onde de acordo com Diniz (1996) os sedimentos da Bacia de São Paulo podem atingir uma espessura de até 255m.

As rochas que compõem o embasamento cristalino pré-cambriano da Bacia de São Paulo são comumente agrupadas em duas unidades geológicas que se encontram separadas pelas falhas de Taxaquara e Jaquari e também, por rochas graníticas intrusivas (DINIZ, 1996). Essas unidades serão melhor detalhadas na seção 3.6 deste trabalho, bem como a Formação Resende, unidade pertencente à Bacia de São Paulo e onde foi desenvolvido o presente estudo.

O pacote sedimentar da Bacia de São Paulo (Figura 13) é constituído pelas formações Resende, Tremembé e São Paulo de idade paleógena (englobadas no Grupo Taubaté) e pela Formação Itaquaquecetuba (Néogeno) (RICCOMINI & COIMBRA, 1992). Recobrimdo esta sequência ocorrem ainda coberturas aluvionares e coluvionares quaternárias de pequena espessura.

Figura 13-Mapa geológico da Bacia de São Paulo e da região sudoeste da Bacia de Taubaté, com destaque em vermelho para área do município de Guarulhos. Legenda: 1) embasamento pré-cambriano; 2) Formação Resende (sistema de leques aluviais proximais); (3) Formação Resende (sistema de leques aluviais medianos a distais associados a planície aluvial de rios entrelaçados); 4) Formação Tremembé; 5) Formação São Paulo; 6) Formação Itaquaquecetuba; 7) sedimentos quaternários; 8) falhas cenozoicas.



Fonte: Modificado de Riccomini et al., 2004.

A Formação Tremembé é constituída por camadas tabulares de argilas maciças de coloração verde que ocorrem intercaladas a argilas orgânicas de origem lacustre (BERTOLO, 1996). Na Bacia de São Paulo esta formação possui aproximadamente 4 km², podendo ultrapassar 60m em alguns pontos (TAKIYA, 1991), todavia é na Bacia de Taubaté que os sedimentos desta unidade ocorrem em maior frequência (RODRIGUEZ, 1998).

A Formação São Paulo, caracterizada por depósitos de sistema fluvial com planícies de inundação bem desenvolvida, é composta predominantemente por conglomerados e arenitos com estratificação plano paralela, passando a acanaladas e cruzadas, gradando para siltitos laminados e argilitos, que configuram, respectivamente, depósitos de canal, barra de pontal e planície de inundação (TAKIYA, 1997). A ocorrência de couraças lateríticas na interface entre os sedimentos arenosos e argilosos dessa formação é frequente.

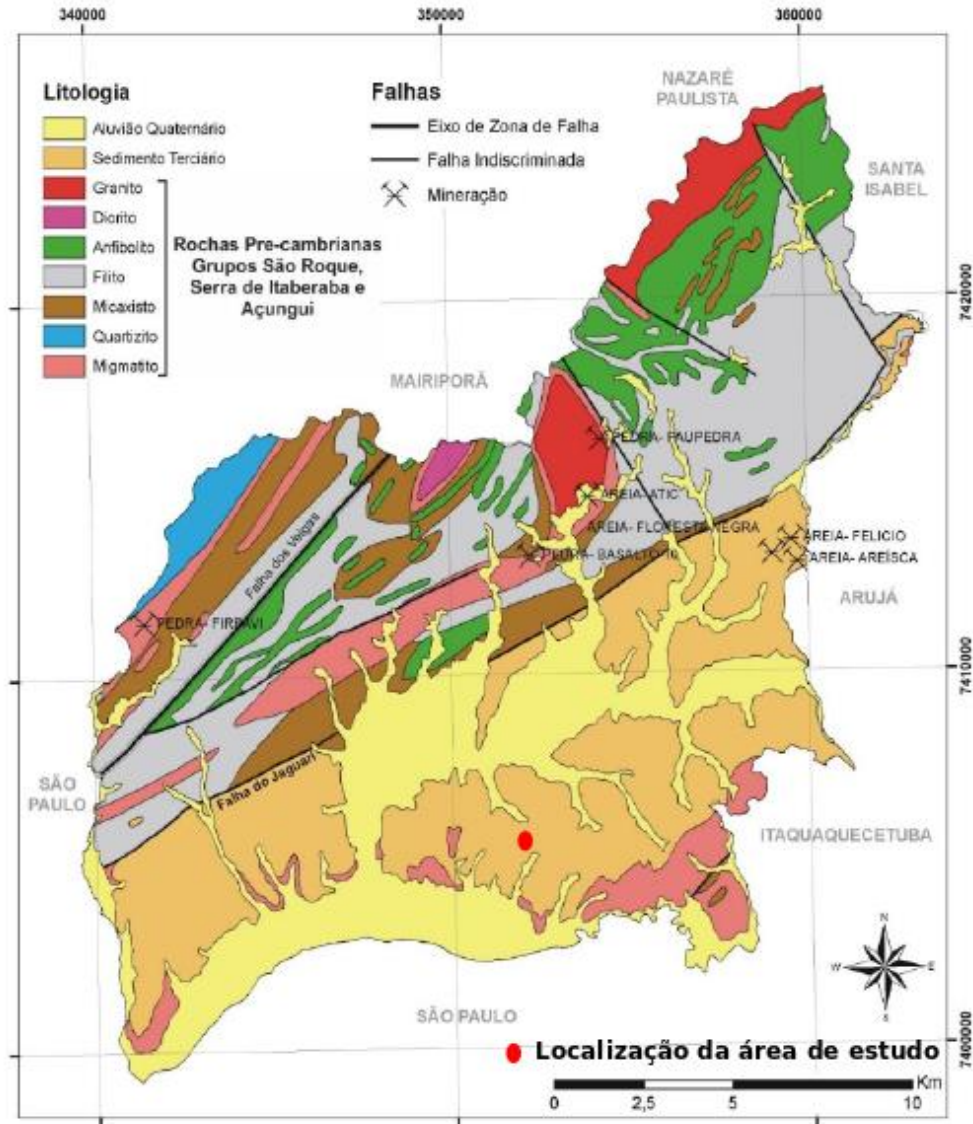
Os depósitos sedimentares da Formação Itaquaquacetuba são atribuídos a sistema fluvial entrelaçado associado a leques aluviais (COIMBRA et al., 1983). Compreende uma sequência de arenitos grossos arcoseanos com estratificações cruzadas tabulares e acanaladas, sendo que alguns estratos podem conter níveis argilo-siltosos a arenosos (TAKIYA, 1997).

Os depósitos coluviais são representados por linhas de seixos e horizonte argiloso ou arenoso. Os depósitos aluviais quaternários são compostos por conglomerados sobrepostos por areias médias com estratificações cruzadas acanaladas de até 2 m de espessura, dispostos pelas extensas planícies aluviais dos rios Tietê, Pinheiros, Tamanduateí, Aricanduva, Cabuçu e seus principais tributários (RICCOMINI & COIMBRA, 1992 e TAKIYA, 1997).

3.6 Contexto geológico do município de Guarulhos

Com intuito de melhor caracterizar a área de estudo, será apresentado a seguir o contexto geológico do município de Guarulhos. Guarulhos, do ponto de vista geológico, pode ser dividido em duas grandes unidades geológicas (citadas anteriormente no contexto regional) representadas pelas rochas sedimentares da Bacia sedimentar de São Paulo e seu embasamento cristalino (Figura. 14).

Figura 14- Mapa geológico do município de Guarulhos com a localização da área de estudo



Fonte: Modificado de Pacheco, 2015.

O embasamento cristalino nesta região é formado por duas unidades geológicas separadas entre si pela falha do Rio Jaguari, a qual secciona o município na direção NE- SW. Ao norte da falha, situam-se os grupos Serra do Itaberaba e São Roque (JULIANI, 1993), os quais inicialmente constituíam um único grupo denominado Grupo São Roque (COUTINHO, 1972). O conjunto de rochas situados ao sul da falha, por sua vez, constitui o Complexo Embu que, juntamente com o Complexo Pilar, compõem o Grupo Açungui (DINIZ e DUARTE, 2012).

O Grupo São Roque é constituído predominantemente por filitos e secundariamente metaconglomerados, metarcóseos, metagrauvas, quartzitos, cálcio-xistos, metacalcários e

metabasitos, geralmente formando lentes de dimensões variadas (JULIANI, 1993). Este conjunto de litotipos teria se metamorfsado na fácies xisto verde de baixa pressão, podendo alcançar localmente, devido à intrusão de corpos graníticos, um grau metamórfico mais elevado.

O Grupo Serra do Itaberaba distingue-se do anterior pela grande variedade de metamorfitos e é formado por metapelitos, rochas metabásicas, metapsamitos (quartzitos puros e arcoseanos), metassedimentos manganésíferos, formações ferríferas, rochas calciossilicáticas e carbonáticas, estas de ocorrência relativamente restrita.

Definido por Hasui & Sadowski (1976), o Complexo Embu, por sua vez, é composto por migmatitos e gnaisses migmatizados, gerados pelo metamorfismo em alto grau dos metassedimentos que compõem o Grupo Açungui (DINIZ e DUARTE, 1996).

Recobrando grande parte das rochas do Complexo Embu, encontram-se os depósitos sedimentares da Bacia de São Paulo. Na área do município de Guarulhos, a Bacia de São Paulo é representada pelos litotipos da Formação Resende, estes localizados em sua maioria ao longo da estrutura designada Gráben do Rio Baquirivú-Guaçu. Essa feição estrutural foi produzida por esforços tectônicos que afetaram a região de Guarulhos durante o final do Cenozoico e é caracterizada por uma sucessão de blocos altos e baixos interceptados por falhas (DINIZ, 1996).

A Formação Resende, unidade na qual está inserido o Aquífero Resende, objeto de estudo deste trabalho, é composta por depósitos de sistema de leques aluviais associados a planícies aluviais de rios entrelaçados (RICCOMINI & COIMBRA, 1992). Nos depósitos de fácies proximais ocorrem orto e paraconglomerados. Os conglomerados são polimíticos com seixos e matacões inseridos em matriz essencialmente lamítica e arenosa (RICCOMINI, 2004). Os depósitos oriundos das porções medianas e distais dos leques aluviais correspondem a lamitos e lamitos arenosos maciços que interdigitam-se lateralmente aos depósitos de fácies proximal. Por sua vez, os depósitos associados aos sistemas de rios entrelaçados (*braided*) são formados por arenitos grossos a médios, localmente conglomeráticos, mal selecionados, em geral subarcoseanos a arcoseanos, e compostos por grãos angulosos a subarredondados com contatos pontuais e envoltos pela matriz argilosa de infiltração (RICCOMINI, 1989).

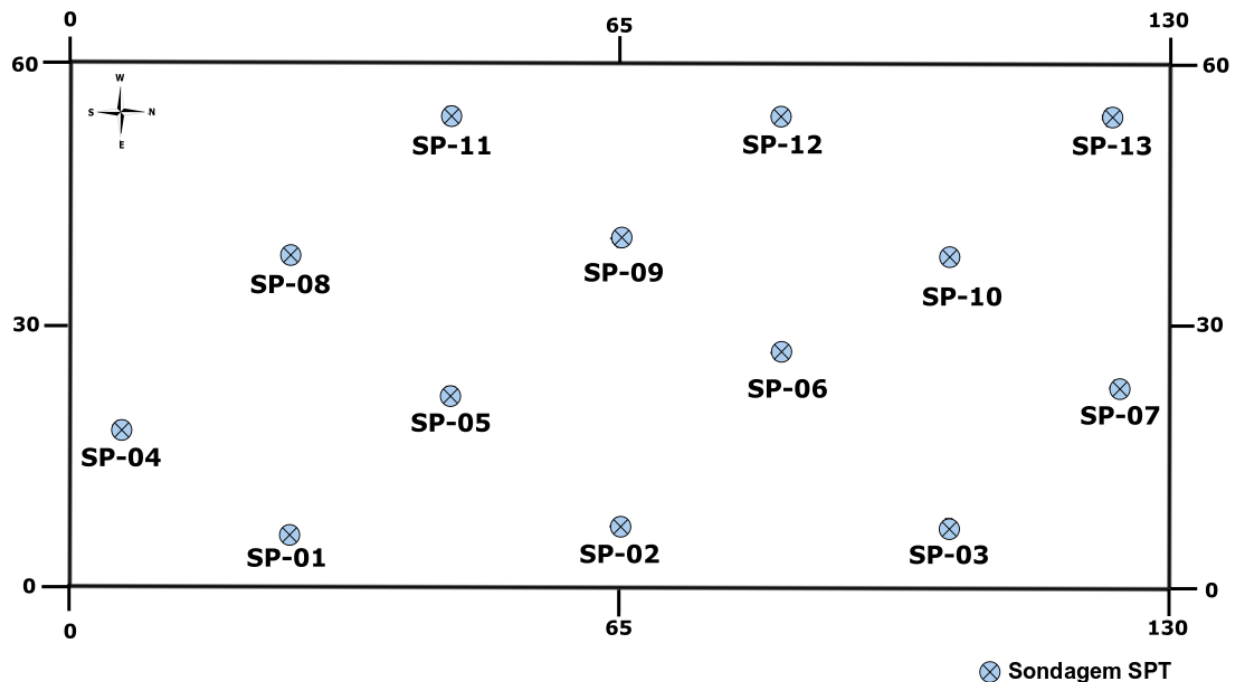
4 MATERIAIS E MÉTODOS

4.1 Revisão bibliográfica e compilação de informações litológicas

Na etapa inicial deste trabalho foram realizadas pesquisas bibliográficas relacionadas à geologia regional e local da área de estudo e também sobre os métodos empregados. Além disso, nesta fase foram realizadas consultas a materiais de referência como apostilas, trabalhos acadêmicos e vídeos tutoriais sobre o manuseio dos *softwares* empregados na modelagem de fluxo e transporte de contaminante.

Em paralelo às pesquisas bibliográficas, foram compilados os dados litológicos de 13 sondagens à percussão (SPT- *standard penetration test*) realizadas na área de estudo por uma empresa terceirizada que cedeu, posteriormente, os boletins de sondagem para o desenvolvimento desse estudo (Figura 15).

Figura 15- Disposição espacial das sondagens realizadas na área de estudo



Fonte: Elaborado pela autora.

4.2 Definição dos litotipos e associação com os valores de condutividade hidráulica

Com base nas descrições contidas nas sondagens SPT foram definidos os tipos litológicos que compõem o arcabouço geológico da área de estudo. São eles: 1) argila siltosa; 2) argila arenosa; 3) areia fina a grossa argilosa; 4) areia fina a média siltosa. Os quatro litotipos identificados nas sondagens foram então reagrupados em apenas três. As unidades compostas por (1) argila siltosa e (2) argila arenosa foram mantidas como dois grupo distintos. Já as unidades (3) areia fina a grossa argilosa e (4) areia fina a média siltosa foram reagrupadas gerando um único grupo, visto que a ocorrência de areia siltosa foi observada em apenas uma das sondagens realizadas. A partir disso, definiu-se a correspondência entre os tipos litológicos reagrupados e os valores de condutividade hidráulica, conforme apresentado na Tabela 4. Os valores médios de condutividade adotados no presente trabalho para realização das simulações de fluxo e transporte são aqueles obtidos por Grossi (2020) através de ensaios de *slug tests* numa área do Aquífero Resende, no município de Guarulhos.

Tabela 4- Valores de condutividade hidráulica associados a cada litotipo	
Litotipo	Condutividade hidráulica (m/s)
Argila siltosa	$1,59 \times 10^{-6}$
Areia fina a grossa argilosa	$1,14 \times 10^{-5}$
Argila arenosa	$5,37 \times 10^{-6}$

Fonte: Elaborado pela autora a partir dos dados de Grossi (2020).

4.3 Simulação das heterogeneidades geológicas

4.3.1 Criação do grid - GMS

Previamente à modelagem estocástica propriamente dita no aplicativo T-PROGS, realizou-se a padronização das descrições litológicas contidas nos boletins de sondagens para um arquivo de texto em formato de tabela, que foi utilizado como parâmetro de entrada no *software* GMS (*Groundwater Modeling System*). Nesse arquivo, foram organizadas 5 colunas, de modo que a primeira coluna continha o número de ID de cada sondagem, as três colunas subsequentes as informações espaciais de cada sondagem (X, Y e Z, respectivamente) e a quarta coluna, os números

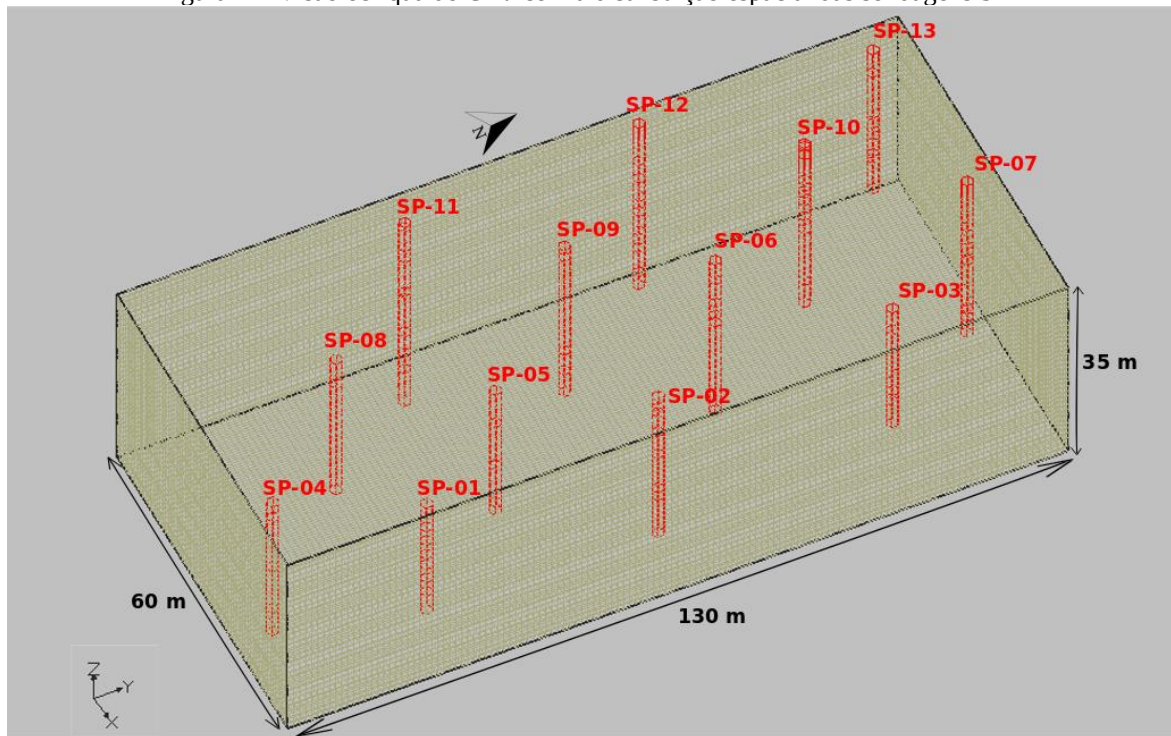
de identificação atribuídos a cada um dos diferentes litotipos (Figura 16). Com os dados de sondagens inseridos no ambiente do GMS, através do processamento da tabela de dados pelo *software*, criou-se um *grid*, cujas dimensões de 60m (eixo x), 130m (eixo y), 35m (eixo Z) e células de 1m x 1m x 1m, resultaram numa malha ortogonal composta por 60 linhas, 130 colunas e 35 camadas (Figura 17).

Figura 16- Exemplo de tabela padronizada para o formato txt com as informações litológicas das sondagens SPT

ID	X	Y	Z	MATERIAL
SP01	350760.000	7405705.000	779.567	1
SP01	350760.000	7405705.000	779.067	1
SP01	350760.000	7405705.000	778.567	1
SP01	350760.000	7405705.000	778.067	1
SP01	350760.000	7405705.000	777.567	1
SP01	350760.000	7405705.000	777.067	1
SP01	350760.000	7405705.000	776.567	1
SP01	350760.000	7405705.000	776.067	1
SP01	350760.000	7405705.000	775.567	1
SP01	350760.000	7405705.000	775.067	1
SP01	350760.000	7405705.000	774.567	1
SP01	350760.000	7405705.000	774.517	2
SP01	350760.000	7405705.000	774.017	2

Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 17- Visão oblíqua do *Grid* com a distribuição espacial das sondagens SPT

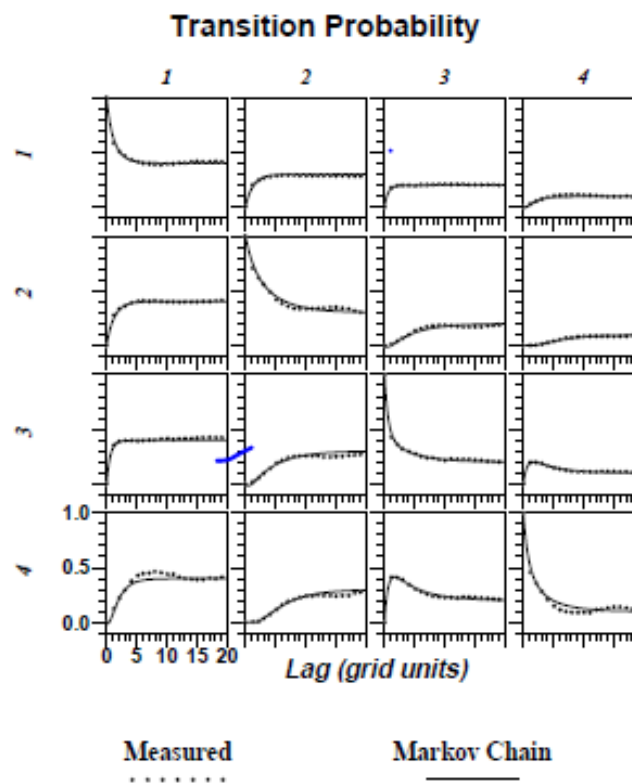


Fonte: Elaborado pela autora.

4.3.2 Geração dos cenários geológicos no software T-PROGS

Após a criação do *grid* englobando todas sondagens, conforme descrito na etapa anterior, foi realizada a modelagem da variabilidade espacial litológica do aquífero pelo método de cadeias de Markov, utilizando o *software* T-PROGS. Para isso, inicialmente, um utilitário associado ao T-PROGS, GAMEAS, é empregado para calcular as probabilidades de transição entre os litotipos. Na sequência é desenvolvido o gráfico de probabilidade de transição. Para construção do gráfico, inicialmente, são elaboradas as curvas do modelo de Cadeia de Markov (representadas pelas linhas sólidas) para a direção vertical, as quais são ajustadas em relação à curva dos dados de probabilidade de transição geradas com base nos dados de sondagem. Entre as opções de ajuste de curvas disponíveis, optou-se pela opção “*fit curves to a discrete lag*”, no qual o ajuste é realizado de forma visual numa sequência de tentativas, até se obter a melhor correspondência entre as duas curvas (Figura 18).

Figura 18- Exemplo de gráfico de probabilidade de transição ajustadas pela cadeia de Markov. As curvas representadas na diagonal correspondem as probabilidades de auto-transição, as demais curvas representam transições entre os diferentes materiais.



Fonte: Carle, 1999.

Após finalizado o modelo de cadeias de Markov para direção vertical, um modelo de variabilidade espacial é aplicado para as duas dimensões horizontais, utilizando como base a Lei de Walther. A lei de Walther ou lei de correlação de fácies afirma que as fácies que ocorrem em sucessões verticais concordantes também ocorrem em ambientes lateralmente adjacentes. Com base nessa lei, assume-se que as tendências de justaposição e as proporções dos litotipos observadas na direção vertical também são verdadeiras nas direções X e Y. A partir daí, é possível estimar a razão do comprimento médio das direções horizontais em relação à direção vertical, possibilitando o cálculo das matrizes de transição para as direções X e Y (ALBERTO, 2010).

Concluídas as etapas anteriores, foi então acionado o utilitário TSIM. Este utilitário é responsável por realizar as simulações estocásticas no T-PROGS, produzindo ao final um conjunto de cenários tridimensionais baseados nas cadeias de Markov. Ao todo foram gerados 30 modelos/cenários geológicos equiprováveis, os quais foram utilizados como parâmetros de entrada no MODFLOW.

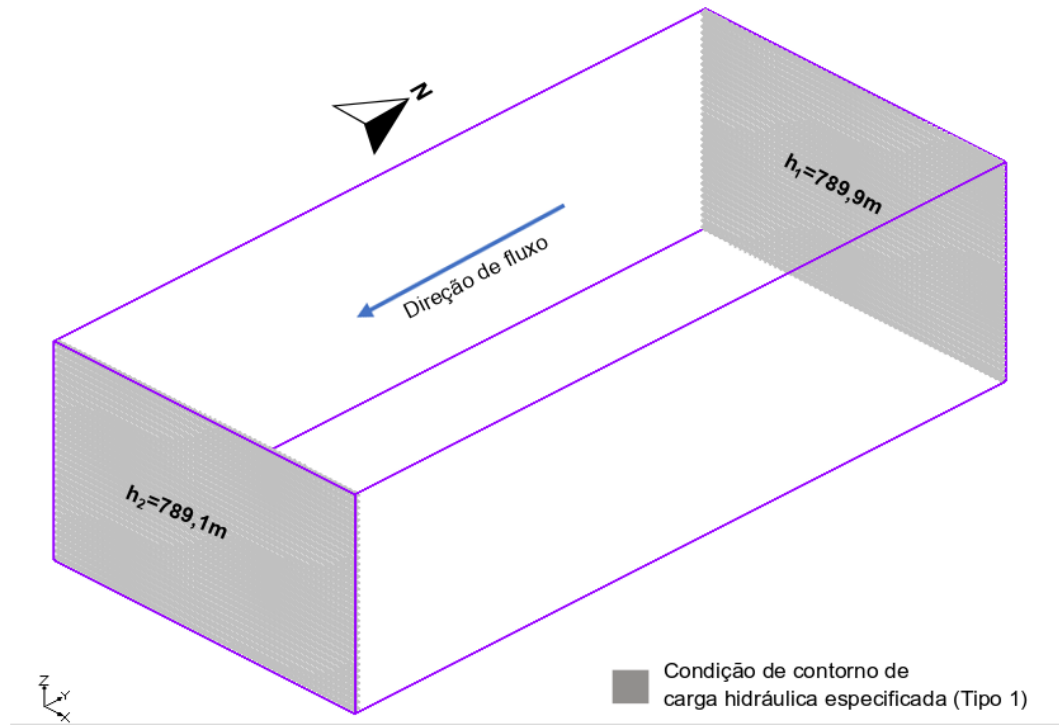
4.4 Simulações de fluxo de água subterrânea - MODFLOW

Para realização das simulações de fluxo de água subterrânea em estado estacionário utilizou-se o software MODFLOW. O MODFLOW é um modelo numérico de fluxo de água subterrânea que simula o fluxo com base no Método de diferenças finitas (McDONALD e HARBAUGH 1988; HARBAUGH et al., 2000). No presente trabalho, o *software* foi configurado para o modo estocástico. Esta opção possibilita que o MODFLOW utilize como parâmetro de entrada os diferentes cenários produzidos pelo T-PROGS, gerando como produto final uma solução de fluxo para cada um dos 30 cenários.

Para representar a área do modelo utilizou-se a mesma malha 3D empregada nas simulações dos cenários geológicos com T-PROGS. Dessa forma é possível realizar a importação dos diferentes valores de condutividade hidráulica e porosidade específica atribuídos aos três litotipos, uma vez que cada célula do *grid* herdado contém um ID (1,2 ou 3) que representa, justamente, estes três materiais geológicos e seus respectivos parâmetros hidráulicos. Além disso, duas condições de contorno de carga especificada (condições de primeiro tipo) foram atribuídas aos limites norte (784,9m) e sul (784,1m) do modelo de modo a criar um gradiente hidráulico que induzisse o fluxo

de água subterrânea de norte para sul, paralelamente ao eixo Y, conforme apresentado na Figura 19.

Figura 19-Área do modelo numérico e as respectivas condições de contorno empregadas



Fonte: Elaborado pela autora

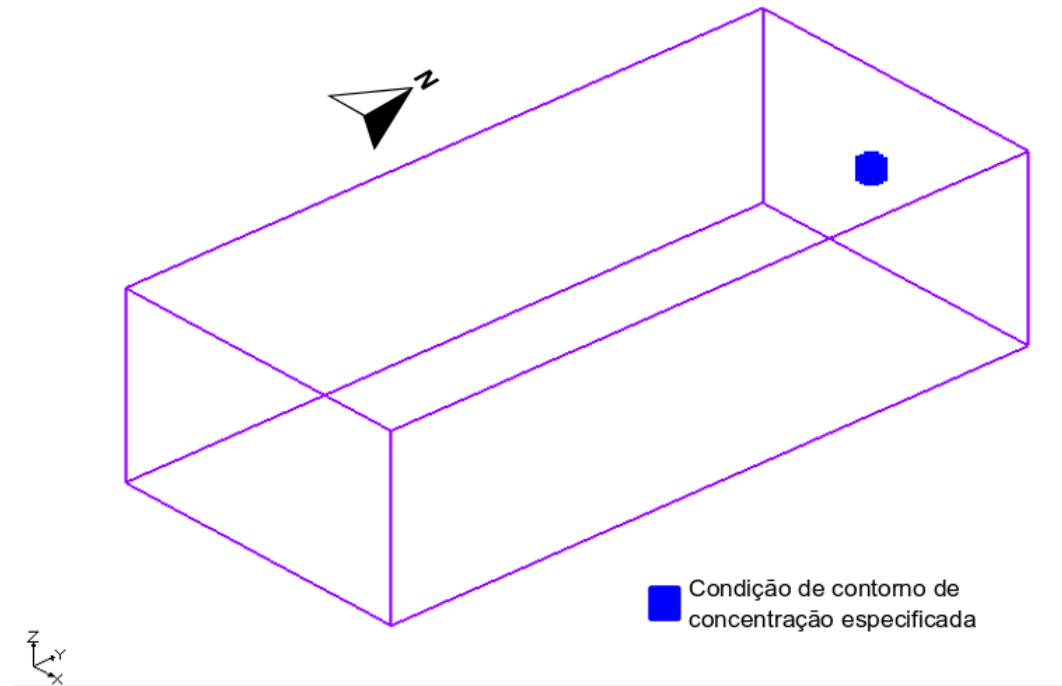
4.5 Simulações de transporte de soluto- MT3DMS

Para simulação do transporte de contaminante na área do aquífero foi empregado o MT3DMS (*Modular ThreeDimensional Multispecies Transport Model*) (ZHENG & WANG, 1999), um pacote de transporte de soluto vinculado ao MODFLOW. Esse pacote combina a advecção, dispersão e reações químicas para simular o transporte e as mudanças de concentração de contaminante dissolvidos em água subterrânea, sendo capaz de representar fontes, sumidouros e condições de contorno complexas (ZHENG e WANG, 1999).

