

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
ESCOLA POLITÉCNICA

VITOR ALENCAR FREITAS DA SILVA  
Professor Orientador: LUIZ CARLOS FERRARI

**Desenvolvimento de modelo conceitual e numérico para embasar a avaliação de  
transporte de contaminantes: um estudo de caso**

São Paulo

2022

**Desenvolvimento de modelo conceitual e numérico para embasar a avaliação de transporte de contaminantes: um estudo de caso**

**Versão Corrigida**

Monografia apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo como parte dos requisitos para a obtenção do título de Especialista em Gestão de Áreas Contaminadas, Desenvolvimento Urbano Sustentável e Revitalização de Brownfields.

Orientador: Luiz Carlos Ferrari

São Paulo

2022

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

### Catálogo na Publicação

Silva, Vitor Alencar Freitas da  
Desenvolvimento de modelo conceitual e numérico para embasar a  
avaliação de transporte de contaminantes: um estudo de caso / V. A. F. Silva --  
São Paulo, 2022.  
63 p.  
Monografia (MBA em MBA em Gestão de Áreas Contaminadas,  
Desenvolvimento Urbano Sustentável e Revitalização de Brownfields) - Escola  
Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia  
Química.  
1.Contaminação de águas subterrâneas 2.Hidrogeologia 3.Modelo  
Conceitual 4.Modelos Numéricos I.Universidade de São Paulo. Escola  
Politécnica. Departamento de Engenharia Química II.t.

## **RESUMO**

### **EM PORTUGUÊS**

Alencar, Freitas da Silva, Vitor. Desenvolvimento de modelo conceitual e numérico para embasar a avaliação de transporte de contaminantes: um estudo de caso. 2022. 63 f. Monografia (MBA em Gestão de Áreas Contaminadas, Desenvolvimento Urbano Sustentável e Revitalização de Brownfields) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2022.

Esse estudo de caso teve como objetivo desenvolver o modelo conceitual e numérico preliminar de fluxo de água subterrânea de uma antiga planta industrial de formulação química localizada no Vale do Rio dos Sinos, no estado do Rio Grande do Sul, com vistas a investigar se a pluma de contaminação por clorobenzeno poderia atingir um receptor ecológico a jusante. Para isso, as etapas estabelecidas para modelagem matemática de águas subterrâneas foram discutidas e foram interpretados dados obtidos através de diversas técnicas de investigação ambiental e levantados na literatura científica. Tais técnicas incluíram sondagens geotécnicas, levantamentos topográficos, séries históricas de monitoramento de carga hidráulica e concentração de clorobenzeno, condução de ensaios de condutividade do aquífero e ensaios geotécnicos em amostras de solo. Os parâmetros hidrogeológicos foram traduzidos para um modelo numérico tridimensional e estacionário no sistema MODFLOW através da interface gráfica do software de modelagem ambiental Groundwater Modeling System (Aquaveo, versão 10.0.1 de 15/07/2014). Os parâmetros físico-químicos relacionados aos fenômenos de transporte de solutos em meios porosos, aplicados especificamente para o clorobenzeno na área de estudo, foram discutidos e definidos, como a velocidade advectiva, dispersividade, taxa de retardo do escoamento da pluma devido ao fenômeno de sorção e taxa de degradação. Por fim, foram abordadas as incertezas relacionadas aos dados e premissas adotadas. O modelo conceitual e modelo numérico preliminar resultantes desse trabalho poderão futuramente embasar esforços de modelagem de fluxo de água subterrânea e transporte de contaminantes, com foco no clorobenzeno, para avaliar a segurança ambiental da área.

Palavras-chave: Contaminação de águas subterrâneas. Hidrogeologia. Modelo Conceitual. Modelagem Matemática.

## **ABSTRACT**

Alencar Freitas da Silva, Vitor. Development of a conceptual and numerical model to support contaminant transport assessment: a case study. 2022. 63 f. Monografia (MBA em Gestão de Áreas Contaminadas, Desenvolvimento Urbano Sustentável e Revitalização de Brownfields) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2022.

This case study aimed to develop the preliminary conceptual and numerical model of a former chemical formulation industrial plant located in Vale do Rio dos Sinos, in the state of Rio Grande do Sul (Brazil), in order to investigate whether a chlorobenzene contamination plume could reach an ecological receptor downstream. To achieve this purpose, the steps established for the mathematical modeling of groundwater were discussed and data obtained through different environmental investigation techniques and collected in the scientific literature were interpreted. Such techniques included geotechnical borings, topographic surveys, historical monitoring series of hydraulic head and chlorobenzene concentration, hydraulic conductivity tests in the aquifer and geotechnical tests on soil samples. The hydrogeological parameters were translated into a three-dimensional, stationary numerical model in MODFLOW through the graphical interface of the modeling software Groundwater Modeling System (GMS). The physical-chemical parameters related to the solute transport mechanism in porous media, specifically applied to chlorobenzene in the study area, were discussed and defined, such as advective velocity, dispersivity, delay of the plume flow due to the sorption phenomenon and the degradation rate. The uncertainties related to the data and assumptions adopted were discussed. The conceptual model and preliminary numerical model resulting from this work may, in the future, support groundwater flow and contaminant transport modeling efforts, with a focus on chlorobenzene, to assess the environmental safety of the area.

**Keywords:** Groundwater contamination. Hydrogeology. Conceptual Model. Mathematical Modeling.

## LISTA DE FIGURAS

|   |    |
|---|----|
| Figura 1 - Layout da área de estudo .....   | 12 |
| Figura 2 - Fluxo geral do processo de modelagem matemática .....  | 15 |
| Figura 3 - Estruturas que integram um Modelo Conceitual para Modelagem Matemática. ....   | 20 |
| Figura 4 - Litoestratigrafia 1:1.000.000, com destaque para a localização aproximada da Área de Estudo inteiramente na Formação Piramboia. ....   | 27 |
| Figura 5 - Localização dos poços profundos localizados na Área de Estudo.....   | 29 |
| Figura 6 - Condutividade hidráulica determinada nos poços da Área de Estudo por meio de ensaios de Slug Test. ....  | 30 |
| Figura 7 - Delimitação do domínio do modelo numérico .....  | 32 |
| Figura 8 - Representação da topografia do fundo do lago no GMS, obtida a partir da interpolação de dados topográficos. ....   | 33 |
| Figura 9 - Representação da distribuição espacial dos pontos de carga hidráulica entrados no software GMS, utilizados na formulação da camada superficial da carga hidráulica.....      | 35 |
| Figura 10- Mapa potenciométrico da Área de Estudo – camada superficial.....   | 36 |
| Figura 11 - Mapa potenciométrico do Sistema Aquífero Guarani compartimentado, no estado Rio Grande do Sul. Destaque adicionado para localização da Área de Estudo dessa monografia..... | 37 |
| Figura 12 - Mapa potenciométrico da Área de Estudo – camada subsuperficial .....  | 38 |
| Figura 13 - Distribuição da média anual de Evapotranspiração Potencial (mm) no estado do Rio Grande do Sul .....  | 41 |
| Figura 14 - Disposição da grade do modelo numérico em planta. ....  | 42 |
| Figura 15 - Localização das amostras indeformadas submetidas a ensaios geotécnicos. ....  | 43 |
| Figura 16- Representação da distribuição de clorobenzeno no plano horizontal com base no monitoramento realizado em junho de 2021. ....   | 44 |
| Figura 17 - Localização da pluma na área fonte com destaque para o comprimento aproximado de sua extensão no sentido longitudinal do fluxo.....   | 45 |
| Figura 18 - Áreas específicas em função do diâmetro dos agregados.....  | 47 |

## **LISTA DE TABELAS**

|  |    |
|--|----|
| Tabela 1 - Valores orientadores de clorobenzeno para solo e água subterrânea. .... | 11 |
| Tabela 2 - Características dos poços profundos localizados na Área de Estudo. .... | 29 |
| Tabela 3 - Vazão média mensal que escoar da lagoa para o córrego. ....             | 39 |
| Tabela 4 - Valores de dispersidade adotados no modelo conceitual ....              | 46 |
| Tabela 5 - Sumário de parâmetros representativos do fenômeno de sorção. ....       | 48 |

## SUMÁRIO

|                      |  |    |
|----------------------|--|----|
| 1.                   | INTRODUÇÃO.....  | 9  |
| 2.                   | OBJETIVOS.....   | 10 |
| 3.                   | JUSTIFICATIVA.....   | 11 |
| 4.                   | REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....   | 14 |
| 4.1.                 | Modelagem matemática de água subterrânea.....  | 14 |
| 4.1.1.               | Fluxo do processo de modelagem matemática.....   | 15 |
| 4.2.                 | Modelo Conceitual e Modelo Numérico.....   | 18 |
| 4.2.1.               | Modelo Conceitual.....   | 18 |
| 4.2.2.               | Componentes do Modelo Conceitual.....  | 20 |
| 4.2.3.               | Modelo Numérico.....   | 22 |
| 5.                   | MATERIAIS E MÉTODOS.....   | 25 |
| 6.                   | RESULTADOS.....  | 26 |
| 6.1.                 | Modelo Conceitual para embasar o Modelo de Fluxo.....  | 26 |
| 6.1.1.               | Geologia Regional.....   | 26 |
| 6.1.2.               | Geologia Local.....  | 28 |
| 6.1.3.               | Hidrogeologia.....   | 30 |
| 6.1.4.               | Domínio do Modelo Numérico.....  | 31 |
| 6.1.5.               | Fluxo, Carga Hidráulica e Condições de Contorno.....   | 32 |
| 6.1.6.               | Vazão no Exutório.....   | 38 |
| 6.1.7.               | Recarga.....   | 39 |
| 6.1.8.               | Evapotranspiração.....   | 40 |
| 6.1.9.               | Grade do Modelo Numérico.....  | 41 |
| 6.2.                 | Parametrização das propriedades do meio físico e do contaminante embasar o Modelo de Transporte..... | 42 |
| 6.2.1.               | Fluxo advectivo.....   | 44 |
| 6.2.2.               | Dispersão Mecânica.....  | 45 |
| 6.2.3.               | Retenção no solo pelo efeito da sorção.....  | 46 |
| 6.2.4.               | Atenuação natural/decaimento.....  | 49 |
| 6.2.5.               | Difusão Molecular.....   | 50 |
| 6.2.6.               | Características da Fonte de Contaminação.....  | 50 |
| 6.3.                 | Considerações sobre as incertezas do modelo conceitual.....  | 51 |
| 7.                   | CONCLUSÃO.....   | 52 |
| 8.                   | REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....  | 54 |
| Apêndice 1 - Tabelas |  |    |



## 1. INTRODUÇÃO

A contaminação de aquíferos aluvionares é um problema ambiental comum em zonas urbanas devido à ocupação inadequada para uso industrial ou doméstico. A ocupação urbana pode se apresentar como um estressor ambiental para os recursos hídricos tanto pelo aspecto da quantidade quanto pela qualidade da água. A disponibilidade de água é influenciada pelos usos concorrentes como captação para consumo humano, dessedentação animal, utilização nos processos industriais e irrigação, bem como pela cobertura do solo que favorece em maior ou menor grau a infiltração ou escoamento superficial. A qualidade da água é influenciada principalmente pelas consequências das atividades antrópicas e pode sofrer contaminação a partir de atividades como a deposição inadequada de resíduos sólidos no solo, o despejo de esgoto doméstico sem tratamento adequado, utilização de fossas sépticas mal construídas, contaminação difusa em áreas próximas a zonas rurais produtivas com uso indiscriminado de agroquímicos.

Nesse sentido, a caracterização hidrogeológica é essencial no entendimento do regime hídrico, comportamento dos contaminantes em meio poroso subterrâneo e no gerenciamento dos passivos ambientais que acometem os aquíferos. O subsolo tem, por si só, um caráter de “desconhecimento”, pois está, na maioria das vezes, fora da visão, compreensão e rotina da população geral. As técnicas de investigação ambiental diretas e indiretas, como sondagens geológicas, descrições das litologias, ensaios de investigação da condutividade do aquífero, monitoramento das cargas hidráulicas por meio de piezômetros e poços de monitoramento, ensaios geotécnicos e químicos das diferentes fases da matriz do solo, investigações de alta resolução, levantamentos geofísicos, entre outras, constituem ferramentas capazes de fornecer dados e informações para interpretação e entendimento do aquífero e de eventuais contaminações existentes (CETESB, 2001).

Os dados e informações obtidos por meio das referidas técnicas podem ser utilizados para criação de modelos conceituais, que de forma simplificada, são a síntese sobre o conhecimento de uma área de estudo a respeito do meio físico e da contaminação diante do que é relevante para os objetivos de uma investigação ambiental. Esse conjunto de conhecimento é uma ferramenta viva, que pode ser revisitado, atualizado e aprimorado à medida que o conjunto de dados, informações e conhecimento aumenta.

Além dos modelos conceituais, uma outra ferramenta tem sido amplamente utilizada e desenvolvida para permitir também previsões do futuro – ou reconstruções do passado – sobre

o regime hídrico subterrâneo e sua interação com os recursos superficiais, assim como o comportamento de contaminantes nos aquíferos: a aplicação de modelos matemáticos baseados em equações que governam o fluxo de água e solutos em meios porosos, conforme demonstrados por Alberto (2005), Anderson, Woessner & Hunt (2015), Constanzo et al (2013), Fandiño et al (2020), Ferrari (2006), Gonçalves (2016), Raffensperger et al (2021), Sousa (2012), Sun (1996), entre outros autores.

O presente trabalho apresenta um estudo de caso de uma contaminação de clorobenzeno em uma antiga planta industrial localizada em um aquífero aluvionar no Vale do Rio dos Sinos, Rio Grande do Sul, onde foram aplicadas ao longo dos últimos anos algumas das técnicas de investigação ambiental mencionadas. A partir desse entendimento inicial, a construção de um modelo conceitual e a sua tradução em um modelo numérico é proposta por meio um software gráfico de modelagem matemática comercialmente disponível baseado em MODFLOW (MCDONALD & HARBAUGH, 1988).

## **2. OBJETIVOS**

O objetivo geral dessa monografia é desenvolver o modelo conceitual e numérico da área de estudo que possa futuramente embasar esforços de modelagem de fluxo e transporte de contaminantes. Para isso, os objetivos específicos são:

- Construir de um modelo conceitual de fluxo de água subterrânea por meio da interpretação de dados obtidos na literatura científica e obtidos com uso de diferentes técnicas de investigação ambiental aplicadas em campo, como sondagens geotécnicas; levantamento topográfico; monitoramento de nível d'água e concentrações de clorobenzeno em poços de monitoramento e nos corpos d'água superficiais; ensaios de condutividade hidráulica e de parâmetros geotécnicos.
- Representar os fenômenos hidrogeológicos da zona saturada de um aquífero livre em software de modelagem matemática por meio da tradução do modelo conceitual de fluxo de água subterrânea em um modelo numérico tridimensional.
- Parametrizar o modelo conceitual de transporte de clorobenzeno em meio poroso saturado de acordo com as características específicas da Área de Estudo.

### 3. JUSTIFICATIVA

O clorobenzeno ( $C_6H_5Cl$ ) é um composto orgânico líquido e incolor, mais denso que a água (densidade igual a  $1,11 \text{ g/cm}^3$ ), com solubilidade em água de  $488 \text{ mg/L}$  a  $25^\circ\text{C}$ , comumente utilizado como solvente na fabricação de agroquímicos, desengordurante para peças automotivas e intermediário na produção de outras substâncias químicas, parte do qual se perde para o meio ambiente nas descargas de água e ar. O clorobenzeno adsorve moderadamente ao solo e é biodegradado relativamente rápido (US EPA, 1980).

O perfil toxicológico do clorobenzeno publicado pela ATSDR (2020) indica que a exposição a essa substância pode causar lesões histopatológicas no fígado e nos rins para exposição por inalação ou ingestão oral baseado em testes laboratoriais realizados em animais. O mesmo documento (ATSDR, 2020) também indica que foram observados efeitos adversos hematológicos, imunológicos e neurológicos, principalmente embasados em estudos em animais. Os estudos sobre carcinogenicidade do clorobenzeno em humanos são escassos e com base nas informações disponíveis de estudos de carcinogenicidade animal e avaliações de genotoxicidade, a Agência de Proteção Ambiental dos EUA (EPA) (IRIS, 2003) atribuiu o clorobenzeno ao grupo D, ou seja, não classificável quanto à carcinogenicidade humana. Segundo a Ficha de Informações Toxicológicas (FIT) da CETESB (2021), trabalhadores expostos a elevadas concentrações de clorobenzeno (mono) apresentam dores de cabeça, sonolência, espasmos musculares, apatia, náuseas e vômitos.

A Resolução CONAMA nº 420, de 28 de dezembro de 2009, estabelece os valores orientadores de concentração de clorobenzeno para a proteção do meio ambiente e saúde reportados na Tabela 1:

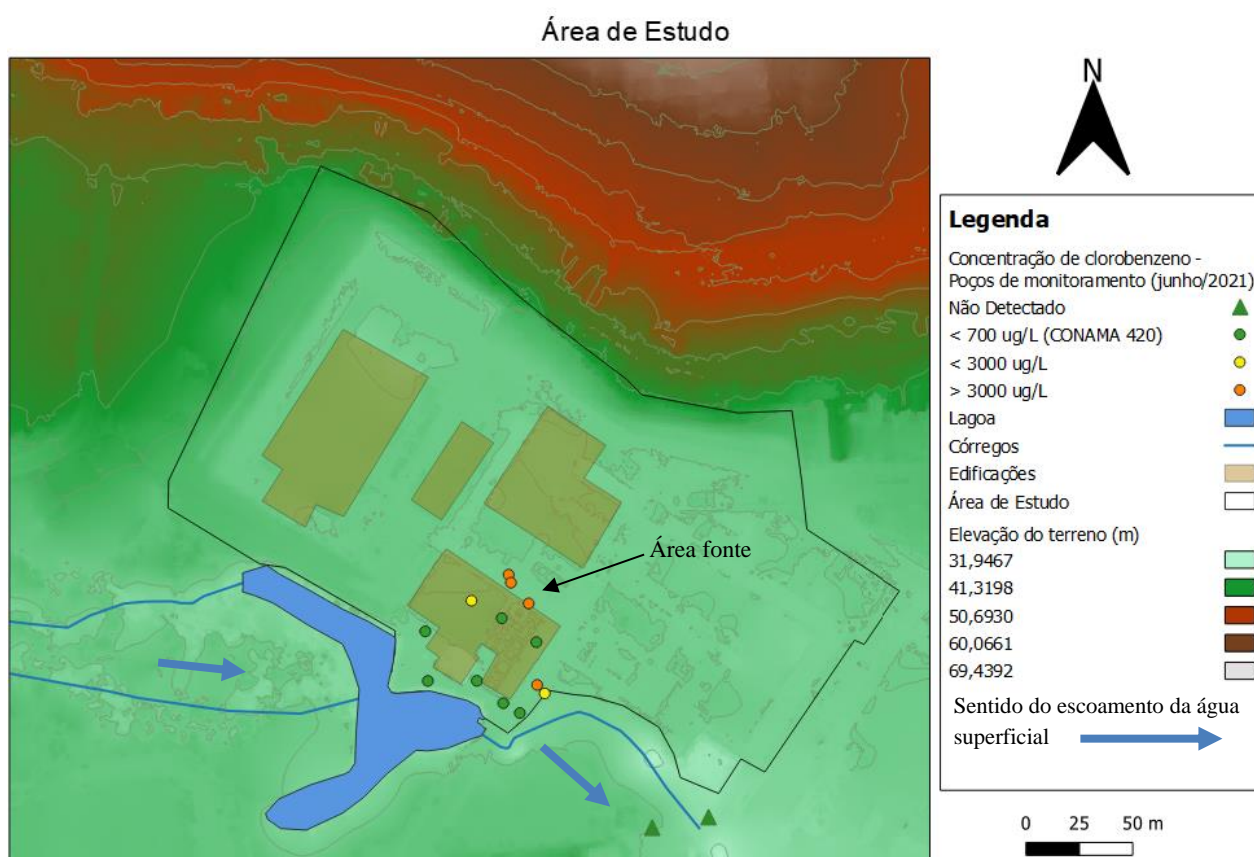
Tabela 1 - Valores orientadores de clorobenzeno para solo e água subterrânea.

| Solo (mg/kg)       |                                |                                   |                                  | Água Subterrânea (µg/L) |
|--------------------|--------------------------------|-----------------------------------|----------------------------------|-------------------------|
| Valor de Prevenção | Valor de Investigação Agrícola | Valor de Investigação Residencial | Valor de Investigação Industrial | Valor de Investigação   |
| 0,41               | 40                             | 45                                | 120                              | 700 <sup>1</sup>        |

<sup>1</sup> A concentração de clorobenzeno calculado com base em risco à saúde humana, de acordo com o escopo da Resolução CONAMA 420/2009 difere do padrão de aceitação para consumo humano de  $0,02 \text{ mg/L}$  definido na Portaria GM/MS nº 888, de 4 de maio de 2021 (Anexo 11) e dos valores máximos permitidos para consumo humano definidos no Anexo I da Resolução CONAMA 396/2008.

