

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS

***APLICAÇÃO DE MODELOS MATEMÁTICOS DE
TRANSPORTE EM PLUMA DE COMPOSTOS
ORGANOCOLORADOS: ESTUDO DE CASO E
DISCUSSÃO***

Rodrigo Brandão Bunevich

Orientador: Prof. Dr. José Domingos Faraco Gallas
Co-orientador: Geólogo Paulo Henrique dos Santos

**MONOGRAFIA DE TRABALHO DE FORMATURA
(TF/08-48)**

**SÃO PAULO
2008**

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS

APLICAÇÃO DE MODELOS MATEMÁTICOS DE TRANSPORTE EM PLUMA DE
COMPOSTOS ORGANOCLORADOS: ESTUDO DE CASO E DISCUSSÃO

MONOGRAFIA DE CONCLUSÃO DE CURSO

(TF-48/2008)

Rodrigo Brandão Bunevich

Orientador: Prof. Dr. José Domingos Faraco Gallas

Co-orientador: Geólogo Paulo Henrique dos Santos



De acordo,

A handwritten signature in blue ink, appearing to read "José D. Faraco Gallas", written over a horizontal line.

Prof. Dr. José Domingos Faraco Gallas

(Orientador)

A handwritten signature in blue ink, appearing to read "Rodrigo Brandão Bunevich", written over a horizontal line.

Rodrigo Brandão Bunevich

(Orientado)

São Paulo

2008

DEDALUS - Acervo - IGC



30900025555

247
B.a

INSTITUTO DE GEOLOGIA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

COMPOSTOS ORGANOLÍTICOS: ESTUDO DE CASO E EXERCÍCIOS
APLICAÇÃO DE MÉTODOS MATEMÁTICOS DE TRANSPORTE EM PLUMAS DE

MONITORIA DE CONDIÇÕES DE CUFIA

(17-43 2001)



Profa. Dra. Maria Helena

Coordenadora do Curso de Pós-Graduação em Geologia
Orientadora: Prof. Dr. José Domingos Feres Costa

De: _____

[Handwritten signature]

Profa. Dra. Maria Helena

Prof. Dr. José Domingos Feres Costa

(Assinatura)

(Assinatura)

2001

2001

Dedico este trabalho aos meus pais
Roberto Bunevich e Clarice V. Brandão,
meus irmãos William, Gustavo e Higor e
aos meus amigos.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador Prof. Dr. José Domingos Faraco Gallas pela confiança que teve em me aceitar como orientando, uma vez que o projeto contemplava uma proposta audaciosa em virtude da complexidade do tema e do processo de aprendizado no manuseio dos programas específicos que serviram de ferramentas para o desenvolvimento desse projeto. Independente das dificuldades que ocorreram sempre estive disposto a discutir as causas e ajudar a encontrar uma solução com base em princípios lógicos.

Aos professores Marcelo Monteiro da Rocha, Reginaldo Bertolo e Ricardo Hirata que ajudaram em questões específicas de tratamento dos dados e de conceitos.

Aos alunos de pós graduação do LAMO (Laboratório de Modelos Físicos) Ingo Wannfried e Carlos Maldaner que me auxiliaram a resolver alguns problemas e propiciaram discussões produtivas na área de hidrogeologia.

Aos meus amigos de faculdade Nicolas Strikis, Victor Miguel, Felix Nanine e Sheila Schuindt que foram desde o início do curso e ainda são grandes amigos.

Aos meus grandes amigos Marcos da Silva e Michel Mofsovich pelas conversas e pela paciência em ler minha monografia.

E por fim uma das pessoas sem a qual não seria possível o desenvolvimento desse projeto Douglas Ávila Pascoal que me ensinou a trabalhar com os programas de uso em hidrogeologia e por todo conhecimento que compartilhou sobre a área de estudo.