No primeiro momento, com intuito de se analisar o transporte de solutos sob a influência das heterogeneidades geológicas, seguiu-se uma abordagem comum de se utilizar um soluto genérico para todas as simulações. Para o presente estudo, admitiu-se a existência de uma área fonte de contaminação hipotética posicionada a 15 metros de profundidade. Esta fonte foi

representada por uma única célula posicionada próximo ao limite norte da área do modelo. Além disso, foi assumida uma concentração constante de 10 mg/L para o contaminante, empregando-se para isso uma condição de contorno de concentração especificada à área fonte idealizada (Figura 20).

Figura 20- Localização da área fonte hipotética e condição de contorno empregada nas simulações de transporte



Fonte: Elaborado pela autora.

Em relação aos parâmetros utilizados nas simulações de transporte, fixou-se um valor de dispersividade longitudinal de 3,0m calculado através da equação de Xu e Eckestein (1995), considerando uma distância de fluxo a partir da área fonte de 50m. Já a dispersividade transversal e a dispersividade vertical foram fixadas, respectivamente, em 10% e 1% em relação ao valor da dispersividade longitudinal (Gelhar et al., 1992). Quanto ao tempo de simulação, foi definido um período de 15 anos, no qual não foram considerados os processos de biodegração e adsorção, concentrando-se, portanto, apenas no transporte de massa por advecção e dispersão.

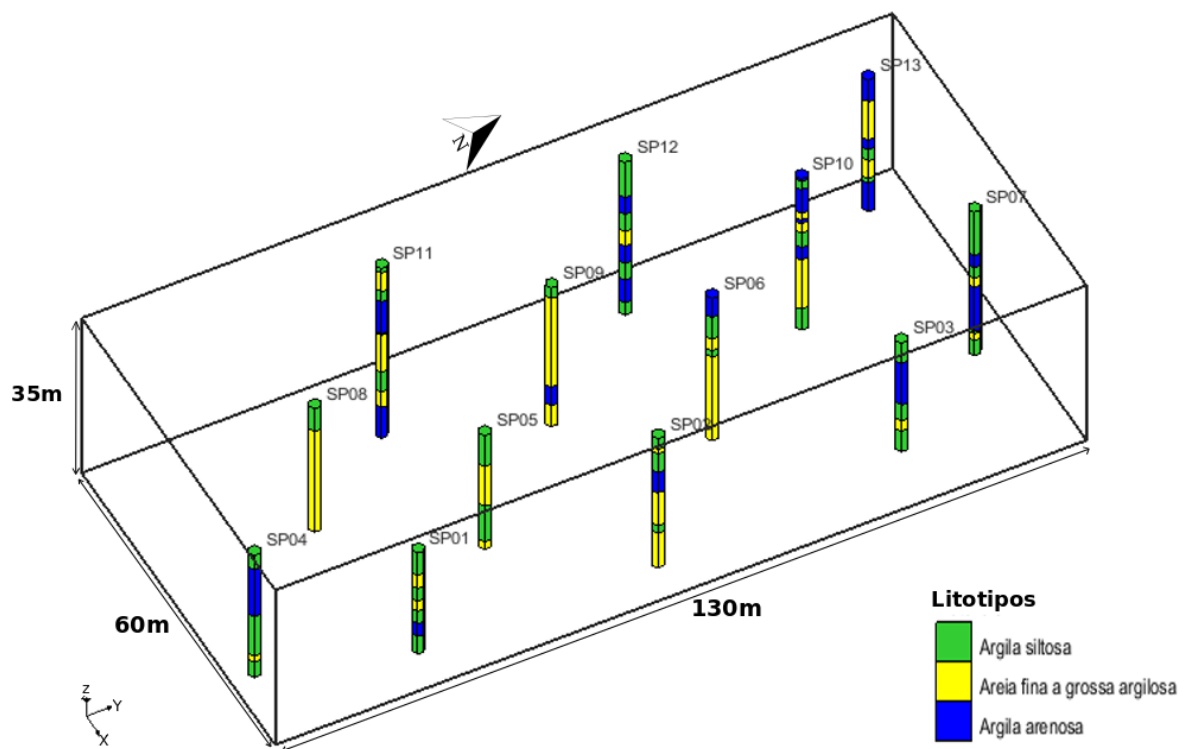
Por fim, o MD3TMS é acionado, gerando como produto final um conjunto de plumas de contaminante igualmente prováveis, com base nas soluções de fluxo geradas pelo MODFLOW e nos parâmetros definidos no modelo de transporte.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 Caracterização e distribuição dos litotipos identificados na área de estudo

Ao todo foram analisados dados litológicos de 13 sondagens SPT (SP-01 a SP-13) realizadas na área de estudo por meio de boletins de sondagens cedidos por uma empresa terceirizada. De modo geral, os furos de sondagem apresentam profundidade média de 30m e estão distribuídos a uma distância uniforme entre si. A análise tátil-visual das amostras coletadas em cada furo indica que o arcabouço geológico sedimentar da área de estudo é composto por três diferentes litotipos que ocorrem em proporções e distribuições variadas no aquífero. São eles: argila siltosa, argila arenosa e areia fina a grossa argilosa. Na figura 21 é apresentada a localização espacial das sondagens e os tipos litológicos identificados em cada uma delas.

Figura 21- Distribuição espacial das sondagens e dos litotipos identificados na área de estudo.



Fonte: Elaborado pela autora.

A areia argilosa constitui o material de maior abundância em relação ao conjunto total de dados litológicos. Este litotipo ocorre na forma de lentes de espessura variável (a depender da sondagem analisada) e é composto por uma fração dominante de areia com ampla variação granulométrica (fina à grossa) e uma fração secundária constituída de argila. Quanto à compactidade, esses materiais apresentam-se como pouco a medianamente compactos. Tal classificação é feita com base nos valores de resistências obtidos na realização de ensaios de SPT, durante a execução das sondagens a percussão.

Intercaladas as lentes de areia argilosa, ocorrem camadas de argila siltosa e argila arenosa de coloração predominante vermelha e “variegada” (termo utilizado para se referir a variabilidade de cores no mesmo material). Em níveis mais rasos, as argilas são caracterizadas por seu aspecto “mole” e são definidas como “pouco compactas”, entretanto, conforme há um aumento de profundidade, tais materiais adquirem maior consistência e passam ser caracterizados como “argilas rijas”.

De acordo com a empresa responsável pela realização das sondagens e coleta das amostras, os litotipos identificados nas sondagens são classificados, quanto à sua gênese, como Sedimentos “Terciários” da Bacia de São Paulo (STBS). Esta classificação é comumente empregada em trabalhos de caracterização do subsolo na Grande São Paulo para se referir aos sedimentos de idade paleógena e neógena da Bacia de São Paulo. De modo específico, no município de Guarulhos, a nomenclatura STBS é atribuída aos litotipos da Formação Resende (Paleógeno).

5.2 Cenários geológicos

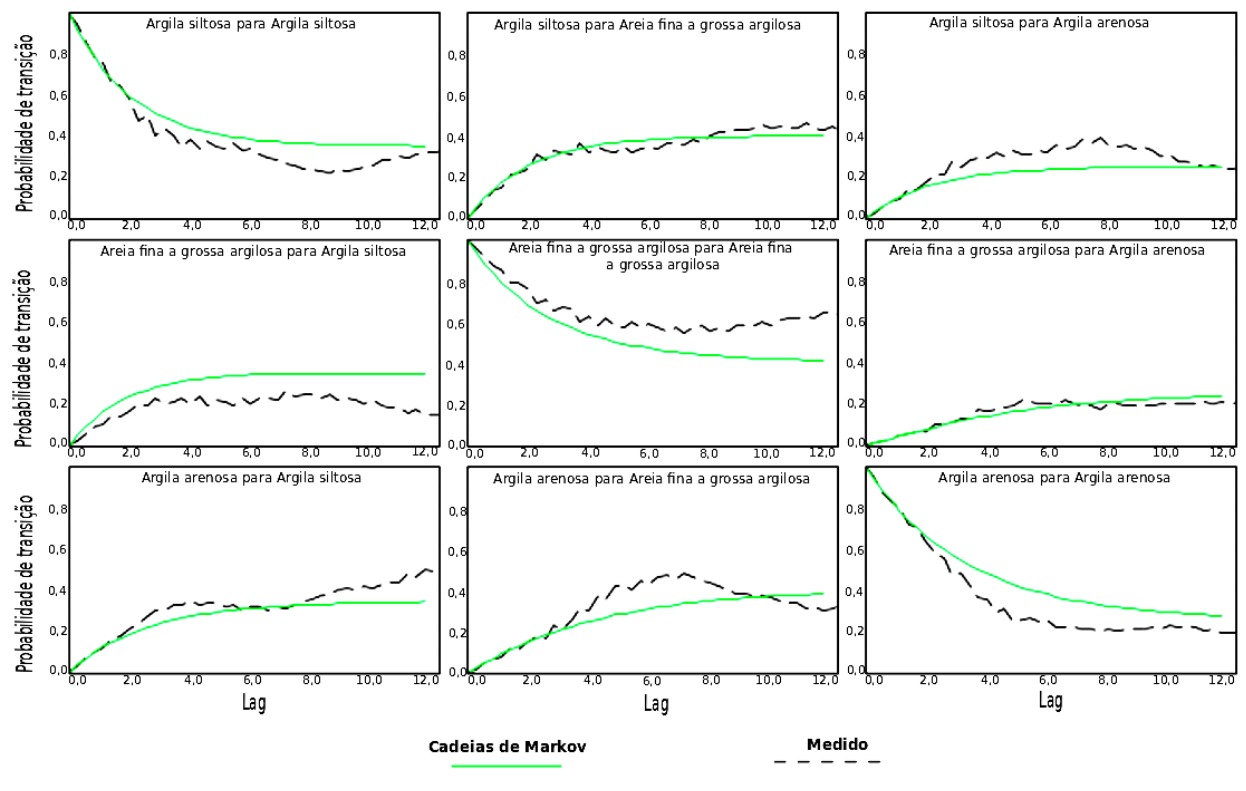
Com base nos dados de sondagem, foram definidas as tendências de transição, as proporções e comprimentos médios de cada litotipo por meio do T-PROGS. Estas informações são utilizadas pelo *software* para construir os gráficos que representam a probabilidade de transição de um material para o outro (Figura 22).

Nesses gráficos, a curva tracejada de coloração preta corresponde a probabilidade de transição entre os litotipos e é calculada a partir dos dados de sondagem. As curvas sólidas de coloração verde, por sua vez, representam as curvas da Cadeia de Markov, as quais são utilizadas para formular equações usadas pelo T-PROGS para gerar os cenários geológicos tridimensionais. Tais curvas são construídas definindo-se a probabilidade de transição em função do espaçamento

do passo ou *lag spacing* (distâncias entre pares de dados) e são ajustadas em relação as curvas dos dados medidos. O *lag spacing* define a densidade das curvas e é estabelecido de acordo com a espessura dos litotipos na direção vertical. De modo a se obter uma análise mais detalhada na direção vertical, considerou-se um valor de 0,3m para o *lag spacing*. Ao final, é calculado pelo *software* o valor da máxima distância do passo ou simplesmente *lag*, que corresponde ao intervalo das curvas a ser representado.

Conforme apresentado nos gráficos de probabilidade de transição abaixo, no eixo horizontal são plotados os intervalos das curvas (*lag*), enquanto no eixo vertical são representados os valores de probabilidade de transição, que variam de 0 a 1, respeitando as restrições de probabilidade.

Figura 22- Curvas de probabilidade de transição medidas (linhas pontilhadas pretas) e curvas do modelo de cadeia de Markov (linha contínua verde)



Fonte: Elaborado pela autora

A partir da análise dos gráficos acima, conclui-se que as maiores probabilidade de transição ocorrem da argila siltosa para areia fina a grossa argilosa e da argila arenosa para argila siltosa. Cabe destacar, entretanto, que não foi possível obter um bom ajuste entre as duas curvas geradas.

A Tabela 5 apresenta as proporções e comprimentos médios calculados para cada um dos 3 materiais na direção vertical. Nota-se que os materiais com maior proporção em relação ao conjunto de dados correspondem a areia fina a grossa argilosa e argila siltosa, com cerca de 40% e 35%, respectivamente. As proporções calculadas pelo T-PROGS estão de acordo aquelas observadas nas sondagens.

Tabela 5- Proporções e comprimentos médios dos três litotipos na direção vertical

Litotipo	Proporção (%)	Comprimento médio(m)
Argila siltosa	35%	3,5
Areia fina a grossa argilosa	40%	4,9
Argila arenosa	25%	4,2

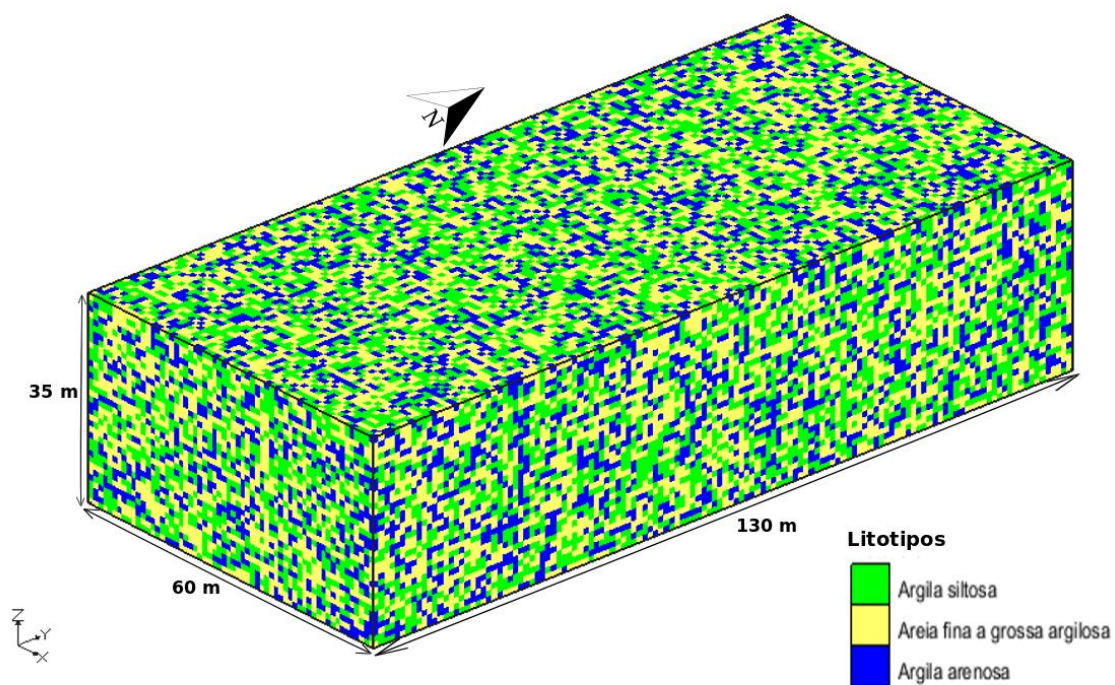
Fonte: Elabora pela autora.

Por fim, as simulações realizadas pelo T-PROGS com base nas cadeias de Markov resultaram em um conjunto 30 cenários geológicos amplamente divergentes entre si. Para ilustrar a dissimilaridade entre os cenários geológicos gerados, abaixo foram selecionados 4 cenários arbitrários para efeito de comparação (Figuras 23 a 26). Os demais cenários podem ser consultados no Apêndice A deste trabalho.

De modo geral, os cenários simulados apontam para existência de uma forte heterogeneidade litológica na área de estudo e, conseqüentemente, para um elevado grau de incerteza quanto à geologia do aquífero. Esta heterogeneidade é marcada pelos diferentes (e igualmente prováveis) arranjos espaciais dos litotipos observados em cada cenário geológico. Cabe destacar que estes cenários são únicos, não tendo sido notadas semelhanças entre eles, o que reforça o caráter heterogêneo do aquífero estudado.

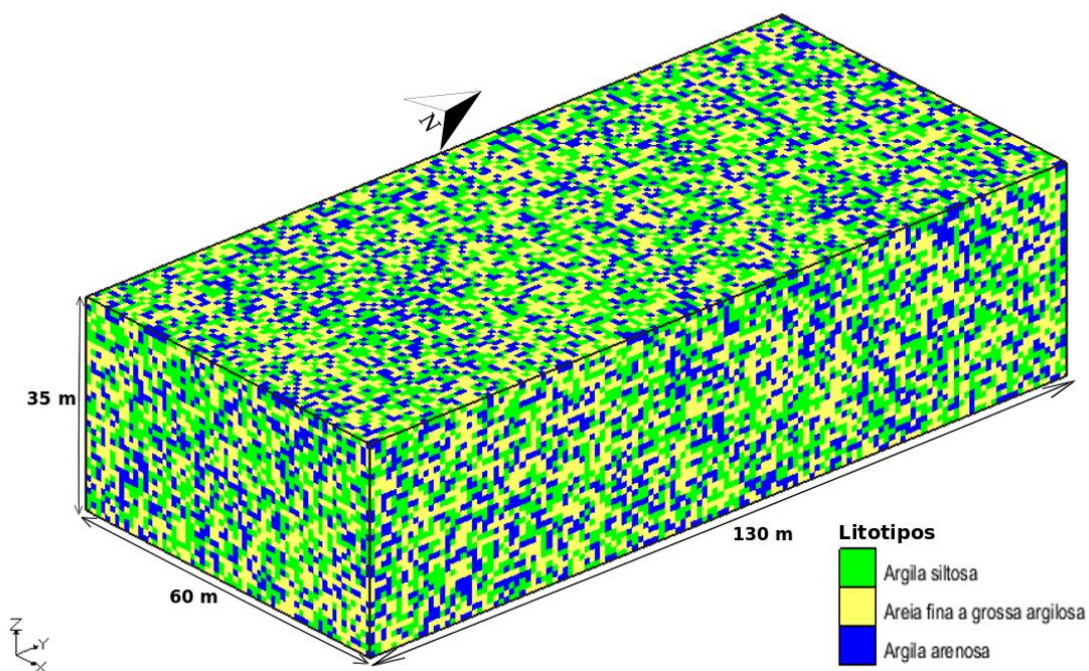
Além disso, com base na análise visual dos cenários produzidos, verifica-se que os corpos arenosos, os quais possuem os maiores valores de condutividade hidráulica, apresentam uma baixa conectividade entre si. Esses corpos apresentam, de maneira geral, uma pequena extensão lateral e geometrias muito variadas. E assim como descrito anteriormente, são limitados verticalmente e horizontalmente pelos litotipos argilosos, que, em contrapartida, exibem os menores valores de condutividade hidráulica na área estudada.

Figura 23- 1º cenário gerado pelo T-PROGS ilustrando a distribuição tridimensional dos litotipos



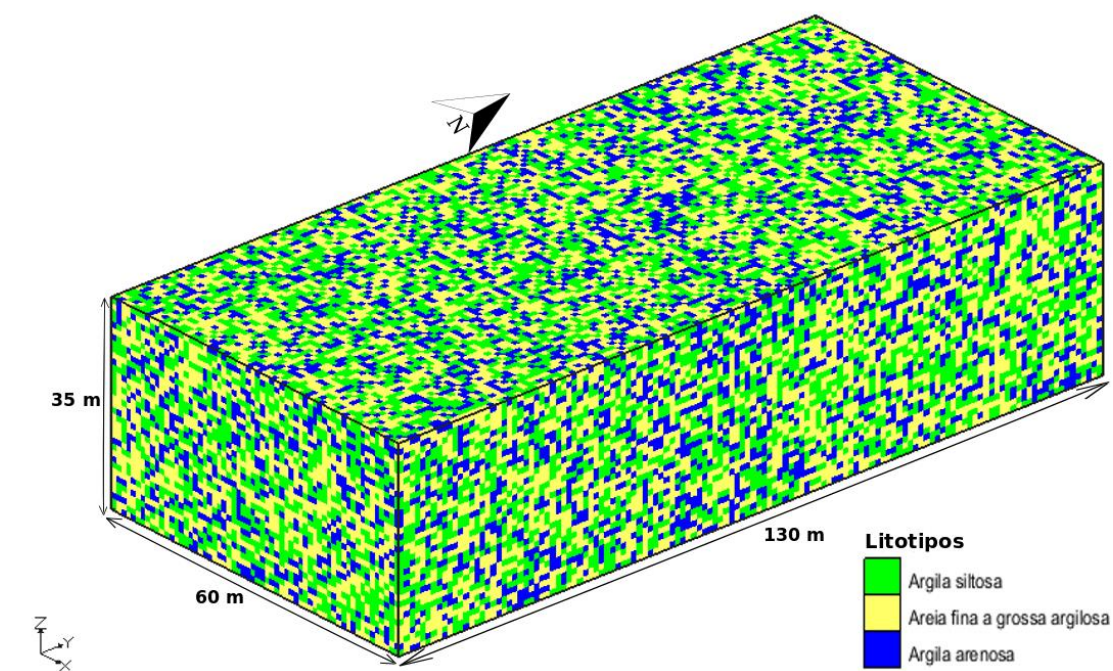
Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 24- 10º cenário gerado pelo T-PROGS mostrando a distribuição tridimensional dos litotipos



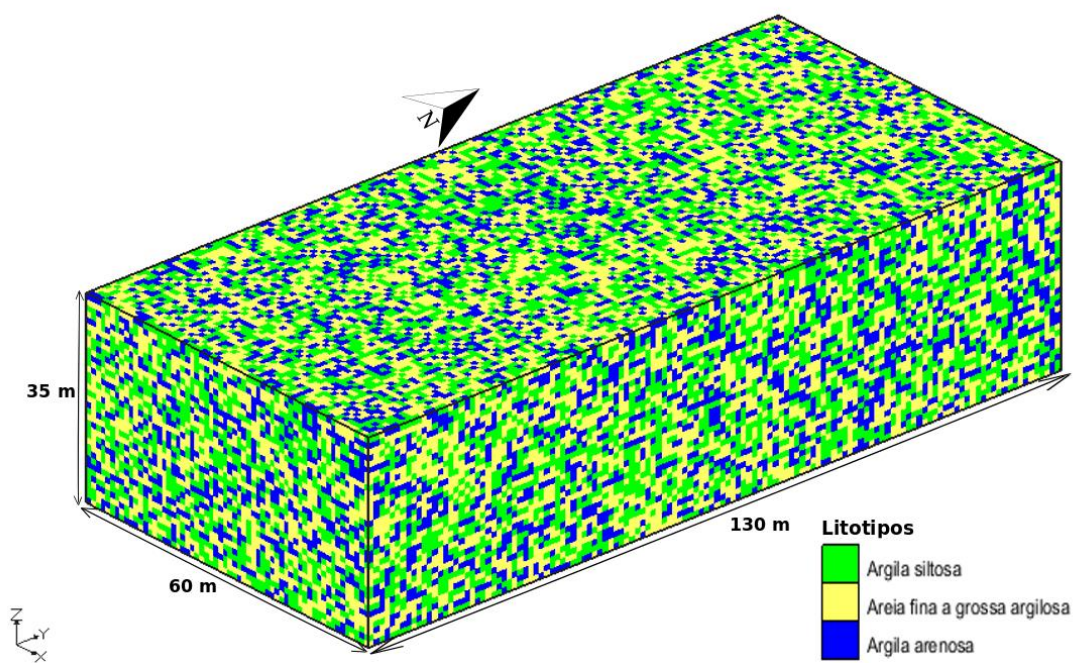
Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 25- 20º cenário gerado pelo T-PROGS mostrando a distribuição tridimensional dos litotipos



Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 26- 30º cenário gerado pelo T-PROGS mostrando a distribuição tridimensional dos litotipos



Fonte: Elaborado pela autora.

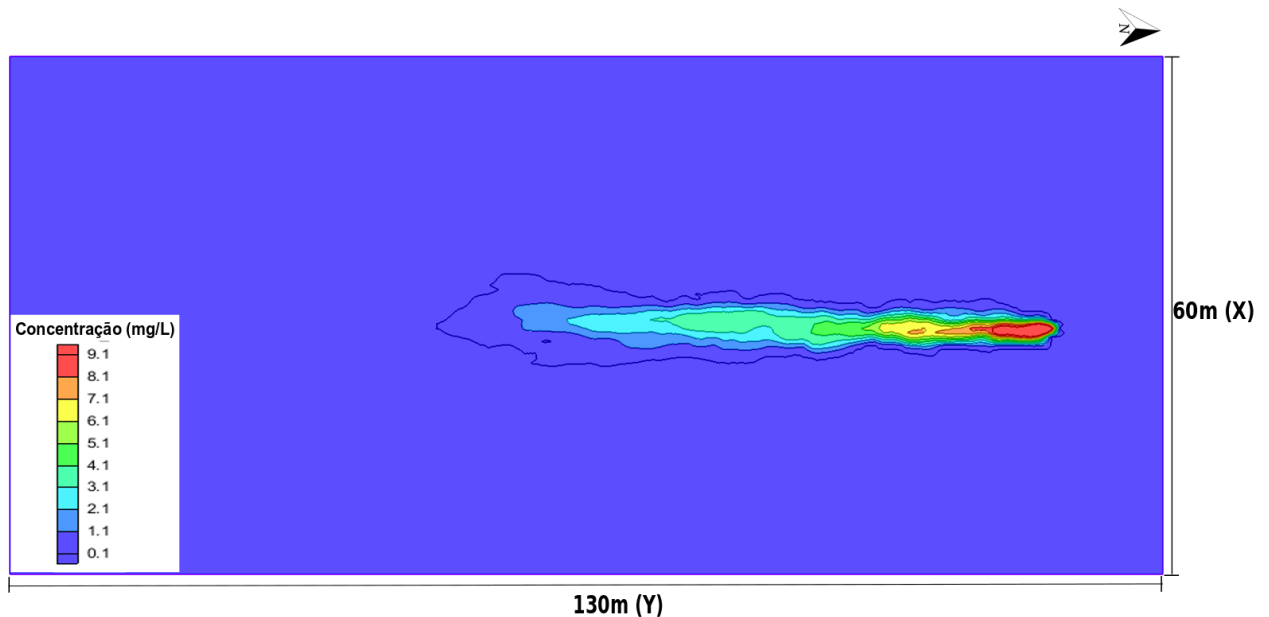
5.3 Simulações de transporte de contaminante

Todos os resultados das simulações de transporte de contaminante obtidos através da aplicação do MT3DMS são apresentados no Apêndice B. Ao todo foram simuladas 30 diferentes plumas de contaminação, utilizando como base os cenários geológicos produzidos pelo T-PROGS. Nas figuras 27 a 34 são apresentados os resultados de quatro destas simulações (simulação 01, 10, 20 e 30).

Nessas figuras, são representadas tanto as plumas simuladas a uma profundidade de 15 metros de profundidade (onde foi posicionada a área fonte) como também uma representação tridimensional de cada uma delas, com a finalidade de se destacar as principais características de cada pluma simulada, em termos de variação da concentração do contaminante, dimensão a partir da área fonte e formas.

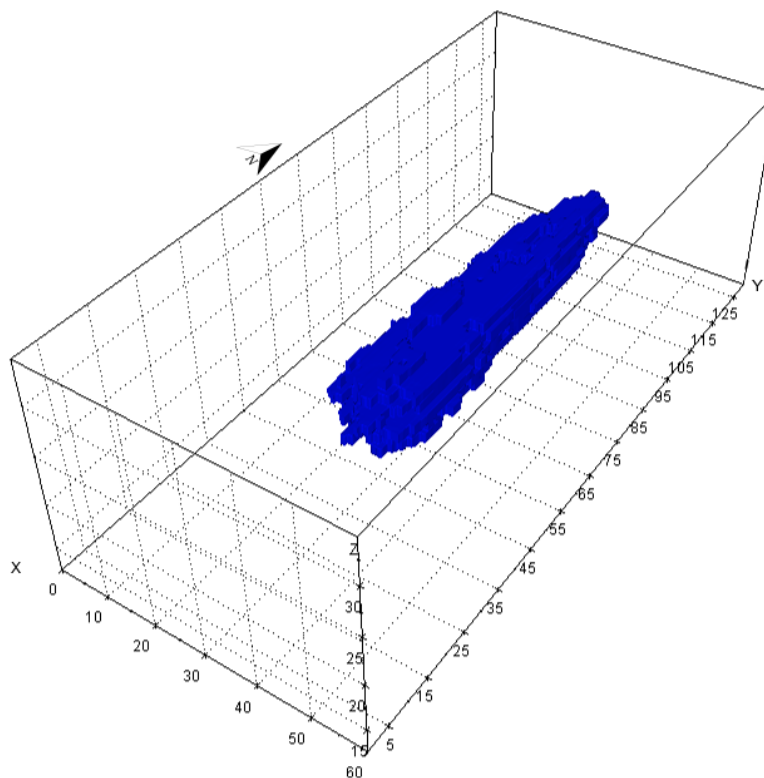
Ressalta-se que para melhor visualização e comparação das curvas de isoconcentração em cada pluma, a transparência dos contornos foi ajustada para um valor de 30%.