O clorobenzeno foi um dos contaminantes identificados em na área de estudo, que fica em uma antiga planta industrial localizada no Vale do Rio dos Sinos, no estado do Rio Grande do Sul. A fonte de contaminação localizava-se onde antigamente funcionava um edifício de formulação química próximo a um lago contido por um pequeno barramento e um córrego à jusante que influencia o fluxo de água subterrânea local. O *layout* da área de estudo está representado na Figura 1.

Figura 1 - Layout da área de estudo



Fonte: elaborado pelo Autor.

Próximo à área de estudo ocorrem rochas sedimentares das formações Pirambóia (Permiano Superior) e Botucatu (Cretáceo), capeadas por rochas vulcânicas da Formação Serra Geral (Cretáceo) (WOJAHNN, 2011). Adicionalmente, ocorrem coberturas coluvionares e aluvionares, que recobrem parcialmente essas formações. Em relação à hidrogeologia da área, Rocha (1997) sugere um valor médio de porosidade efetiva de 15% para o Sistema Aquífero Guarani, no qual está situada a área de estudo. Entretanto, Heine (2008) dividiu o aquífero em horizontes estratigráficos, com valores de porosidade efetiva que variam de 18% a 30%. Este mesmo autor caracterizou as variações de condutividade hidráulica do Sistema Aquífero Guarani nas proximidades da área de estudo com valores entre  $10^{-3}$  a  $10^{-5}$  cm/s para areias

médias a finas e areias siltosas, com valores de condutividade decrescentes do topo à base (HEINE, 2008).

A fonte primária de contaminação por clorobenzeno consiste no vazamento do produto de tanques superficiais de armazenamento, drenos no piso e um duto subterrâneo nas imediações do antigo edifício de formulação química. Essas estruturas de contaminação primária foram removidas e a área de estudo passou por intervenções para tratamento e contenção das fontes de contaminação secundária (solo e água subterrânea), as quais combinaram diferentes técnicas de remediação com objetivo na redução da massa de contaminante, além do isolamento da contaminação e medidas institucionais de restrição com objetivo de proteção de receptores humanos e ecológicos.

No entanto, após quatro anos consecutivos de monitoramento trimestral da água subterrânea em que a concentração do clorobenzeno se mostrava continuamente decrescente, as últimas medições realizadas a partir de 2020 mostraram um aumento nos níveis de concentração na água subterrânea nos poços de monitoramento localizados na área fonte. A concentração de clorobenzeno na água superficial, monitorada semestralmente entre 2017 e 2021 no córrego a jusante que recebe a água subterrânea do aquífero local, manteve-se abaixo do limite de detecção do método analítico praticado pelo laboratório, com apenas duas detecções pontuais ocorridas em outubro de 2017 (5,4 µg/L) e março de 2020 (2,9 µg/L), ambas significativamente abaixo do valor de referência de 47 µg/L (US EPA, 2003). Esse fato levou a um questionamento importante: é possível que as concentrações mais elevadas de clorobenzeno na água subterrânea próxima a área fonte detectadas nas últimas campanhas de monitoramento possam alcançar o córrego à jusante da área fonte e, portanto, apresentar potencial risco a receptores ecológicos?

A modelagem matemática da água subterrânea é uma ferramenta estratégica adequada para a previsão do comportamento do fluxo de água e de contaminantes, conforme demonstrado por Alberto (2005), Anderson, Woessner & Hunt (2015), Constanzo *et al* (2013), Fandiño *et al* (2020), Ferrari (2006), Gonçalves (2016), Raffensperger *et al* (2021), Sousa (2012), Sun (1996), entre outros autores.

Como parte do processo de construção do modelo matemático de fluxo e transporte, se faz necessário o desenvolvimento de um modelo conceitual hidrogeológico e a tradução do mesmo para um modelo numérico (conforme explicado na seção 4.1.1) para embasar as simulações de previsão. O presente trabalho visa desenvolver tais modelos – conceitual e

numérico – a partir da interpretação de dados ambientais obtidos em campo a partir de uma série de técnicas de investigação ambiental e uso de um software de modelagem matemática adequado ao objetivo, conforme detalhada na seção 5 e discutidos na seção 6 dessa monografia. Ressalta-se que o modelo conceitual e numérico propostos para essa monografia poderão ser utilizados no futuro para o desenvolvimento de um modelo de previsão do fluxo de água e comportamento do contaminante, apesar de esse não ser o objetivo do presente trabalho.

## **4. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

### **4.1. Modelagem matemática de água subterrânea**

Um modelo matemático de água subterrânea fornece uma estrutura quantitativa que sintetiza e simplifica as informações obtidas em campo e representa os processos hidrogeológicos que ocorrem na área de estudo.

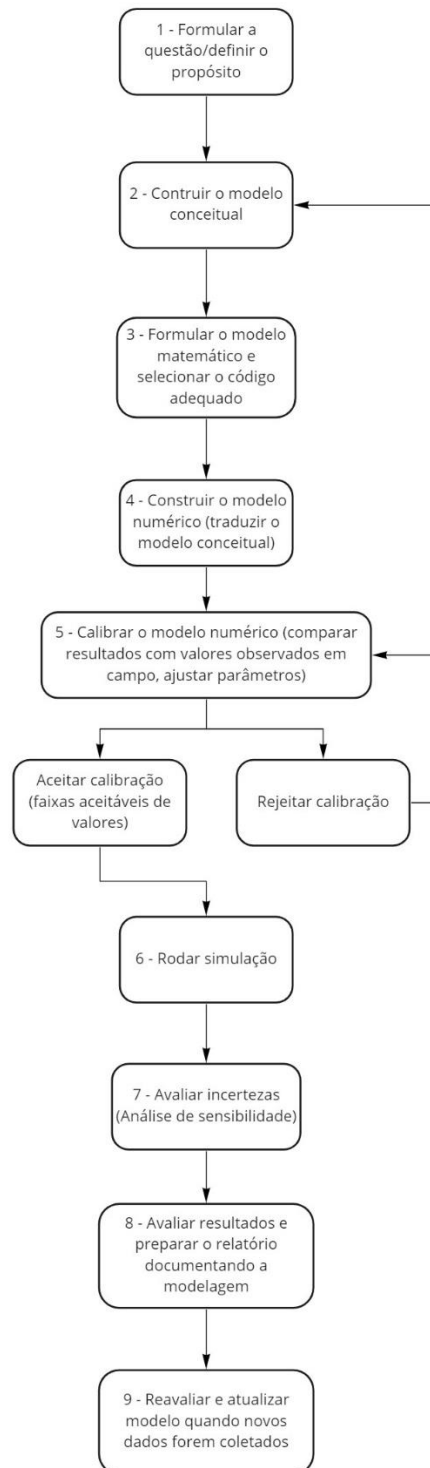
De forma geral, os modelos de água subterrânea podem ser divididos em modelos físicos e matemáticos. Os modelos físicos são testes realizados em escalada de laboratório por meio de tanques preenchidos com meio poroso e com medição direta das cargas hidráulicas, a exemplo do modelo desenvolvido por Darcy (1856). Modelos matemáticos podem ser do tipo “baseado em dados” (também chamados de *black box*), que utilizam dados empíricos para calcular uma variável desconhecida. Também podem ser “baseados em processos”, em que as soluções são alcançadas através da resolução da equação que governa o fluxo de água em meio porosos, que descreve um processo físico dentro do domínio estabelecido, da definição das condições de contorno nos limites do domínio e da condição inicial do domínio no tempo inicial da simulação que se deseja realizar (ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015).

Modelos matemáticos podem ter soluções analíticas, geralmente utilizadas para soluções de problemas mais simples, em duas dimensões ou sem heterogeneidade hidrogeológica. Também podem ter soluções numéricas, que são baseadas, por exemplo, nos métodos dos elementos finitos ou das diferenças finitas. Neste caso, as soluções numéricas são utilizadas para resolver problemas mais elaborados, capazes de representar modelos tridimensionais, que apresentam heterogeneidade hidrogeológica e fluxos estacionários ou transientes em domínios com fontes e sumidouros e com fronteiras complexas (KRESIC, 2006; ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015).

#### 4.1.1. Fluxo do processo de modelagem matemática

A construção de um modelo matemático segue um processo sequencial de etapas conforme apresentado na Figura 2.

Figura 2 - Fluxo geral do processo de modelagem matemática



Assim como no método científico, o trabalho da modelagem matemática de fluxo subterrâneo começa com uma pergunta que tem relação com as condições hidrogeológicas da área de estudo (ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015). No presente trabalho, o modelo numérico visa responder se e quando o contaminante clorobenzeno detectado na área fonte irá atingir uma área crítica para a proteção da saúde humana e do ecossistema à jusante, representado pelo córrego.

O propósito do modelo, os recursos disponíveis e o detalhamento desejado ajudam a definir se o modelo de fluxo de água subterrânea deve ser analítico ou numérico, se o modelo será estacionário ou transiente, e se, além de um modelo de fluxo, um modelo de transporte de soluto será necessário (BEAR & CHENG, 2010).

A construção do modelo conceitual é uma das etapas iniciais do processo e consiste na descrição do sistema de fluxo de água subterrânea, unidades hidroestratigráficas, processo hidrológicos que ocorrem na superfície e limites do sistema. Os dados e informações obtidas em campo são interpretados e o sistema hidrogeológico é descrito. O modelo conceitual sintetiza o que se é conhecido do sistema hidrogeológico e fornece a estrutura necessária para criação do modelo numérico na sequência (ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015).

Os dados obtidos em campo e sua interpretação são utilizados para a criação do modelo conceitual ambiental, que é a base na qual se sustenta o modelo matemático de fluxo e/ou transporte ao ser aplicado o código que simula os processos hidrogeológicos. À medida que novos dados de campos são obtidos, os modelos podem ser revisados e aprimorados, o que confere ao processo de construção do modelo uma natureza cíclica (ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015). A seção sobre metodologia descreve os dados obtidos em campo ou por meio de pesquisas que serão utilizados na construção do modelo conceitual.

A definição da pergunta central do modelo é a própria definição do seu propósito, é a sua motivação, que em conjunto com o modelo conceitual ajuda a definir quais serão as simplificações realizadas, premissas adotadas e norteiam na escolha do código adequado a ser utilizado na modelagem. O modelo conceitual consiste em um conjunto de premissas que reduzem o problema real a versões simplificadas e satisfatórias de acordo com os objetivos da modelagem, do problema de gerenciamento associado e dos dados disponíveis (BEAR & CHENG, 2010).



O passo seguinte corresponde ao projeto do modelo propriamente dito, ou seja, traduzir o modelo conceitual hidrogeológico no computador para a linguagem do software utilizado na modelagem. Nessa etapa, uma grade adequada para a divisão da área de estudo é definida, onde valores são atribuídos a cada um dos parâmetros e as fronteiras do domínio do modelo são definidas, assim como as suas condições de contorno. Caso o modelo seja transiente, também é necessário definir a condição inicial para todo o domínio (KRESIC, 2006).

A etapa de calibração consiste em definir os objetivos (faixas aceitáveis para a acurácia do modelo) e parâmetros de calibração, seguida da execução de um processo iterativo em simulações sequenciais, nas quais são feitos ajustes dos valores inicialmente assinalados para os parâmetros até que o resultado do modelo seja razoavelmente comparável às observações de campo (HILL & TIEDEMAN, 2007). O modelo calibrado é então utilizado para executar simulações e prever as condições hidrogeológicas no futuro ou reconstruir as do passado. Adicionalmente, é essencial realizar uma análise de incerteza do modelo a partir da medição de erros e análise de sensibilidade dos parâmetros para garantir que se tenha um modelo matemático robusto (ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015; HILL & TIEDEMAN, 2007).

Por fim, deve ser realizada a documentação da construção do modelo e apresentação de seus resultados, a qual deve conter a descrição das etapas e premissas utilizadas, criar um registro do processo e permitir replicabilidade do modelo.

A criação de qualquer modelo matemático requer a execução das etapas de 1 a 4 do fluxograma apresentado na Figura 2, sendo que a execução das demais depende do tipo e objetivo do modelo. Um modelo de previsão de fluxo ou transporte conta com todas as etapas descritas (ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015). O objetivo do presente trabalho é construir o modelo conceitual e projetar esse modelo no software de modelagem escolhido, de modo a fornecer a base necessária para resolver o questionamento central. Portanto, o escopo definido nesse trabalho inclui as etapas de 1 a 4 representadas na Figura 2. Ressalta-se que a conclusão das etapas posteriores é necessária para se atingir a completude do processo de modelagem matemática para previsão de fluxo, porém não serão apresentadas nessa monografia.

## 4.2. Modelo Conceitual e Modelo Numérico

### 4.2.1. Modelo Conceitual

De acordo com o Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas (CETESB, 2001), o Modelo Conceitual “constitui-se numa síntese das informações relativas a uma área em estudo, onde se pode visualizar, por meio de texto explicativo ou ilustração, a localização da contaminação, a sua forma de propagação e a sua relação com os bens a proteger existentes”.

A CETESB também define o modelo conceitual dentro do gerenciamento de áreas contaminadas, pela sua Decisão de Diretoria nº 038/2017/C, publicada em 07 de fevereiro de 2017, como um “relato escrito, acompanhado de representação gráfica, dos processos associados ao transporte das substâncias químicas de interesse na área investigada, desde as fontes potenciais, primárias e secundárias de contaminação, até os potenciais ou efetivos receptores.” A definição de modelo conceitual dada pela CETESB no referido documento legal também sugere quais são os componentes que devem integrar o modelo conceitual dentro da perspectiva do Gerenciamento de Áreas Contaminadas, os quais incluem a identificação das substâncias químicas de interesse, as fontes de contaminação, os mecanismos de liberação e transporte dessas substâncias, os compartimentos ambientais pelos quais as substâncias serão transportadas, os receptores potencialmente expostos à essas substâncias e as vias de ingresso das substâncias nesses receptores.

No entanto, quando falamos em modelo conceitual no contexto da modelagem matemática, esse conceito tem um sentido mais amplo, que vai além do entendimento necessário para cumprimento do objetivo de um processo de gerenciamento de áreas contaminadas. O modelo conceitual é a síntese e representação do conhecimento sobre os componentes físicos que compõem o sistema a ser modelado, e propriedades e processos hidrogeológicos que o governam e que são relevantes para o objetivo da modelagem (ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015; ENEMARK *et al*, 2018; KRESIC, 2006).

De forma geral, os modelos matemáticos criados para avaliar e solucionar questões hidrogeológicas são desenvolvidos a partir desse modelo conceitual, e quanto mais representativo ele for da realidade, melhor será a previsão fornecida pelo modelo matemático. Nesse sentido, o nível de detalhamento requerido do modelo conceitual é determinado pelo

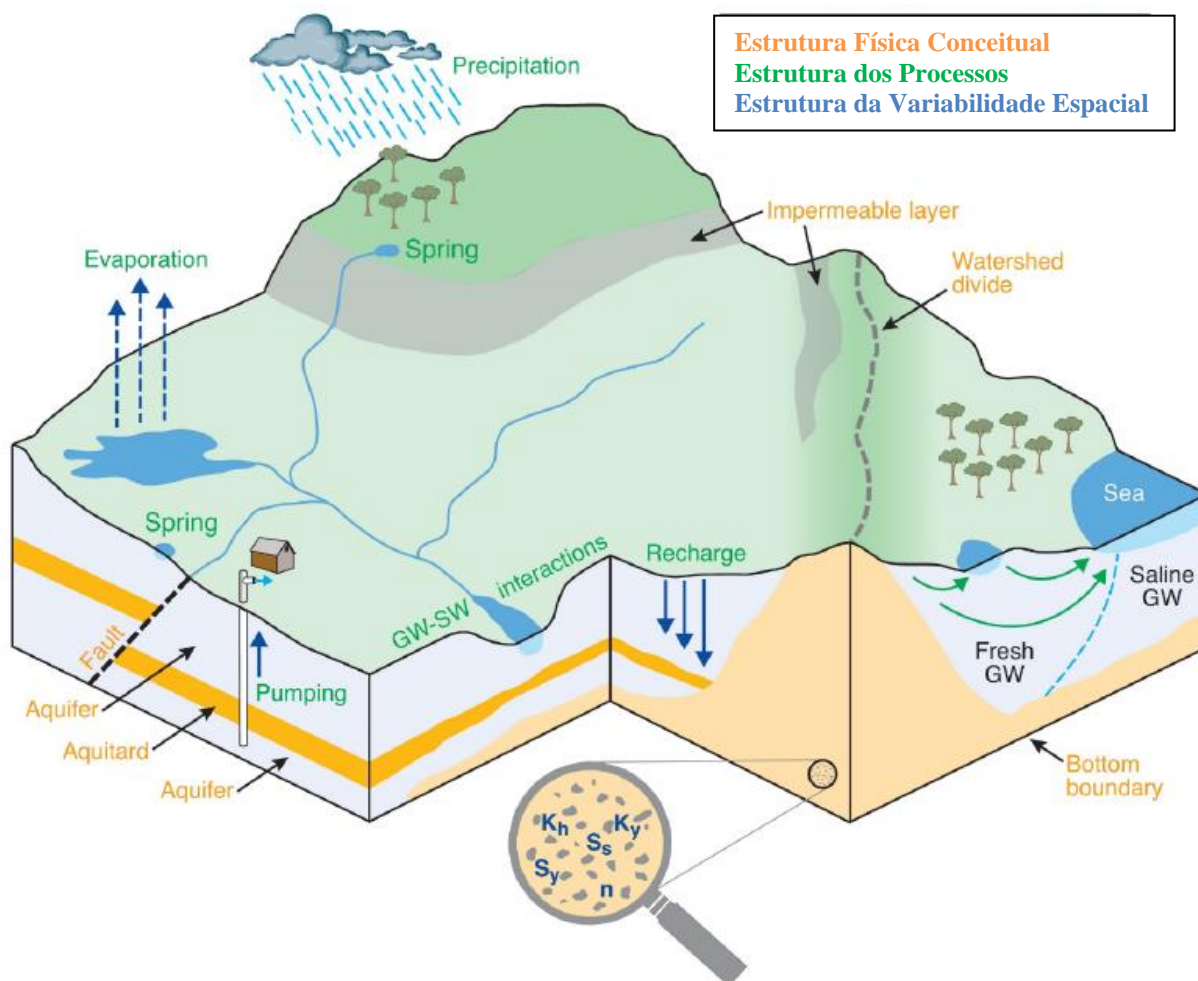
propósito da modelagem matemática, pela disponibilidade e qualidade dos dados de campo (BEAR & CHENG, 2010).