RESUMO

O trabalho contemplou a elaboração de um modelo matemático de fluxo da água subterrânea e de transporte de contaminantes em um aquífero litorâneo, localizado no bairro da Alemoa, município de Santos – SP, o qual encontra-se impactado por contaminantes organoclorados: percloroetileno (PCE), tricloroetileno (TCE), dicloroetenos (DCE) e cloreto de vinila (CV). O objetivo específico foi a análise comparativa entre os programas simuladores de transporte de contaminantes MT3DMS® e RT3D2.5® sob as condições de fluxo obtidas pelo programa *Visual MODFLOW 4.0* da *Waterloo Hydrogeologic, Inc.*®. A comparação entre os programas foi feita sem que os modelos de transporte fossem calibrados, mantendo-se os mesmos parâmetros de entrada. Foi utilizado o cálculo de decaimento irreversível de primeira ordem no MT3DMS® e a opção de reação com decaimento sequencial de PCE, TCE, DCE e CV para o programa RT3D2.5®. A análise dos procedimentos matemáticos efetuados em cada programa mostrou que o coeficiente de partição tem grande importância no modelamento de contaminantes organoclorados, uma vez que tanto o deslocamento da pluma contaminante quanto as reações de decaimento (efetuadas pelo RT3D2.5®) são fortemente influenciadas por esse fator. O comportamento da curva de concentração em função do tempo obtida para o programa RT3D2.5® indicou uma tendência linear, enquanto a obtida pelo MT3DMS® apresentou tendência logarítmica. Os resultados obtidos nas simulações para um período de 10 anos mostrou uma tendência mais conservadora do programa RT3D2.5® em comparação ao MT3DMS® sobretudo nas concentrações do composto CV, cuja diferença média foi de até 9 ordens de grandeza. Esta elevada diferença deve-se principalmente ao fato do programa RT3D2.5® incorporar os produtos gerados da degradação de PCE, TCE, DCE nas concentrações de CV, procedimento não efetuado pelo programa MT3DMS®.

ABSTRACT

The work included the development of a mathematical model of groundwater flow and transport of contaminants in a coastal aquifer, located in the neighborhood of Alemoa, municipality of Santos - SP, which is impacted by organic chlorinated contaminants: Perchloroethene (PCE), Trichloroethene (TCE), Dichloroethenes (DCE) and vinyl chloride (VC). The specific objective was the comparison between program simulators for the transport of contaminants MT3DMS ® and RT3D2.5 ® under the conditions of flow obtained by the Visual MODFLOW 4.0 of Waterloo Hidrogeologic, Inc. ®. The comparison between the transport engines was performed without transport calibration, under the same input parameters. We used the calculation of irreversible decay of first order in MT3DMS ® and the option of reaction with sequential decay of PCE, TCE, DCE and VC for the engine RT3D2.5 ®. The mathematical analysis of procedures performed in each transport engine showed that the partition coefficient is very important parameter in organic chlorinated compounds, since both the displacement of the contaminant plume as the reactions of decay (made by RT3D2.5 ®) are strongly influenced by this factor. The behavior of the curve of concentration versus time obtained from the RT3D2.5 ® showed a linear trend, while from MT3DMS ® indicated a logarithmic trend. The results of the simulations for a period of 10 years indicated the engine RT3D2.5 ® more conservative when compared to MT3DMS ® especially in the concentrations of the compound CV, whose average difference was up to 9 orders of magnitude. This high difference is primarily due to the fact the RT3D2.5 ® incorporate the products generated from the degradation of PCE, TCE, DCE in concentrations of VC, no procedures performed by the program MT3DMS ®.