Figura 27- Pluma de contaminação simulada para o cenário 01 (representação da 15ª camada)



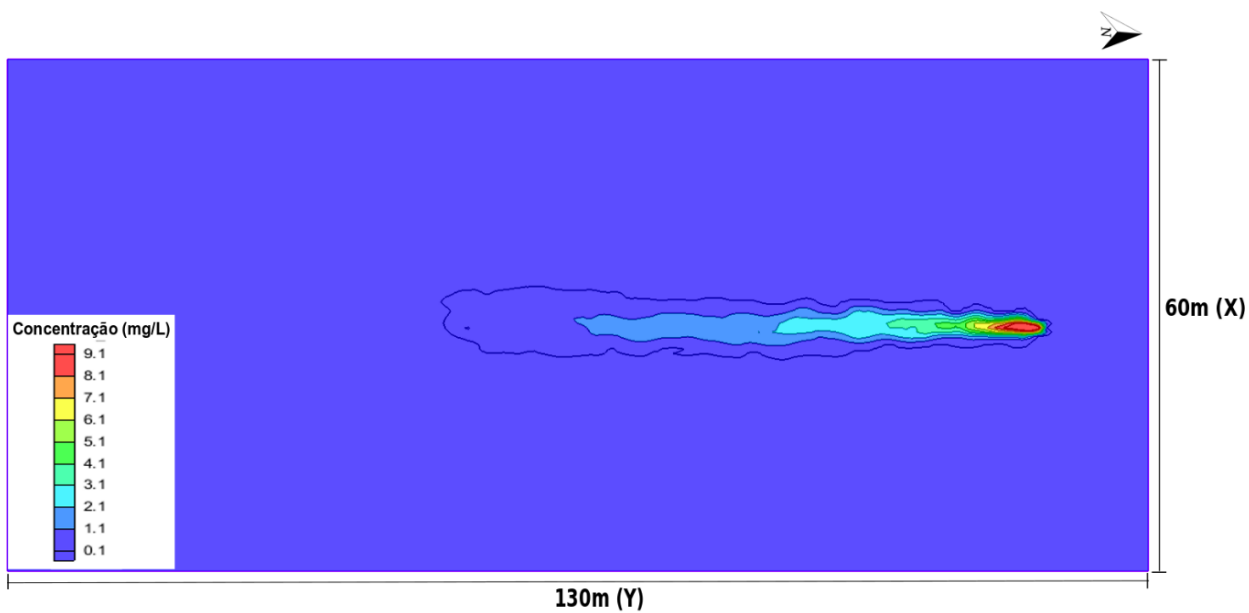
Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 28- Representação tridimensional da pluma de contaminação do cenário 1



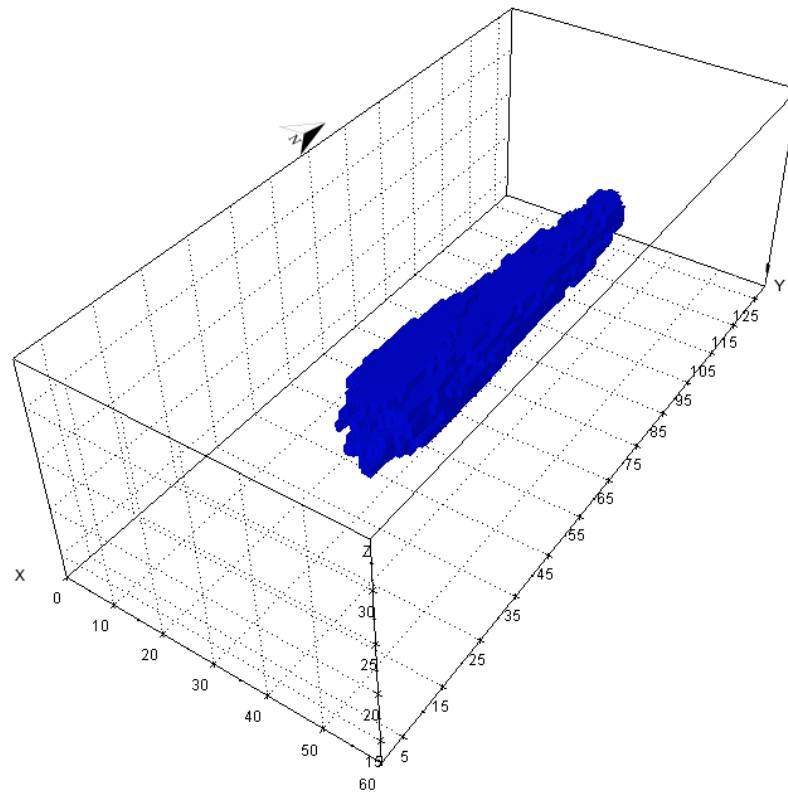
Fonte: Elaborado pela autora

Figura 29- Pluma de contaminação simulada para o cenário 10 (representação da 15ª camada)



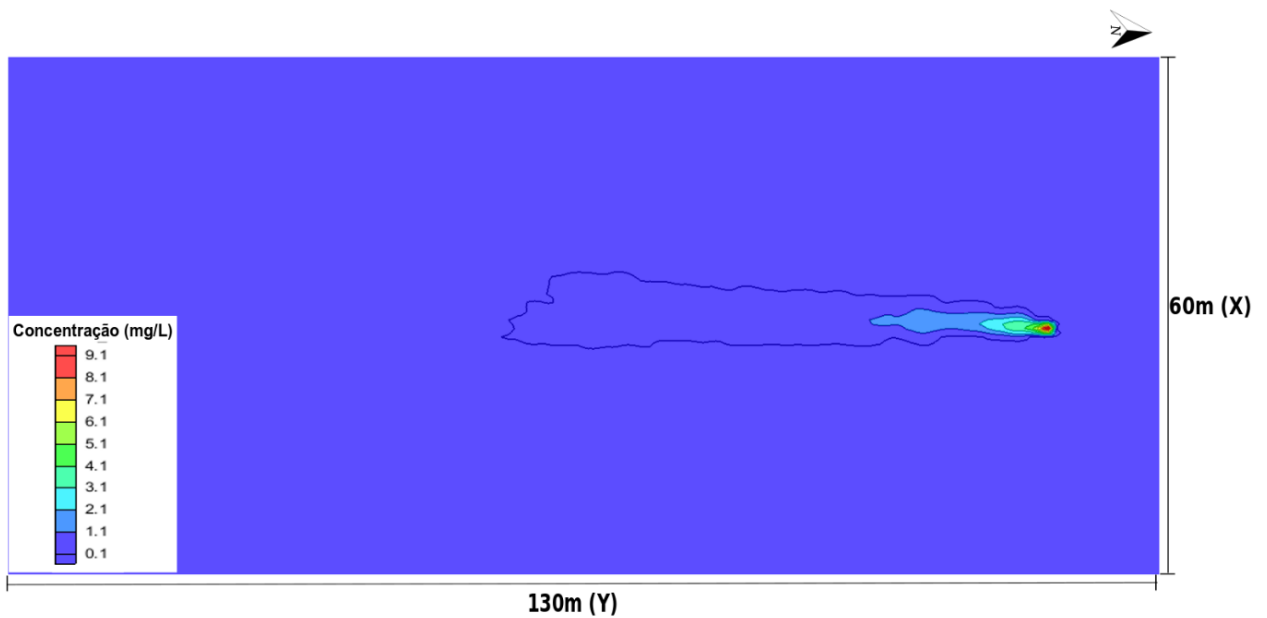
Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 30- Representação tridimensional da pluma de contaminante simulada para o cenário 10



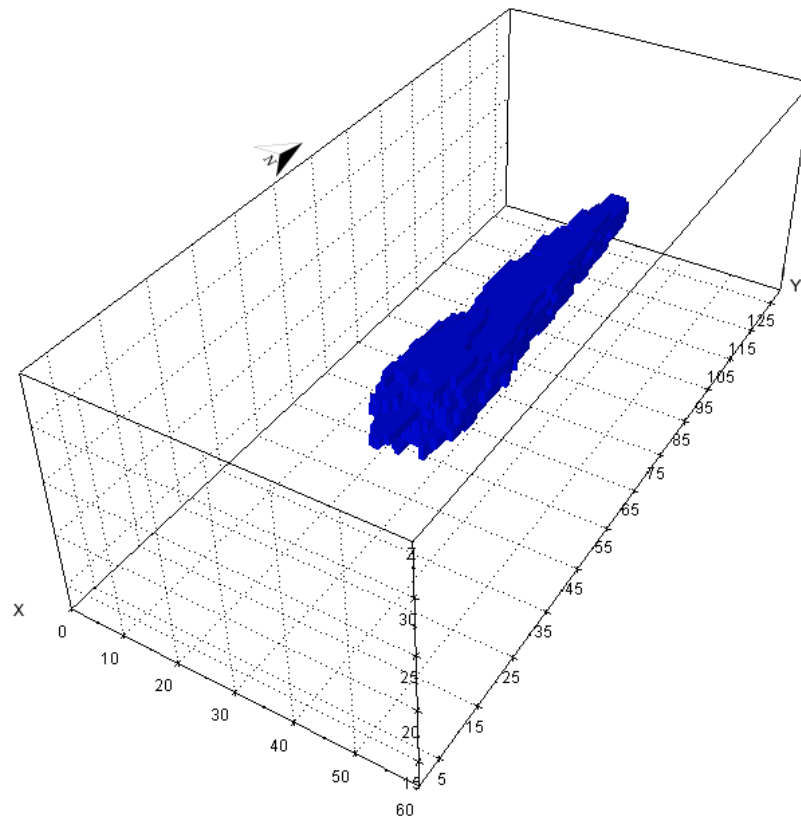
Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 31- Pluma de contaminação simulada para o cenário 20 (representação da 15ª camada)



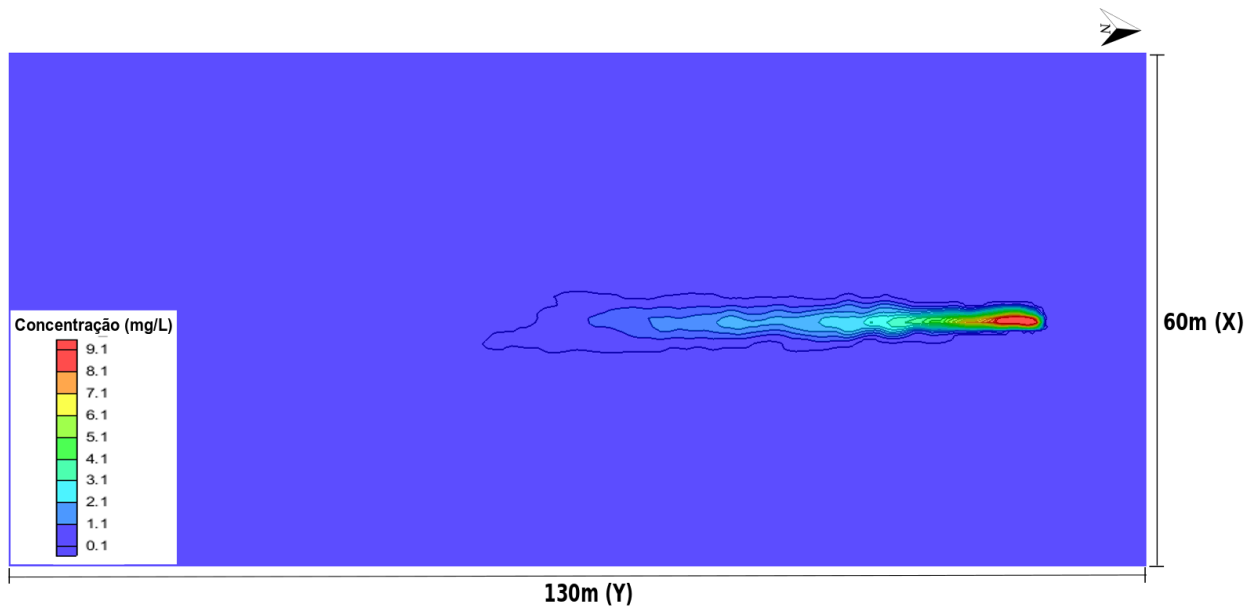
Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 32- Representação tridimensional da pluma de contaminante simulada para o cenário 20



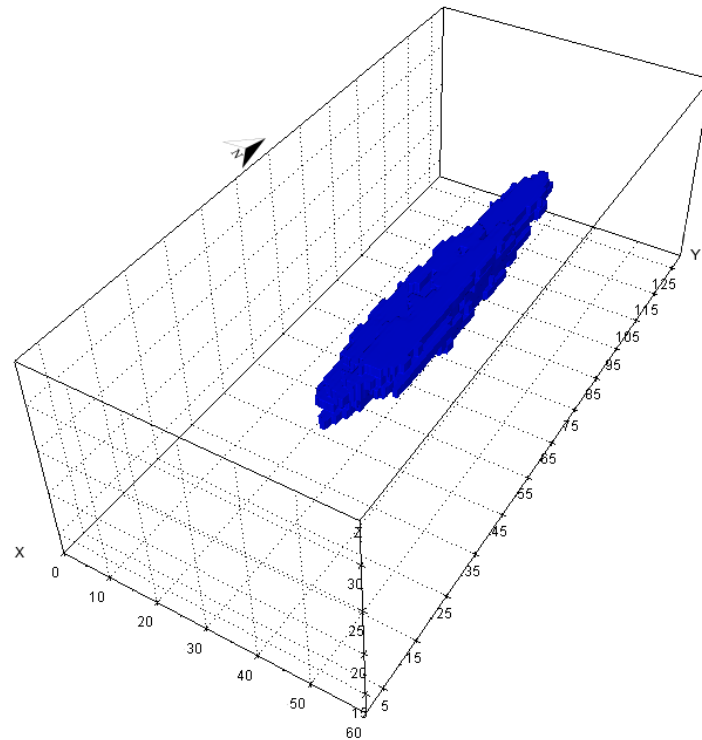
Fonte: Elaborado pela autora

Figura 33- Pluma de contaminação simulada para o cenário 30 (representação da 15ª profundidade)



Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 34- - Representação tridimensional da pluma de contaminante simulada para o cenário 30



Fonte: Elaborado pela autora

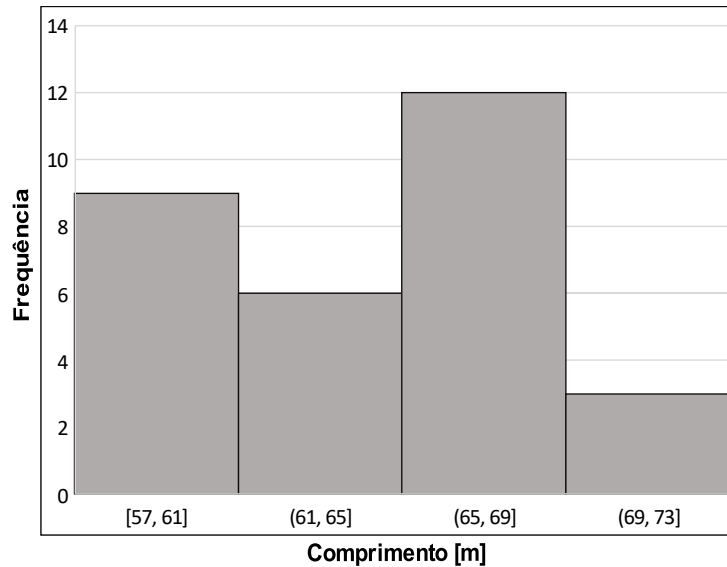
As simulações realizadas demonstram que, considerando-se um período de transporte de 15 anos e a atuação dos mecanismos de advecção e dispersão, em todos os cenários as plumas de fase dissolvida assumirão formas altamente assimétricas e contornos igualmente irregulares tanto horizontalmente quanto verticalmente.

Observa-se também que as concentrações nas plumas de fase dissolvida apresentam grandes variações. Essas concentrações são divididas em intervalos, os quais são delimitados por linhas de isoconcentrações que, por sua vez, exibem padrões diversos, podendo ser mais esparsas ou mais densas, a depender de como estão distribuídos os litotipos no cenário analisado. Além disso, em grande parte dos cenários gerados, nota-se que as maiores concentrações das plumas estão localizadas nas proximidades da área fonte e que conforme aumenta-se o distanciamento em relação a mesma, há uma diminuição (não uniforme) da concentração do contaminante.

Em termos de dispersividade em relação a área fonte, de modo geral, é demonstrado que as plumas atingirão um maior espalhamento ao longo da longitudinal, evidenciado por sua forma alongada no sentido do fluxo da água subterrânea, e um espalhamento menos pronunciado nas direções perpendiculares ao fluxo. Na Tabela C1 (Apêndice C) são apresentados os comprimentos

aproximados de cada pluma a partir da área fonte. A média dos comprimentos das plumas simuladas é de 64,6m, com uma variação entre 57m (mínimo) e 73m (máximo) e um desvio padrão de 4,57m. Para ilustrar a distribuição destes dados, foi gerado um histograma de barras que é apresentado na figura 35.

Figura 35-Histograma de distribuição dos valores de comprimento das plumas de fase dissolvida a partir da área fonte

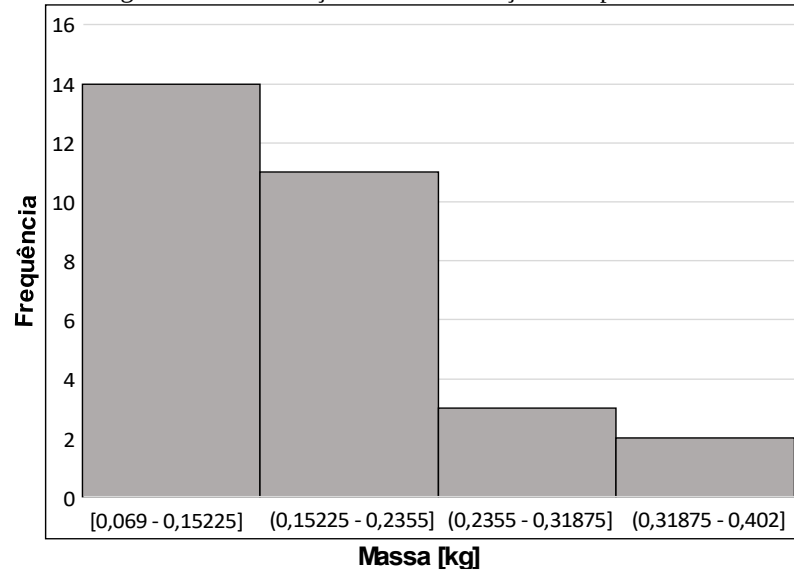


Fonte: Elaborado pela autora.

A partir da análise do histograma acima, conclui-se que em quase metade dos cenários (12) as plumas apresentam um comprimento aproximado entre 65m e 69m, ao passo que somente em 3 cenários elas exibem extensão longitudinal superior a 69m.

Além da variabilidade espacial da concentração e do comprimento longitudinal das plumas geradas, as simulações de transporte de soluto revelam também a existência de uma ampla variação em relação a massa do contaminante produzida ao final do período de 15 anos, sem considerar uma possível perda de massa pelo processo de biodegradação. Os valores de massa obtidos variam entre de 0,069 kg (24º cenário) e 0,402 kg (27º cenário), com uma média de 0,172 kg e desvio padrão de 0,0772 kg. Para ilustrar a distribuição dos valores de concentração estimados nas diferentes simulações, confeccionou-se também um histograma de barras para estes dados, o qual é apresentado na figura 36. Todos os dados de massa obtidos podem ser consultados na Tabela C2 no Apêndice C.

Figura 36- Histograma da distribuição das concentrações das plumas de fase dissolvida



Fonte: Elaborado pela autora.

Em suma, com base na comparação entre as diferentes plumas simuladas, é possível afirmar que o conhecimento acerca da geologia da área de estudo é dominado por incertezas. Tais incertezas estão intrinsecamente associadas à heterogeneidade do arcabouço geológico que, por sua vez, é responsável pelas diferentes características observadas em cada pluma simulada (distribuição da concentração, dimensão da pluma e massa de contaminante). Entretanto, cabe destacar, que embora os resultados aqui apresentados reafirmem a importante influência da heterogeneidade sobre o transporte de soluto, estas heterogeneidades, normalmente, não são devidamente caracterizadas em trabalhos de investigação ambiental, devido ao custo e, em alguns casos, à indisponibilidade de dados geológicos. Todavia, a falta de conhecimento geológico de detalhe na área investigada pode conduzir a elaboração de modelos numéricos de previsão do comportamento de contaminantes pouco confiáveis e, conseqüentemente, levar a ineficiência dos sistemas de remediação empregados. Entretanto, também é válido mencionar que ainda que conduzidas investigações de maior detalhe em área, as incertezas associadas ao arcabouço geológico sempre se farão presentes, devido à grande variabilidade espacial dos litotipos. Nesse contexto, a aplicação de ferramentas, como o T-PROGS, pode auxiliar no dimensionamento das dessas heterogeneidades e também na avaliação da conectividade de corpos arenosos, conduzindo a elaboração de modelos numéricos mais realistas e a definição de técnicas de remediação mais apropriadas ao contexto analisado.

6 CONCLUSÃO

O objetivo deste trabalho foi investigar o efeito da heterogeneidade geológica no transporte e destino de contaminante dissolvidos em água subterrânea numa porção do Aquífero Resende, no município de Guarulhos. Para atingir tal objetivo foram obtidas informações litológicas de 13 sondagens à percussão na área de trabalho que foram, posteriormente, utilizadas como parâmetro de entrada no *software* T-PROGS para elaboração de diferentes cenários geológicos. Estes cenários, por fim, foram inseridos no MODFLOW para realização de simulações de transporte de um contaminante hipotético.

Os resultados obtidos por meio das simulações estocásticas apontam para um elevado grau de incerteza quanto a distribuição litológica da área de estudo, uma vez que a partir de um mesmo banco de dados litológicos foi possível obter um conjunto de cenários geológicos amplamente discrepantes entre si, nos quais são observadas diferentes distribuições espaciais dos litotipos entre um cenário e outro. Além disso, as simulações estocásticas mostraram-se também eficientes quanto à avaliação do grau de conectividade de corpos arenosos, altamente permeáveis, que no presente trabalho poderiam vir a constituir caminhos preferencias de migração de contaminantes em meio a uma matriz argilosa menos condutora. Entretanto, tal característica não foi observada.

Por sua vez, a integração dos cenários geológicos ao MT3DMS possibilitou a geração de conjunto de soluções de transporte que honram as diferentes distribuições espaciais dos litotipos e dos parâmetros hidráulicos observados em cada cenário gerado pelo T-PROGS. As diferentes formas, distribuições e extensões das plumas simuladas reforçam a existência de uma forte heterogeneidade relacionada à área de estudo. Cabe destacar, entretanto, que a presença de heterogeneidade litológicas é uma característica comum a diversos aquíferos e sua existência constitui um verdadeiro desafio à modelagem de transporte, pois dificulta a previsão de migração do contaminante, frente ao elevado grau de incerteza associado a arcabouços geológicos heterogêneos. Diante disso, e com vistas a minimizar as incertezas associadas às heterogeneidades, sugere-se que sejam realizadas investigações de maior detalhe na área de estudo que promovam a ampliação do conhecimento hidrogeológico do aquífero e, conseqüentemente, auxiliem na elaboração de modelos numéricos mais assertivos.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALBERTO, Marcio Costa. 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. Tese (Doutorado em Geociências e meio ambiente) - Universidade Estadual Paulista, Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Rio Claro, 2010.

ALMEIDA, Fernando Flávio Marques. Os fundamentos geológicos do relevo paulista. Boletim do Instituto de Geografia e Geologia, São Paulo. n. 41, p. 169- 263. 1964

ALMEIDA, Lizane; SERRA, Juan Carlos Valdés. Modelos hidrológicos, tipos e aplicações mais utilizadas. Revista da FAE, v. 20, n. 1, p. 129-137, 2017

ANDERSON, M. P. & WOESSNER, W. W. Applied Groundwater Modeling: Simulation of Flow and Advective Transport. Academic Press, Inc., 381p., London. 1992.

ANDERSON, Mary P.; CHERRY, John A. Using models to simulate the movement of contaminants through groundwater flow systems. Critical Reviews in Environmental Science and Technology, v. 9, n. 2, p. 97-156, 1979.

ANDRADE, M.R.M. Cartografia de aptidão para assentamentos urbanos do Município de Guarulhos. 1999. 147 f. Dissertação (Mestrado em Geografia Humana) – Faculdade de Filosofia, Ciências Humanas, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1999.

ANDRADE, M. R. M. et al. Aspectos fisiográficos da paisagem guarulhense. Guarulhos tem História: questões sobre a história natural, social e cultural. São Paulo: Ananda, p. 25-37, 2008.

BEAR, Jacob; CHENG, Alexander H.-D. Modeling groundwater flow and contaminant transport. Springer Science & Business Media, 2010.

BERTOLO, Reginaldo Antonio. Relações entre rios e o aquífero sedimentar da Bacia de São Paulo em área de exploração intensiva de água subterrânea. 1996. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

BIANCHI, Marco et al. Spatial connectivity in a highly heterogeneous aquifer: From cores to preferential flow paths. *Water Resources Research*, v. 47, n. 5, 2011.

CARLE, Steven F.; FOGG, Graham E. Modeling spatial variability with one and multidimensional continuous-lag Markov chains. *Mathematical Geology*, v. 29, n. 7, p. 891-918, 1997.

CARLE, Steven F. T-PROGS: Transition probability geostatistical software. University of California, Davis, CA, v. 84, 1999.

CASTRO, Diogo Meurer de Souza et al. Cadeias de Markov: uma aplicação para o ensino de matrizes e probabilidades. 2015.

CESAR, C. F.; CAMPOS, D. C.; OLIVEIRA, E. S. Guarulhos 450 anos: atlas escolar histórico e geográfico. São Paulo: Noovha América, 1ª Edição - 2011

Cleary, R. W. (2007). Águas Subterrâneas. Tampa, Flórida, Princeton Groundwater Inc. 117p

COIMBRA, A. M.; RICCOMINI, C.; MELO, M. S. A Formação Itaquaquetuba: evidências de tectonismo no quaternário paulista. *Simpósio Regional de Geologia*, v. 4, p. 253-266, 1983.

COUTINHO, 1972: COUTINHO, José Moacyr Vianna. Petrologia do pré-Cambriano em São Paulo e arredores. *Boletim IG*, v. 3, p. 05-99, 1972.

DINIZ, Helio Nobile. Estudo do potencial hidrogeológico da bacia hidrográfica do Rio Baquirivu-Guaçu, municípios de Guarulhos e Arujá, SP. 1996. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

DINIZ, Helio Nobile; DUARTE, Uriel. CARACTERIZAÇÃO GEOLÓGICA E HIDROGEOLÓGICA DA BACIA HIDROGRÁFICA DO RIO BAQUIRIVU-GUAÇU NA REGIÃO DE GUARULHOS, SP. Revista Geociências-UNG-Ser, v. 1, n. 3, p. 51-61, 2012.

FABHAT-SERVMAR. Mapeamento das áreas potenciais de risco de contaminação das águas subterrâneas na UGRHI 6 e suas regiões de recarga. Relatório síntese. FABHAT, São Paulo. 2012.38p

FAUST, Charles R.; MERCER, James W. Ground-Water Modeling: Numerical Models a. Groundwater, v. 18, n. 4, p. 395-409, 1980

FEITOSA, A. C. & MANOEL FILHO, J. (2000). Hidrogeologia – Conceitos e aplicações.2°. Edição. Fortaleza: CPRM/REFO, LABHID-UFPE, 391 p li

FETTER, Charles Willard; BOVING, Thomas B.; KREAMER, David K. Contaminant hydrogeology. Upper Saddle River, NJ: Prentice hall, 1999.

FETTER, C.W. Applied Hydrogeology. 4 Ed., Upper Saddle River: Prentice Hall, 2001.

FETTER, Charles Willard. Applied hydrogeology. 3 ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2000

FETTER, Charles Willard. Applied hydrogeology. Waveland Press, 2018.

FOGG, Graham E. Groundwater flow and sand body interconnectedness in a thick, multiple-aquifer system. Water Resources Research, v. 22, n. 5, p. 679-694, 1986.

FREEZE R. A., CHERRY J. A. 1979. Groundwater. Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey, 624 p

GRAÇA, B.A. Condicionantes geoambientais no processo histórico da ocupação territorial do município de Guarulhos, Estado de São Paulo. Guarulhos, 2007. 116 f. Dissertação (Mestrado em Análise Geoambiental) – Universidade Guarulhos

GROSSI, R.M. Cadeias de Markov aplicadas à definição de camadas litológicas para modelos de fluxo de águas subterrâneas. Dissertação (mestrado em Geociências) - Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo. São Paulo, 158p. 2020.

GELHAR, Lynn W.; WELTY, Claire; REHFELDT, Kenneth R. A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers. Water resources research, v. 28, n. 7, p. 1955-1974, 1992.

GELHAR, Lynn W.; GELHAR, L. W. Stochastic subsurface hydrology. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1993.

GUARULHOS, 2008. Plano Diretor de Drenagem de Guarulhos: Diretrizes orientações e propostas. Guarulhos: Prefeitura Municipal de Guarulhos, 80p.