O desenvolvimento de modelos conceituais é feito a partir das informações geológicas e hidrológicas disponíveis, que são dados observados em campo, como níveis de água obtidos em poços de monitoramento, sobre sondagens e concentrações de traçadores ou contaminantes, acompanhados de interpretação de especialistas (ENEMARK *et al*, 2018).

Gupta *et al* (2012) dividem o processo de criação de um modelo de água subterrânea em cinco grandes etapas: a estrutura conceitual física (I) e dos processos (II), que estão relacionadas à construção do modelo conceitual propriamente dito, seguidas pela estrutura da variabilidade espacial (III) e estrutura da equação utilizada (IV), que estão dentro da definição do modelo numérico, e a estrutura computacional (V), relacionada ao modelo computacional.

O foco do presente trabalho é o desenvolvimento das etapas de I a III para o presente caso descrito na Introdução. Essas três etapas são ilustradas em um exemplo conceitual na Figura 3, adaptada de Enemark *et al* (2018). A estrutura física destacada de laranja representa as camadas hidroestratigráficas e sua extensão, a extensão horizontal e vertical do sistema, as feições geológicas que atuam como barreiras e/ou faixa para o fluxo preferencial de água subterrânea, falhas geológicas e a divisão do sistema de água subterrânea em aquíferos e aquitardes. A estrutura dos processos, representada em verde, consiste nas condições de controle, cargas hidráulicas e fluxos de água, que podem estar relacionados a fatores externos como precipitação e evapotranspiração, e a fatores internos, como a interação entre o aquífero e corpos d'água superficiais, e a existência de poços de bombeamento ou injeção. A estrutura de variabilidade espacial destacada em azul na lupa representa as propriedades hidrológicas que não mudam com o tempo a curto e médio prazo, apesar de poderem sofrer alterações de longo prazo por meio de processos como erosão e compactação do solo. Porém, essas propriedades hidrológicas tem distribuição espacial variada dentro do domínio como a condutividade hidráulica, porosidade, coeficientes de armazenamento específico (Enemark *et al*, 2018).

Figura 3 - Estruturas que integram um Modelo Conceitual para Modelagem Matemática.



Fonte: Adaptado de Enemark et al (2018).

#### 4.2.2. Componentes do Modelo Conceitual

Os componentes do modelo conceitual incluem minimamente informações sobre suas fronteiras, unidades hidroestratigráficas do material hidrológico e suas propriedades, direção do fluxo, fontes de recarga e descarga de água.

As condições hidrológicas na fronteira do modelo conceitual determinam as condições de contorno do modelo numérico e influenciam significativamente as direções do fluxo calculadas pelo modelo, especialmente se sua natureza for estacionária. Essas fronteiras incluem feições como divisores de água subterrânea razoavelmente estáveis, corpos d'água superficiais e rochas impermeáveis. Em modelos numéricos tridimensionais, os aquíferos livres têm o limite superior do domínio geralmente definido pelo plano do nível d'água no lençol freático, enquanto os limites laterais e inferior são definidos por essas feições hidrogeológicas

razoavelmente estáveis. Aquíferos confinados podem ter limites superiores diferentes do nível d'água do lençol freático. Essas fronteiras podem ser definidas a partir da interpretação de dados e mapas topográficos, geológicos e potenciométricos (ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015).

É preferível estabelecer limites físicos reais como fronteiras do modelo conceitual. Porém, isso pode ser inviável devido às limitações de escala do modelo quando os limites reais estão muito distantes. Nesses casos, as fronteiras precisam ser definidas por meio de limites hidráulicos razoavelmente estáveis (KRESIC, 2006).

Outro componente importante do modelo conceitual são as unidades hidroestratigráficas, que consistem em faces ou camadas de material geológico contínuo em escala local com propriedades hidrogeológicas semelhantes. O conhecimento dessas unidades é tão importante para a atribuição de valores aos parâmetros quanto a construção do modelo numérico. Todos os modelos de água subterrânea precisam de dados sobre a condutividade hidráulicas das unidades hidroestratigráficas. Caso a natureza da simulação seja transiente, ainda é necessário conhecer o armazenamento específico e/ou a vazão específica de cada unidade. O valor da porosidade específica também é essencial para modelos de transporte de contaminantes (ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015).

No desenvolvimento do modelo conceitual, os valores das cargas hidráulicas obtidas pelo monitoramento de níveis d'água em poços de monitoramento e corpos d'água são utilizados para se compreender a rede de escoamento e seu fluxo preferencial. Adicionalmente as informações sobre as taxas de recarga – como precipitação e irrigação – e descarga de água – através de bombeamento, evapotranspiração e escoamento superficial – são compilados ou estimados juntamente com informações sobre a variabilidade temporal e espacial das condições de recarga/descarga, quando disponíveis. Essas informações são usadas para o entendimento do balanço geral de água subterrânea dentro do domínio, ou seja, o volume de água que entra e sai e a diferença entre eles, definida de forma simplificada como o armazenamento do sistema. Esses dados também são usados na atribuição de valores aos parâmetros para construção do modelo numérico e na etapa de calibração (ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015; KRESIC, 2006).

Algumas informações adicionais podem ajudar a tornar o modelo conceitual mais completo, quando disponíveis, como características físico-químicas da água subterrânea, presença de ecossistemas, tipo e cobertura de vegetação.

Uma característica importante da construção de modelos conceituais é a incerteza. Bredehoeft (2005) é um dos pesquisadores que se dedicou a estudar esse aspecto dos modelos conceituais e afirma que a incerteza é um fato quando se discute modelagem de água subterrânea. Uma das razões é a impossibilidade de amostrar e medir as propriedades físicas da completude do meio subterrâneo por onde a água escoa, sendo possível se obter apenas aproximações da sua distribuição espacial, que não são completamente precisas. Adicionalmente, muitas das análises se fundamentam em interpretações qualitativas e subjetivas, baseadas em premissas assumidas e no julgamento profissional do modelador.

Apesar das incertezas intrínsecas do modelo conceitual, Zheng e Bennet (2002) afirmam que o modelo numérico construído fornece resultados que permitem a verificação da qualidade do primeiro modelo conceitual elaborado ao compará-los com dados observados em campo. Dessa forma é possível direcionar a coleta de novos dados necessários e atualizações do modelo conceitual. O modelo conceitual e a modelagem numérica formam um processo iterativo onde essa ferramenta é continuamente aprimorada até se atingir o objetivo da modelagem. Portanto, de acordo com os referidos autores, não é razoável esperar até se obter o modelo conceitual “perfeito” antes de se prosseguir com a construção do modelo numérico e as simulações.

As estratégias para lidar com a incerteza dos modelos conceituais são justamente a execução da calibração do modelo numérico e análise de incertezas (por meio de análises de sensibilidade), que guiam a tomada de decisão sobre investimentos em coleta de novos dados e aumento da robustez do modelo conceitual. Outra estratégia é a auditoria posterior do modelo numérico, quando se passou tempo suficiente para se observar em campo o que o modelo tentou simular e prever (ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015; BREDEHOEFT, 2005).

#### 4.2.3. Modelo Numérico

A construção do modelo numérico é a tradução do modelo conceitual no software de modelagem. Conforme explicado por Kresic (2006), além do modelo conceitual discutido nas seções anteriores, o modelo numérico inclui a seleção de um código de computador coerente com o objetivo de simulação; a definição da geometria do modelo, ou seja, a extensão vertical e lateral do domínio, a definição da grade, a quantidade e posição das camadas; atribuição de valores dos parâmetros físicos para cada uma das células que compõe o domínio, definição das condições de contorno; definição dos valores de “estresse hidráulico”, ou seja, de recarga e descarga de água e, por fim, a definição da condição inicial de carga hidráulica e/ou

concentração do contaminante, caso o modelo seja transiente (BEAR & CHENG, 2010; KRESIC, 2006).

A seleção do código de computador a ser utilizado depende do problema que se deseja resolver e do conhecimento e habilidade do modelador. De maneira simplificada, um modelo computacional resolve um sistema de equações algébricas de matrizes que representam equações diferenciais parciais de fluxo de água subterrânea. As duas principais metodologias amplamente difundidas para realizar esse processamento são o método das diferenças finitas e o método dos elementos finitos. A diferença entre eles é que no método de diferenças finitas, os nós são localizados no espaço 3D usando índices (i, j, k) para atribuir localizações relativas dentro de uma grade retangular, enquanto no método de elementos finitos, as localizações dos nós são designadas usando coordenadas espaciais (x, y, z) em uma malha (ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015).

Kresic (2006) afirma que o MODFLOW, um modelo computacional de fluxo de água subterrânea tridimensional baseado no método de diferenças finitas, desenvolvido no Serviço Geológico dos Estados Unidos (USGS) por McDonald e Harbaugh (1988), Harbaugh e McDonald (1996), e Harbaugh *et al.* (2000) é considerado o programa de computador de fluxo de água subterrânea disponível mais confiável, verificado e utilizado. Existem disponíveis no mercado vários pacotes de softwares gráficos que facilitam a utilização do MODFLOW ao fornecer uma interface de entrada de dados e visualização dos resultados da modelagem. Um desses pacotes de softwares gráficos é o Groundwater Modeling System (Jones, 2014), desenvolvido para o Departamento de Defesa dos Estados Unidos, e que será utilizado nessa pesquisa.

O MODFLOW utiliza um sistema de grades formado por blocos ortogonais denominados células, dentro das quais as propriedades hidrogeológicas são consideradas uniformes. A resolução da grade, ou seja, a quantidade e dimensões das células pode ser customizada em diferentes áreas do domínio de acordo com as necessidades de sensibilidade e precisão do modelo e seu objetivo (KRESIC, 2006; ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015).

Em relação aos parâmetros de entrada do modelo numérico, Kresic (2006) sugere uma divisão em quatro grupos: (1) tempo, (2) espaço, conforme definição das camadas superior e inferior, (3) características hidrogeológicas, como condutividade hidráulica, transmissividade, armazenamento e porosidade efetiva, e (4) parâmetros relacionados ao transporte de

contaminantes, como dispersividade, sorção, coeficiente de retardo, difusão, reações químicas e taxa de degradação.

Na construção do modelo numérico deve-se atribuir as condições de contorno e respectivos valores de carga hidráulica e/ou fluxo. Alberto (2005) define as condições de contorno de um modelo hidrogeológico como as relações de fluxo entre o exterior e o interior do domínio de um modelo. São representações matemáticas das circunstâncias em que a água entra ou sai das fronteiras do domínio. Em sua dissertação de mestrado explica o agrupamento feito por Franke *et al* (1987) das condições de contorno em três tipos:

- Tipo I (Condição de Dirichlet): contorno de carga hidráulica especificada, como lagos e rios que tenham conexão com o aquífero em estudo;
- Tipo II (Condição de Neumann): contorno de fluxo especificado. O fluxo pode ou não ser nulo. Exemplos de fronteiras desse tipo são divisores de água subterrânea, falhas geológicas que impõem ausência de fluxo ou condições fixas de fluxo. Quando todo o domínio tem condições de contorno desse tipo, pelo menos uma carga hidráulica precisa ser fornecida para que o modelo apresente solução numérica única.
- Tipo III (Condição de Cauchy): contorno de fluxo dependente da carga hidráulica. Um exemplo onde esse tipo de condição pode ser usado é a presença de dois aquíferos ou de um aquífero e um corpo d'água superficial separados por uma camada geológica semipermeável em que o fluxo entre eles é governado pela Lei de Darcy.

O modelo numérico pode simular condições de fluxo estacionário ou transiente. Na simulação em estado estacionário, a distribuição das cargas hidráulicas se mantém igual ao longo do tempo dentro do domínio e não há variação do armazenamento de água naquela parte do aquífero. Na simulação em estado transiente, as cargas hidráulicas variam com o tempo e o armazenamento específico em aquíferos confinados (ou vazão específica em aquíferos livres) precisa ser fornecido, além da condição inicial em cada uma das células do domínio, ou seja, a carga hidráulica e a concentração do contaminante no tempo  $t = 0$ . Os dois tipos de modelo fornecem respostas úteis, mas a escolha entre o estacionário ou transiente depende do objetivo do modelo, nível de detalhamento desejado, disponibilidade de dados, recurso e tempo. É



comum os modelos comecem com uma simulação de estado estacionário e evoluírem para uma simulação transiente (ANDERSON, WOESSNER & HUNT, 2015; KRESIC, 2006).

Para produzir um modelo numérico computacional que represente a transiência do fluxo de uma área que apresente alta variabilidade dos níveis d'água, pode ser adotada uma estratégia de inicialmente calibrar um modelo estacionário para se obter valores iniciais de condutividades hidráulicas que facilitarão a calibração de um modelo transiente posterior, como foi realizado por Ferrari (2006).

## 5. MATERIAIS E MÉTODOS

A fundamentação metodológica compreende a interpretação de dados obtidos por meio de uma série de técnicas de investigação ambiental, coletados por profissionais técnicos qualificados ao longo de um processo de investigação e remediação na área de estudo, com foco no monitoramento realizado entre os anos de 2017 e 2021.

Os dados utilizados para interpretação e construção do modelo conceitual incluem:

- Série histórica de monitoramento do nível d'água e concentrações de clorobenzeno em água subterrânea em poços de monitoramento construídos de acordo com a norma ABNT NBR 15.495-1/2007 e 15.495-2/2008 e monitorados conforme as orientações da norma técnica ABNT NBR 15.847/2010;
- Monitoramento do nível d'água dos mananciais superficiais medidos com *dataloggers*;
- Vazão de água nos corpos d'água superficiais;
- Concentração do contaminante de interesse no solo obtidos em ensaios químicos executados por laboratórios comerciais;
- Dados litológicos obtidos por meio de sondagens geotécnicas;
- Levantamentos topográficos e aerofotogramétricos;
- Dados de condutividade hidráulica obtidos a partir da condução de ensaios do tipo *slug test*;

- Dados geotécnicos do solo (porosidade total e efetiva, fração de carbono orgânico, densidade, granulometria), obtidos em análises laboratoriais de amostras indeformadas;
- Busca por parâmetros hidrológicos e geológicos representativos na literatura, como taxas de recarga e evapotranspiração, dentre outros.

O modelo conceitual de fluxo criado nessa monografia foi traduzido para um modelo numérico por meio do software Groundwater Modeling System<sup>2</sup> (GMS), que utiliza a solução numérica determinística pelo método das diferenças finitas. O modelo será tridimensional e em condição de estado estacionário, considerando os recursos e tempo disponíveis, além do nível de detalhamento desejado para essa monografia.

## **6. RESULTADOS**

### **6.1. Modelo Conceitual para embasar o Modelo de Fluxo**

Primeiramente, são discutidos e apresentados os parâmetros físico-químicos e seus respectivos valores adotados na construção do Modelo Conceitual, representativos dos fenômenos hidrogeológicos que governam o fluxo de águas subterrâneas na Área de Estudo. Adicionalmente, são abordados aspectos sobre a tradução desses parâmetros do Modelo Conceitual no modelo numérico de fluxo com uso do software de modelagem GMS (Aquaveo, versão 10.0.1 de 15/07/2014).

#### **6.1.1. Geologia Regional**

A Área de Estudo localiza-se no Sistema do Aquífero Guarani (SAG). De acordo com a Carta geológica da folha Porto Alegre 1:1.000.000 (CPRM, 2004)<sup>3</sup>, a área de estudo encontra-se totalmente inserida na unidade litoestratigráfica Formação Pirambóia, como apresentado na Figura 4. Essa formação geológica é composta por arenito fino a médio eólico intercalado por depósitos interdunares úmidos e de leitos aquosos na base.

---

<sup>2</sup> <https://www.aquaveo.com/software/gms-groundwater-modeling-system-introduction>

<sup>3</sup> Disponível em: <https://geoportal.cprm.gov.br/geosgbr/>

Figura 4 - Litoestratigrafia 1:1.000.000, com destaque para a localização aproximada da Área de Estudo inteiramente na Formação Piramboia.



Fonte: adaptado de CPRM (2004)

Heine (2008) determinou através de valores de espessura, condutividade hidráulica e porosidade, que o SAG em Ivoti/RS possui espessura maior que 120 m. Segundo Golberg (2003, apud WOJHAN, 2011), a Formação Piramboia varia de 50 m a 100 m. No entanto, o estudo realizado por Wojhan (2011) concluiu que a Formação Piramboia mais próxima à Área de Estudo dessa monografia apresentou espessura de 210 m. De acordo com o Plano de Gerenciamento da Bacia Hidrográfica do Rio Dos Sinos (Pró-Sinos, 2011), o aquífero Piramboia apresenta espessura média de 200 metros e se encontra na condição de aquífero livre a semiconfinado dependendo da localidade. Na Área de Estudo ocorre na condição de aquífero livre.

A Formação Rio do Rasto (período Permiano Superior), que está localizada na base da Formação Piramboia, e próximo à Área de Estudo, é constituída por 60% de pelitos e 40% de arenitos finos, com condutividade hidráulica baixa a muito baixa, sendo caracterizada como um aquitarde que limita o fluxo de água subterrânea (Machado, 2005 apud Wojhan, 2011). Logo, a base do Aquífero Piramboia (contato com o topo da Formação Rio do Rasto), foi considerada no modelo numérico como a superfície de fluxo nulo que constitui a base do domínio.

### 6.1.2. Geologia Local

Com base em dados locais obtidos em campo, na área de estudo ocorrem apenas solos de alteração e rochas sedimentares arenosas da Formação Piramboia cobertos por solos aluvionares. Por meio das descrições dos perfis litológicos provenientes das sondagens realizadas em investigações ambientais passadas, é possível descrever a geologia local da Área de Estudo em quatro camadas hidroestratigráficas sobrepostas:

- Aterro – composto de argila, silte e argila arenosa. Ocasionalmente, camadas de matéria orgânica.
- Sedimento aluvionar – duas unidades distintas. Porção superior composta predominantemente por argila arenosa e porção inferior mais arenosa. O aterro e o sedimento aluvionar alcançam uma profundidade de 5 a 9 m, aproximadamente.
- Alteração de rocha sedimentar
- Rocha sedimentar – Arenito

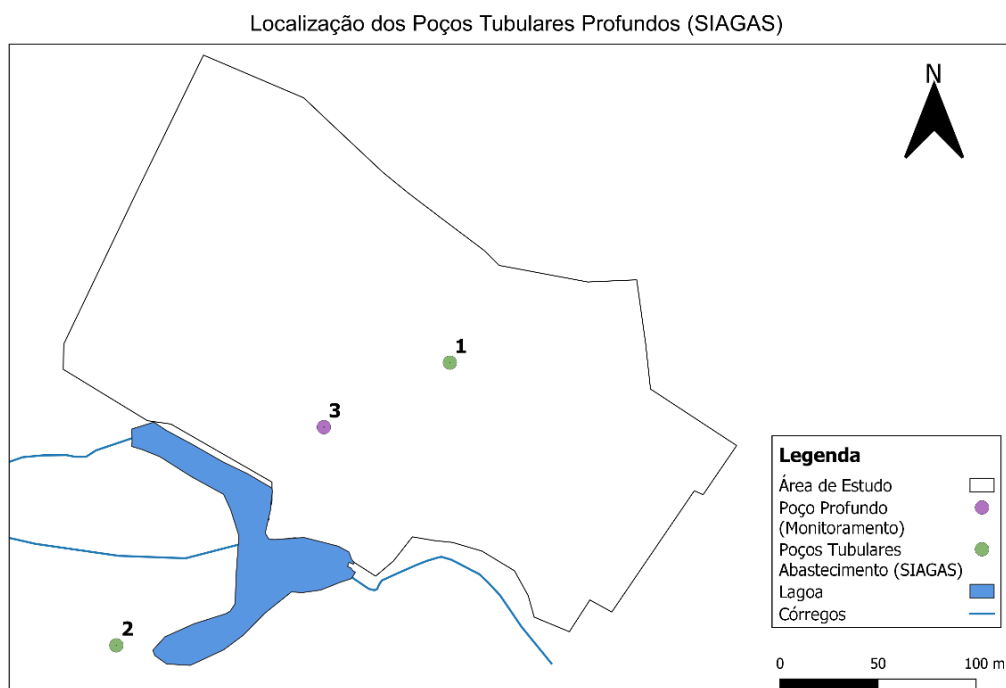
Para simplificação do modelo numérico, o domínio foi dividido em 3 camadas, sendo elas denominadas “Aluvião” (inclui o aterro superficial e as duas camadas de sedimento aluvionar), “Alteração de Rocha” e “Arenito”.