ÍNDICE

1.	INTRODUÇÃO	1
2.	OBJETIVOS	1
3.	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	1
3.1.	COMPOSTOS ORGANOCLORADOS.....	1
3.1.1.	<i>Características e principais usos dos compostos de interesse</i>	2
3.1.1.1.	Tetracloroetano (PCE).....	2
3.1.1.2.	Tricloroetano (TCE).....	2
3.1.1.3.	1,1-Dicloroetano (1,1-DCE)	2
3.1.1.4.	1,2-Dicloroetano	3
3.1.1.5.	Cloreto de Vinila	3
3.1.2.	<i>Degradação de compostos organoclorados</i>	3
3.2.	MODELOS MATEMÁTICOS	6
3.2.1.	<i>Modelo conceitual</i>	6
3.2.2.	<i>Equação de fluxo</i>	7
3.2.3.	<i>Elementos do modelo matemático</i>	8
3.2.3.1.	Discretização da malha	9
3.2.3.2.	Condições de contorno.....	11
3.2.3.3.	Calibração do modelo.....	13
3.3.	MECANISMOS DE TRANSPORTE.....	14
3.3.1.	<i>Modelo matemático de transporte</i>	16
3.3.1.1.	Programa MT3DMS.....	16
3.3.1.2.	Programa RT3D	16
4.	ÁREA DE ESTUDO	18
4.1.	LOCALIZAÇÃO E ACESSO	18
4.2.	CONTEXTO GEOLÓGICO REGIONAL	19
4.2.1.	<i>Unidades litoestratigráficas</i>	21
4.2.1.1.	Formação Pariquera-Açu.....	21
4.2.1.2.	Formação Morro de Icapara	21
4.2.1.3.	Formação Cananéia	21
4.2.1.4.	Formação Ilha Comprida	22
5.	MÉTODOS DE TRABALHO	22
5.1.	INSTALAÇÃO DE POÇOS DE MONITORAMENTO.....	22
5.1.1.	<i>Locação e procedimentos de perfuração</i>	23
5.1.2.	<i>Instalação</i>	24
5.1.3.	<i>Desenvolvimento do poço</i>	24

5.2.	AMOSTRAGEM DE SOLO.....	24
5.2.1.	<i>Procedimentos de coleta</i>	25
5.2.2.	<i>Ensaio geotécnico</i>	25
5.3.	MEDIÇÕES DOS NÍVEIS DE ÁGUA	25
5.4.	COLETA DE ÁGUA SUBTERRÂNEA	26
5.5.	ANÁLISE DAS AMOSTRAS DE ÁGUA SUBTERRÂNEA	27
6.	RESULTADOS	27
6.1.	HIDROGEOLOGIA	27
6.1.1.	<i>Informações dos poços de monitoramento</i>	27
6.2.	DESCRIÇÃO LITOLÓGICA.....	27
6.2.1.	<i>Sedimentos de Mangues, Pântanos e Baixos (SMP)</i>	28
6.2.1.1.	Sedimentos de Mangues, Pântanos e Baixos Arenosos (SMPAr).....	28
6.2.1.2.	Sedimentos de Mangues, Pântanos e Baixos Argilosos (SMGAg)	28
6.2.2.	<i>Sedimentos Flúvio Lagunares (Formação Ilha Comprida) (SFL)</i>	28
6.2.2.1.	Sedimentos Flúvio Lagunares Arenosos (SFLAr)	28
6.2.2.2.	Sedimentos Flúvio-Lagunares Argilosos (SFLAg)	28
6.2.3.	<i>Sedimentos Flúvio-Marinheiros (SFM)</i>	28
6.2.4.	<i>Sedimentos Fluviais (Aluviões) (SFA)</i>	29
6.2.5.	<i>Argilas Transicionais (Formação Cananéia) (A)</i>	29
6.2.6.	<i>Solo Residual (SR)12125</i>	29
6.2.7.	<i>Embasamento Gnaisses e Migmatitos (MGn)</i>	29
6.3.	MODELO CONCEITUAL	29
6.4.	RECARGA HIDRÁULICA	31
6.4.1.	<i>Balanço hídrico</i>	31
6.5.	CONDUTIVIDADES HIDRÁULICAS	32
6.5.1.	<i>Resultados dos bail-tests</i>	32
6.5.2.	<i>Condutividade hidráulica adotada no modelo matemático de fluxo</i>	36
7.	MODELO NUMÉRICO DE FLUXO ESTACIONÁRIO GERAL.....	38
7.1.	DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL E VOLUME MODELADO	38
7.2.	CONDIÇÕES DE CONTORNO	38
7.3.	PARÂMETROS HIDROGEOLÓGICOS.....	40
7.4.	PADRÃO POTENCIOMÉTRICO REGIONAL	41
7.5.	AVALIAÇÃO DO MODELO DE FLUXO REGIONAL.....	44
8.	MODELO DE FLUXO ESTACIONÁRIO LOCAL	45
8.1.	DIMENSÕES DA MALHA E CONDIÇÕES DE CONTORNO	46
9.	MODELO DE TRANSPORTE	47
9.1.	PROPRIEDADES QUÍMICAS DOS COMPOSTOS DE INTERESSE	47
9.2.	ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DOS PROGRAMAS SOB CONDIÇÕES HIPOTÉTICAS	48