HARBAUGH, Arlen W. et al. Modflow-2000, the u. s. geological survey modular ground-water model-user guide to modularization concepts and the ground-water flow process. Open-file report. U. S. Geological Survey, n. 92, p. 134, 2000.

HASUI, Yociteru. Evolução polifásica do precambriano a oeste de São Paulo. Boletim IG, v. 6, p. 95-108, 1975.

HASUI, Yociteru; SADOWSKI, Georg Robert; CARNEIRO, Celso Dal Ré. Considerações sobre a estratigrafia do Pré-Cambriano na região de São Paulo. Boletim IG, v. 7, p. 107-112, 1976.

HASUI, YOCITERU; SADOWSKI, GEORG ROBERT. Evolução geológica do Precambriano na região sudeste do Estado de São Paulo. Revista Brasileira de Geociências, v. 6, n. 3, p. 182-200, 2018.

JULIANI, Caetano. Geologia, petrogênese e aspectos metalogenéticos dos Grupos Serra do Itaberaba e São Roque na região das serras do Itaberaba e da Pedra Branca, NE da cidade de São Paulo, SP. 1993. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

KLOTZ, D. et al. Dispersivity and velocity relationship from laboratory and field experiments. *Journal of Hydrology*, v. 45, n. 3-4, p. 169-184, 1980.

KOLTERMANN, Christine E.; GORELICK, Steven M. Heterogeneity in sedimentary deposits: A review of structure-imitating, process-imitating, and descriptive approaches. *Water Resources Research*, v. 32, n. 9, p. 2617-2658, 1996.

KRESIC, N. Hidrogeology and groundwater modeling. CRC. 2º ED. 2007.

LALLEMAND-BARRES, A.; PEAUDECERF, P. Recherche des relations entre la valeur de la dispersivité macroscopique d'un milieu aquifère, ses autres caractéristiques et les conditions de mesure. *Bull. Bur. Rech. Geol. Min., Sect 3*, v. 4, n. 4, 1978.

MANZIONE, Rodrigo Lilla. Incorporação de incertezas associadas à predições de modelos hidrológicos aos instrumentos de gestão em recursos hídricos. *Caderno Prudentino de Geografia*, v. 1, n. 36, p. 215-227, 2014.

MAXWELL, Reed M.; KOLLET, Stefan J. Quantifying the effects of three-dimensional subsurface heterogeneity on Hortonian runoff processes using a coupled numerical, stochastic approach. *Advances in Water Resources*, v. 31, n. 5, p. 807-817, 2008.

MCDONALD, Michael G.; HARBAUGH, Arlen W. A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model. US Geological Survey, 1988.

NEUMAN, Shlomo P. Universal scaling of hydraulic conductivities and dispersivities in geologic media. *Water resources research*, v. 26, n. *8, p. 1749-1758, 1990.

OLIVEIRA, Antonio Manoel dos Santos et al. Diagnóstico ambiental para o manejo sustentável do Núcleo Cabuçu do Parque Estadual da Cantareira e áreas vizinhas do município de Guarulhos. Guarulhos: Laboratório de Geoprocessamento da Universidade Guarulhos. Relatório FAPESP (Processo 01/02767-0), 2005.

PACHECO, Ricardo. Mapeamento geomorfológico do geoparque ciclo do ouro de Guarulhos–SP. 2015.

PISSATO, Edilson. Gestão da mineração de areia no município de Guarulhos: aproveitamento de resíduos finos em cerâmica vermelha. 2009. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

RICCOMINI, C. & COIMBRA, A.M. 1992 . Geologia da Bacia Sedimentar de São Paulo. Solos da Cidade de São Paulo, ABMS & ABEF. São Paulo, p. 37-94.

RICCOMINI, C. O Rift Continental do Sudeste do Brasil. São Paulo. Tese de doutorado. Instituto de Geociências da Universidade de São Paulo. p.256. 1989;

RICCOMINI, Claudio; SANT’ANNA, Lucy Gomes; FERRARI, André Luiz. Evolução geológica do rift continental do sudeste do Brasil. Geologia do continente Sul-Americano: evolução da obra de Fernando Flávio Marques de Almeida, p. 383-405, 2004.

RODRIGUEZ, Sergio Kleinfelder. Geologia urbana da região metropolitana de São Paulo. 1998. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

SANTOS, S. A. D. Tanque Grande: um espaço em transformação: estudo da região do Tanque Grande – Guarulhos, área de proteção de mananciais. 2005. 150p. Dissertação (Mestrado em Geografia) – Instituto de Geociências, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.

TAKIYA, Harmi. Aplicação de métodos quantitativos espaciais a dados geológicos da Bacia de São Paulo. 1991. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

TAKIYA, Harmi. Estudo da sedimentação Neogênico-Quaternário no município de São Paulo: caracterização dos depósitos e suas implicações na geologia urbana. 1997. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

TERAMOTO, Elias Hideo; CHANG, Hung Kiang; CAETANO-CHANG, Maria Rita. Transporte de solutos em diferentes cenários geológicos gerados por modelos estocásticos de cadeias de Markov. *Águas Subterrâneas*, v. 31, n. 4, p. 316-326, 2017.

THOME, A., KNOP, A., 2005, “Movimentos de Contaminantes no Solo”. Disponível em: <http://www.upf.br/coaju/download/contaminantesII.pdf>. Acesso em: 30 Out. 2020, 15:00h.

TORRESANI, Bruna Daniele de Carvalho Gimenez et al. ANÁLISE DA COBERTURA ARBÓREA NO MUNICÍPIO DE GUARULHOS (SP), COMO UM DOS INDICADORES DA VARIAÇÃO DE TEMPERATURA SUPERFICIAL E DA QUALIDADE AMBIENTAL. *Revista Geociências-UNG-Ser*, v. 15, n. 2, p. 94-105, 2016.

VIVIANI-LIMA, Juliana Baitz. Estimativa de recarga em áreas urbanizadas: estudo de caso na bacia do Alto Tietê (SP). 2007. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

XU, Moujin; ECKSTEIN, Yoram. Use of weighted least-squares method in evaluation of the relationship between dispersivity and field scale. *Groundwater*, v. 33, n. 6, p. 905-908, 1995.

WALKER, Justin R. Application of transition probability geostatistics for indicator simulations involving the MODFLOW model. 2002. Tese de Doutorado. Brigham Young University. Department of Civil and Environmental Engineering.

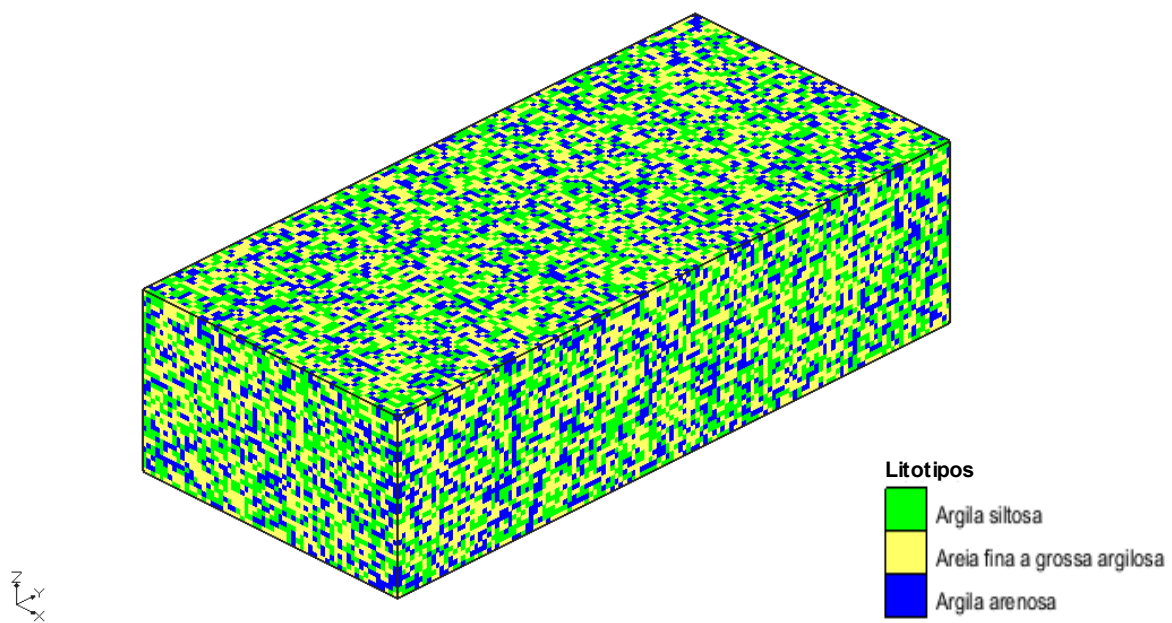
WOTTRICH, Ingo. Uso de ferramentas computacionais na construção de modelos estocásticos de fluxo e delimitação de perímetro de proteção de poços. 2012.

ZHANG, Dongxiao. Stochastic methods for flow in porous media: coping with uncertainties. Elsevier, 2001.

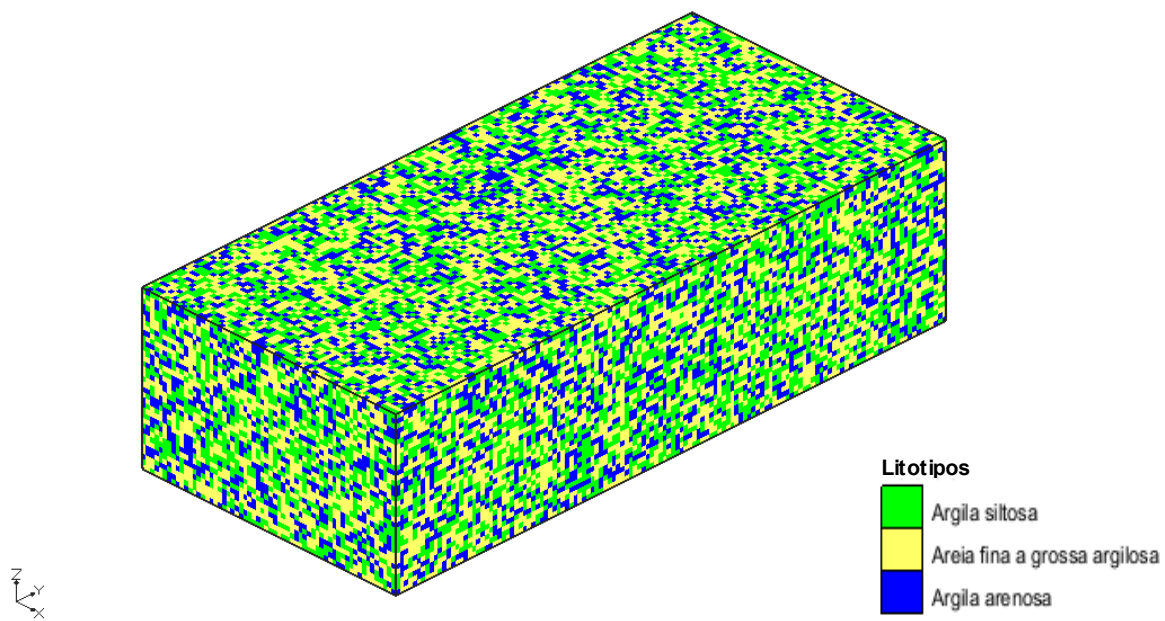
ZHENG, Chunmiao et al. MT3DMS: a modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems; documentation and user's guide. 1999.

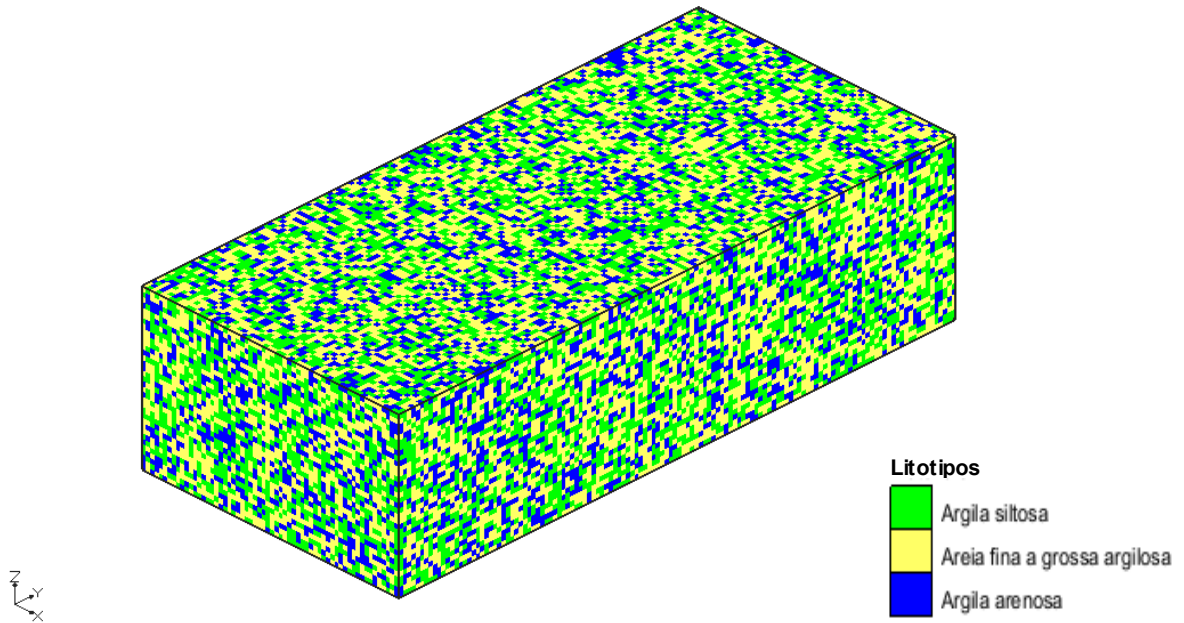
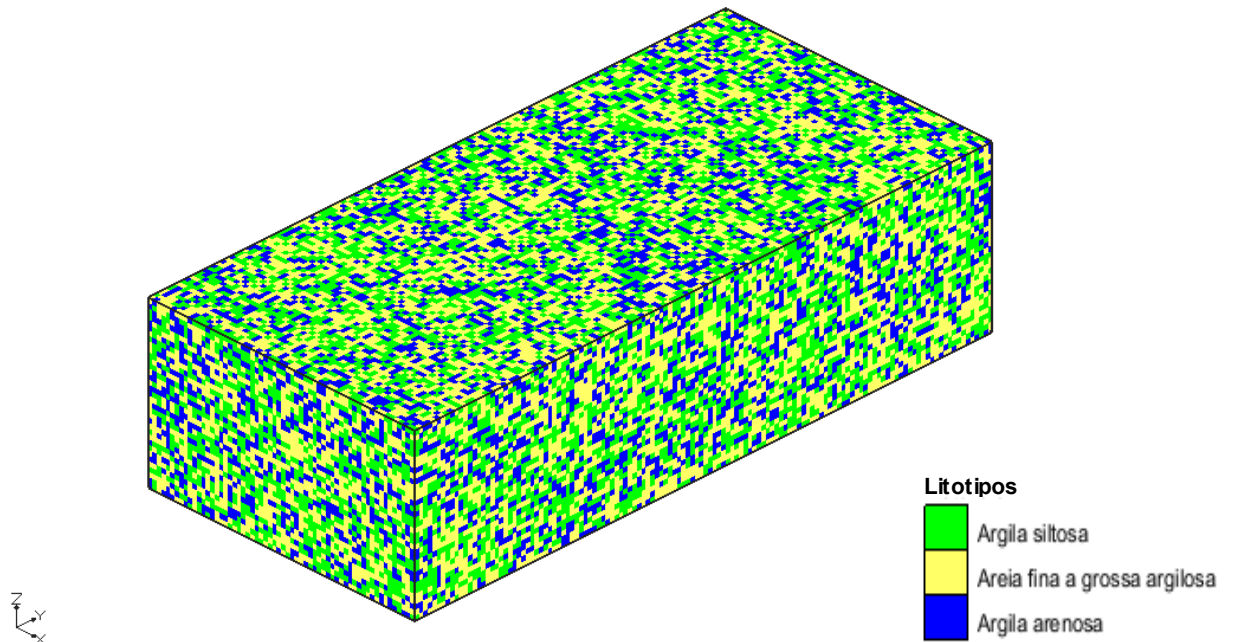
APÊNDICE A – Cenários Geológicos

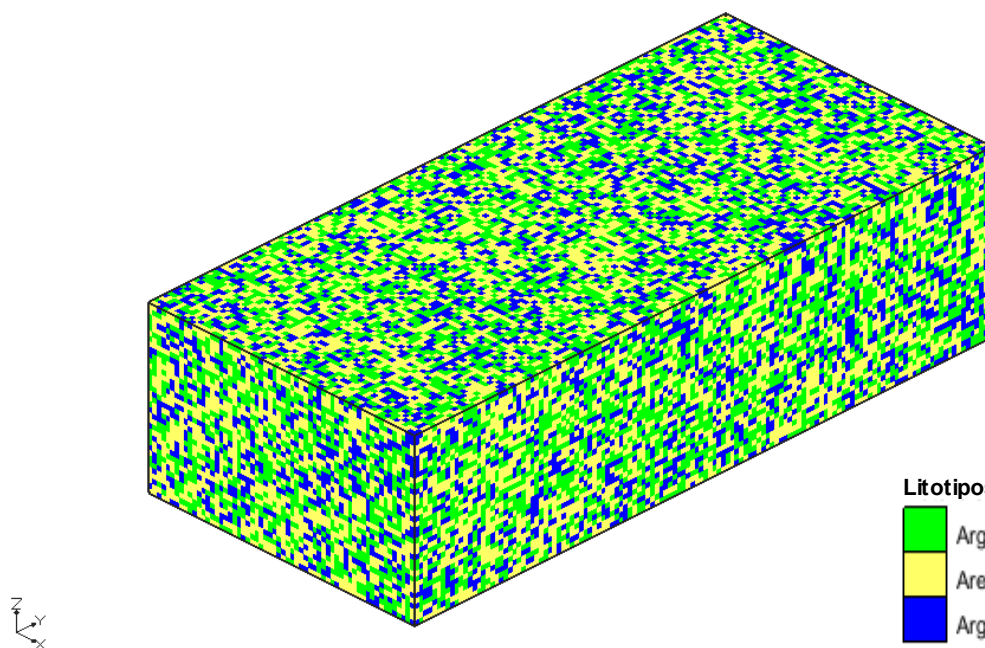
Cenário 1



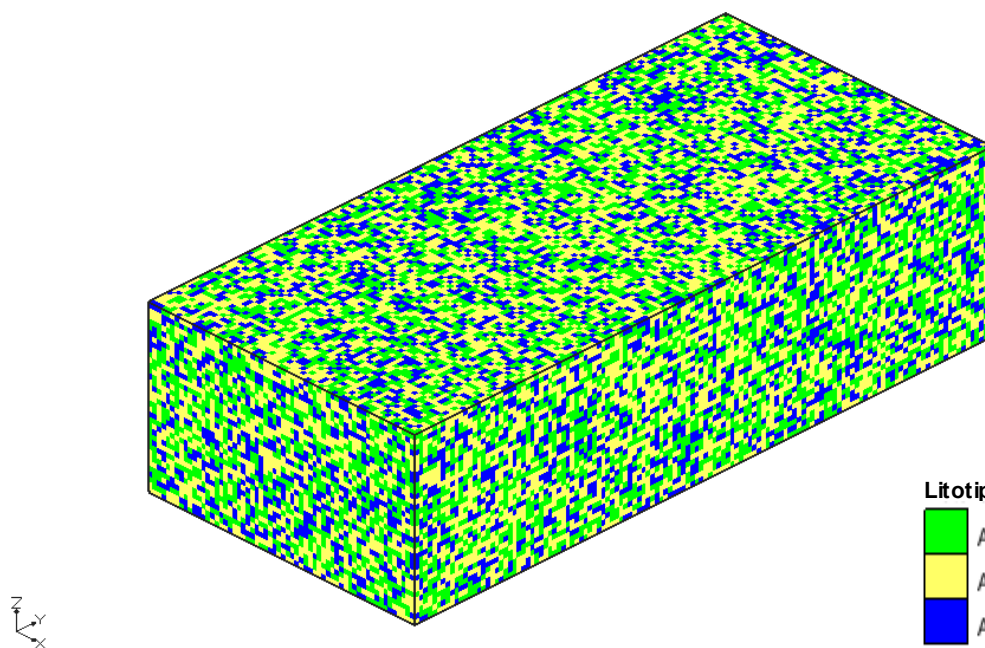
Cenário 2



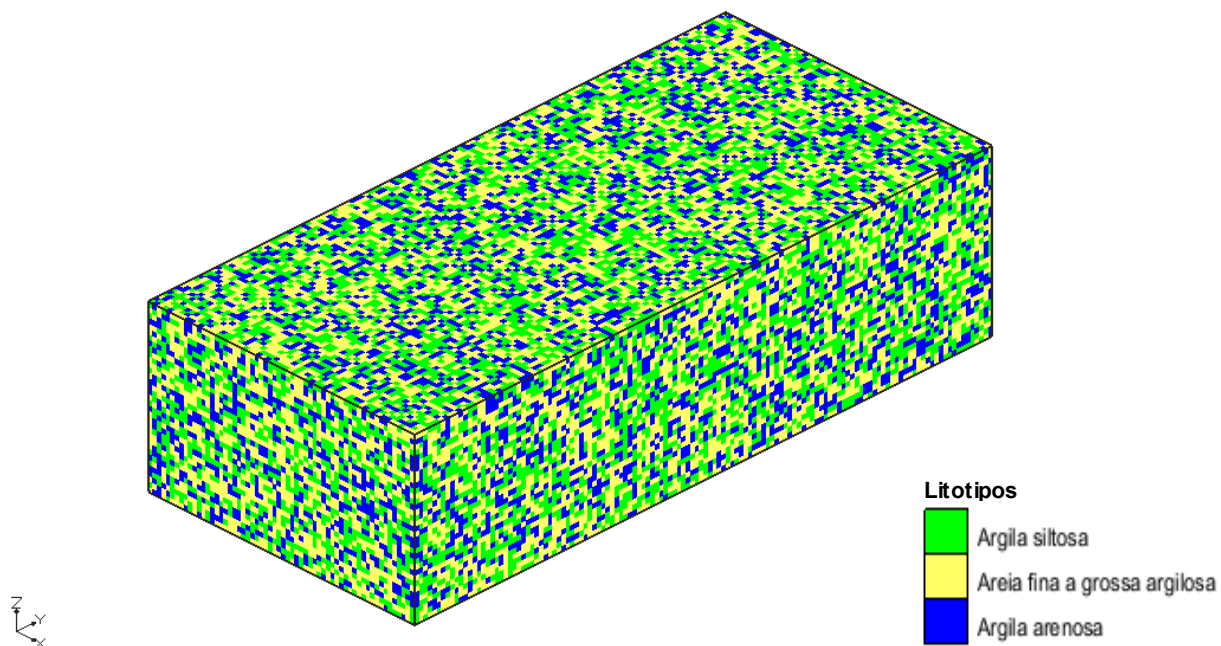
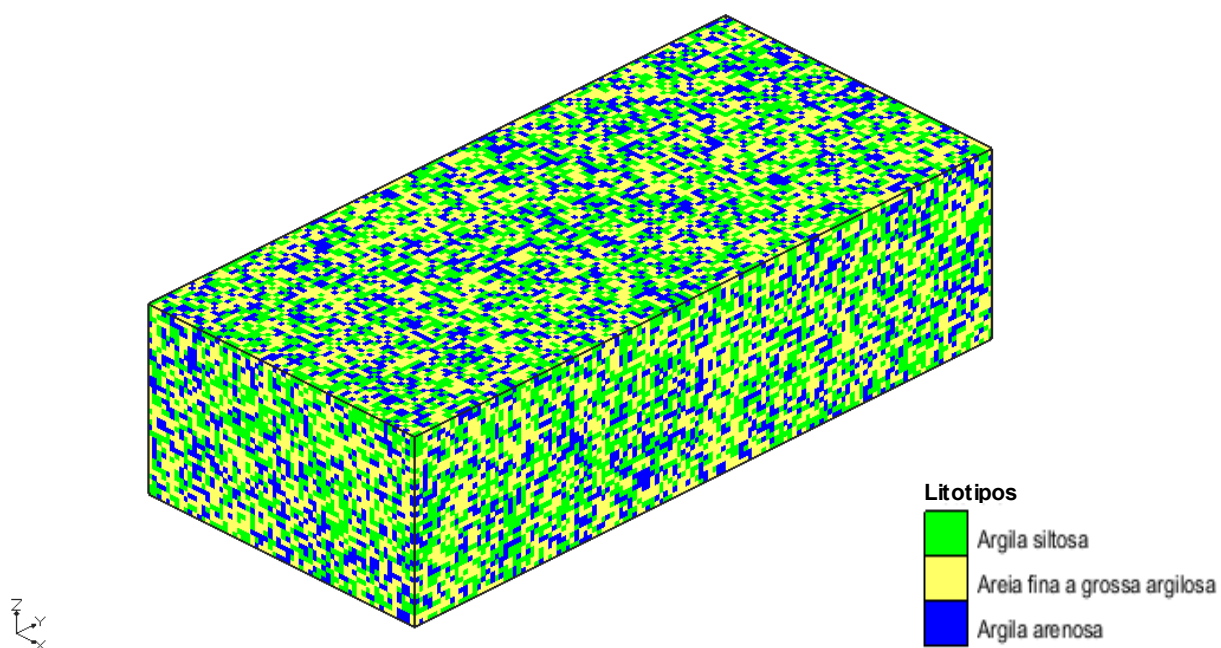
Cenário 3**Cenário 4**

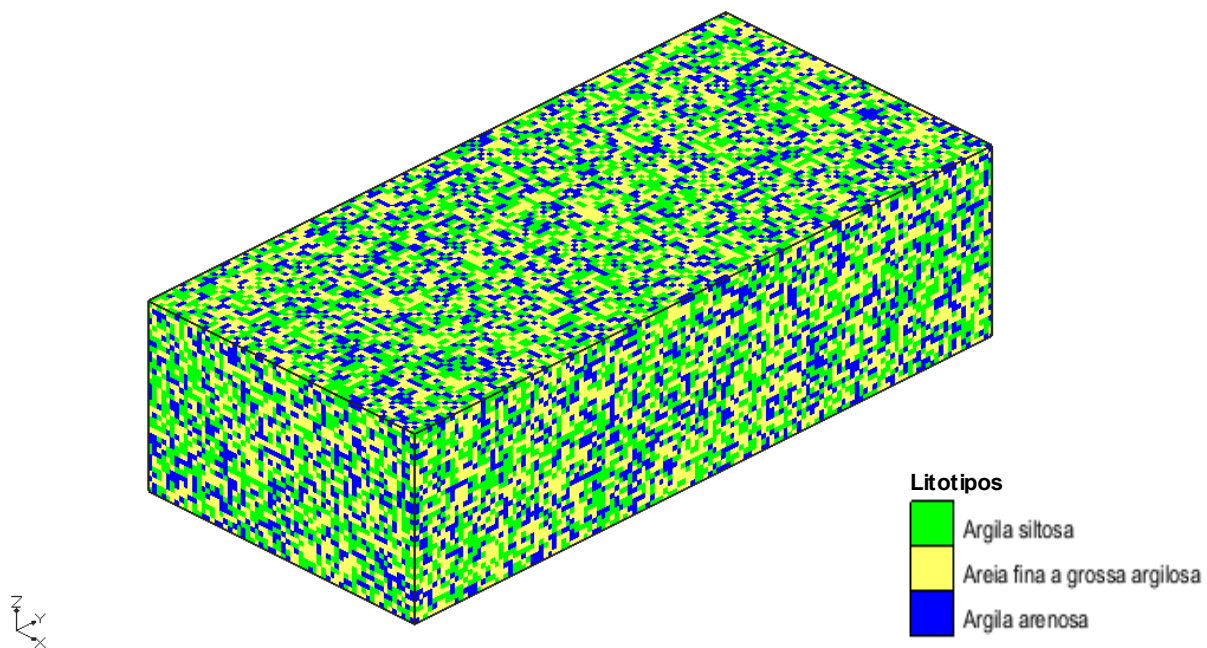
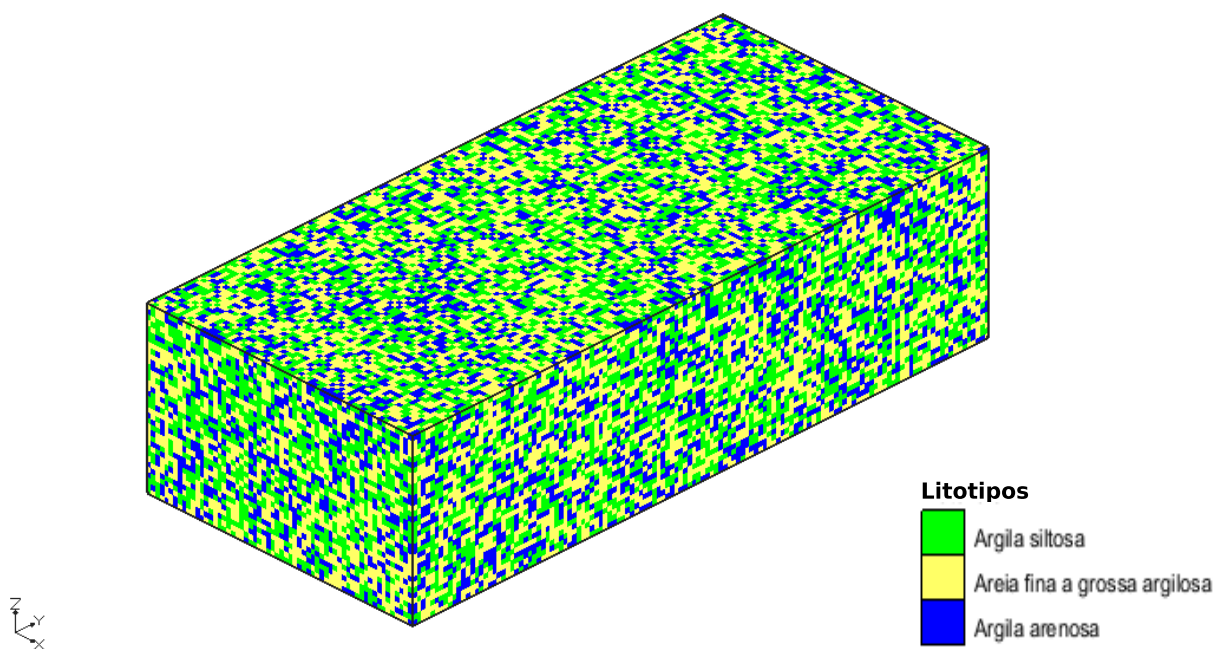
Cenário 5**Litotipos**