Há um poço profundo (descomissionado) no interior da área de estudo, cuja descrição da litologia indica que superfície do Arenito está localizada aproximadamente na profundidade 28 m. Esse valor está coerente com o início da camada de Arenito reportada na ficha técnica de dois poços tubulares profundos, utilizados para captação industrial, obtidas a partir de consulta ao Sistema de Informações de Águas Subterrâneas (SIAGAS)<sup>4</sup>. A Figura 5 apresenta a localização dos poços profundos utilizados para determinação do Arenito e a Tabela 2 apresenta o resumo das informações sobre os poços.

---

<sup>4</sup> Disponível em: <http://siagasweb.cprm.gov.br/layout/index.php>

Figura 5 - Localização dos poços profundos localizados na Área de Estudo.



Fonte: elaborado pelo Autor.

Tabela 2 - Características dos poços profundos localizados na Área de Estudo.

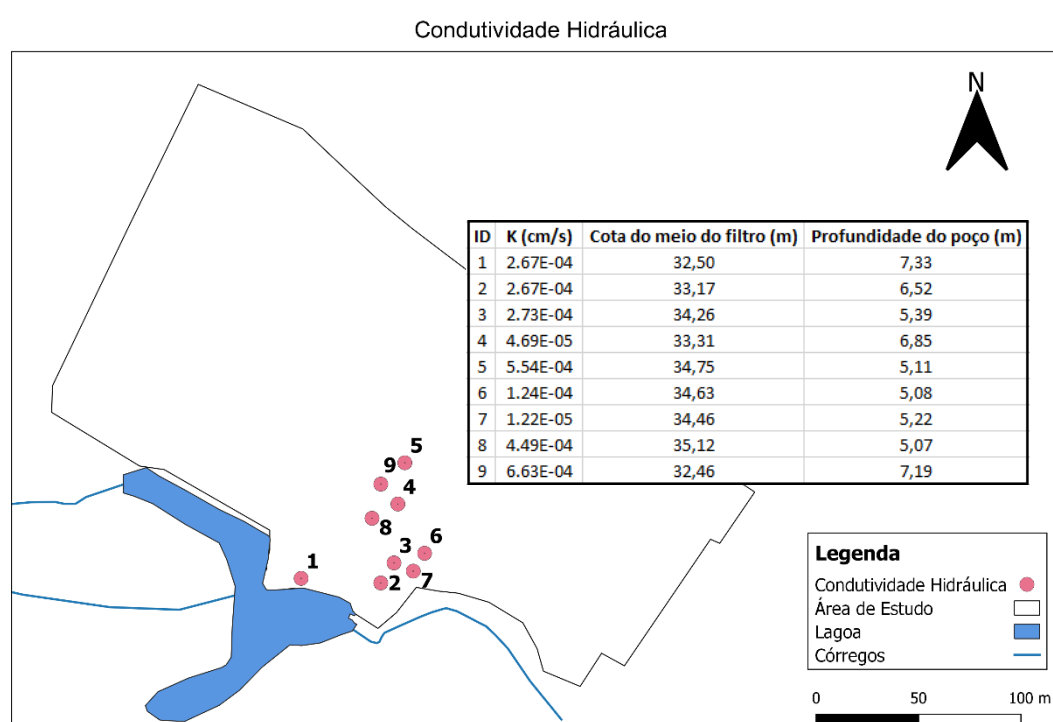
| ID | Natureza do poço                         | Direção em relação a Área de Estudo | Profundidade total (m) | Cota Terreno (m) | Cota da superfície camada de rocha sedimentar (Arenito) |
|----|--|-------------------------------------|------------------------|------------------|---|
| 1  | Poço tubular de abastecimento industrial | -                                   | 148                    | 40               | Arenito médio a 27,4 m                                  |
| 2  | Poço tubular de abastecimento industrial | SO                                  | 116                    | 41               | Arenito médio a 28,4 m                                  |
| 5  | Poço de monitoramento profundo           | -                                   | 86                     | 37.8             | Arenito a 28,7 m  |

Considerando que o perfil litológico dos dois poços tubulares profundos registrados no SIAGAS e localizados dentro da Área de Estudo apresentam arenitos finos e médios presentes na Formação Piramboia ao longo de toda a sua extensão vertical com profundidade total de 148 e 116 m, respectivamente, e considerando a espessura para a Formação Piramboia reportada por Pró-Sinos (2011) e Wojhan (2011) próximo à Área de Estudo dessa monografia de aproximadamente 200 m, adotou-se a profundidade total do domínio igual a 200 m.

### 6.1.3. Hidrogeologia

Os valores de condutividade hidráulica foram obtidos na Área de Estudo por meio da realização de ensaios de *Slug Test*. O referido ensaio consiste na inserção de um volume conhecido, causando uma mudança brusca na cota do nível d'água estático dentro do poço e a recuperação do nível d'água dinâmico em função do tempo é monitorada (DE CARVALHO, 2013). A Figura 6 apresenta os valores de condutividade hidráulica obtidos na Área de Estudo.

Figura 6 - Condutividade hidráulica determinada nos poços da Área de Estudo por meio de ensaios de Slug Test.



Fonte: elaborado pelo Autor.

Valores de condutividade hidráulica encontrados na Área de Estudo são coerentes com os valores encontrados por Heine (2008) para areias médias a finas e areias siltsas do Sistema Aquífero Guarani em Ivoti/RS, na região próxima a Área de Estudo, que variam de  $10^{-3}$  a  $10^{-5}$  cm/s. Wojahn (2011) estima que a permeabilidade para a formação Piramboia, pertencente à região do Aquífero Guarani na Bacia do Rio dos Sinos situa-se entre  $2,32 \times 10^{-5}$  cm/s e  $3,53 \times 10^{-4}$  cm/s, em estudo conduzido próximo à Área de Estudo desta monografia.

Heine (2008) determinou, com base em valores de espessura, condutividade hidráulica e porosidade, que o SAG em Ivoti/RS possui 4 horizontes heterogêneos com condutividade

hidráulica decrescente no sentido do topo para a base, sendo esses últimos lateralmente contínuos.

Desta forma, foram adotados os seguintes valores de condutividade hidráulica horizontal ( $k$ ) para cada uma das camadas do modelo:

- Aluvião:  $1,4 \times 10^{-4}$  cm/s, obtido pela média geométrica<sup>5</sup> de  $k$  dos poços localizados exclusivamente na camada de sedimentos aluvionares.
- SAR:  $2,4 \times 10^{-4}$  cm/s, obtido pela média geométrica<sup>5</sup> de  $k$  dos poços cujo perfil passa pela camada aluvionar, mas a profundidade alcança o solo de alteração de rocha.
- Arenito:  $1,0 \times 10^{-5}$  cm/s adotado o valor de  $k$  mais baixo dentro do intervalo de variação desse parâmetro hidrogeológico reportado por Heine (2008).

Wojhan (2011) conclui que o aquífero Piramboia é anisotrópico e que a permeabilidade é controlada pela estratificação, sendo mais permeável no sentido longitudinal aos estratos que transversalmente. Isso se deve ao efeito da caulnização, que dificulta o fluxo de água subterrânea no sentido transversal. Esse mesmo autor observou o valor da razão entre a permeabilidade longitudinal e a permeabilidade transversal ( $K_L/K_T$ ) na Formação Piramboia próximo à Área de Estudo dessa monografia entre 9 e 11. Por essa razão, assumiu-se no modelo numérico a condutividade hidráulica horizontal ( $K_H$ ) 10 vezes maior que a condutividade hidráulica vertical ( $K_v$ ) para todas as camadas litológicas do domínio.

#### 6.1.4. Domínio do Modelo Numérico

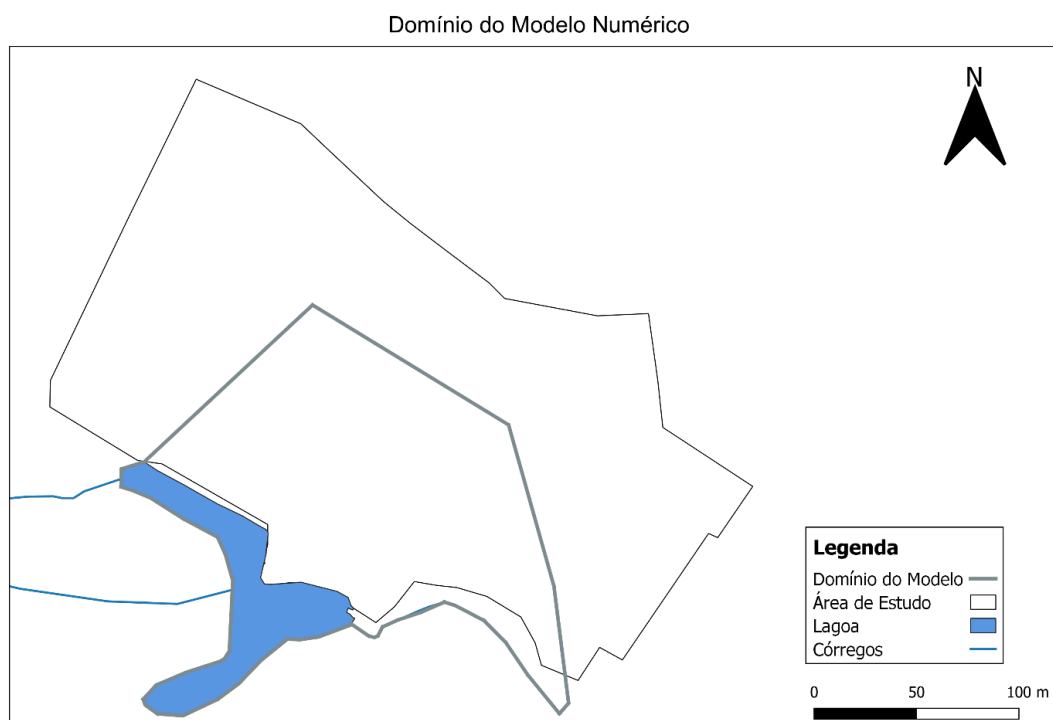
O domínio do modelo foi definido de forma a englobar toda a área de interesse, ou seja, área de ocorrência da pluma da fase dissolvida de clorobenzeno e seu potencial caminho de escoamento até possivelmente atingir o córrego, principal receptor ecológico local. Adicionalmente, a base do domínio coincide com a base adotada da Formação Piramboia, e as bordas laterais do domínio coincidiram com a hidrologia local para definição das condições de

---

<sup>5</sup> Como a variável aleatória regionalizada  $k$  (condutividade hidráulica) normalmente apresenta uma distribuição de probabilidade no formato log-normal, foi utilizada a média geométrica para obter maior precisão na estimativa do valor de  $k$  para aquele determinado grupo de dados.

contorno, conforme discutido na seção 6.1.5 a seguir. A Figura 7 corresponde a delimitação do domínio do modelo numérico em planta.

Figura 7 - Delimitação do domínio do modelo numérico



Fonte: elaborado pelo Autor.

#### 6.1.5. Fluxo, Carga Hidráulica e Condições de Contorno

Em função da distinção da disponibilidade de dados levantados em campo ou na literatura científica, da presença de feições e processos hidrogeológicos, o domínio foi dividido em duas camadas de carga hidráulica: uma camada superficial e uma camada subsuperficial.

##### 6.1.5.1. Camada Superficial

As condições de contorno do domínio do modelo foram definidas de forma a representar os atributos hidrológicos e hidrogeológicos da Área de Estudo. Elas são:

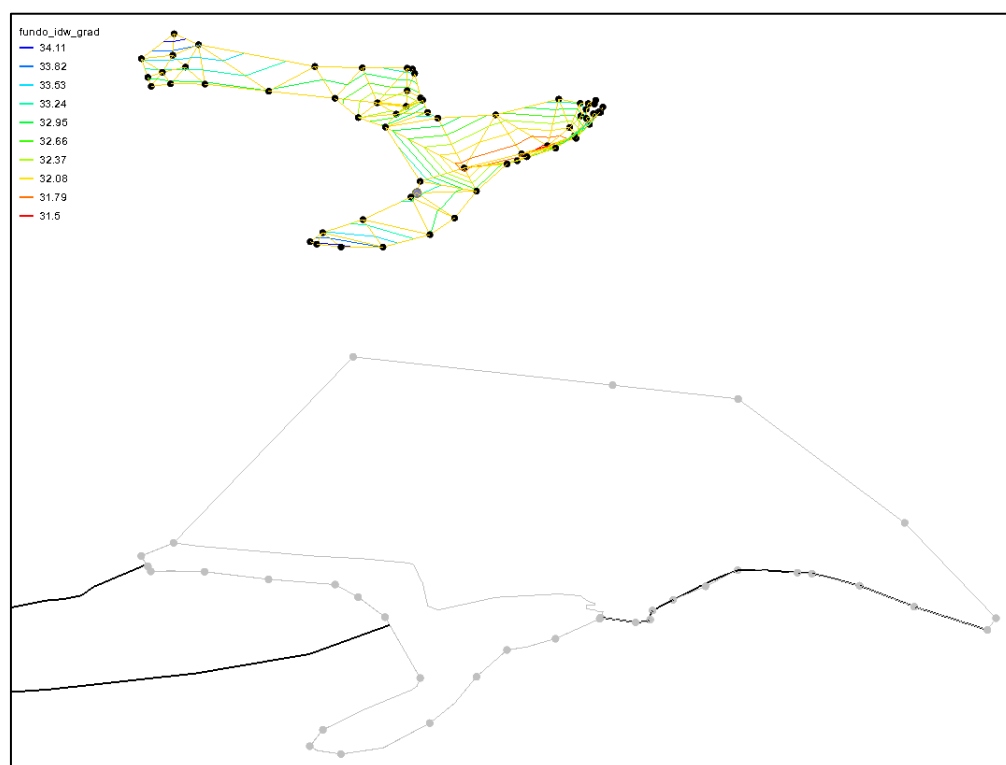
Lago (represamento do córrego) – Condição de contorno do Tipo I (carga hidráulica conhecida):

Carga hidráulica constante de 36,6 m, baseada no monitoramento histórico com *data logger*. O lago funciona como reguladora do fluxo de água subterrânea. A cota é mantida



constante para atuar como barreira hidráulica, o que impede que o fluxo ocorra preferencialmente do aquífero para o lago. O pacote LAK3 no MODFLOW foi utilizado para representá-lo. A topografia do fundo do lago foi interpolada a partir de resultados de levantamento batimétrico, conforme apresentado na Figura 8.

Figura 8 - Representação da topografia do fundo do lago no GMS, obtida a partir da interpolação de dados topográficos.



Fonte: elaborado pelo Autor.

- Parâmetros inseridos na definição da camada:
  - Initial, Min e Max Stage = 36,6 m
  - Condutância do lago (“Lake Leakance”) = 0,154/d. Média da espessura do sedimento baseada em levantamento batimétrico e condutividade hidráulica da camada de sedimentos de fundo foi adotada como sendo da mesma magnitude da formação geológica da área, ou seja,  $10^{-4}$  cm/s.
  - Precipitação = 1434 mm/ano e Evaporação = 915,4 mm/ano (Heine, 2008)
  - Escoamento superficial para o lago (*runoff*) foi considerado nulo, devido às características topográficas da área imediatamente adjacente ao lago.

Córrego que constitui o segmento a jusante do barramento – Condição de contorno do Tipo I (carga hidráulica conhecida):

O córrego é o receptor principal da água subterrânea local. O pacote RIVER no MODFLOW foi utilizado para representá-lo.

A cota do nível d'água varia de 34,56 (média obtida a partir de monitoramento com *data logger* posicionado a jusante do barramento) a 34 m (valor adotado no exutório do domínio). A variação do nível d'água no córrego foi assumida com base na topografia suave do local, que apresenta um leve desnível entre o primeiro ponto do córrego, imediatamente à jusante do lago, e o exutório.

As cotas do fundo do córrego foram baseadas em levantamento topográfico e foram adicionadas em 10 pontos ao longo do arco. O valor da condutância do córrego foi calculado a partir de uma largura média do leito do rio de 3 m (obtido pela média da largura da seção medida em vários pontos da delimitação do leito no levantamento topográfico através de da ferramenta de medição de distâncias do software de geoprocessamento QGIS) e uma espessura da camada de sedimentos do fundo adotada igual a 0,2 m. A condutividade hidráulica da camada de sedimentos de fundo foi adotada com mesma magnitude da formação geológica da área, ou seja,  $10^{-4}$  cm/s. O valor da condutância do córrego obtido foi de aproximadamente 1,3 m/d.

Restante do domínio – Condição de contorno do tipo I (carga hidráulica conhecida):

Os valores de carga hidráulica superficiais foram determinados através de um mapa potenciométrico baseado na carga hidráulica média calculada a partir da série histórica de monitoramento dos poços e das cargas assumidas para lago e córrego, conforme discutido anteriormente. Foram utilizados dados de um total de 85 poços cujo monitoramento ocorreu entre 2007 e 2021. O nível d'água médio nos poços de monitoramento localizados na área de estudo é 1,6 m (+ ou - 0,15 m com nível de confiança a 95%). A Figura 9 apresenta a distribuição dos pontos de carga hidráulica e inclui poços de monitoramento, e nível d'água do lago e córrego, utilizados para definição da distribuição de carga hidráulica na camada superficial.