9.2.1.	<i>Análise do comportamento dos programas sem considerar as reações de decaimento</i>	49
9.2.2.	<i>Análise do comportamento dos programas sem considerar a adsorção</i>	49
9.2.3.	<i>Análise do comportamento dos programas considerando elevada adsorção</i>	50
9.2.4.	<i>Análise do comportamento dos programas considerando as condições hidrogeoquímicas verificadas na área e as curvas obtidas para concentrações hipotéticas em função do tempo</i>	51
9.3.	<i>COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS OBTIDOS PELOS PROGRAMAS MT3DMS® E RT3D 2.5®</i>	54
10.	DISCUSSÃO.....	56
11.	CONCLUSÕES.....	57
12.	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	60

ÍNDICE DE ANEXOS

Anexo 1 – Perfil construtivo e litológico dos poços de monitoramento

Anexo 2 – Perfis litológicos

Anexo 3 – Parâmetros do balanço hídrico

Anexo 4 – Dados de condutividades hidráulicas

Anexo 5 – Análise estatística dos dados de condutividade hidráulica

Anexo 6 – Mapas de isoconcentrações

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Propriedades físicas e químicas dos compostos de interesse.....	2
Tabela 2 - Valores obtidos de condutividade hidráulica.....	33
Tabela 3 - Parâmetros hidrogeológicos considerados no modelo.....	40
Tabela 4 - Dados de Carga Hidráulica.....	46
Tabela 5 - Métodos de cálculo de K_{oc}	47
Tabela 6 - Valores obtidos para K_{oc}	47
Tabela 7 - Resultados de carbono orgânico total (valores em %) para amostras de solo.....	48
Tabela 8 - Parâmetros utilizados no modelo de transporte de contaminantes.....	48
Tabela 9 - Análise dos compostos de interesse dissolvidos na água subterrânea, concentrações em mg/L.....	55
Tabela 10 - Resultados de concentrações (mg/l) obtidos pelos programas RT3D2.5 [®] e MT3DMS [®]	55

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Seqüência de degradação do composto tetracloroetileno.....	5
Figura 2 - Representação das malhas de diferenças finitas e elementos finitos.	10
Figura 3 - Exemplo de malha tridimensional de diferenças finitas	11
Figura 4 - Ilustração das condições de contorno.....	12
Figura 5 - Mapa de localização da área de estudo.....	19
Figura 6 - Principais litotipos e sua distribuição na região da Baixada Santista.....	20
Figura 7 - Perfuração a trado.....	23
Figura 8 - Inserção do revestimento de aço.....	23
Figura 9 - Equipamento utilizado para retirada de material inconsolidado	23
Figura 10 - Unidades hidroestratigráficas.	30
Figura 11 - Parâmetros do balanço hídrico na região de Santos, SP.....	32
Figura 12 - Localização das áreas de realização dos ensaios de permeabilidade.	33
Figura 13 - Histogramas dos resultados de condutividade hidráulica.	34
Figura 14 - Curva de freqüência acumulada dos valores normalizados de condutividade hidráulica.....	35
Figura 15 - Distribuição vertical das condutividades atribuídas ao modelo matemático.....	36
Figura 16 - Distribuição horizontal das condutividades hidráulicas nas diferentes unidades hidroestratigráficas.....	37
Figura 17 - Condições de contorno atribuídas ao modelo matemático de fluxo.....	39
Figura 18 - Mapa potenciométrico da primeira unidade hidroestratigráfica e perfil geral.....	41
Figura 19 - Mapas potenciométricos das unidades hidroestratigráficas inferiores.....	42
Figura 20 - Gráfico de calibração do modelo de fluxo.	44
Figura 21 - Balanço de massa do modelo de fluxo regional.....	45
Figura 22 - Discretização da malha e condições de contorno.....	46
Figura 23 - Gráfico de dispersão das concentrações obtidas nos programas MT3DMS [®] e RT3D2.5 [®] sem considerar o efeito da adsorção do soluto.....	50
Figura 24 - Localização dos pontos de coleta de dados das simulações.....	51
Figura 25 - Resultados obtidos nas simulações para PCE nas metodologias analisadas.	52
Figura 26 - Evolução das concentrações dos compostos de interesse no ponto locado sobre a pluma de concentração no tempo t=0 dias.....	53
Figura 27 - Evolução das concentrações dos compostos de interesse no ponto situado à jusante da pluma.....	54