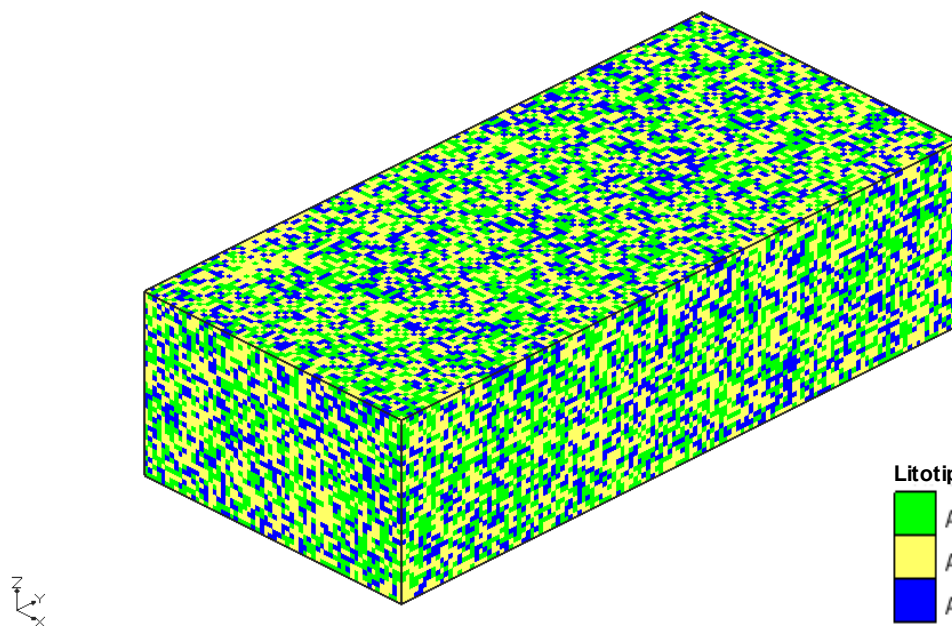
- Argila siltosa
- Areia fina a grossa argilosa
- Argila arenosa

Cenário 6**Litotipos**

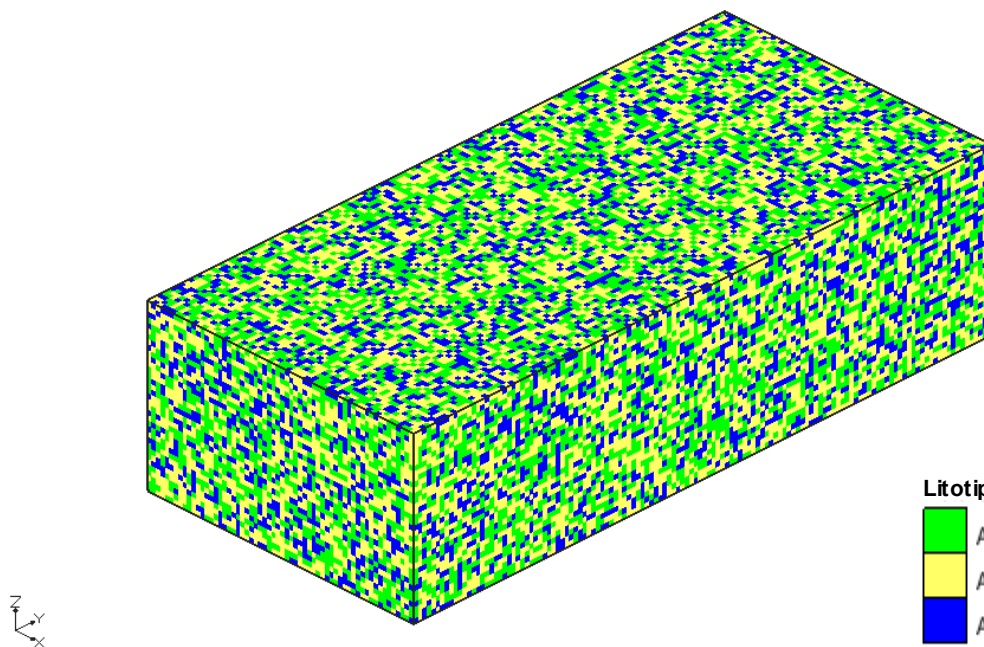
- Argila siltosa
- Areia fina a grossa argilosa
- Argila arenosa

Cenário 7**Cenário 8**

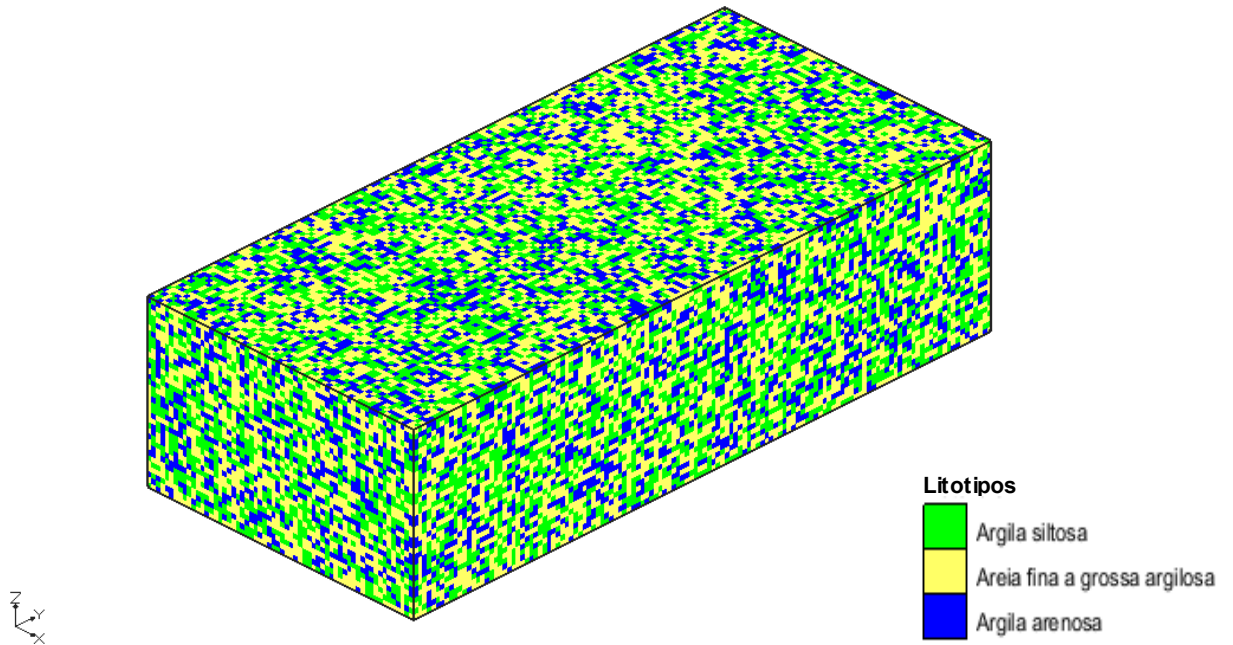
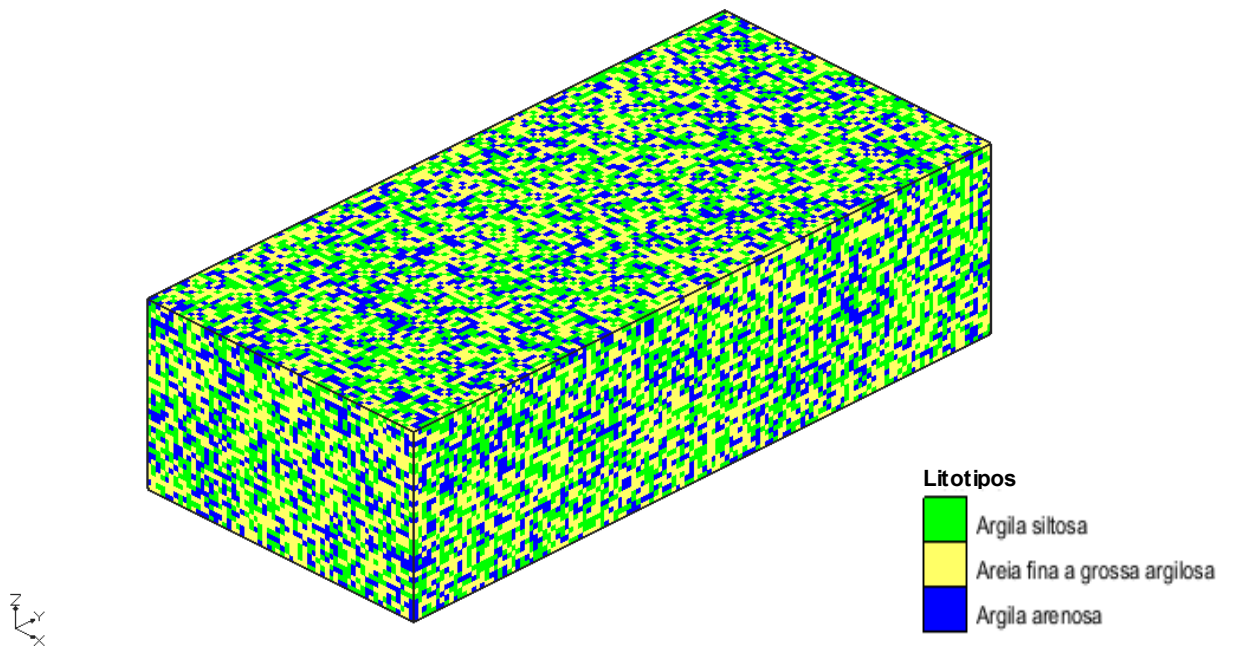
Cenário 9**Cenário 10**

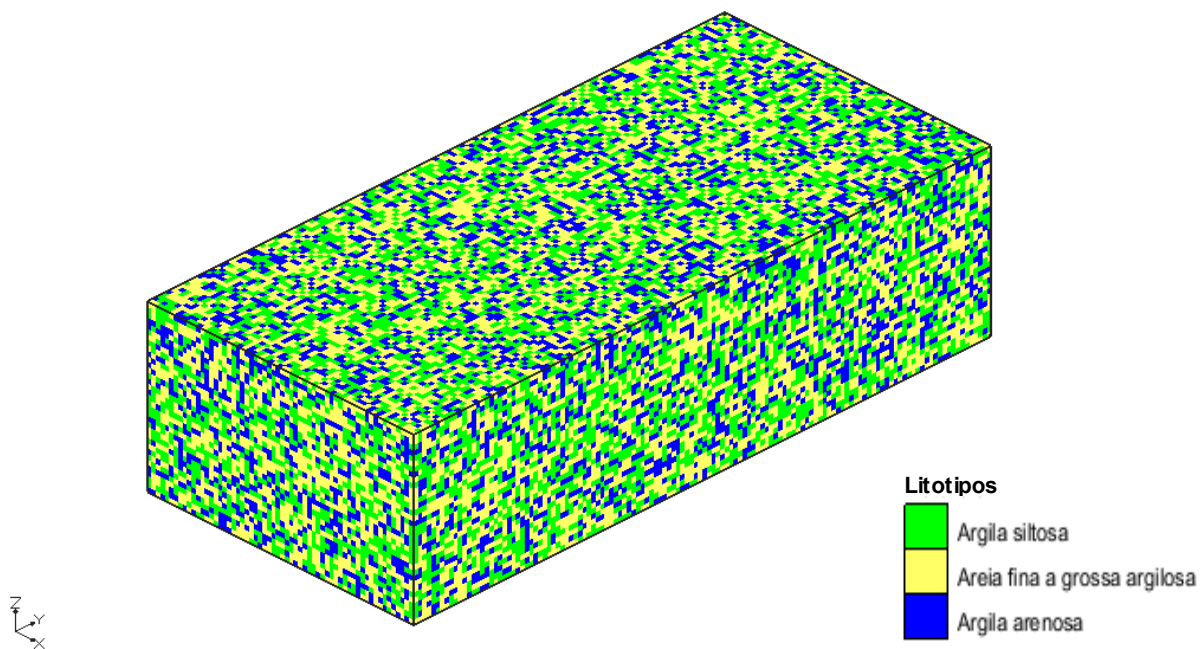
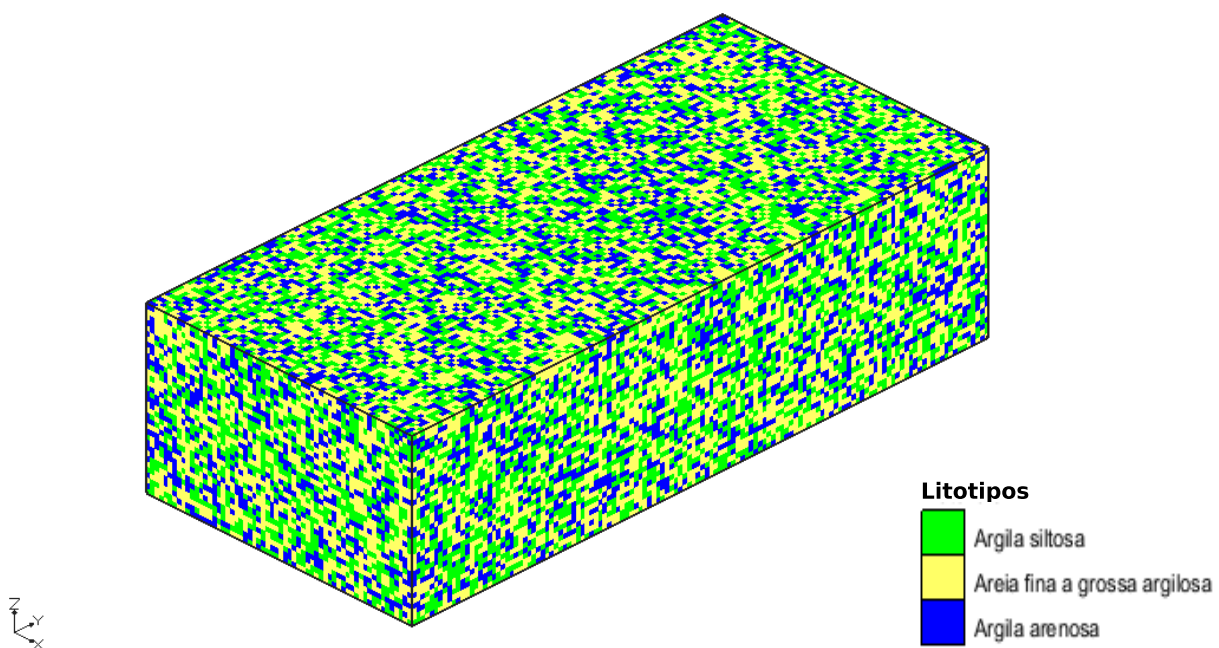
Cenário 11**Litotipos**

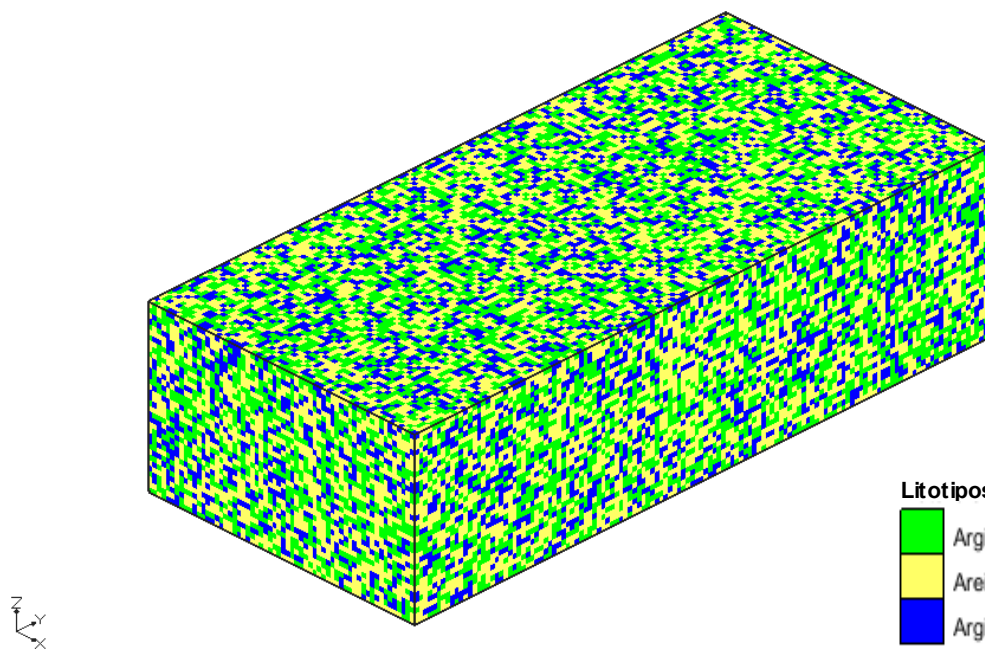
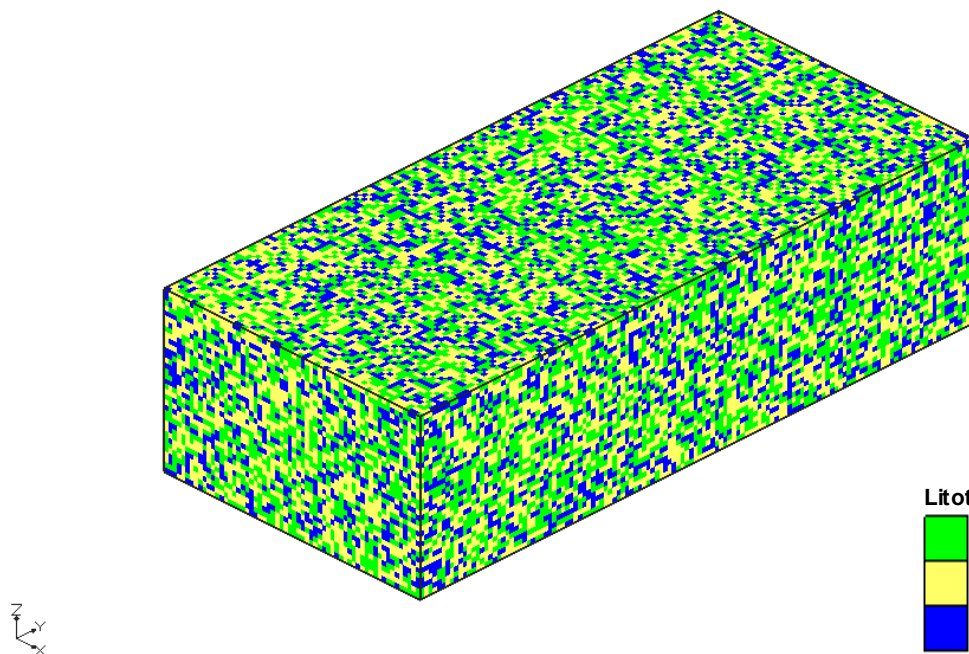
- Argila siltosa
- Areia fina a grossa argilosa
- Argila arenosa

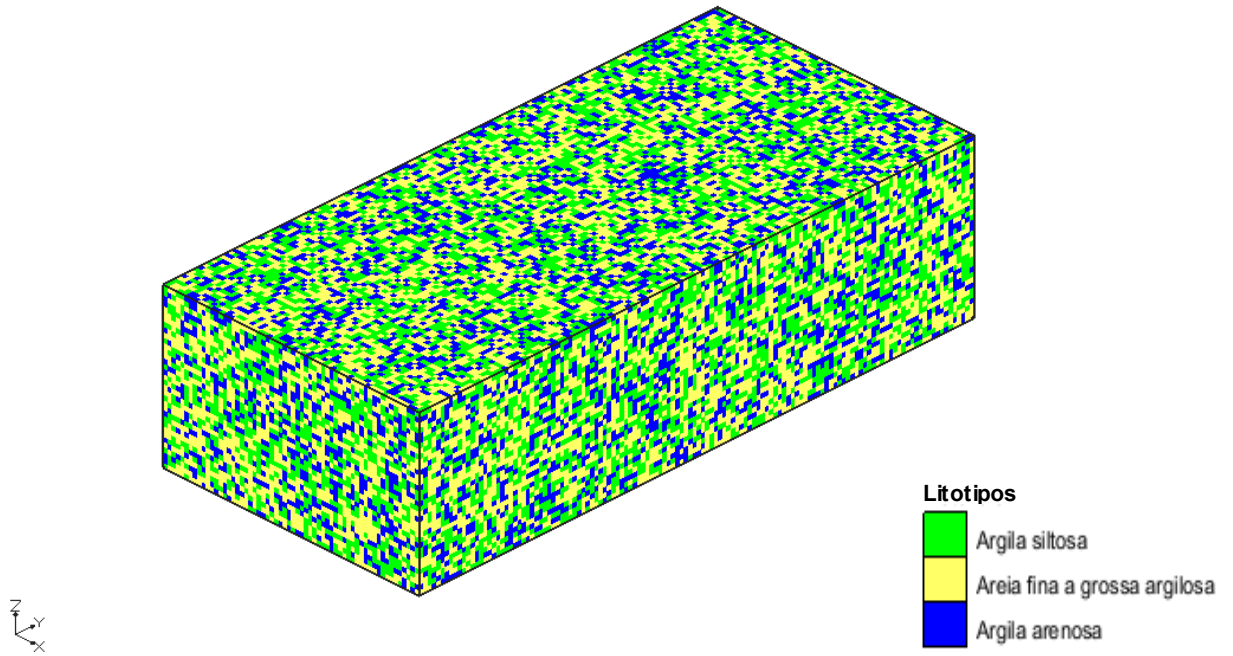
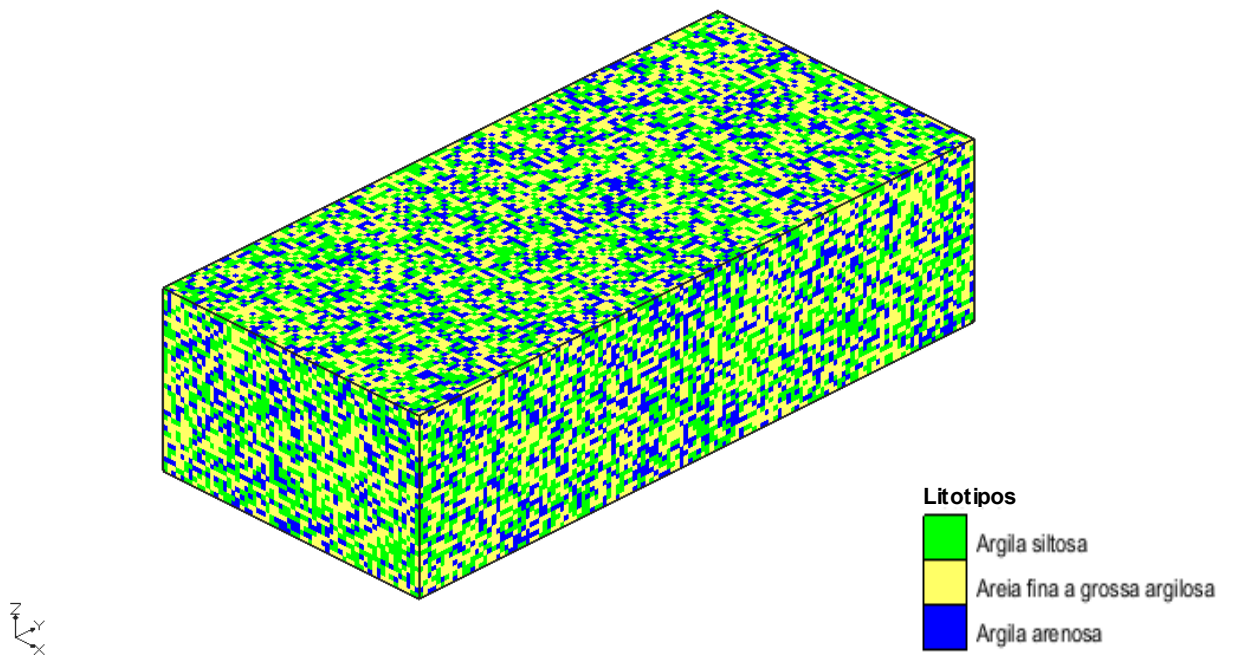
Cenário 12**Litotipos**

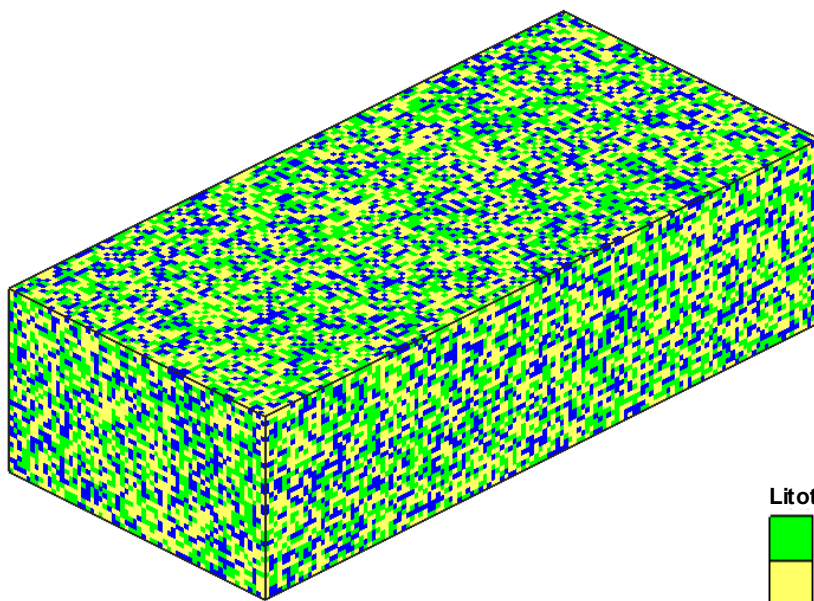
- Argila siltosa
- Areia fina a grossa argilosa
- Argila arenosa

Cenário 13**Cenário 14**

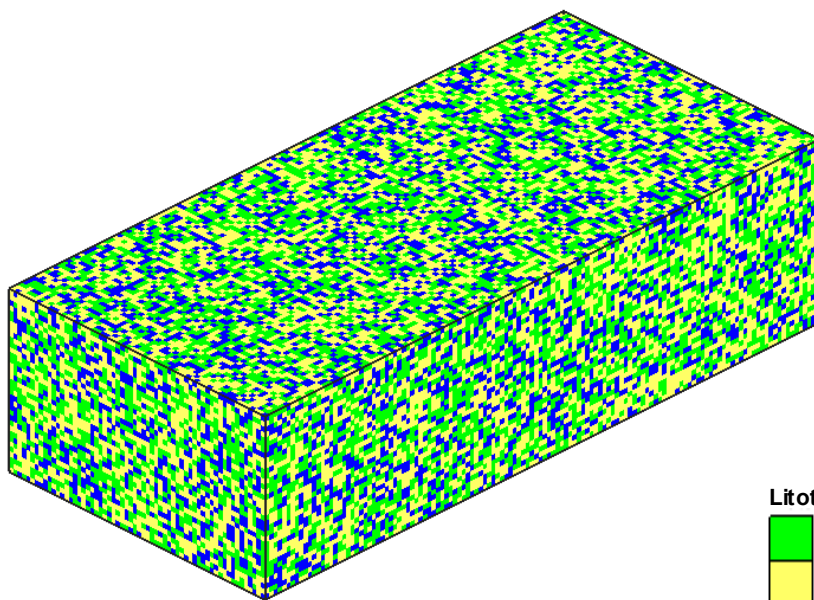
Cenário 15**Cenário 16**

Cenário 17**Cenário 18**

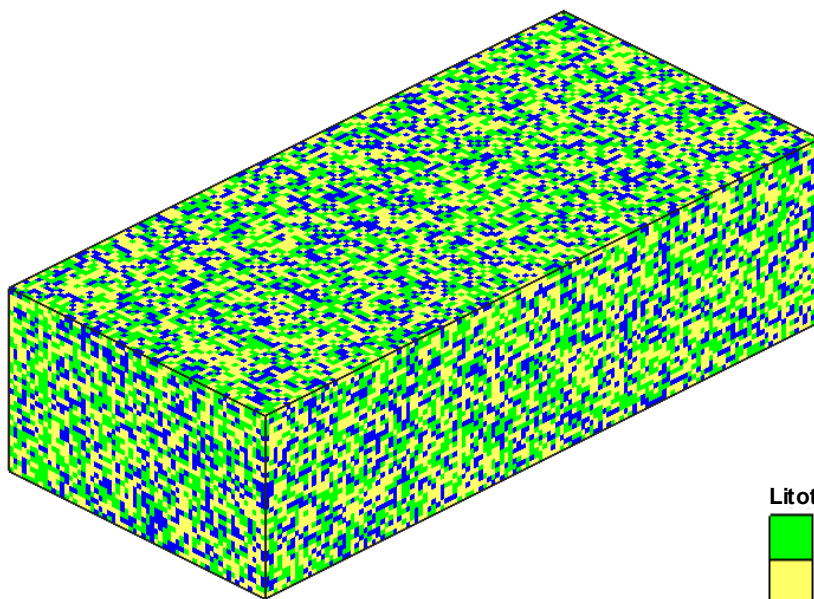
Cenário 19**Cenário 20**

Cenário 21**Litotipos**

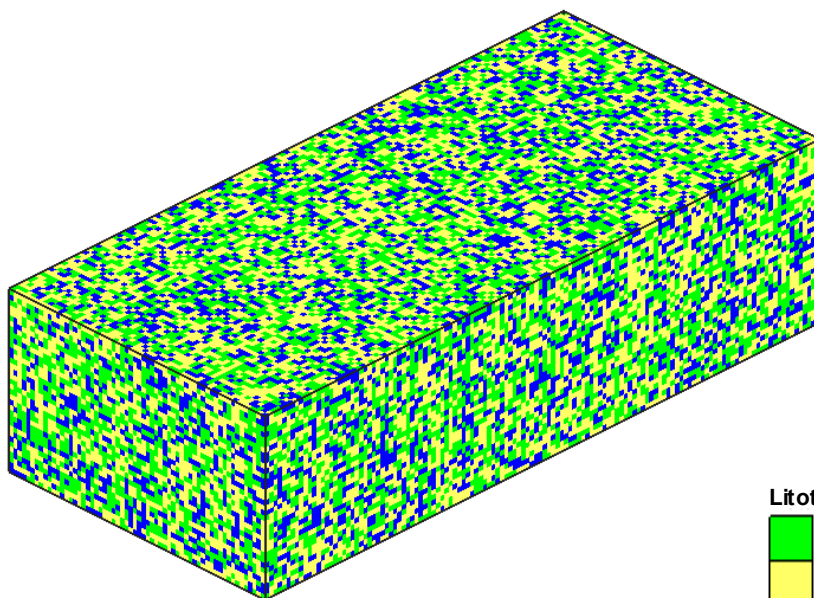
- Argila siltosa
- Areia fina a grossa argilosa
- Argila arenosa