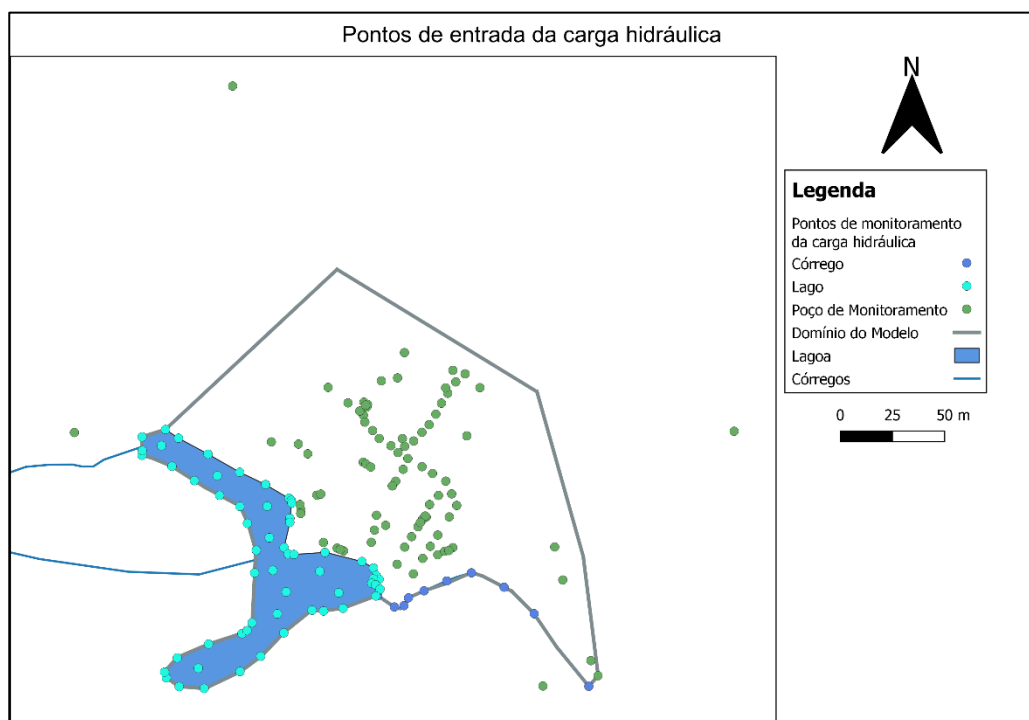
O fluxo de água subterrâneo foi interpretado através da criação de um mapa potenciométrico da Área de Estudo, onde as isolinhas apresentadas na Figura 10 representam uma superfície de mesma carga hidráulica. O mapa potenciométrico foi obtido a partir da interpolação pelo método da Ponderação do Inverso das Distâncias (Inverse Distance

Weighting – IDW) da média das cargas hidráulicas em cada ponto, provenientes do monitoramento da área. O processo de cálculo por meio dessa metodologia de interpolação, consiste na determinação do valor de um ponto qualquer da região por meio a média com os pontos mais próximos, onde essa média é ponderada pelo inverso da distância aos pontos conhecidos (BEZERRA et al., 2011).

Conforme indicado pelas linhas de fluxo perpendiculares às isolinhas potenciométricas, o fluxo de água subterrânea na camada superficial do aquífero ocorre preferencialmente no sentido Sudeste, em direção ao córrego.

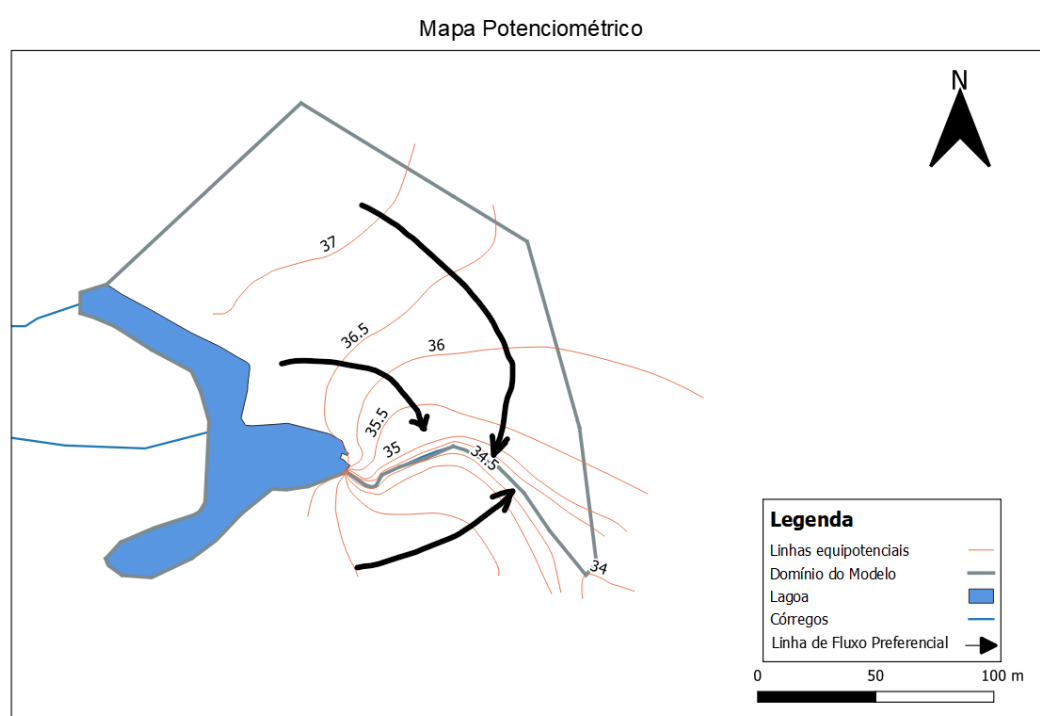
Ademais, a fronteira lateral do domínio, na camada superficial do aquífero, localizada imediatamente abaixo do córrego foi considerada como uma superfície de fluxo nulo, ou seja, com condição de contorno tipo II (fluxo conhecido). Essa premissa foi adotada visto que o fluxo de ambas as margens do córrego converge para esse canal de drenagem principal, ou seja, tanto o fluxo proveniente do Norte quanto do Sul, que afloram em seu leito (rio efluente).

Figura 9 - Representação da distribuição espacial dos pontos de carga hidráulica entrados no software GMS, utilizados na formulação da camada superficial da carga hidráulica.



Fonte: elaborado pelo Autor.

Figura 10- Mapa potenciométrico da Área de Estudo – camada superficial



Fonte: elaborado pelo Autor.

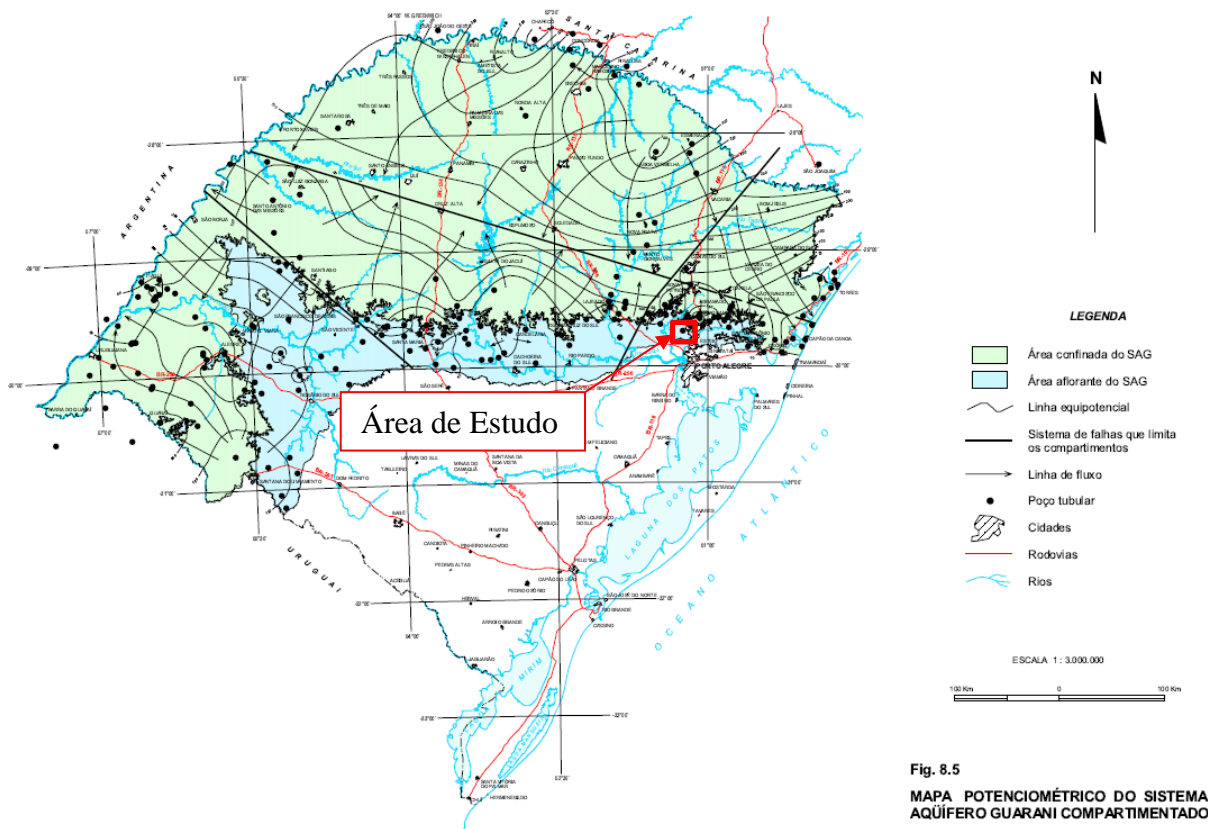
#### 6.1.5.2. Camada Subsuperficial

Não há poços profundos de monitoramento ativos disponíveis na Área de Estudo. Portanto, as cargas hidráulicas de camadas subterrâneas mais profundas foram definidas por meio de um racional distinto.

Machado (2005) elaborou a compartimentação espacial e arcabouço hidroestratigráfico do Sistema Aquífero Guarani no Rio Grande Do Sul, onde concluiu que no compartimento Leste, onde se encontra a Área de Estudo, predominam as linhas de fluxo com direção sul, com áreas de descarga entre a região metropolitana de Porto Alegre e o litoral. A Figura 11 mostra o Mapa Potenciométrico Compartimento do SAG no Rio Grande do Sul, elaborado por Machado (2005) a partir de dados de cotas do nível estático (NE) de poços tubulares profundos, com destaque para a localização aproximada da Área de Estudo dessa monografia.

Dessa forma, adotou-se que o fluxo preferencial “geral” na Área de Estudo segue majoritariamente para sul/sudeste, em direção à macrodrenagem principal da bacia hidrográfica em que está inserido, o rio Rio dos Sinos. Logo, a compartimentação local está de acordo com a regional.

Figura 11 - Mapa potenciométrico do Sistema Aquífero Guarani compartimentado, no estado Rio Grande do Sul. Destaque adicionado para localização da Área de Estudo dessa monografia.



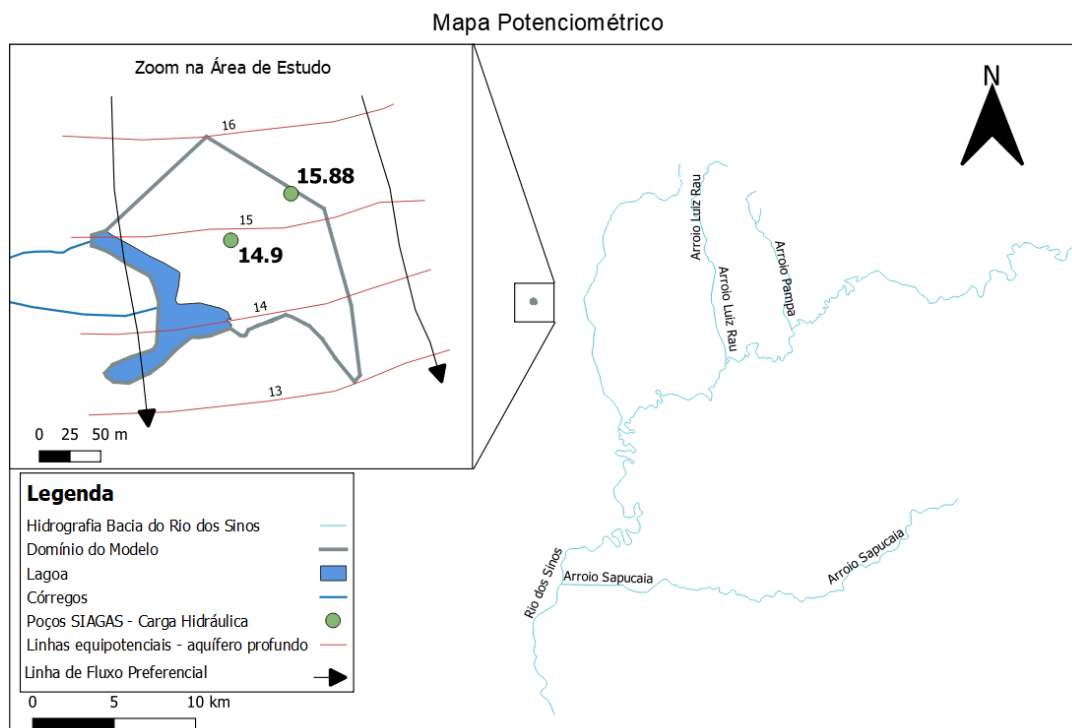
Fonte: adaptado de Machado (2005).

Adicionalmente, combinou-se a informação acima sobre o fluxo preferencial “geral” da área com a cota potenciométrica de dois poços tubulares profundos registrados no SIAGAS localizados na Área de Estudo, obtida a partir da subtração da cota do terreno pela profundidade do nível d’água estático. A partir desses valores estimou-se um gradiente de carga hidráulica para a camada mais profunda do aquífero na Área de Estudo, ou seja, a camada subsuperficial do modelo, conforme apresentado na Figura 12.

A condição de contorno do tipo I (carga hidráulica conhecida) pode ser definida para as fronteiras laterais do domínio por meio dessa distribuição de cargas hidráulicas.

Ressalta-se que essa é uma aproximação baseada nos dados disponíveis encontrados para a área e no julgamento técnico do autor, que por se basear em apenas dois poços profundos e em uma única medição de cota potenciométrica de cada, agrega uma incerteza. Idealmente, uma superfície potenciométrica deve ser construída a partir da interpretação de uma série histórica de monitoramento, com utilização de um número mais representativo de poços. Tal incerteza deve ser considerada na interpretação dos resultados do modelo numérico e, eventualmente ajustada uma etapa de calibração, conforme explanado na seção 4.1.1.

Figura 12 - Mapa potenciométrico da Área de Estudo – camada subsuperficial



Fonte: elaborado pelo Autor.

Por fim, retoma-se a adoção da espessura de 200 m para o domínio como a espessura do Aquífero Piramboia na Área de Estudo, sendo essa base uma superfície de fluxo nulo, conforme explanado na seção 6.1.1, ou seja, a base do domínio segue a condição de contorno do Tipo II (fluxo especificado).

#### 6.1.6. Vazão no Exutório

O valor de vazão do córrego no exutório do domínio foi adotado a partir do cálculo da vazão média que escoava do lago para o córrego através do vertedouro durante um estudo hidráulico realizado na Área de Estudo em 2020. A Tabela 3 apresenta os valores de vazão medidos ao longo de um estudo hidrológico realizado na área em 2020. A média entre as vazões mensais foi utilizada como parâmetros de entrada no modelo, ou seja,  $12.781,20 \text{ m}^3/\text{dia}$  e desvio padrão de  $10.326,33 \text{ m}^3/\text{dia}$ .

A definição da vazão no exutório do córrego a partir desse método representa uma aproximação da realidade, visto que a vazão no exutório tende a ser maior que a vazão vertida do lago para o córrego através do barramento, visto que o córrego recebe as contribuições

hídricas do aquífero circundante. Fato esse que agrega uma incerteza ao modelo. O valor da vazão no exutório, portanto, não é uma métrica muito útil para ser usada como alvo na calibração do modelo numérico, pois é difícil separar quantitativamente qual é a contribuição do aquífero para essa vazão final. Ao invés dessa variável, outros parâmetros hidrogeológicos podem ser utilizados para a eventual calibração do modelo numérico, como as taxas de recarga e evapotranspiração, ou propriedades do aquífero, como o valor atribuído à porosidade e condutividade hidráulica, por exemplo.

Tabela 3 - Vazão média mensal que escoou da lagoa para o córrego.

| Mês - 2020 | Média mensal da vazão no vertedouro (m <sup>3</sup> /s) |
|------------|---|
| Fevereiro  | 0,0392  |
| Março      | 0,1164  |
| Abril      | 0,0750  |
| Maio       | 0,1643  |
| Junho      | 0,3447  |

#### 6.1.7. Recarga

A proporção de água que infiltra no solo após a precipitação pode variar de 50%, em ambientes naturais, para 30 a 15%, a depender do tipo de ocupação do solo urbano. (MOTA, 1981; HOUGH, 1985 apud SERAPHIM, 2018).

Heine (2008) utilizou valor de recarga igual a 13,4% em uma camada do Sistema Aquífero Guarani, semelhante aos sedimentos aluvionares que ocorrem na Área de Estudo, para desenvolver um modelo estacionário com uso do MODFLOW para análise de sustentabilidade do uso do SAG em Ivoti – RS (a cerca de 15 km de distância da Área de Estudo). Matuzzi (2013) estimou as taxas de recarga na Bacia Hidrográfica do Rio Ibicui, no Rio Grande do Sul, com resultados que variaram entre 13 e 47%.

Segundo Heines (2008), a precipitação média na Bacia do Rio dos Sinos é de 1434 mm/ano, baseada em 43 anos de observação no Atlas Agroclimático do Estado do Rio Grande do Sul (Instituto de Pesquisas Agronômicas).

Considerando que a Área de Estudo é predominantemente pavimentada e com base nas recargas encontradas na literatura, adotou-se um valor de recarga igual a 10% da precipitação,

que corresponde aproximadamente à porção da superfície do domínio que não é pavimentada, e o solo é coberto por grama. Ou seja, 143,4 mm/ano.