1. INTRODUÇÃO

Este trabalho apresenta as etapas de elaboração de um modelo matemático de fluxo e análise comparativa entre dois programas simuladores de transporte de contaminantes aplicado a um estudo de caso em uma empresa de armazenagem de grãos líquidos, localizada na área portuária do município de Santos, no bairro da Alemoa.

O estudo é de grande importância para a avaliação da evolução e predição das concentrações dos contaminantes na água subterrânea ao longo de um período estipulado. Atualmente, a modelagem matemática está sendo utilizada no gerenciamento de áreas impactadas, no planejamento para implantação dos sistemas de remediação e na definição do perímetro de proteção de poços abastecimento.

A supervisão e execução dos trabalhos foram realizadas pela Waterloo Brasil Consultoria Ambiental Ltda, bem como a disponibilização dos dados para uso neste trabalho de formatura.

2. OBJETIVOS

Este estudo tem como objetivo geral a elaboração de um modelo de fluxo utilizando o programa Visual MODFLOW e de dois modelos de transporte de contaminantes utilizando-se os programas RT3D – *Reactive Multi-Species Transport Dimensions* (Clement, 1997) e o MT3DMS® – *Multi-Species Transport in 3-Dimensions* (Zheng e Wang, 2003).

Sendo o objetivo específico a análise comparativa entre os programas simuladores de transporte, em uma área impactada por compostos organoclorados da seqüência tricloroeteno, dicloroeteno e cloreto de vinila.

3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1. Compostos Organoclorados

Os hidrocarbonetos halogenados constituem um dos maiores e mais importantes grupos de contaminantes encontrados na água subterrânea. Este grupo inclui os solventes clorados, e está dividido em duas subclasses: a dos hidrocarbonetos clorados aromáticos (cadeia contendo o anel aromático/benzílico) e a dos hidrocarbonetos clorados alifáticos (cadeia aberta) (Laudewerys, 1992).

Os compostos estudados neste trabalho fazem parte do grupo dos hidrocarbonetos alifáticos. Nestas moléculas, um ou mais átomos de hidrogênio podem ser substituídos por átomos de cloro em diversos locais da estrutura molecular, possibilitando a formação de um grande número de substâncias. Na **Tabela 1** são apresentadas as principais propriedades físicas e químicas dos compostos de interesse.

Tabela 1 - Propriedades físicas e químicas dos compostos de interesse

Composto	ρ^1	PF (C°)	PE (C°)	Solubilidade em água (mg/l a 25C°)	P° (mm Hg)	K _H (atm/m3/mol)
Cloreto de vinila	0,91	-153,8	-13,37	8,80E+3	2,98E+3	2,78E-2
1,1-dicloroeteno	1,22	-122,56	31,56	2,25E+3	6,00E+2	2,61E-2
Trans-1,2-dicloroeteno	1,26	-49,8	47,7	6,30E+3	3,31E+2	9,38E-3
Cis-1,2-dicloroeteno	1,28	-80,1	60,2	3,50E+3	2,01E+2	4,08E-3
Tricloroeteno	1,46	-84,8	86,7	1,10E+3	6,90E+1	9,85E-3
Tetracloroeteno	1,62	-22,35	121,07	2,00E+2	1,86E+1	1,77E-2

Fonte: Fetter, 1999

ρ^1 - densidade do composto a 20 °C; PF - Ponto de Fusão; PE-Ponto de Ebulição; P° - Pressão de Vapor; K_H-Constante de Henry.