Cenário 22**Litotipos**

- Argila siltosa
- Areia fina a grossa argilosa
- Argila arenosa

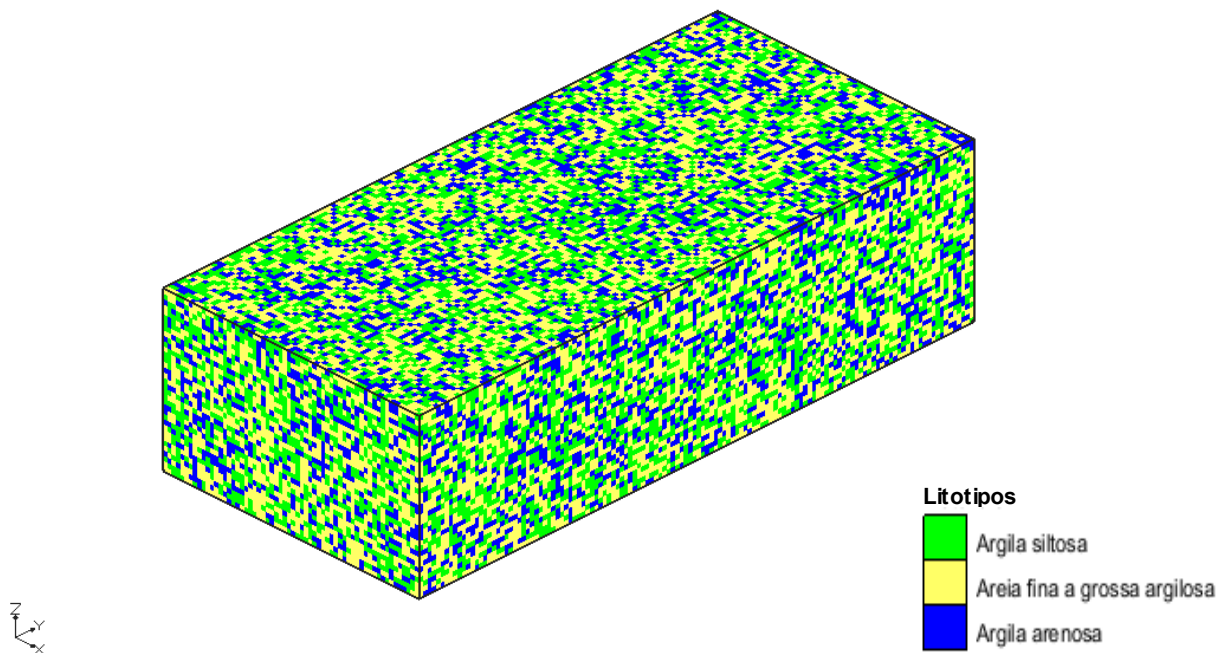
Cenário 23**Litotipos**

- Argila siltosa
- Areia fina a grossa argilosa
- Argila arenosa

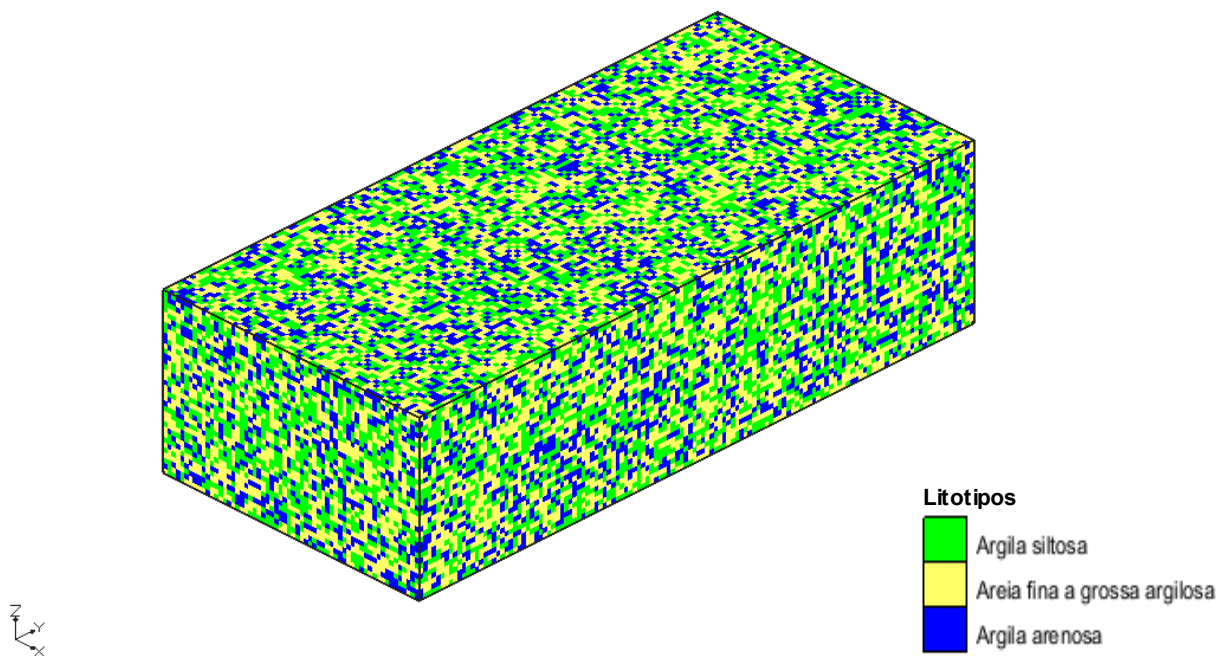
Cenário 24**Litotipos**

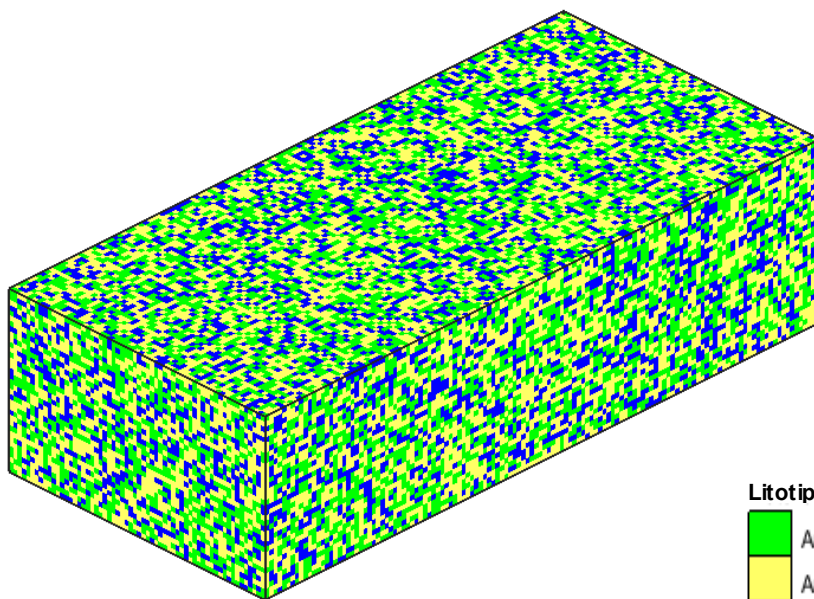
- Argila siltosa
- Areia fina a grossa argilosa
- Argila arenosa

Cenário 25

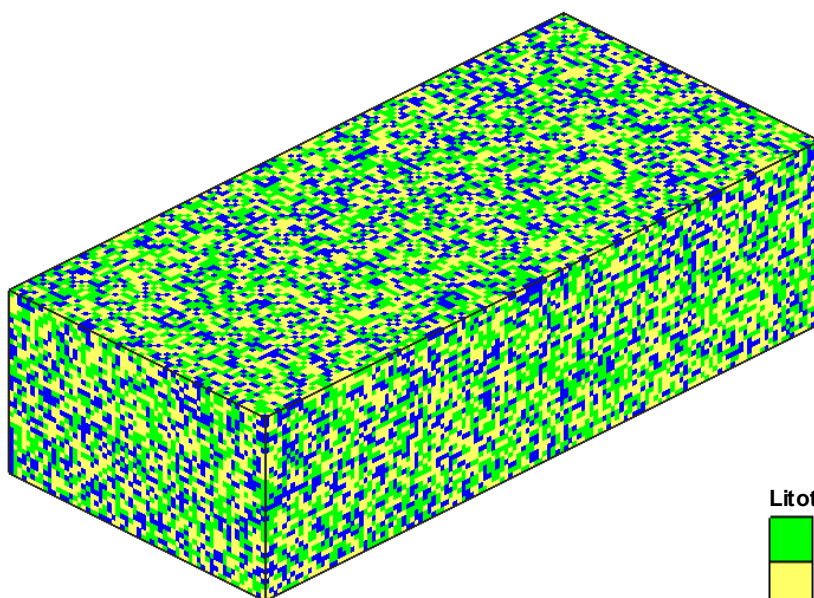


Cenário 26

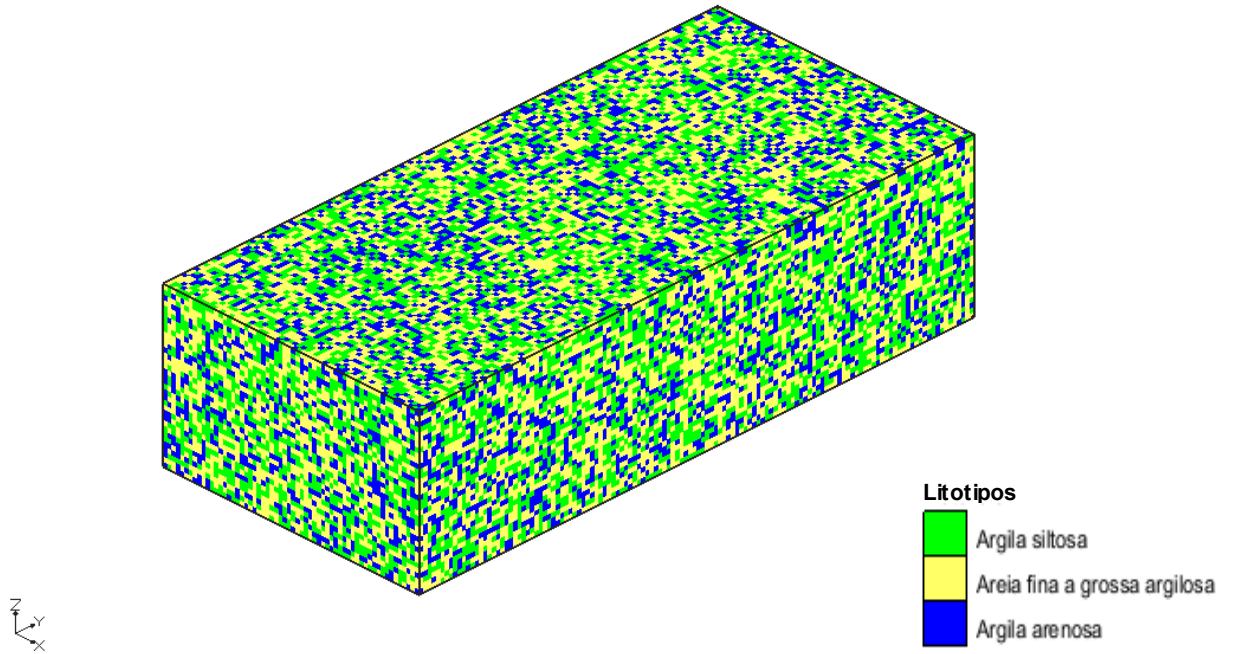
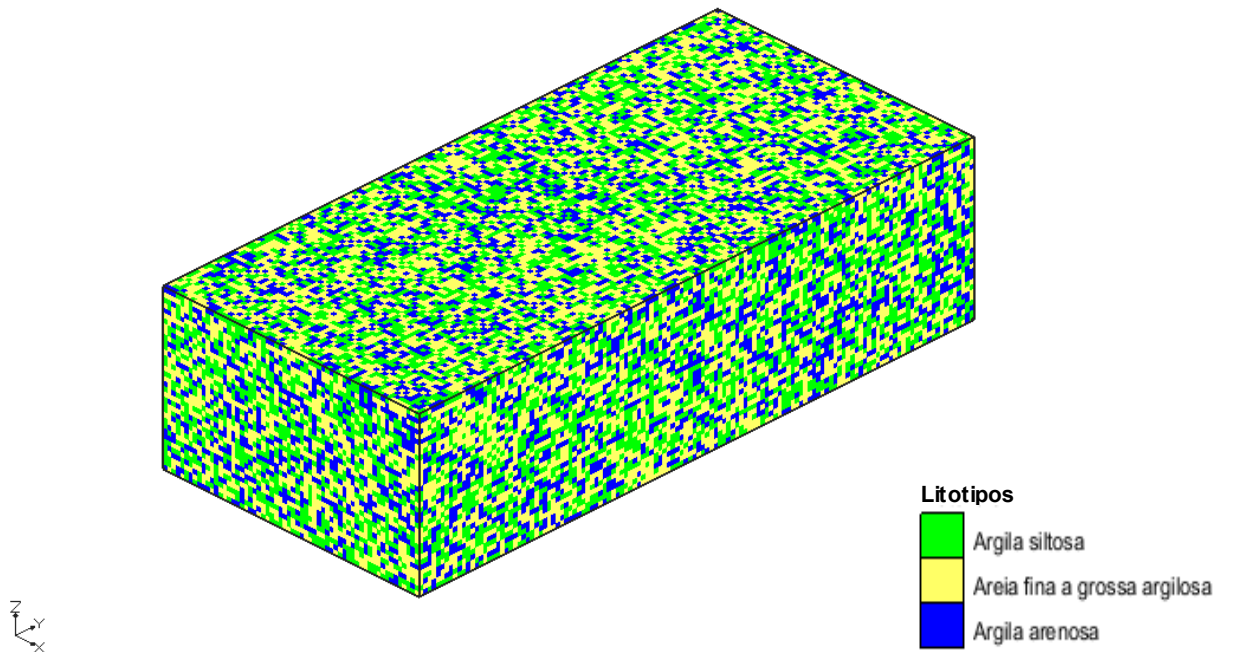


Cenário 27**Litotipos**

- Argila siltosa
- Areia fina a grossa argilosa
- Argila arenosa

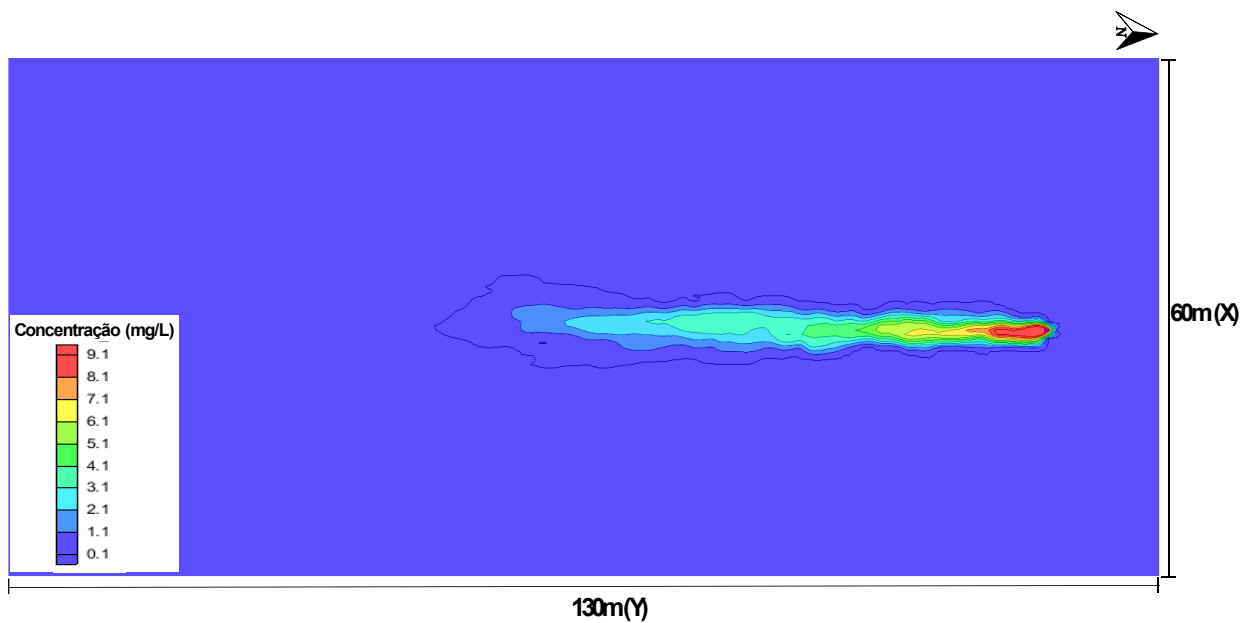
Cenário 28**Litotipos**

- Argila siltosa
- Areia fina a grossa argilosa
- Argila arenosa

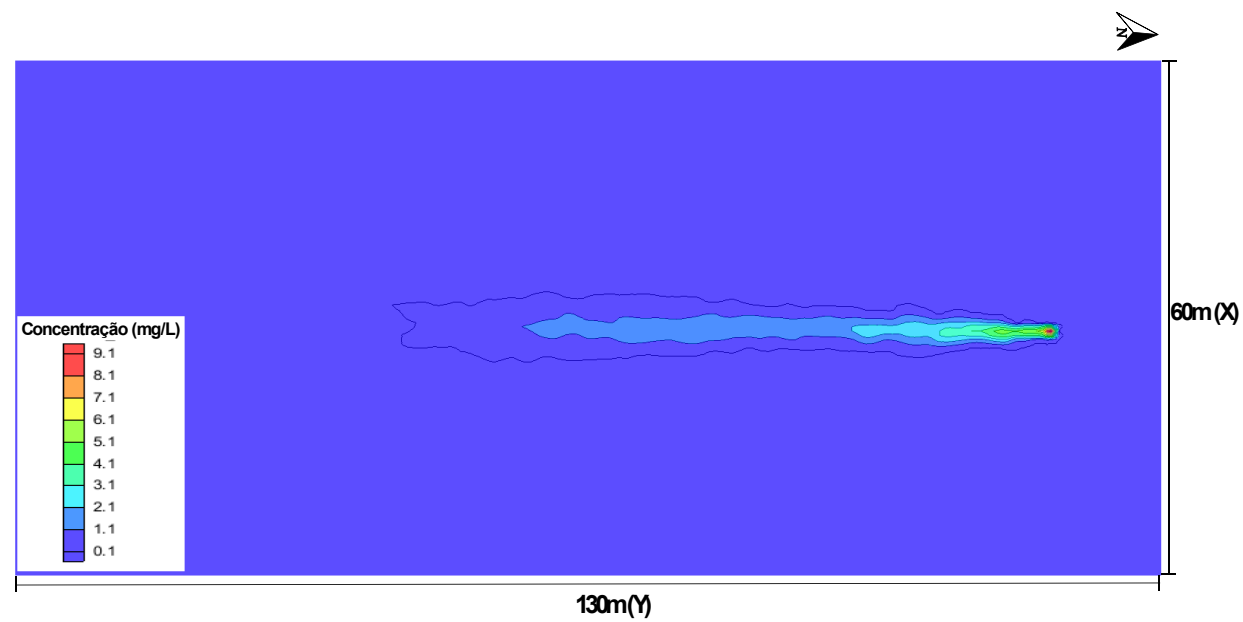
Cenário 29**Cenário 30**

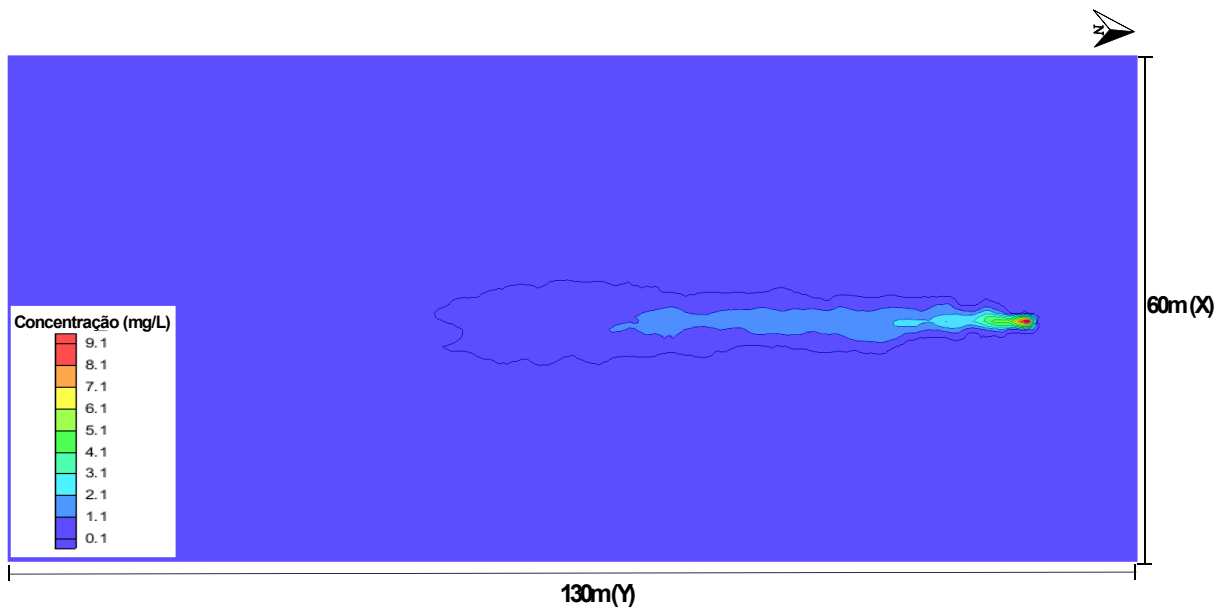
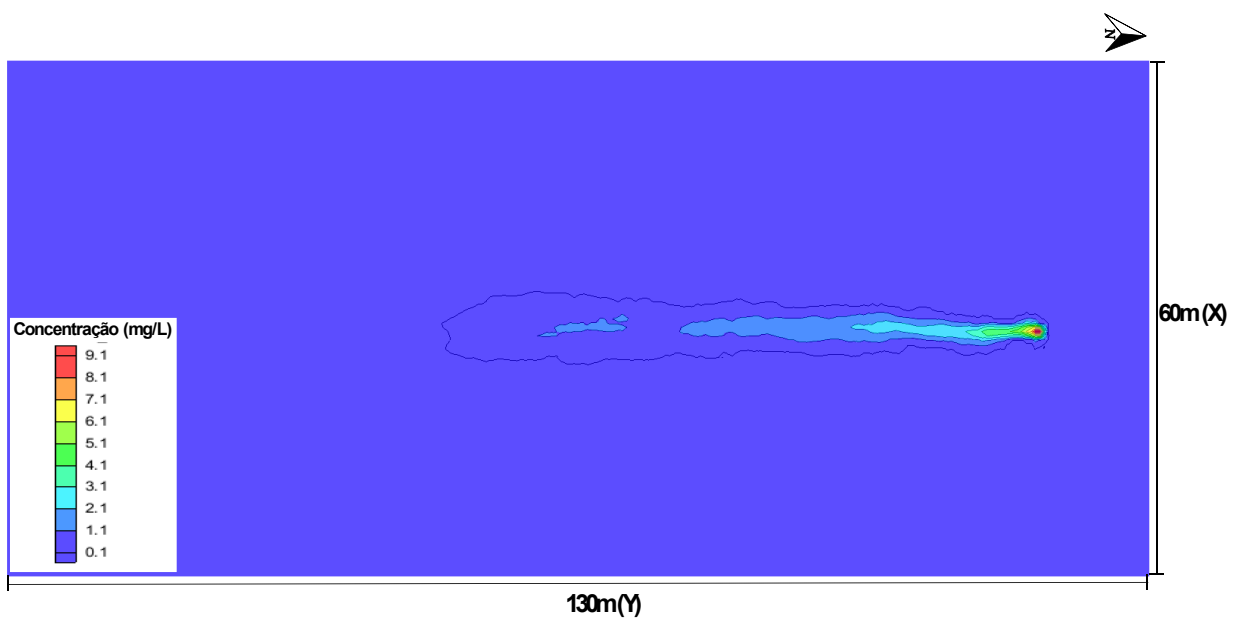
APÊNDICE B – Simulações de transporte

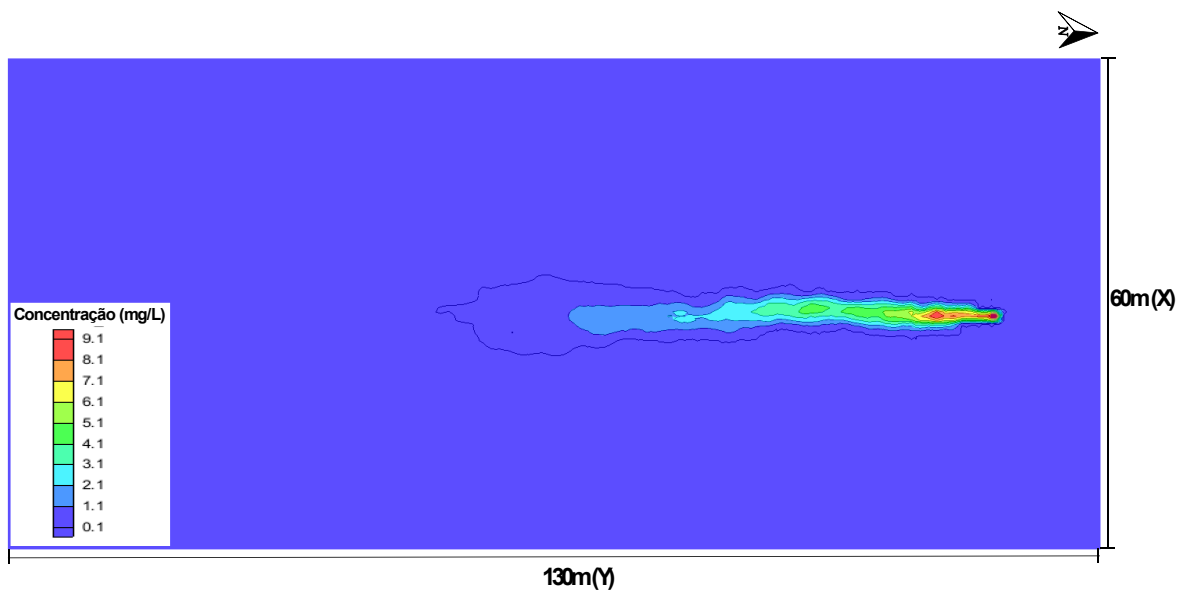
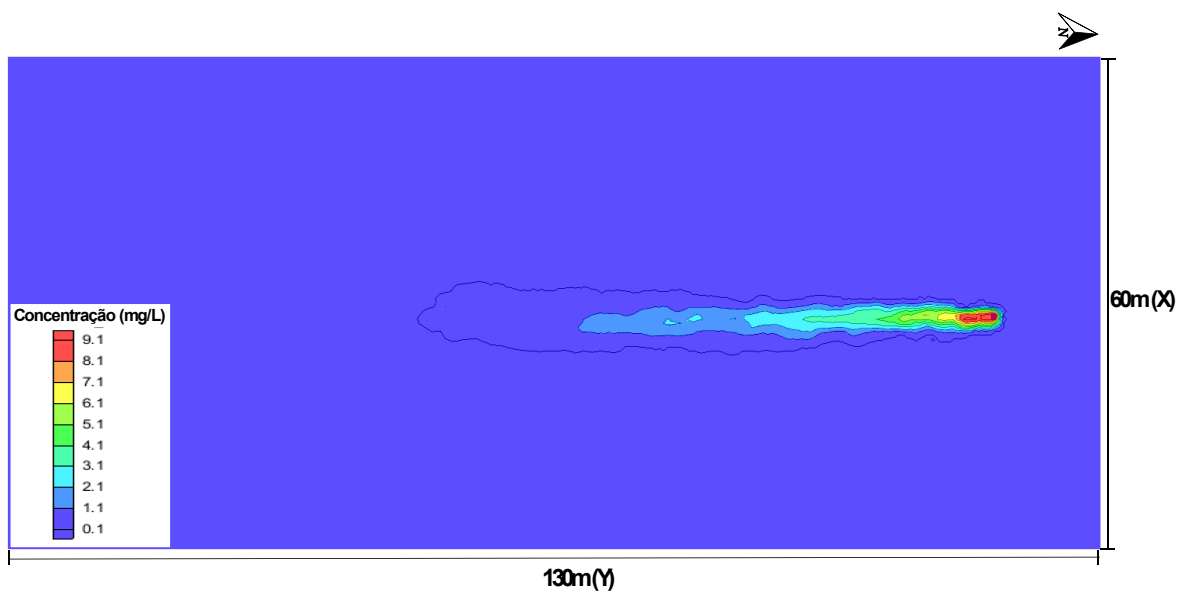
Simulação 1