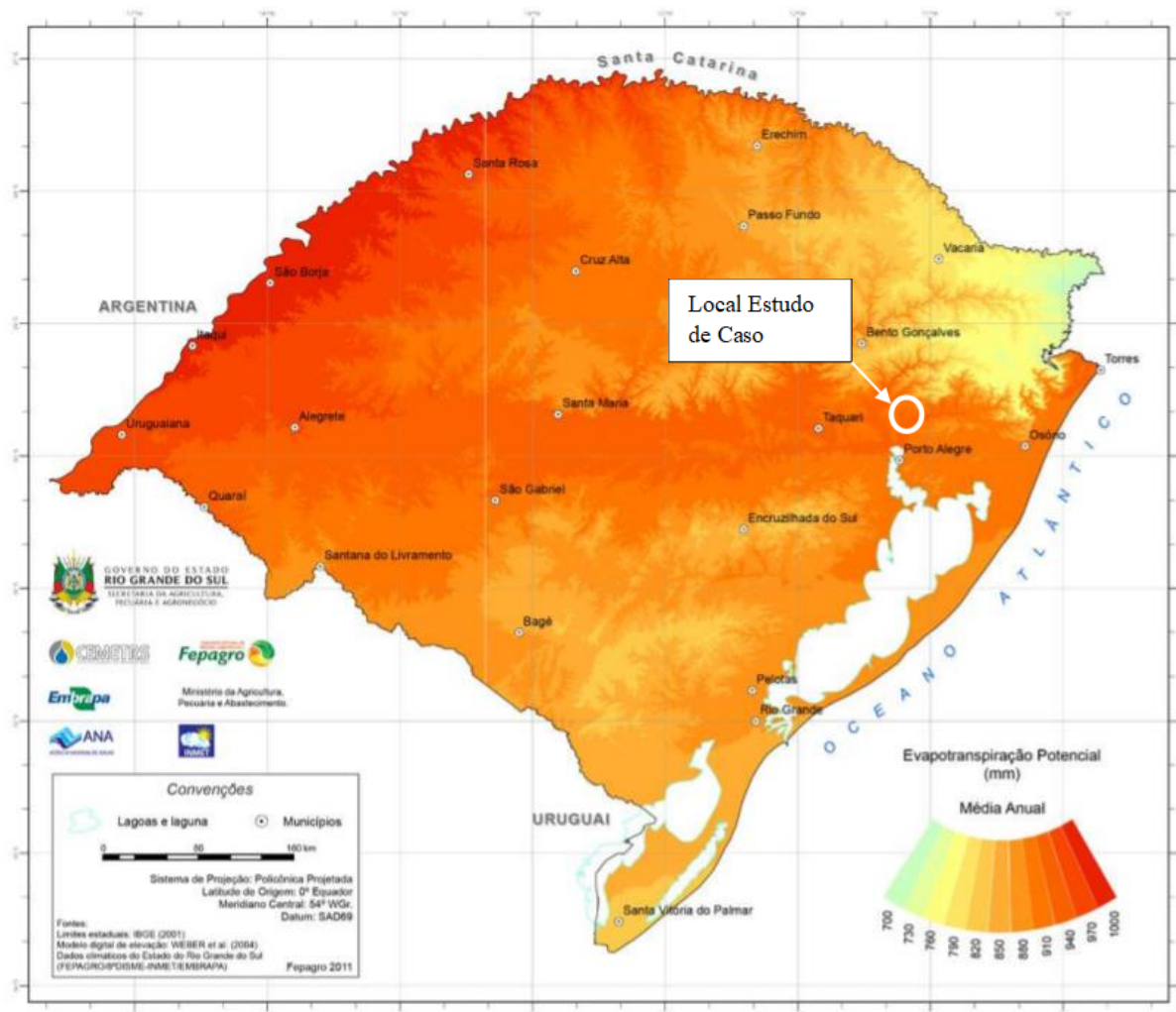
#### 6.1.8. Evapotranspiração

A evapotranspiração potencial (mm) representa a média de água transferida do solo para a atmosfera, perdida por evaporação direta do solo e transpiração pelas plantas. Esse parâmetro foi determinado no Atlas Climático do Rio Grande do Sul (FEPAGRO, 2011) em função da média aritmética dos totais mensais, estacionais e anuais no período 1976-2005. As classes foram divididas em intervalos de 10 mm de água evapotranspirada. A Figura 13 apresenta a carta de distribuição da média anual de Evapotranspiração Potencial (mm) no estado do Rio Grande do Sul feita em SIG, por meio de regressão linear. Os pontos no mapa representam as estações de medição que geraram a série histórica utilizada na determinação da evapotranspiração média. A Evapotranspiração Potencial média anual na região onde está localizada a área de estudo é 940 mm, de acordo com o Atlas Climático do Rio Grande do Sul.

A Área de Estudo é predominantemente pavimentada. No entanto, existe uma porção menor do terreno, mais próxima ao córrego, cujo solo é coberto por vegetação gramínea e árvores correspondente a aproximadamente 10% da área superficial do domínio. Somente essa porção estaria, portanto, suscetível aos efeitos que levam à evapotranspiração. Por essa razão, a evapotranspiração no domínio foi adotada como 10% do valor da Evapotranspiração Potencial média anual da região, ou seja, 94 mm.



Figura 13 - Distribuição da média anual de Evapotranspiração Potencial (mm) no estado do Rio Grande do Sul



Fonte: Adaptado de FEPAGRO (2011).

#### 6.1.9. Grade do Modelo Numérico

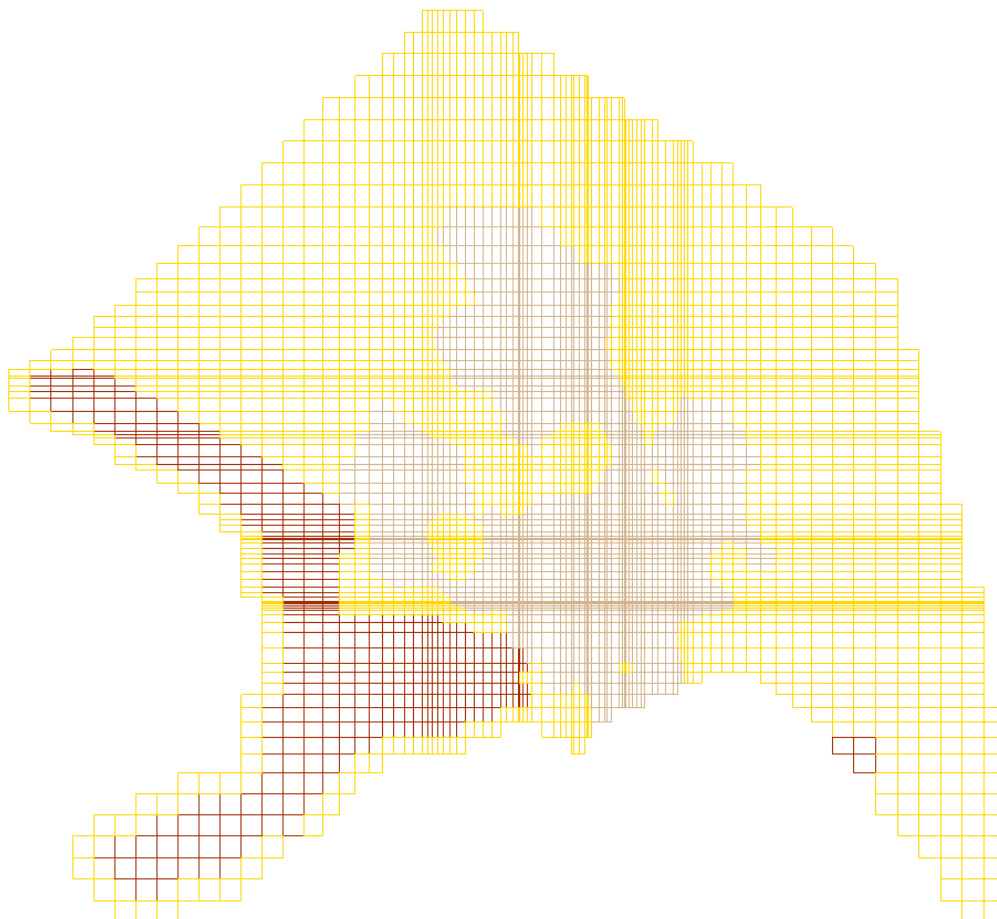
A geometria do modelo é centrada na célula a sua grade foi definida com as características listadas a seguir:

- Comprimento inicial do modelo:  $x = 390$  m e  $y = 338$  m.
- Número de células:  $i = 108$ ,  $j = 127$  e  $k = 10$  (camadas).
- Tamanho em planta da célula base igual a 10 m x 10 m.
- Refinamento na porção central da malha, em poços selecionados, localizados no possível caminho da pluma de clorobenzeno, com tamanho da célula igual a 2

m x 2 m em planta, para obter maior precisão do modelo numérico nas áreas mais críticas.

A Figura 14 apresenta a disposição da grade do modelo numérico em planta.

Figura 14 - Disposição da grade do modelo numérico em planta.



Fonte: elaborado pelo Autor.

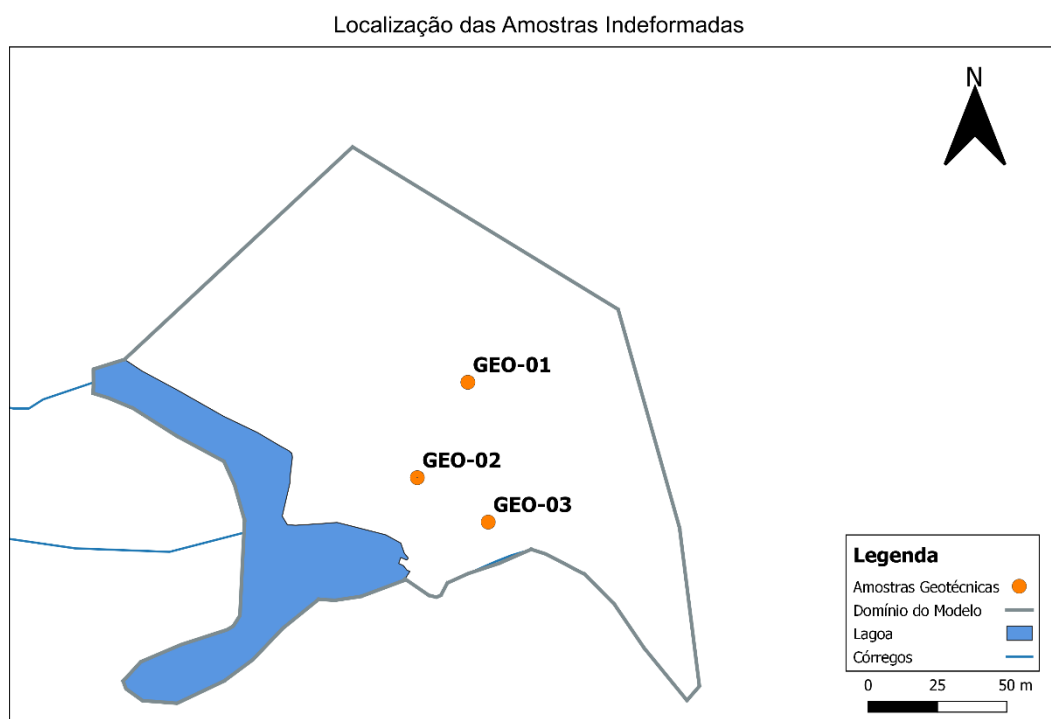
## 6.2. Parametrização das propriedades do meio físico e do contaminante embasar o Modelo de Transporte

Para construir um modelo numérico de transporte de contaminantes, o modelo numérico de fluxo subterrâneo precisa necessariamente estar concluído para servir como base para esse segundo. Como as etapas de calibração, ajuste e teste/simulação do modelo numérico de fluxo não fazem parte do escopo dessa monografia, o modelo numérico de transporte não pôde ser elaborado no ambiente do software GMS. Todavia, os principais fenômenos que governam o transporte de soluto em meio poroso, com os respectivos parâmetros físico-químicos e seus

valores adotados especificamente para o clorobenzeno na Área de Estudo, que compõem o Modelo Conceitual apresentado nessa monografia, são discutidos a seguir.

Dentre esses parâmetros, aqueles que possuem caráter geotécnico foram obtidos através de ensaios laboratoriais de 3 amostras indeformadas coletadas na Área de Estudo, cujos locais de amostragem são apresentados na Figura 15. Os valores dos parâmetros obtidos nos ensaios são apresentados na Tabela 1 do Apêndice 1.

Figura 15 - Localização das amostras indeformadas submetidas a ensaios geotécnicos.



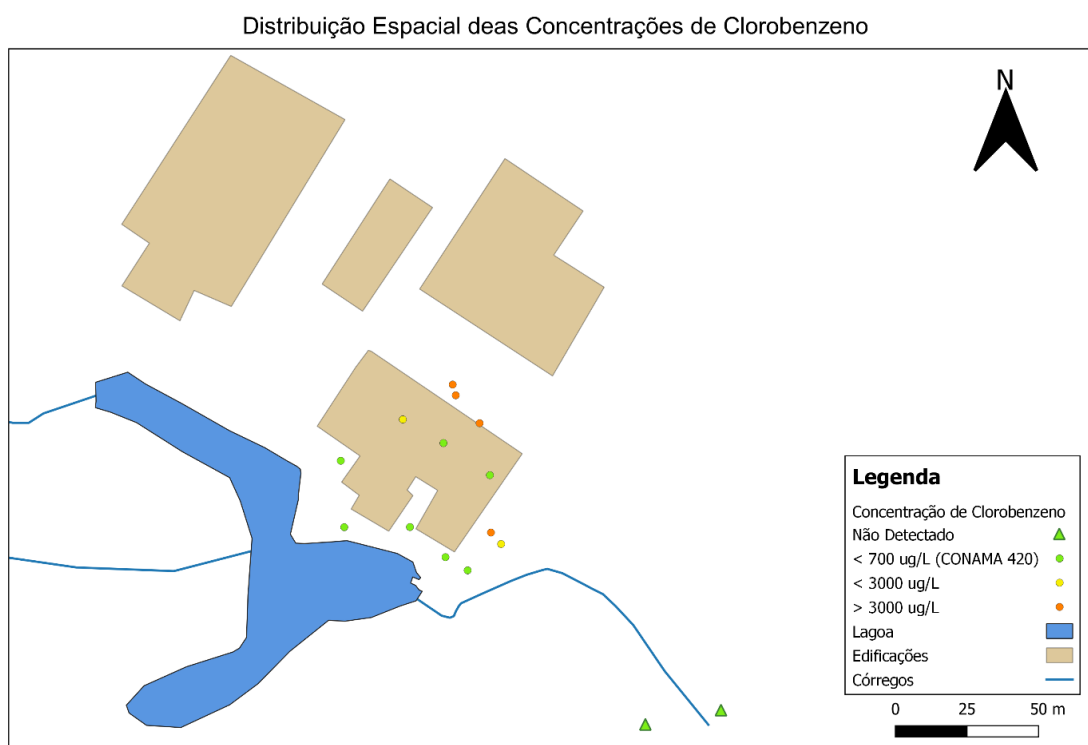
Fonte: elaborado pelo Autor.

O fornecimento da condição inicial da distribuição da contaminação é uma etapa necessária para a construção de um modelo numérico de transporte, ou seja, informar qual é a concentração de clorobenzeno em cada célula do domínio. As dimensões da pluma de clorobenzeno no plano horizontal foram representadas pela elipse laranja na Figura 16 com base nas concentrações amostradas em junho de 2021 nos poços de monitoramento do aquífero raso, cuja profundidade varia de 5 a 7 metros. Clorobenzeno já foi detectado em campanhas de monitoramento anteriores em poços mais antigos, com profundidade de 8 metros em concentração acima do valor de referência da Resolução CONAMA nº 420/2009 de 700 µg/L. Em poços com profundidade de 9 metros foram observadas não detecções alternadas com detecções pontuais, com concentrações abaixo de 12 µg/L. O clorobenzeno nunca foi detectado

nos poços profundos, cujo profundida alcança 56 metros ou mais. Portanto, a distribuição espacial da contaminação de clorobenzeno foi admitida como limitada à camada superficial do aquífero, ou seja, sua porção mais rasa.

Logo, a fim de fornecer a condição inicial de distribuição de concentração de clorobenzeno na parametrização do modelo conceitual de transporte, é razoável assumir a distribuição no plano horizontal conforme a representação da Figura 16 e um alcance da pluma de maneira conservadora até a camada correspondente a profundidade de 9 metros.

Figura 16- Representação da distribuição de clorobenzeno no plano horizontal com base no monitoramento realizado em junho de 2021.



Fonte: elaborado pelo Autor.

### 6.2.1. Fluxo advectivo

Uma vez que o modelo numérico de fluxo de acordo com a configuração inicial de parâmetros conforme o modelo conceitual apresentado estiver calibrado e ajustado, os valores de fluxo de Darcy para todos os pontos do domínio serão conhecidos. A partir daí, velocidade do fluxo advectivo da massa de contaminantes é obtido pela divisão do fluxo de Darcy pela porosidade efetiva do meio geológico ( $n_e$ ).

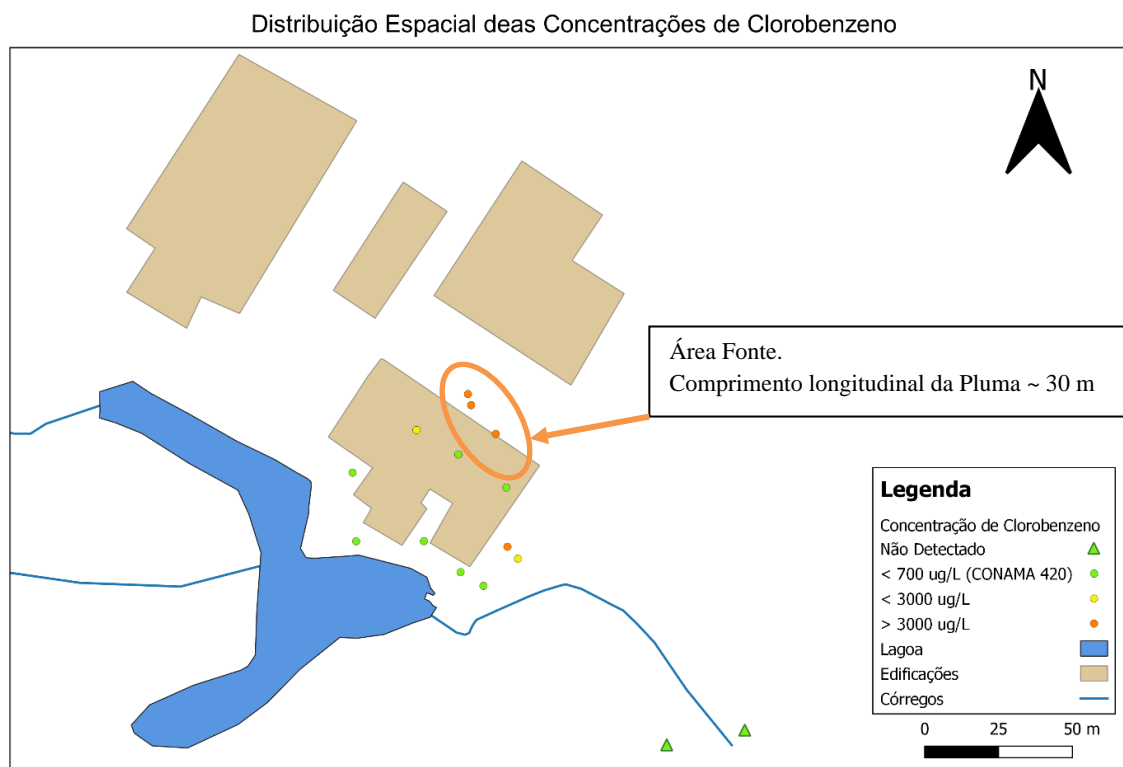
A porosidade efetiva foi obtida através de análise geotécnica realizada em laboratório comercial de três amostras de solo indeformadas coletadas na Área de Estudo. Nesse modelo conceitual foi definida a utilização da média geométrica da porosidade efetiva igual a 3,3% para todo o domínio.

### 6.2.2. Dispersão Mecânica

O fenômeno da dispersão mecânica é governado por aspectos físicos do meio geológico poroso como a heterogeneidade da condutividade hidráulica em maior escala e do tamanho de abertura dos poros, diferenças na tortuosidade dos caminhos pelos quais a frente da pluma flui e a fricção do escoamento na parede dos poros em menor escala. Esse fenômeno é representado pela Lei de Fick e a dispersão do contaminante é influenciada pela escala da pluma de contaminação, representada pela sua extensão longitudinal.

O comprimento longitudinal da pluma na área fonte, ou seja, na direção do sentido preferencial do fluxo, foi adotada como 30 m a partir da ferramenta de medição de distâncias em Sistema de Informação Geográfica, como apresentado na Figura 17.

Figura 17 - Localização da pluma na área fonte com destaque para o comprimento aproximado de sua extensão no sentido longitudinal do fluxo.



Fonte: elaborado pelo Autor.

A dispersividade longitudinal foi obtida através da equação abaixo, apresentada por Xu & Eckstein (1995).

$$\alpha_L = 0,83 (\log_{10} L)^{2.414}$$

Onde:

- $\alpha_L$ : Dispersividade longitudinal
- L: extensão da pluma de contaminação

A dispersividade transversal ao sentido do fluxo preferencial é significativamente menor que a dispersividade horizontal (KRESIC, 2006). Nesse caso, a dispersividade transversal horizontal foi adotada como 0,1  $\alpha_L$  e a dispersividade transversal vertical como 0,05  $\alpha_L$ . Os valores definidos são apresentados na Tabela 4.