3.1.1. Características e principais usos dos compostos de interesse

3.1.1.1. Tetracloroeteno (PCE)

O tetracloroeteno ou percloroetileno é um solvente de larga utilização, sendo produzido comercialmente para uso na lavagem a seco e processos têxteis (15%), desengraxamento de metais (25%), como intermediário químico (55%), outros usos não especificados (5%). À temperatura ambiente corresponde a um líquido incolor com odor sutil sendo as principais vias de exposição por inalação, ingestão de água contaminada e contato dermal (EPA, 2008).

Quando presente na água subterrânea pode dar origem a outros compostos, tais como 1,2-Dicloroeteno, cis e trans-Dicloroeteno e cloreto de vinila, devido aos processos de degradação.

3.1.1.2. Tricloroeteno (TCE)

O composto químico tricloroeteno, também conhecido como tricloroetileno, corresponde a um líquido incolor, volátil e não inflamável. De acordo com o manual de produtos químicos perigosos da CETESB (2008), os principais usos do composto tricloroeteno são: desengraxamento de metais, solvente para extração de óleos, gorduras e ceras, solventes de tintas, limpeza a seco, líquido refrigerante para troca de calor, sínteses orgânicas, fumigante e medicina (anestésico).

3.1.1.3. 1,1-Dicloroeteno (1,1-DCE)

Não ocorre naturalmente, mas é encontrado como resultado de decomposição de cloreto de polivinilideno. O 1,1-Dicloroeteno foi utilizado como intermediário para síntese orgânica e produção de copolímeros de polivinilideno, acrilonitrila, cloreto de vinila, metanilonitrila e metacrilato.

3.1.1.4. 1,2-Dicloroeteno

Corresponde a misturas dos compostos trans-1,2-dicloroeteno e cis-1,2-dicloroeteno. É altamente inflamável e extremamente corrosivo. Suas aplicações destinam-se à síntese de solventes clorados, resinas, acetilcelulose, perfumes, corantes, lacas, termoplásticos, e como intermediário químico (Salgado e Marona, 2004).

Estes compostos acima listados têm sido freqüentemente encontrados como contaminantes na água subterrânea. Devido sua alta densidade e baixa solubilidade, quando presentes em quantidades superiores ao limite de saturação da água podem vir a constituir um sistema, cuja fase pura do produto pode migrar verticalmente enquanto a fase dissolvida migra junto com o fluxo da água subterrânea.

3.1.1.5. Cloreto de Vinila

O cloreto de vinila também é conhecido como cloroeteno na nomenclatura da IUPAC. É um composto de grande importância para a indústria química, a partir do qual são obtidos polímeros, poli cloroeteno (*polyvinyl chloride* - PVC), em sínteses orgânicas e adesivos para plásticos. Em temperatura ambiente, ocorre como um gás incolor e tóxico. Sua produção é feita industrialmente a partir do 1,2-Dicloroetano.

As principais formas de exposição ao cloreto de vinila são por via respiratória e oral. Este composto demonstrou estatisticamente em diversos estudos sua elevada carcinogenicidade, sendo relatados casos de angiosarcoma, hepatocarcinomas e cirrose (EPA, 2000).

3.1.2. Degradação de compostos organoclorados

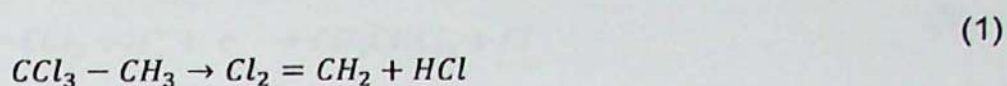
Os processos de degradação para os compostos organoclorados podem ser bióticos ou abióticos. Os etanos e etenos clorados têm sido bem estudados e constituem contaminantes comuns na água subterrânea. Segundo Fetter (1999), existe uma série de reações abióticas de quebra molecular, as quais resultam em compostos de menor peso molecular.