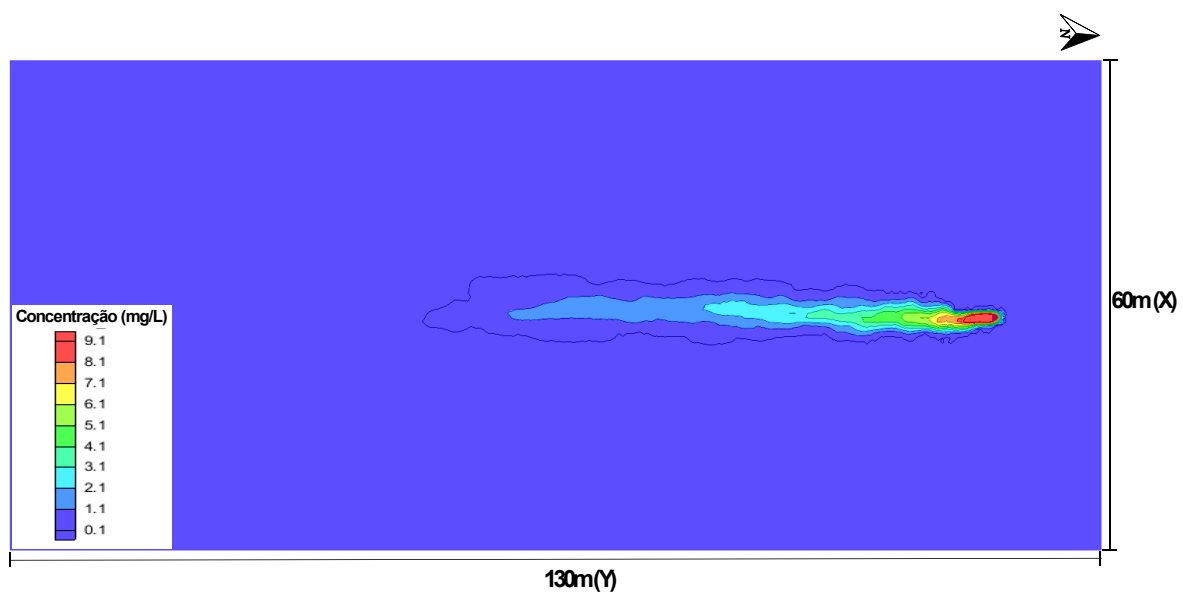
Simulação 2



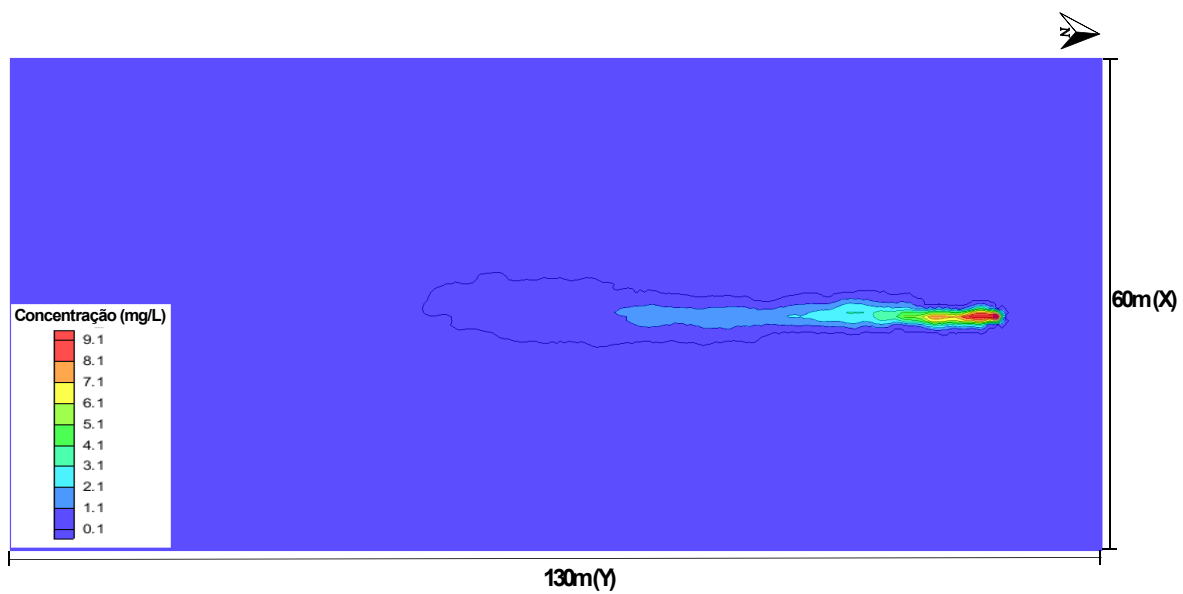
Simulação 3**Simulação 4**

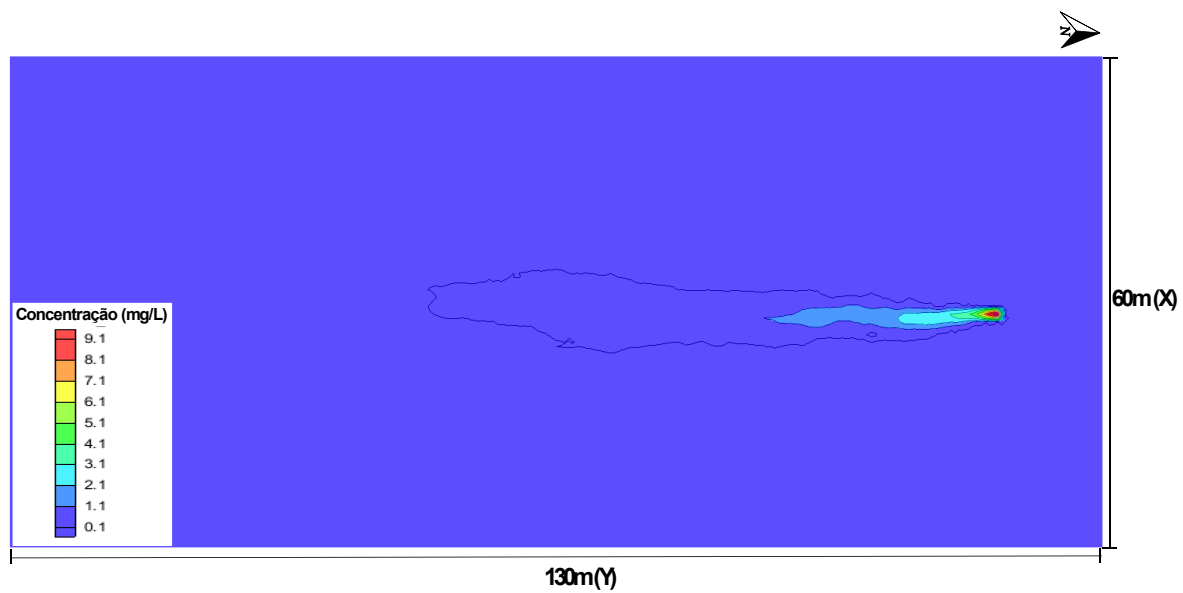
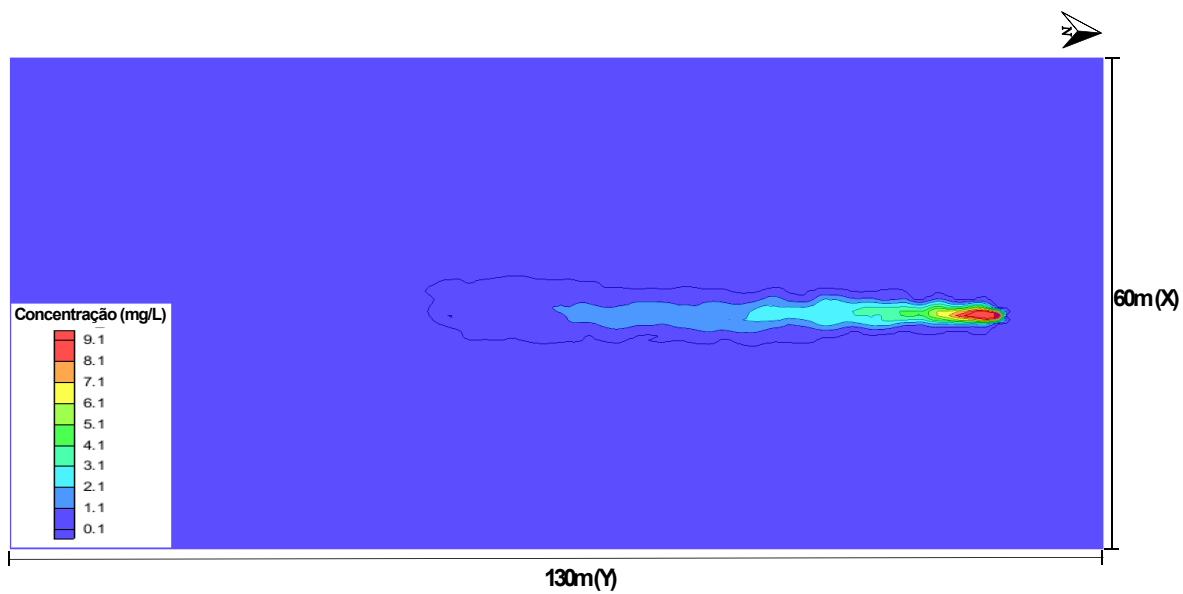
Simulação 5**Simulação 6**

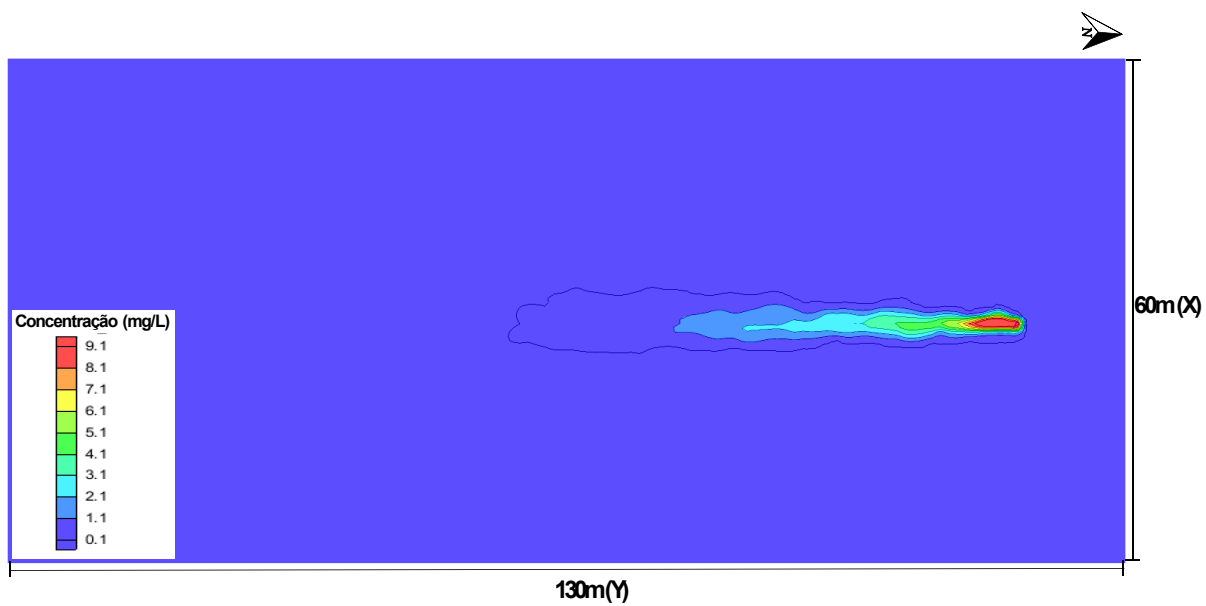
Simulação 7



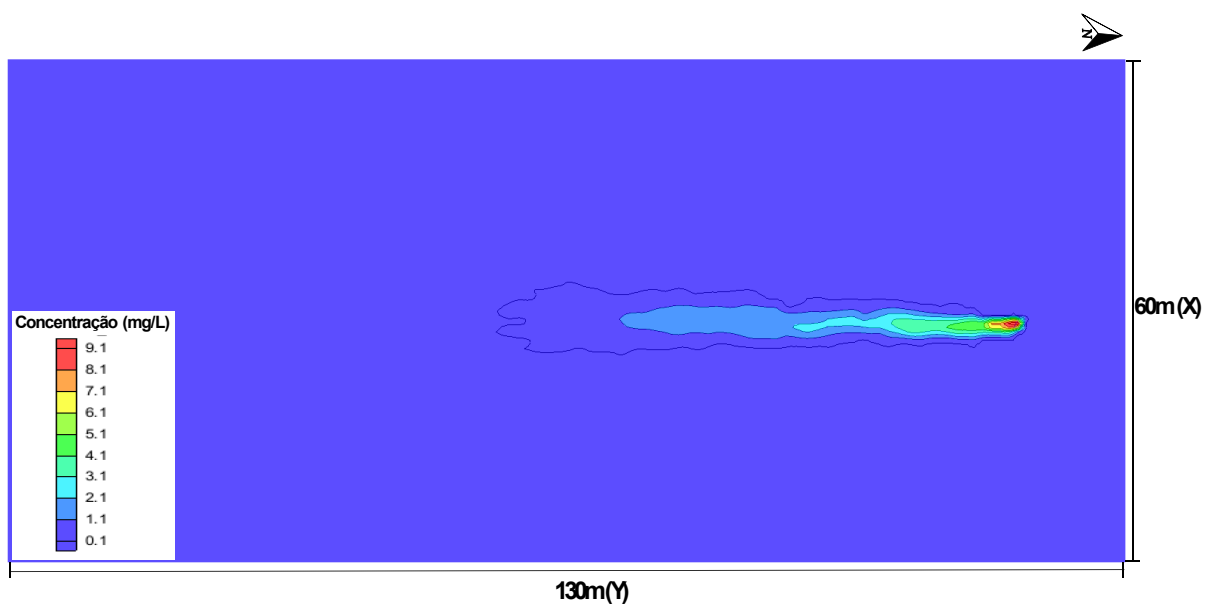
Simulação 8



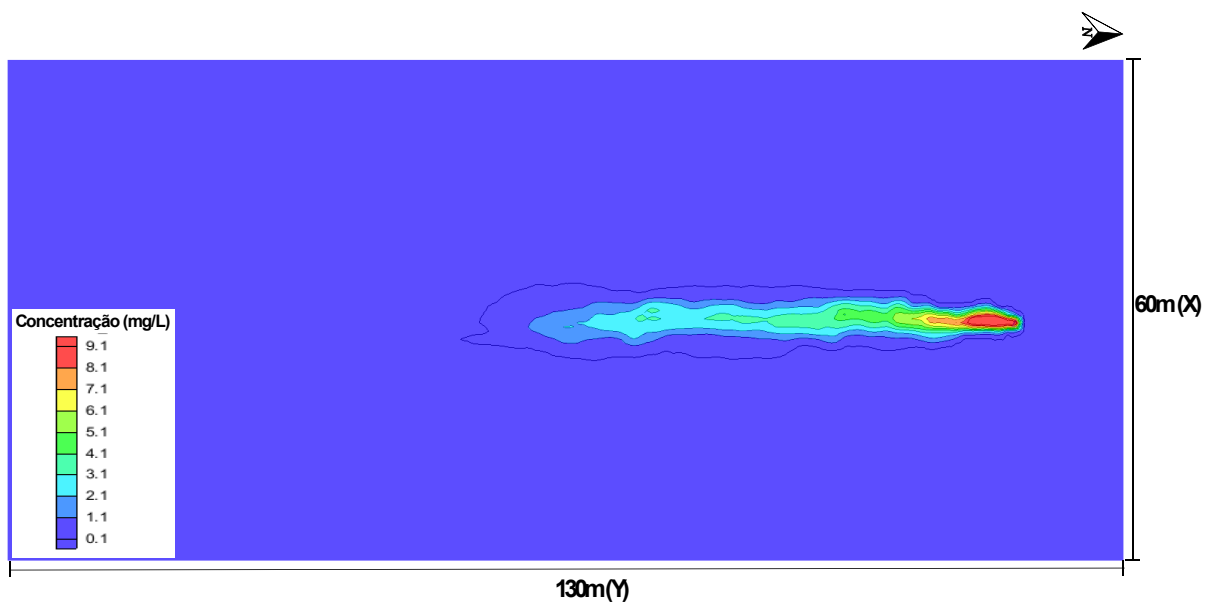
Simulação 09**Simulação 10****Simulação 11**