Tabela 4 - Valores de dispersividade adotados no modelo conceitual

| Parâmetro                             | Valor adotado (m) |
|---------------------------------------|-------------------|
| Dispersividade longitudinal           | 2,128             |
| Dispersividade transversal horizontal | 0,213             |
| Dispersividade transversal vertical   | 0,106             |

Fonte: elaborado pelo Autor.

### 6.2.3. Retenção no solo pelo efeito da sorção

A sorção é um fenômeno físico-químico de captura temporária de partículas de soluto na superfície das partículas do solo e é dependente das características do aquífero e do contaminante em questão, o que influencia diretamente no transporte de solutos em meio poroso e causa um “retardo” no avanço da pluma.

Considerando que os compostos orgânicos sorvem essencialmente no carbono orgânico presente no solo, os parâmetros necessários para descrever esse fenômeno são definidos a seguir:

- Coeficiente de partição octanol/água do clorobenzeno é igual à 691,83 ( $\log K_{ow} = 2.84$ ).<sup>6</sup>

<sup>6</sup>Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/7964#section=LogP>

- Área superficial específica (ASE) do solo se relaciona a sua textura granulométrica. Uma relação da ASE em função do diâmetro dos agregados foi proposta por Bauer (1992 apud. ARAÚJO *et al*, 2003) conforme apresentado na Figura 18. De acordo com as análises granulométricas realizadas em três amostras de solo coletadas na Área de Estudo, a maior parte dos grãos (entre 65 e 80%) situa-se entre os intervalos de fração 40-80  $\mu\text{m}$  e 0,6-1,2 mm (destacadas na Figura 18). Portanto, adotou-se um valor intermediário de área específica para a Área de Estudo igual 20  $\text{m}^2/\text{kg}$ .

Figura 18 - Áreas específicas em função do diâmetro dos agregados.

| Fração                | Área específica, $A_M$ , ( $\text{m}^2/\text{kg}$ ) |
|-----------------------|---|
| 10 – 20 $\mu\text{m}$ | 158,7   |
| 40 – 80 $\mu\text{m}$ | 39,6  |
| 0,6 – 1,2 mm          | 2,8   |
| 2,4 – 4,8 mm          | 0,7   |
| 38 – 76 mm            | 0,1   |

Fonte: Bauer (1992)

- Fração de carbono orgânico do solo ( $f_{oc}$ ) foi obtida através de análises laboratoriais. A  $f_{oc}$  adotada nesse modelo conceitual corresponde à média geométrica das três amostras de solo analisadas, cujo valor é 0,056.
- Fração de carbono orgânico crítica do solo ( $f_{oc}^*$ ) é obtida através da equação abaixo, com resultado igual a  $4,12 \times 10^{-7}$ .

$$f_{oc}^* = \frac{ASE}{200 (K_{ow})^{0,84}}$$

- O coeficiente de participação água/carbono orgânico ( $K_{oc}$ ) foi obtido a partir da equação proposta por Schwarzenbach & Westall (1981) para hidrocarbonetos clorados, apresentada abaixo, resultado em um valor de 342,61 mL/g. Esse valor é coerente com o  $K_{oc}$  reportado por Pankow & Cherry (1996, Tabela A1 do Apêndice A) de 330 mL/g.

$$\log K_{oc} = 0,49 + 0,72 \log K_{ow}$$

- Considerando que o a fração de carbono orgânico medido do solo é  $10^5$  ordens de magnitude maior que a fração de carbono orgânico crítica ( $f_{oc} \gg f_{oc}^*$ ), o

coeficiente de partição do clorobenzeno ( $K_d$ ) pode então ser obtido pela aproximação representada pela equação a seguir, resultando em um valor de 1,92 mL/g.

$$K_d = K_{oc} \times f_{oc}$$

- Portanto, o coeficiente de retardação ( $R$ ), utilizado para representar o efeito da sorção no transporte do clorobenzeno nesse modelo conceitual, foi obtido pela equação apresentada a seguir ao adotar a premissa de que o coeficiente segue uma isoterma linear, resultando em um valor igual a 86,3. Ou seja, o fenômeno da sorção é responsável por um retardo de aproximadamente 86 vezes na velocidade da pluma em comparação com a velocidade puramente advectiva.

$$R = 1 + \frac{\rho_e}{n_e} K_d$$

Em que  $\rho_e$  e  $n_e$  são, respectivamente, a densidade aparente e a porosidade efetiva do solo, obtidas através da média geométrica dos resultados das análises de três amostras indeformadas coletadas na Área de Estudo.

Os parâmetros definidos para representar o fenômeno de sorção foram sumarizados na Tabela 5.

Tabela 5 - Sumário de parâmetros representativos do fenômeno de sorção.

| Parâmetro   | Símbolo           | Valor                  | Unidade            | Fonte   |
|---|-------------------|------------------------|--------------------|---|
| Área superficial específica do solo na Área de Estudo         | ASE               | 20                     | m <sup>2</sup> /kg | Assumida pelo autor com base nos intervalos reportados por Bauer (1992) e nas frações texturais predominantes da área, obtidas através de análise granulométrica. |
| Coeficiente de partição octanol/água do clorobenzeno          | K <sub>ow</sub>   | 691,83                 | Adimensional       | Valor reportado no banco de dados Pubchem   |
| Fração de carbono orgânico crítico do solo                    | f <sub>oc</sub> * | 4,12x10 <sup>-07</sup> | Adimensional       | Calculado pelo autor por meio da equação proposta por Schwarzenbach& Westall (1981) para hidrocarbonetos clorados.  |
| Fração de carbono orgânico do solo                            | f <sub>oc</sub>   | 0,0056                 | Adimensional       | Dado obtido através de ensaios geotécnicos de amostras coletadas na Área de Estudo  |
| Coeficiente de partição água/carbono orgânico do clorobenzeno | K <sub>oc</sub>   | 342,61                 | mL/g               | Calculado pelo autor por meio da equação proposta por Schwarzenbach& Westall (1981) para hidrocarbonetos clorados.  |
| Coeficiente de partição do clorobenzeno                       | K <sub>d</sub>    | 1,92                   | mL/g               | Calculado pelo autor  |
| Densidade aparente do solo                                    | ρ <sub>e</sub>    | 1,47                   | g/cm <sup>3</sup>  | Dado obtido através de ensaios geotécnicos de amostras coletadas na Área de Estudo  |
| Porosidade efetiva do solo                                    | n <sub>e</sub>    | 3,30                   | %                  | Dado obtido através de ensaios geotécnicos de amostras coletadas na Área de Estudo  |
| Coeficiente de retardação do clorobenzeno na Área de Estudo   | R                 | 86,3                   | Adimensional       | Calculado pelo autor  |

Fonte: elaborado pelo Autor.



#### 6.2.4. Atenuação natural/decaimento

A degradação é um fenômeno importante para o transporte de solutos, que implica na redução da massa do contaminante no meio poroso, pois envolve a transformação ou destruição das substâncias químicas de interesse através de processos abióticos e/ou biológicos, esse último, intermediado por microrganismos.

A taxa de degradação do clorobenzeno no aquífero, para ser inicialmente utilizada no modelo, foi obtida através da observação da série de monitoramento da concentração. A série de dados apresenta oscilações na concentração de clorobenzeno. Porém, dois poços localizados na área fonte apresentam uma tendência de redução a partir de maio de 2020 e setembro de 2020. Portanto, a taxa de degradação para esses dois poços e períodos mencionados, foi calculada através da equação de decaimento de primeira ordem, representada como:

$$C(t) = C(t_0)e^{-\lambda(t-t_0)}$$

Em que:

- $C(t)$  é a concentração final, mais recente;
- $C(t_0)$  é a concentração inicial do período avaliado;
- $e$  é o número de Euler;
- $\lambda$  é a taxa de degradação do clorobenzeno calculada para a Área de Estudo;
- $t$  é a data final, mais recente; e
- $t_0$  é a data inicial do período avaliado.

Um dos poços apresentou uma taxa de degradação igual a  $0,005 \text{ d}^{-1}$ , enquanto o outro apresentou um valor de  $0,003 \text{ d}^{-1}$ . Assim, definiu-se a média como sendo a taxa de degradação do clorobenzeno a ser utilizada inicialmente nesse modelo conceitual, cujo valor é igual a  $0,004 \text{ d}^{-1}$ . Ressalta-se que o decréscimo da concentração de clorobenzeno observada nesses poços não ocorreu exclusivamente devido aos processos de degradação, e também pode ser em parte atribuído ao próprio movimento advectivo e dispersivo da pluma de contaminação. Portanto, o valor de  $0,004 \text{ d}^{-1}$  foi configurado no modelo numérico como um valor máximo possível para a taxa de degradação real. A ferramenta Planilha de Avaliação de Risco da CETESB reporta, com base no *Handbook of Environmental Degradation Rates* (HOWARD *et al.*, 1991), que o

tempo de meia vida do clorobenzeno é igual a  $8,22 \times 10^{-1}$ . Considerando que a taxa de degradação é igual à  $\ln$  de 2 dividido pelo tempo de meia vida, esse tempo reportado pela CETESB equivale à uma taxa de degradação igual a  $0,0023 \text{ d}^{-1}$ . Um valor mais representativo dos processos de degradação propriamente dito poderá ser aferido durante um futuro esforço de calibração do modelo.

#### 6.2.5. Difusão Molecular

A difusão é o fenômeno em que as moléculas e íons movem-se em meio aquoso de uma parte com maior concentração para a menor concentração. Esse fenômeno de transporte é especialmente importante para escoamento em rochas fraturadas de matriz porosa ou depósitos de argila. Por ser considerado um fenômeno com consequências para o transporte do soluto pequenas em relação aos demais fenômenos apresentados para esse caso em estudo, o efeito da difusão foi desprezado nesse modelo conceitual.

#### 6.2.6. Características da Fonte de Contaminação

O modelo numérico de transporte também exige que as informações sobre a localização, área, intensidade de contribuição da fonte e evolução temporal sejam fornecidas. Para o Modelo Conceitual em tela, considerou-se a fonte como cessada, haja visto que a fonte foi removida e as atividades de remediação foram implementadas ao longo do histórico de gerenciamento da área.

Adicionalmente, apesar do modelo numérico de fluxo ser estacionário, o modelo de transporte é necessariamente transiente, considerando que as concentrações do contaminante irão alterar em cada célula do domínio ao longo do tempo, à medida que os fenômenos de transporte são simulados. Logo, é necessário fornecer a concentração do soluto no tempo inicial de simulação,  $t=0$ . Para tanto, adotou-se nesse modelo conceitual, a interpolação das medidas de concentração mais recentes (junho de 2021) apresentadas na Figura 17 para a camada superficial do aquífero. As concentrações de clorobenzeno na camada subsuperficial do aquífero até a base do domínio foi definida como nula em  $t=0$ , visto que não foram detectadas concentrações dessa substância nos poços de monitoramento do aquífero profundo.

### 6.3.Considerações sobre as incertezas do modelo conceitual

A heterogeneidade é uma característica intrínseca do meio ambiente. A melhor forma de adotar valores de parâmetros do modelo para uma área específica é obtê-los em campo por meio de um programa de amostragem, como foi realizado para as propriedades geotécnicas do solo, de condutividade e carga hidráulica e concentrações. No entanto, mesmo aqueles parâmetros cujo valor foi medido através de técnicas de investigação ambiental e analíticas guardam uma incerteza em maior ou menor grau associada às heterogeneidades intrínsecas do solo em macro e microescala.

Outra fonte de incertezas para o modelo numérico são valores de parâmetros e conhecimentos importados de outras pesquisas empíricas e áreas, como a espessura do aquífero ou a taxa de recarga por exemplo; ou valores obtidos pontualmente, não baseados em uma série temporal ou conjunto amostral mais robusto que inclua variações sazonais, como foi o caso da carga hidráulica adotada para o aquífero profundo.

Apesar dos valores de parâmetros geotécnicos, como porosidade efetiva, densidade dos sólidos e fração de carbono orgânico, terem sido obtidos a partir de ensaios tecnicamente confiáveis e representativos em amostras indeformadas coletadas na Área de Estudo, não foram coletadas amostras em todas as camadas hidroestratigráficas que compõem o domínio. Esse fato também contribui para a incerteza relacionado à heterogeneidade intrínseca do meio físico.

Apesar do esforço para buscar sempre parâmetros obtidos em situações que guardem semelhança e representatividade com o caso em estudo, cada ambiente é único e possui suas heterogeneidades.

Existem outros contaminantes conhecidos presentes no aquífero na Área de Estudo. No entanto, devido a maior preocupação, esse trabalho teve como foco o clorobenzeno. A presença de mais de um contaminante também apresenta uma fonte de incerteza devido à possibilidade de interferência nos processos de transporte mútuos. Por exemplo, diferentes contaminantes podem “competir” pelos mesmos sítios de sorção na matriz sólida do aquífero. Em termos de biodegradação, o conjunto de contaminantes também pode compartilhar os receptores/doadores de elétrons ou conjunto de microrganismos catalisadores das reações bioquímicas. A taxa de degradação/decaimento do clorobenzeno na Área de Estudo foi estimada a partir das concentrações observadas em campo, o que tende a reduzir a incerteza do valor da taxa devido à coexistência de contaminantes. A análise da coexistência de diferentes contaminantes no

aquífero e como a presença de um influencia no transporte de outro não foi avaliada nessa monografia.

## 7. CONCLUSÃO

Para construção de um Modelo Conceitual capaz de embasar o desenvolvimento de um modelo numérico de fluxo e transporte, dados obtidos a partir de diferentes técnicas de investigação ambiental executadas na Área de Estudo foram interpretados, como sondagens geotécnicas, levantamentos topográficos, séries históricas de monitoramento de carga hidráulica e concentração de clorobenzeno, condução de ensaios de condutividade do aquífero e ensaios geotécnicos em amostras de solo.

Os dados e premissas adicionais necessários para elaboração do Modelo Conceitual foram obtidos através de pesquisa bibliográfica de outros estudos realizados, preferencialmente próximos à Área de Estudo. As incertezas intrínsecas dos levantamentos de dados e adoção de premissas, como a representatividade da heterogeneidade do meio físico e influência de outros contaminantes presentes, foram abordadas ao longo do texto.

Os materiais geológicos e sua espessura foram definidos a partir de perfis litológicos de sondagens realizadas na área e dados encontrados na literatura científica. A geologia encontra-se inteiramente na Formação Piramboia e foi dividida no modelo numérico em 3 camadas litológicas com características distintas, sendo a primeira composta por um aterro superficial e sedimentos aluvionares, a segundo composta por solo de alteração de rocha sedimentar e a terceira por arenito. A base do domínio está localizada sob a Formação Rio do Rasto, um aquitarde cuja interface representa uma superfície de fluxo nulo. A condutividade hidráulica das camadas litológicas foi definida a partir da média geométrica de resultados de ensaios *slug test* ou encontradas na literatura científica.

A distribuição de cargas hidráulicas na porção superior do domínio (parte mais rasa do aquífero) foi determinada a partir da série histórica de monitoramento de poços rasos instalados na área, do monitoramento do NA do córrego e do lago. O lago funciona como uma barreira hidráulica de NA controlado e constante, e o sentido preferencial do fluxo subterrâneo ocorre no sentido Sudeste, direcionado para o córrego, que é o principal receptor local das águas de descarga do aquífero (rio efluente, recebe contribuição de água do subsolo e aumentam sua vazão em direção à jusante). A distribuição de cargas hidráulicas na porção inferior do domínio (parte profunda do aquífero) foi adotada com base em cotas potenciométricas observadas em

poços tubulares profundos registrados no banco de dados do SIAGAS e no sentido preferencial de fluxo esperado para a região e documentado na literatura científica.

Com o Modelo Conceitual definido, os parâmetros hidrogeológicos foram traduzidos para um modelo numérico tridimensional e estacionário no sistema MODFLOW através da interface gráfica do software de modelagem ambiental Groundwater Modeling System (GMS), incluindo as características dos materiais geológicos que ocorrem na região, características dos corpos hídricos superficiais e sua interação com o aquífero, taxas de recarga e evapotranspiração.

Adicionalmente, foi realizada a parametrização do modelo conceitual de transporte de clorobenzeno, considerando as características específicas da Área de Estudo, para descrever os fenômenos que governam o transporte, sendo eles: advecção, dispersão, sorção e degradação/decaimento. Para tal, foram utilizados dados obtidos através de ensaios geotécnicos conduzidos em amostras indeformadas da Área de Estudo, o que permitiu conhecer características como a densidade aparente, porosidade efetiva, distribuição granulométrica e fração de carbono orgânico do solo. A taxa de degradação do clorobenzeno foi definida a partir de uma análise das concentrações observadas nos poços de monitoramento ao longo do tempo. Outros dados relevantes sobre as propriedades do clorobenzeno, como o coeficiente de partição, foram levantados através da literatura científica.

O desenvolvimento do Modelo Conceitual discutido e o modelo numérico preliminar construído no GMS fornecem uma base para a formulação de um modelo de previsão completo, que uma vez concluídas todas as etapas do processo de Modelagem Matemática, poderá ser utilizado para responder à pergunta inicial: se e quando a pluma de contaminação de clorobenzeno poderá atingir o receptor ecológico localizado à jusante.

Como atividades adicionais para o prosseguimento desta pesquisa, recomenda-se a continuidade das etapas reportadas no fluxograma de modelagem ambiental, desenvolvimento das etapas de calibração e ajuste dos parâmetros do modelo numérico, execução da simulação de previsão do transporte, análise de sensibilidade e elaboração de um relatório completo para documentação do processo de modelagem, permitindo sua rastreabilidade. Como o modelo conceitual é uma ferramenta viva, os resultados do modelo numérico poderão ser comparados com dados empíricos coletados em campo no futuro de forma a permitir sua atualização e aprimoramento.

## 8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGENCY FOR TOXIC SUBSTANCES AND DISEASE REGISTRY. **Toxicological Profile for Chlorobenzene.** Outubro de 2020. Disponível em: <https://www.atsdr.cdc.gov/toxprofiles/tp131.pdf>

ALBERTO, Marcio Costa; KIANG, CHANG Hung. **Fluxo da água subterrânea em sistema de encosta-rio, município de Paulínia (SP): caracterização hidrogeológica e simulação numérica.** Geociências, Rio Claro/SP, 2005.

ANDERSON, Mary P.; WOESSNER, William W.; HUNT, Randall J. **Applied groundwater modeling: simulation of flow and advective transport.** Academic press, 2015.

ARAÚJO, Georgia Serafim; BICALHO, Kátia Vanessa; TRISTÃO, Fernando Avancini. **Determinação da área específica das areias através da análise de imagens.** 2003.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **Poços de monitoramento de águas subterrâneas em aquíferos granulares – Parte 1: Projeto e construção.** Rio de Janeiro, RJ. 2007.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **Poços de monitoramento de águas subterrâneas em aquíferos granulares – Parte 2: Desenvolvimento.** Rio de Janeiro, RJ. 2008.

BAUER, L. A. Falcão. **Materiais para construção.** Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora, 1992

BEAR, Jacob; CHENG, Alexander H.-D. **Modeling groundwater flow and contaminant transport.** New York: Springer, 2010.

BEZERRA, J.E.; SOUZA, N.M; ASSIS, A.P. **Implementação numérica do método IDW para interpolação de dados georeferenciados de ensaios SPT via Planilhas Eletrônicas.** VI INFOGEO – VI INFOGEO – Co-evento – II Geocentro, Brasília. 2011.

BREDEHOEFT, John. The conceptualization model problem—surprise. **Hydrogeology journal**, v. 13, n. 1, p. 37-46, 2005.

COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL. **Decisão de Diretoria Nº 038/2017/C.** São Paulo. 2017. Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/wp-content/uploads/2014/12/DD-038-2017-C.pdf>

COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL. **Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas.** 2.ed. São Paulo. 2001. Disponível em: <https://edisciplinas.usp.br/mod/resource/view.php?id=3096371>

COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL. **Ficha de Informação Toxicológica do Clorobenzeno (mono), 1,2-diclorobenzeno, 1,3-diclorobenzeno e 1,4-diclorobenzeno.** Divisão de Toxicologia Humana e Saúde Ambiental. Atualizado em maio de 2021. Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/laboratorios/wp-content/uploads/sites/24/2018/05/Clorobenzenos.pdf>

COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL. **Manual de gerenciamento de áreas contaminadas.** 2ª Edição. São Paulo. 2001. Disponível em:

<https://cetesb.sp.gov.br/areas-contaminadas/documentacao/manual-de-gerenciamento-de-areas-contaminadas/informacoes-gerais/apresentacao/>

COSTANZO, Caetano Pontes et al. Modelagem geoestatística hidrogeológica para simulação numérica de fluxo e transporte de contaminantes. **Águas Subterrâneas**, 2013.

DE CARVALHO, Ana Maciel et al. Determinação da condutividade hidráulica de uma área contaminada da grande São Paulo utilizando-se método Slug Test. **Águas Subterrâneas**, v. 27, n. 3, 2013.

FANDIÑO, Jonathan Steven Murcia; NAGALLI, Andre; MORO FILHO, Roberto Carlos. Modeling of the dispersion of pollutants in porous media: Case of a landfill in Brazil. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, 2020.

FEPAGRO. **Atlas Climático do Rio Grande do Sul**. Rio Grande do Sul. 2011. Disponível em: <https://www.agricultura.rs.gov.br/upload/arquivos/202005/13110034-atlas-climatico-rs.pdf>

FERRARI, Luiz Carlos Kauffman Marasco. **Modelagem tridimensional de fluxo de águas subterrâneas em um aquífero livre e raso: aplicação no Parque Ecológico do Tietê-São Paulo**. 2006. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

GONÇALVES, Laila Garcia Maia; VELÁSQUEZ, Leila Nunes Menegasse. Modelagem hidrogeológica de fluxo e transporte advectivo na Bacia do Engenho Nogueira, Campus Pampulha da UFMG, Belo Horizonte, MG. **Águas Subterrâneas**, v. 30, n. 2, p. 269-288, 2016.

GUPTA, Hoshin V. et al. Towards a comprehensive assessment of model structural adequacy. **Water Resources Research**, v. 48, n. 8, 2012.

HEINE, Carlos Alvin. **Análise de sustentabilidade de uso do sistema Aquífero Guarani em Ivoti-RS**. Universidade do Vale do Rio dos Sinos. São Leopoldo, RS. 2008.

HILL, Mary C.; TIEDEMAN, Claire R. **Effective groundwater model calibration with analysis of data, sensitivities, and uncertainty**. 2007.

JONES, Norman L., 2014. **GMS v10.0 Reference Manual**. Aquaveo, Brigham Young University, Provo, Utah, 662 p.

KRESIC, Neven. **Hydrogeology and groundwater modeling**. CRC press, 2006.

MACHADO, José Luiz Flores. **Compartimentação espacial e arcabouço hidroestratigráfico do sistema aquífero Guarani no Rio Grande do Sul**. 2005. Disponível em: <https://rigeo.cprm.gov.br/handle/doc/142>

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

PANKOW, James F.; CHERRY, John A. **Dense chlorinated solvents and other DNAPLs in groundwater: History, behavior, and remediation**. 1996.

PRÓ-SINOS. **Plano de Gerenciamento da Bacia Hidrográfica do Rio dos Sinos**. Prosinos: Consórcio Público de Saneamento básico da Bacia Hidrográfica do Rio dos Sinos, 2011. Disponível em: <https://www.consorcioprosinos.com.br/publicacoes-legais/acervo-bibliografico/plano-de-bacia>

RAFFENSPERGER, Jeff P.; VORONIN, Lois M.; DIETER, Cheryl A. **Simulation of groundwater flow in the aquifer system of the Anacostia River and surrounding watersheds, Washington, DC, Maryland, and Virginia**. US Geological Survey, 2021.

ROCHA, Gerônimo Albuquerque. O grande manancial do Cone Sul. **Estudos Avançados**, v. 11, p. 191-212, 1997.

SERAPHIM, Ana Paula Albuquerque Campos Costalonga. **Relações entre as áreas de recarga dos aquíferos e áreas destinadas a urbanização: estudo dos padrões de ocupação do solo da unidade hidrográfica do Paranoá-DF**. 2018.

SERVIÇO GEOLÓGICO BRASILEIRO. **Carta geológica da folha Porto Alegre**. 2004. Disponível em: <https://geoportal.cprm.gov.br/geosgb/>

SOUSA, Mauro César de Brito et al. Modelagem do fluxo de contaminantes em aquífero freático na área do cemitério Bom Jardim, Fortaleza, CE, Brasil. **Revista Ambiente & Água**, v. 7, p. 163-178, 2012.

SUN, Ne-Zheng. **Mathematical modeling of groundwater pollution**. Springer Science & Business Media, 1ª ed. Beijing, China. 1996.

UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. **Chlorobenzene – Health and Environmental Effects**. Washington, DC. Abril de 1980. Disponível em: <https://nepis.epa.gov/Exe/ZyPURL.cgi?Dockey=9101410X.txt>

UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. **Ecological Screening Levels**. EPA, Region V, Chicago – IL, 2003. Disponível em: [https://rais.ornl.gov/documents/EPA\\_R5\\_ESL.pdf](https://rais.ornl.gov/documents/EPA_R5_ESL.pdf)

WOJAHN, Daniel. **Parâmetros hidrogeológicos do Sistema Aquífero Guarani na sub-bacia do Arroio Portão/RS**. Universidade do Vale do Rio dos Sinos. São Leopoldo, RS. 2011.

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.

ZHENG, Chunmiao et al. **Applied contaminant transport modeling**. New York: Wiley-Interscience, 2002.



# Apêndice 1 - Tabelas

Tabela 1 - Parâmetros geotécnicos obtidos em amostras coletadas na Área de Estudo utilizados para elaboração do modelo conceitual.

| Ponto  | Profundidade (m) | Porosidade efetiva % | Densidade aparente (g/cm3) | Areia muito grossa (2,00 - 1,00mm) | Areia grossa (1,00 - 0,50 mm) | Areia média (0,50 - 0,25 mm) | Areia fina (0,25 - 0,125 mm) | Areia muito fina (0,125 - 0,062 mm) | Areia total (2,00 - 0,062 mm) | Argila (0,00394 - 0,0002 mm) | Silte (0,062 - 0,00394 mm) | Carbono Orgânico Total (%p/p) | Porcentagem de sólidos (%p/p) | Fração de carbono orgânico (foc) |
|--------|------------------|----------------------|----------------------------|------------------------------------|-------------------------------|------------------------------|------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------|------------------------------|----------------------------|-------------------------------|-------------------------------|----------------------------------|
| GEO-01 | 1,3 a 1,9        | 3,50                 | 1,50                       | 5,10%                              | 16,40%                        | 28,70%                       | 21,00%                       | 7,80%                               | 79,00%                        | 11,20%                       | 9,80%                      | 0,02                          | 8,7                           | 0,002414                         |
| GEO-02 | 1,0 a 1,6        | 3,10                 | 1,40                       | 0,00%                              | 10,80%                        | 20,00%                       | 23,40%                       | 11,60%                              | 65,80%                        | 18,40%                       | 15,80%                     | 1,22                          | 74                            | 0,016486                         |
| GEO-03 | 2,0 a 2,6        | 3,30                 | 1,50                       | 0,00%                              | 0,00%                         | 0,40%                        | 46,30%                       | 32,80%                              | 79,50%                        | 6,70%                        | 13,80%                     | 0,36                          | 82,1                          | 0,004385                         |

Fonte: elaborado pelo Autor.

Tabela 2 - Carga hidráulica dos poços de monitoramento, córrego e lago utilizados para definição das condições de contorno para a camada superficial do domínio.

| Tipo    | Nome | Carga Hidráulica Média (m) | Confiança Assumida (%) | Desvio Padrão (calculado para Poços e assumido para córrego e lago) |
|---------|------|----------------------------|------------------------|---|
| Córrego | R1   | 34.56                      | 95                     | 0.51  |
| Córrego | R2   | 34.498                     | 95                     | 0.51  |
| Córrego | R3   | 34.436                     | 95                     | 0.51  |
| Córrego | R4   | 34.373                     | 95                     | 0.51  |
| Córrego | R5   | 34.311                     | 95                     | 0.51  |
| Córrego | R6   | 34.249                     | 95                     | 0.51  |
| Córrego | R7   | 34.187                     | 95                     | 0.51  |
| Córrego | R8   | 34.124                     | 95                     | 0.51  |

| <b>Tipo</b> | <b>Nome</b> | <b>Carga Hidráulica Média (m)</b> | <b>Confiança Assumida (%)</b> | <b>Desvio Padrão (calculado para Poços e assumido para córrego e lago)</b> |
|-------------|-------------|-----------------------------------|-------------------------------|--|
| Córrego     | R9          | 34.0622                           | 95                            | 0.51   |
| Córrego     | R10         | 34                                | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L1          | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L2          | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L3          | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L4          | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L5          | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L6          | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L7          | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L7          | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L8          | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L9          | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L10         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L11         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L12         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L13         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L14         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L15         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L16         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L17         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L18         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L19         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L20         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L21         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L23         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L24         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L25         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L26         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |

| <b>Tipo</b> | <b>Nome</b> | <b>Carga Hidráulica Média (m)</b> | <b>Confiança Assumida (%)</b> | <b>Desvio Padrão (calculado para Poços e assumido para córrego e lago)</b> |
|-------------|-------------|-----------------------------------|-------------------------------|--|
| Lago        | L27         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L28         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L29         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L30         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L31         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L32         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L33         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L34         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L35         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L36         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L37         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L38         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L39         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L40         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L41         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L42         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L44         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L45         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L46         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L47         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L48         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L50         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L51         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L52         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L53         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L54         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L55         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago        | L55         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |

| <b>Tipo</b>           | <b>Nome</b> | <b>Carga Hidráulica Média (m)</b> | <b>Confiança Assumida (%)</b> | <b>Desvio Padrão (calculado para Poços e assumido para córrego e lago)</b> |
|-----------------------|-------------|-----------------------------------|-------------------------------|--|
| Lago                  | L56         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago                  | L56         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago                  | L57         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Lago                  | L60         | 36.6                              | 95                            | 0.51   |
| Poço de Monitoramento | PM01        | 34.606                            | 95                            | 0.255497   |
| Poço de Monitoramento | PM02        | 35.263                            | 95                            | 0.46694  |
| Poço de Monitoramento | PM03        | 34.82045                          | 95                            | 0.149077   |
| Poço de Monitoramento | PM04        | 34.97874                          | 95                            | 0.268502   |
| Poço de Monitoramento | PM05        | 36.822                            | 95                            | 0.126174   |
| Poço de Monitoramento | PM06        | 36.72898                          | 95                            | 0.21543  |
| Poço de Monitoramento | PM07        | 36.06874                          | 95                            | 0.188864   |
| Poço de Monitoramento | PM08        | 36.65905                          | 95                            | 0.200166   |
| Poço de Monitoramento | PM09        | 37.03635                          | 95                            | 0.131677   |
| Poço de Monitoramento | PM10        | 37.62824                          | 95                            | 0.156758   |
| Poço de Monitoramento | PM11        | 37.16853                          | 95                            | 0.181175   |
| Poço de Monitoramento | PM12        | 37.1614                           | 95                            | 0.113918   |
| Poço de Monitoramento | PM13        | 36.91739                          | 95                            | 0.277753   |
| Poço de Monitoramento | PM14        | 36.64845                          | 95                            | 0.134402   |
| Poço de Monitoramento | PM15        | 36.08874                          | 95                            | 0.124329   |
| Poço de Monitoramento | PM16        | 35.18452                          | 95                            | 0.202003   |
| Poço de Monitoramento | PM17        | 35.19168                          | 95                            | 0.176604   |
| Poço de Monitoramento | PM18        | 35.33265                          | 95                            | 0.223564   |
| Poço de Monitoramento | PM19        | 35.70052                          | 95                            | 0.139733   |
| Poço de Monitoramento | PM20        | 35.73643                          | 95                            | 0.20324  |
| Poço de Monitoramento | PM21        | 35.90539                          | 95                            | 0.212573   |
| Poço de Monitoramento | PM22        | 36.23141                          | 95                            | 0.163083   |
| Poço de Monitoramento | PM23        | 36.58439                          | 95                            | 0.126863   |
| Poço de Monitoramento | PM24        | 36.00378                          | 95                            | 0.155845   |

| <b>Tipo</b>           | <b>Nome</b> | <b>Carga Hidráulica Média (m)</b> | <b>Confiança Assumida (%)</b> | <b>Desvio Padrão (calculado para Poços e assumido para córrego e lago)</b> |
|-----------------------|-------------|-----------------------------------|-------------------------------|--|
| Poço de Monitoramento | PM25        | 36.7137                           | 95                            | 0.116015   |
| Poço de Monitoramento | PM26        | 36.71435                          | 95                            | 0.199392   |
| Poço de Monitoramento | PM27        | 36.58211                          | 95                            | 0.257186   |
| Poço de Monitoramento | PM28        | 36.85826                          | 95                            | 0.173235   |
| Poço de Monitoramento | PM29        | 36.8977                           | 95                            | 0.153342   |
| Poço de Monitoramento | PM30        | 36.93783                          | 95                            | 0.110512   |
| Poço de Monitoramento | PM31        | 36.236                            | 95                            | 0.070065   |
| Poço de Monitoramento | PM32        | 36.00722                          | 95                            | 0.090877   |
| Poço de Monitoramento | PM33        | 35.82656                          | 95                            | 0.077576   |
| Poço de Monitoramento | PM34        | 35.62444                          | 95                            | 0.192556   |
| Poço de Monitoramento | PM35        | 35.51452                          | 95                            | 0.191  |
| Poço de Monitoramento | PM36        | 35.01768                          | 95                            | 0.151665   |
| Poço de Monitoramento | PM37        | 35.23826                          | 95                            | 0.120075   |
| Poço de Monitoramento | PM38        | 36.30774                          | 95                            | 0.09868  |
| Poço de Monitoramento | PM39        | 36.26928                          | 95                            | 0.118269   |
| Poço de Monitoramento | PM40        | 36.65706                          | 95                            | 0.216425   |
| Poço de Monitoramento | PM41        | 37.08947                          | 95                            | 0.084244   |
| Poço de Monitoramento | PM42        | 37.13819                          | 95                            | 0.131453   |
| Poço de Monitoramento | PM43        | 36.51257                          | 95                            | 0.39663  |
| Poço de Monitoramento | PM44        | 36.53633                          | 95                            | 0.208484   |
| Poço de Monitoramento | PM45        | 37.20484                          | 95                            | 0.11766  |
| Poço de Monitoramento | PM46        | 36.7331                           | 95                            | 0.10762  |
| Poço de Monitoramento | PM47        | 36.65952                          | 95                            | 0.082522   |
| Poço de Monitoramento | PM48        | 36.46921                          | 95                            | 0.060127   |
| Poço de Monitoramento | PM49        | 36.73913                          | 95                            | 0.301531   |
| Poço de Monitoramento | PM50        | 36.60129                          | 95                            | 0.418045   |
| Poço de Monitoramento | PM51        | 36.85133                          | 95                            | 0.412765   |
| Poço de Monitoramento | PM52        | 36.01382                          | 95                            | 0.191132   |

| <b>Tipo</b>           | <b>Nome</b> | <b>Carga Hidráulica Média (m)</b> | <b>Confiança Assumida (%)</b> | <b>Desvio Padrão (calculado para Poços e assumido para córrego e lago)</b> |
|-----------------------|-------------|-----------------------------------|-------------------------------|--|
| Poço de Monitoramento | PM53        | 36.06714                          | 95                            | 0.210057   |
| Poço de Monitoramento | PM54        | 36.27008                          | 95                            | 0.285151   |
| Poço de Monitoramento | PM55        | 36.37155                          | 95                            | 0.208596   |
| Poço de Monitoramento | PM56        | 36.325                            | 95                            | 0.356745   |
| Poço de Monitoramento | PM57        | 40.09533                          | 95                            | 0.437302   |
| Poço de Monitoramento | PM58        | 36.512                            | 95                            | 0.212436   |
| Poço de Monitoramento | PM59        | 34.872                            | 95                            | 0.218977   |
| Poço de Monitoramento | PM60        | 37.7995                           | 95                            | 0.461546   |
| Poço de Monitoramento | PM61        | 37.143                            | 95                            | 0.007071   |
| Poço de Monitoramento | PM62        | 36.936                            | 95                            | 0.014142   |
| Poço de Monitoramento | PM63        | 36.62442                          | 95                            | 0.235371   |
| Poço de Monitoramento | PM64        | 36.39955                          | 95                            | 0.418834   |
| Poço de Monitoramento | PM65        | 35.7535                           | 95                            | 0.621606   |
| Poço de Monitoramento | PM66        | 35.3663                           | 95                            | 0.391755   |
| Poço de Monitoramento | PM67        | 34.816                            | 95                            | 0.354935   |
| Poço de Monitoramento | PM68        | 34.76436                          | 95                            | 0.29339  |
| Poço de Monitoramento | PM69        | 36.41525                          | 95                            | 0.123339   |
| Poço de Monitoramento | PM70        | 36.45525                          | 95                            | 0.135271   |
| Poço de Monitoramento | PM71        | 36.29771                          | 95                            | 0.129693   |
| Poço de Monitoramento | PM72        | 36.29086                          | 95                            | 0.127275   |
| Poço de Monitoramento | PM73        | 35.4                              | 95                            | 1.732071   |
| Poço de Monitoramento | PM74        | 35.974                            | 95                            | 0.183848   |
| Poço de Monitoramento | PM75        | 36.772                            | 95                            | 0.225906   |
| Poço de Monitoramento | PM76        | 35.446                            | 95                            | 0.282843   |
| Poço de Monitoramento | PM77        | 36.98633                          | 95                            | 1.008481   |
| Poço de Monitoramento | PM78        | 37.09433                          | 95                            | 0.664028   |
| Poço de Monitoramento | PM79        | 36.725                            | 95                            | 0.014142   |
| Poço de Monitoramento | PM80        | 36.62                             | 95                            | 0.584397   |

| <b>Tipo</b>           | <b>Nome</b> | <b>Carga Hidráulica Média (m)</b> | <b>Confiança Assumida (%)</b> | <b>Desvio Padrão (calculado para Poços e assumido para córrego e lago)</b> |
|-----------------------|-------------|-----------------------------------|-------------------------------|--|
| Poço de Monitoramento | PM81        | 36.23113                          | 95                            | 0.145466   |
| Poço de Monitoramento | PM82        | 35.875                            | 95                            | 0.58662  |
| Poço de Monitoramento | PM83        | 33.67067                          | 95                            | 0.282902   |
| Poço de Monitoramento | PM84        | 36.36189                          | 95                            | 0.123536   |
| Poço de Monitoramento | PM85        | 36.16667                          | 95                            | 0.263122   |