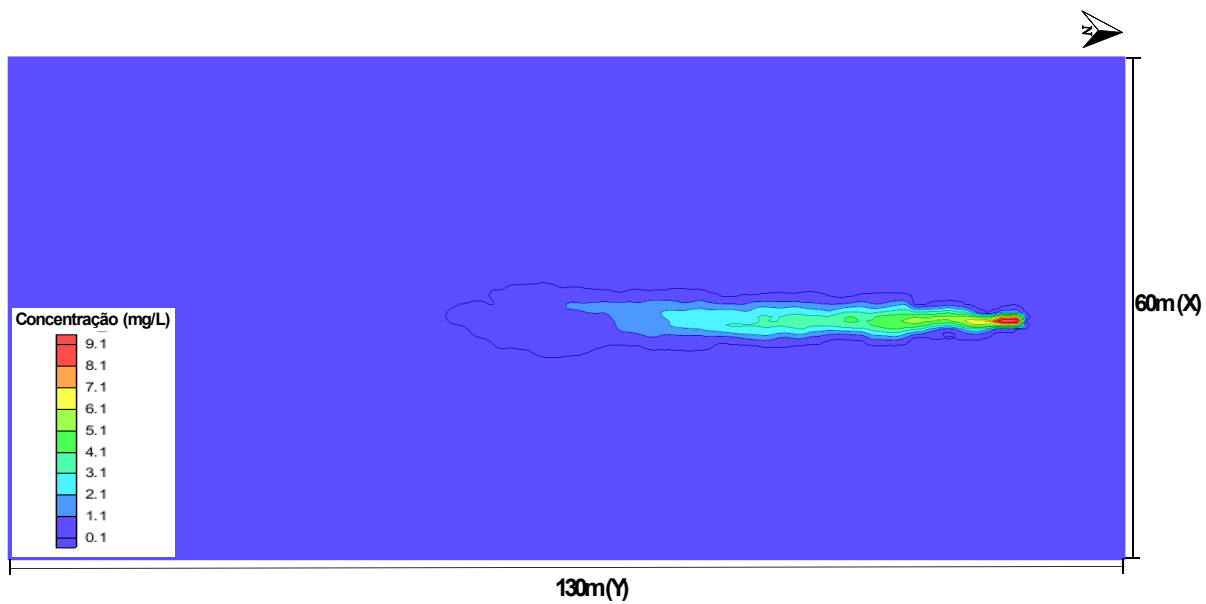
Simulação 12



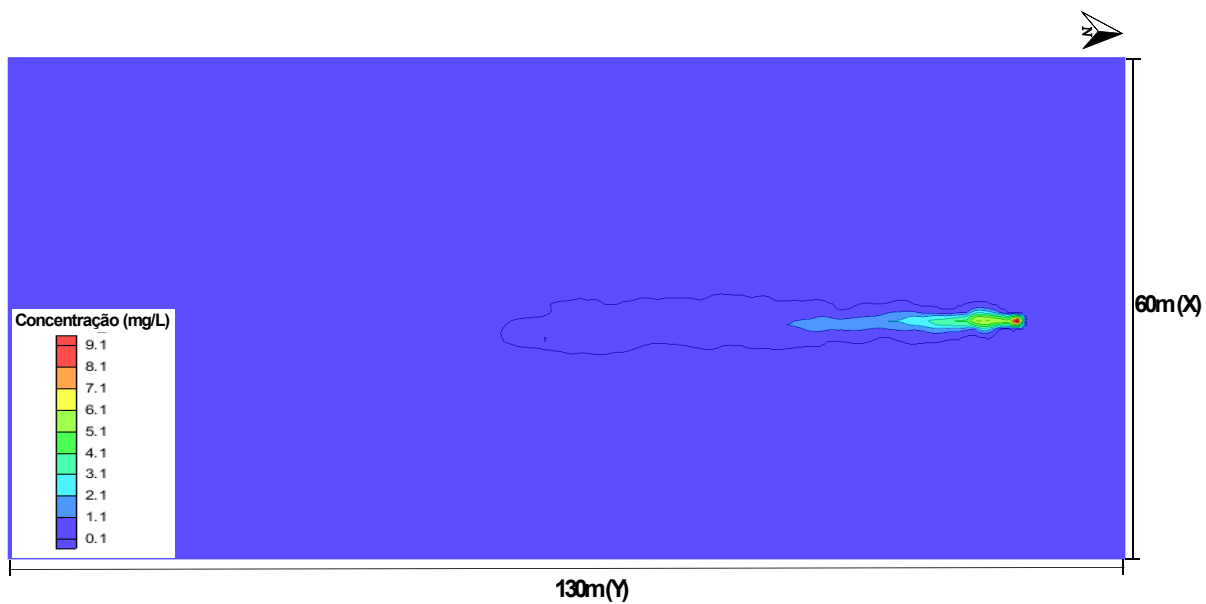
Simulação 13



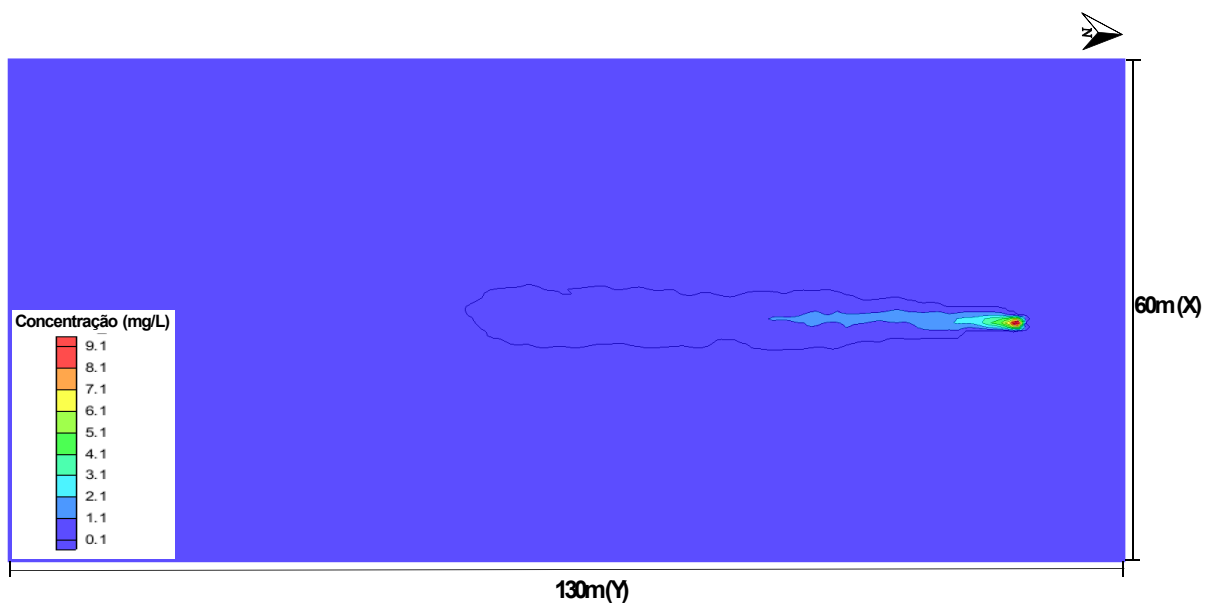
Simulação 14



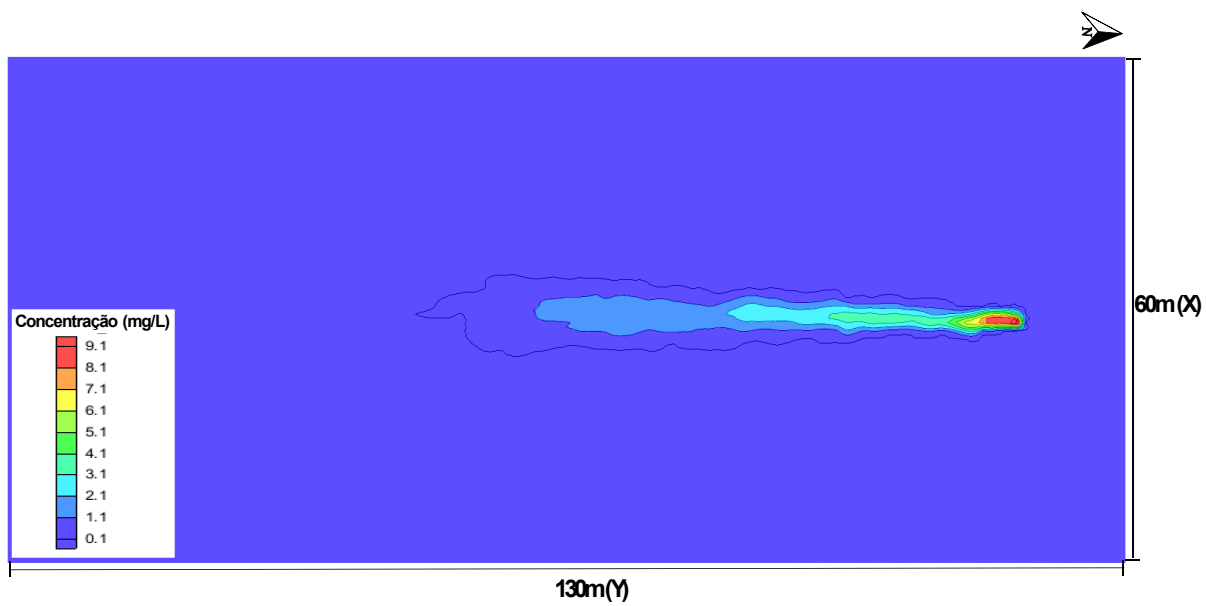
Simulação 15



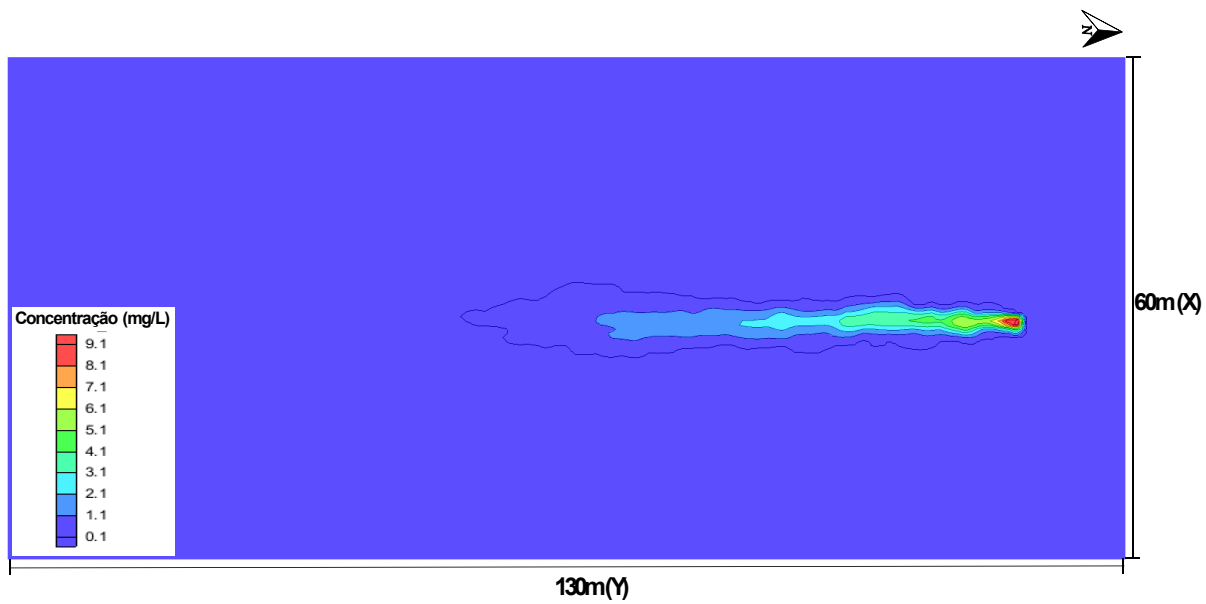
Simulação 16

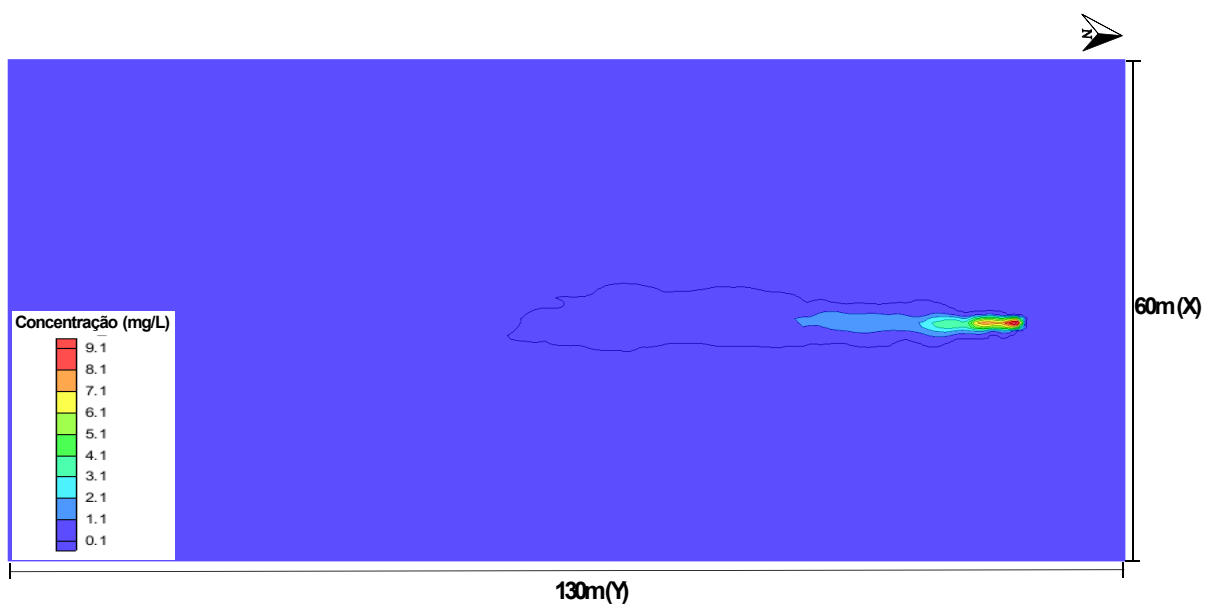
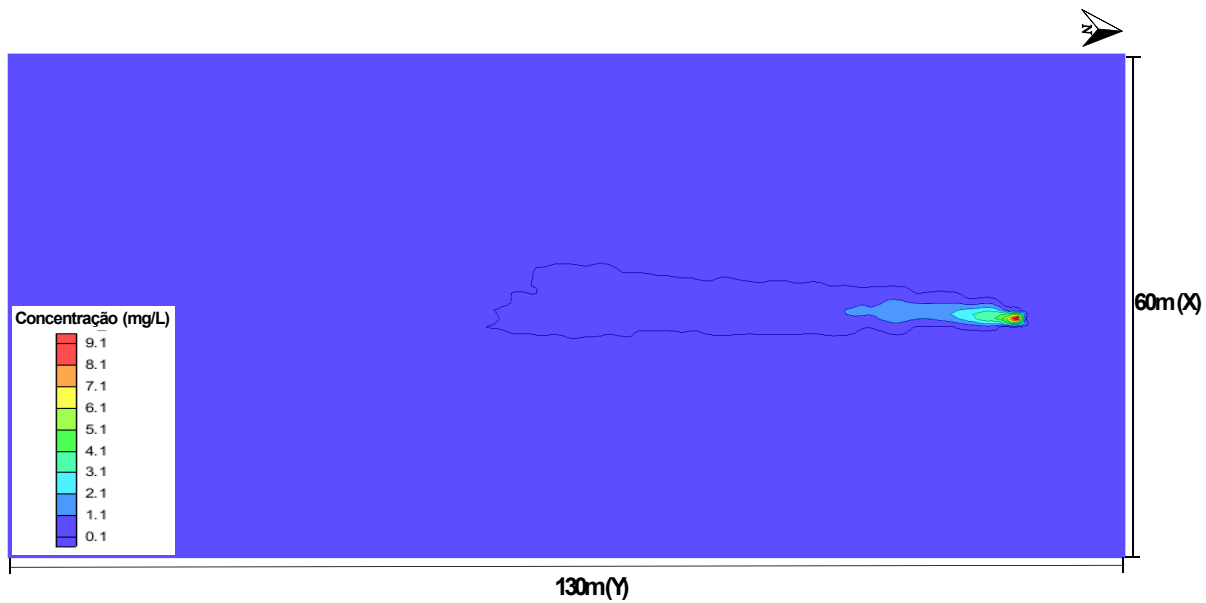


Simulação 17

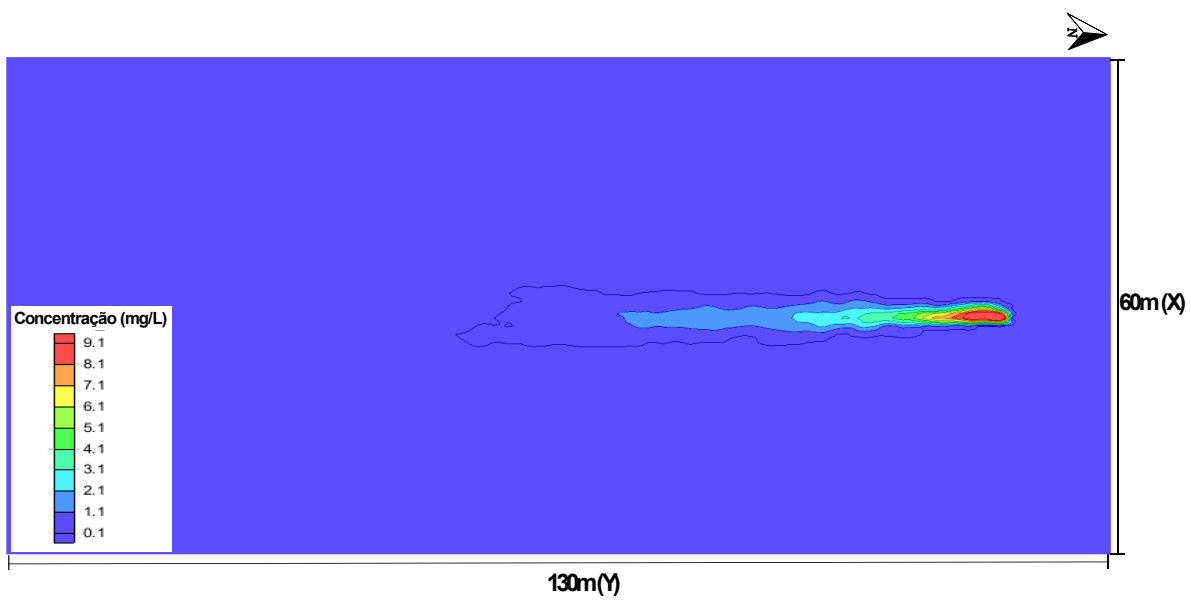


Simulação 18

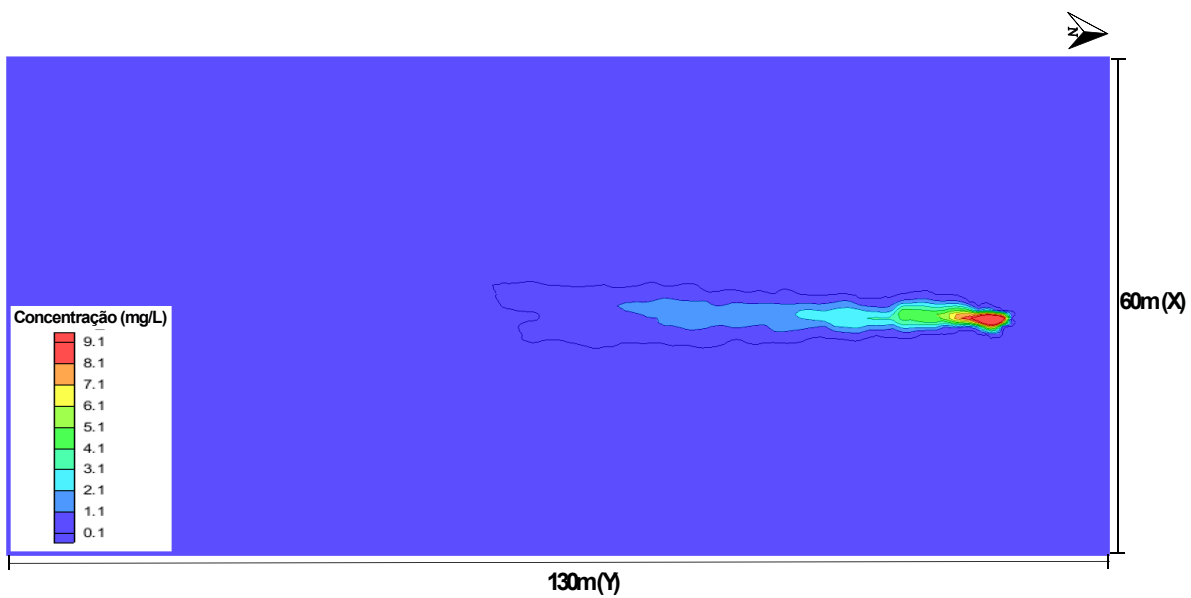


Simulação 19**Simulação 20**

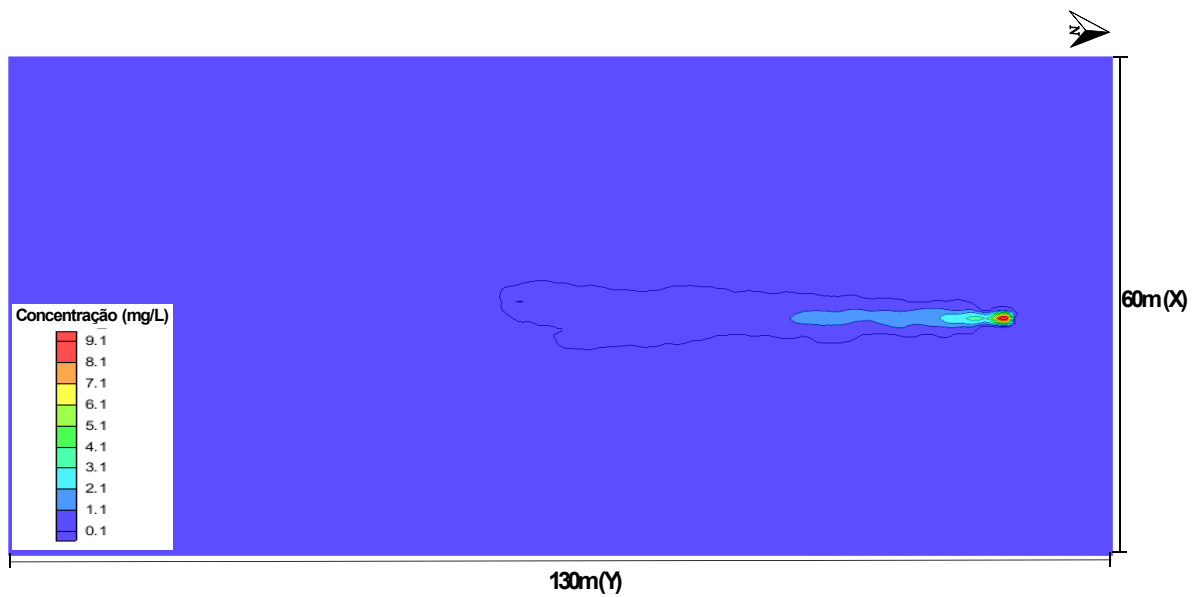
Simulação 21



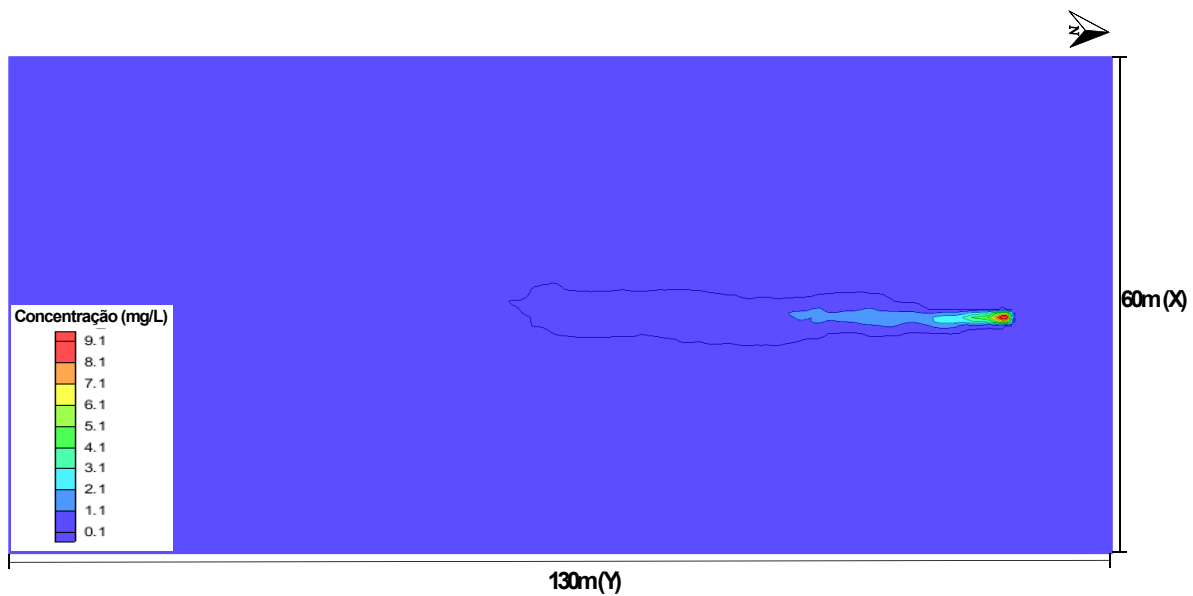
Simulação 22



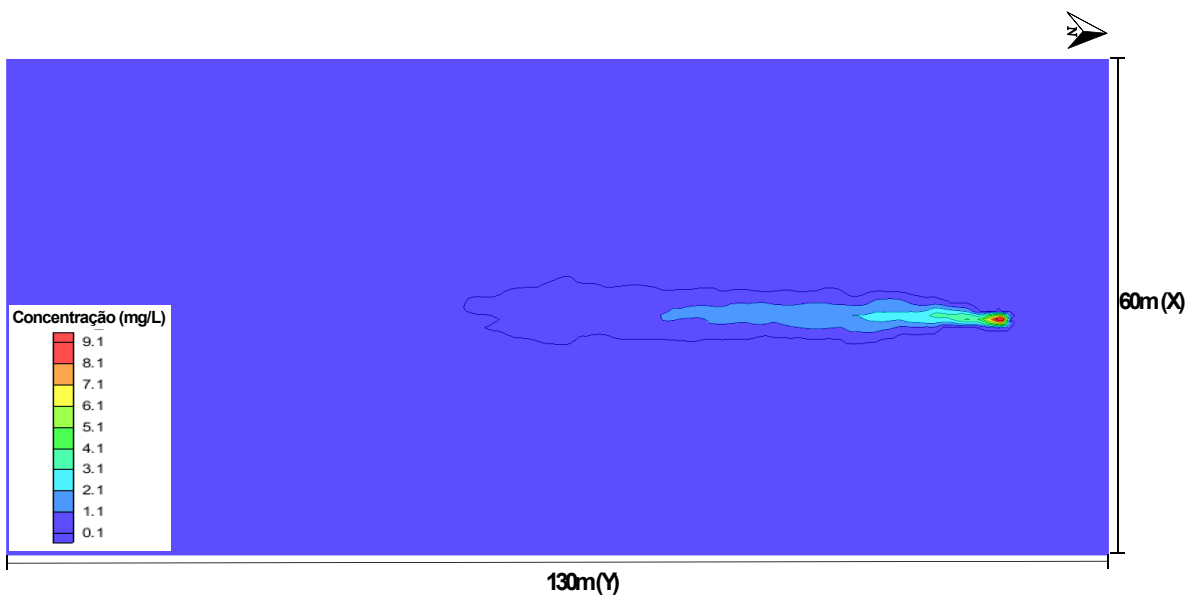
Simulação 23



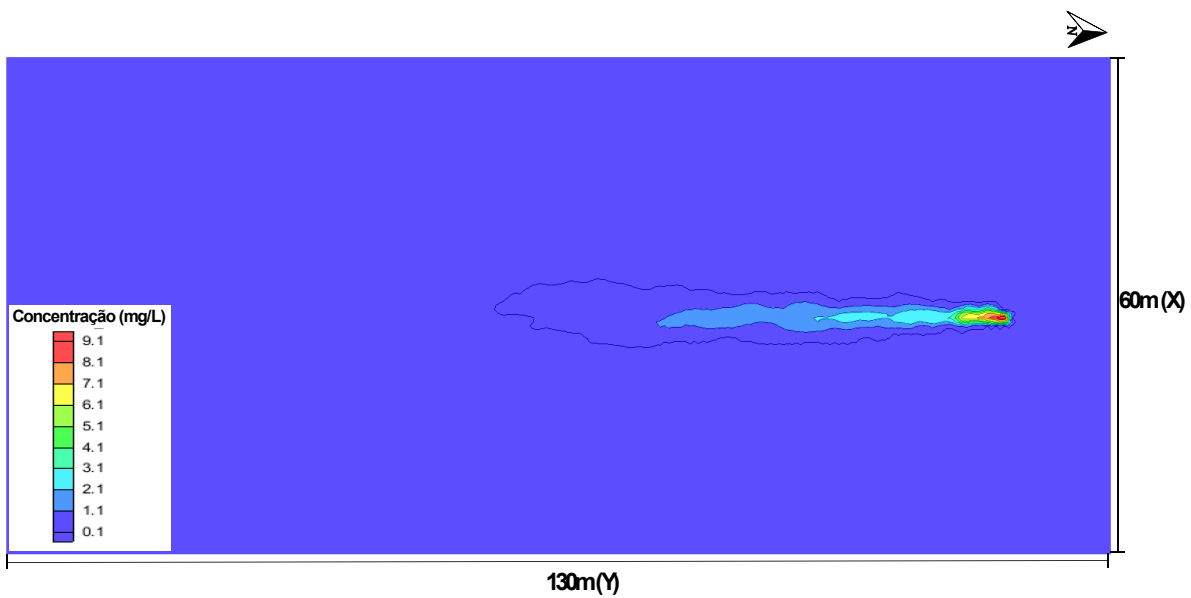
Simulação 24



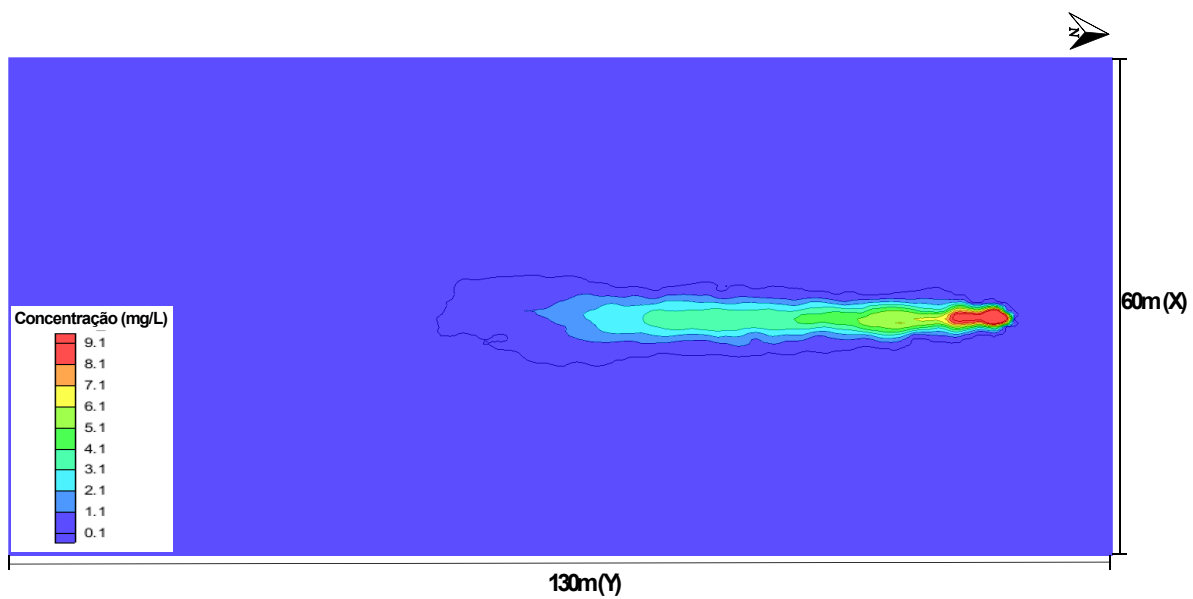
Simulação 25



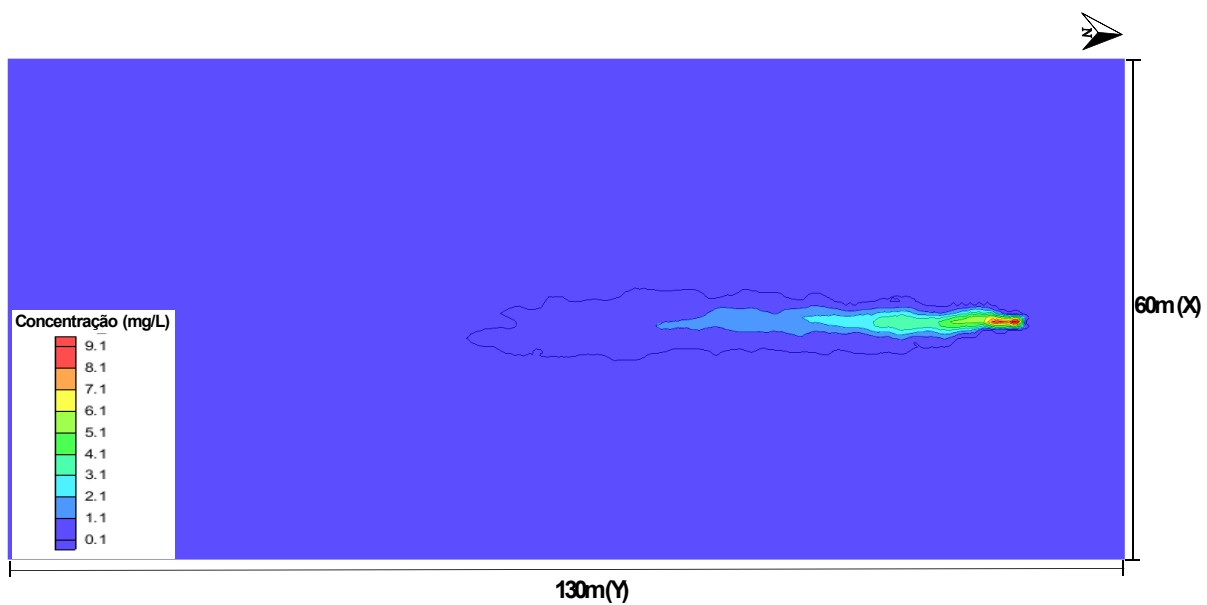
Simulação 26

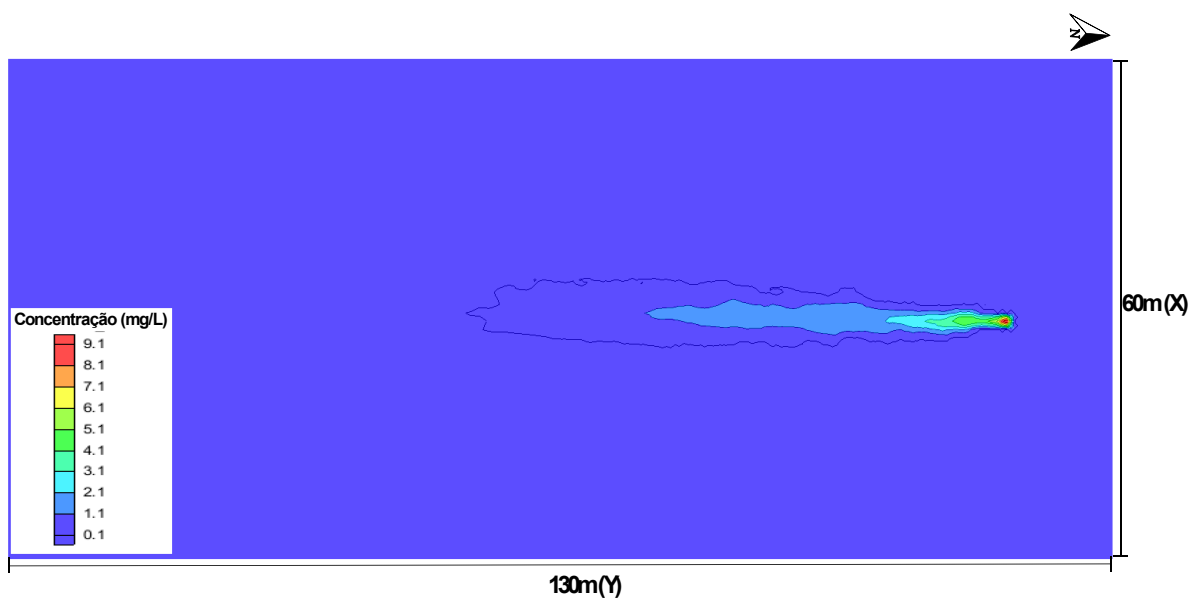
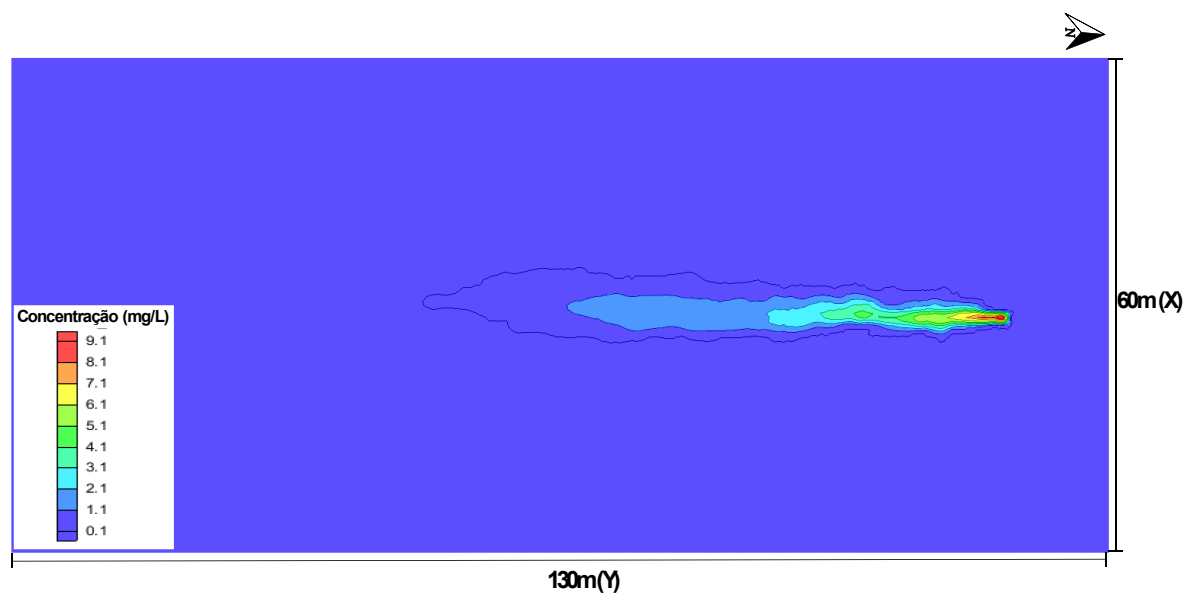


Simulação 27



Simulação 28



Simulação 29**Simulação 30**

APÊNDICE C – Tabelas

Tabela C1- Comprimento aproximado das plumas a partir da área fonte

Nº Cenário	Comprimento (m)
Cenário 1	70
Cenário 2	73
Cenário 3	69
Cenário 4	68
Cenário 5	67
Cenário 6	69
Cenário 7	69
Cenário 8	69
Cenário 9	68
Cenário 10	69
Cenário 11	59
Cenário 12	61
Cenário 13	64
Cenário 14	67
Cenário 15	61
Cenário 16	65
Cenário 17	70
Cenário 18	66
Cenário 19	59
Cenário 20	62
Cenário 21	63
Cenário 22	57
Cenário 23	58
Cenário 24	57
Cenário 25	62
Cenário 26	58
Cenário 27	66
Cenário 28	64
Cenário 29	60
Cenário 30	68

Tabela C2- Massa de contaminante em cada cenário

Nº Cenário	Massa (kg)
Cenário 1	0,3445
Cenário 2	0,163
Cenário 3	0,139
Cenário 4	0,163
Cenário 5	0,206
Cenário 6	0,209
Cenário 7	0,244
Cenário 8	0,17
Cenário 9	0,109
Cenário 10	0,218
Cenário 11	0,19
Cenário 12	0,138
Cenário 13	0,28
Cenário 14	0,245
Cenário 15	0,082
Cenário 16	0,092
Cenário 17	0,216
Cenário 18	0,185
Cenário 19	0,096
Cenário 20	0,092
Cenário 21	0,148
Cenário 22	0,182
Cenário 23	0,08
Cenário 24	0,069
Cenário 25	0,108
Cenário 26	0,137
Cenário 27	0,402
Cenário 28	0,143
Cenário 29	0,126
Cenário 30	0,186