Os processos de degradação dos compostos organoclorados podem ocorrer por:

- Substituição. Consiste em uma reação onde a água reage com o composto halogenado, ocorrendo a substituição de um OH^- por um X^- (Cl^- , Br^- etc), obtendo-se um álcool deste processo. Esta reação pode ocorrer na água sem que seja necessário nenhum tipo de agente catalisador. No entanto, as velocidades de reação são lentas. Os processos de substituição ocorrem mais rápido para compostos mono-halogenados.

- Dehidrohalogenação. É uma reação na qual um alcano perde um íon halógeno de um átomo de carbono e depois um íon de hidrogênio de um carbono adjacente. Como

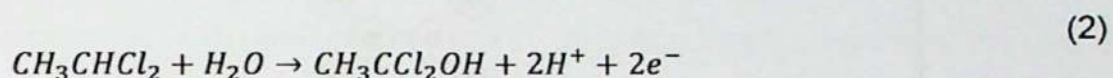
resultado ocorre a formação de uma dupla ligação entre os átomos de carbono, gerando um alceno, como é observado na transformação de 1,1,1-tricloroetano em 1,1-dicloroeteno:



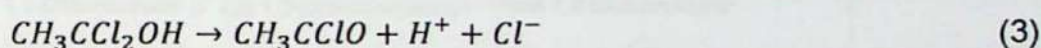
Este processo ocorre em maiores taxas quando a molécula apresenta um maior número de íons halógenos em sua estrutura.

Os processos que envolvem a redução e oxidação geralmente são mediados biologicamente e precisam de agentes oxidantes e redutores. Em alguns casos, compostos alifáticos poli-halogenados atuarão como receptores de elétrons tornando-se reduzidos.

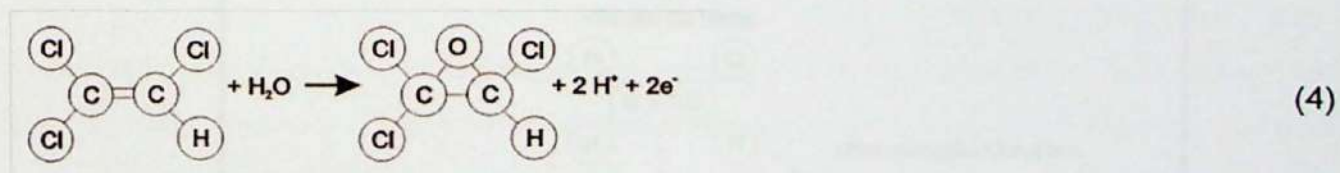
- Oxidação. Inclui a α -hidrogenólise, que consiste na adição de uma hidroxila em um alceno, substituindo o lugar de um átomo de hidrogênio no carbono ligado aos íons halógenos. O produto da reação consiste na formação de álcool clorinado, como é observado na reação de 1,1-dicloroetano formando 1,1-dicloroetanol:



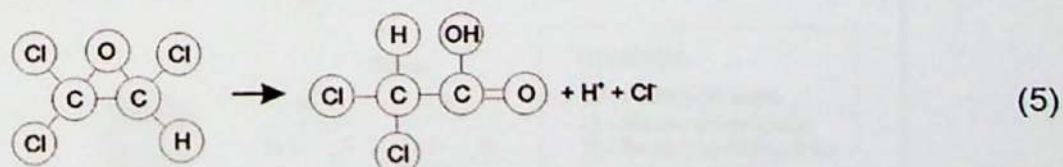
O álcool halogenado pode sofrer a perda do íon de hidrogênio da hidroxila e de um halógeno para formar um aldeído:



- Epoxidação. Ocorre devido à oxidação da dupla ligação entre dois átomos de carbono, podendo resultar na formação de um epóxido:

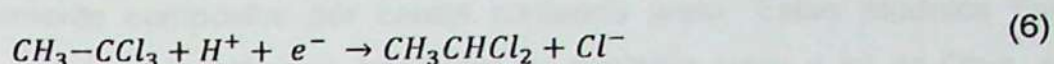


O epóxido apresenta uma vida curta, e sob condições de pH neutro pode ser oxidado para ácido carboxílico:



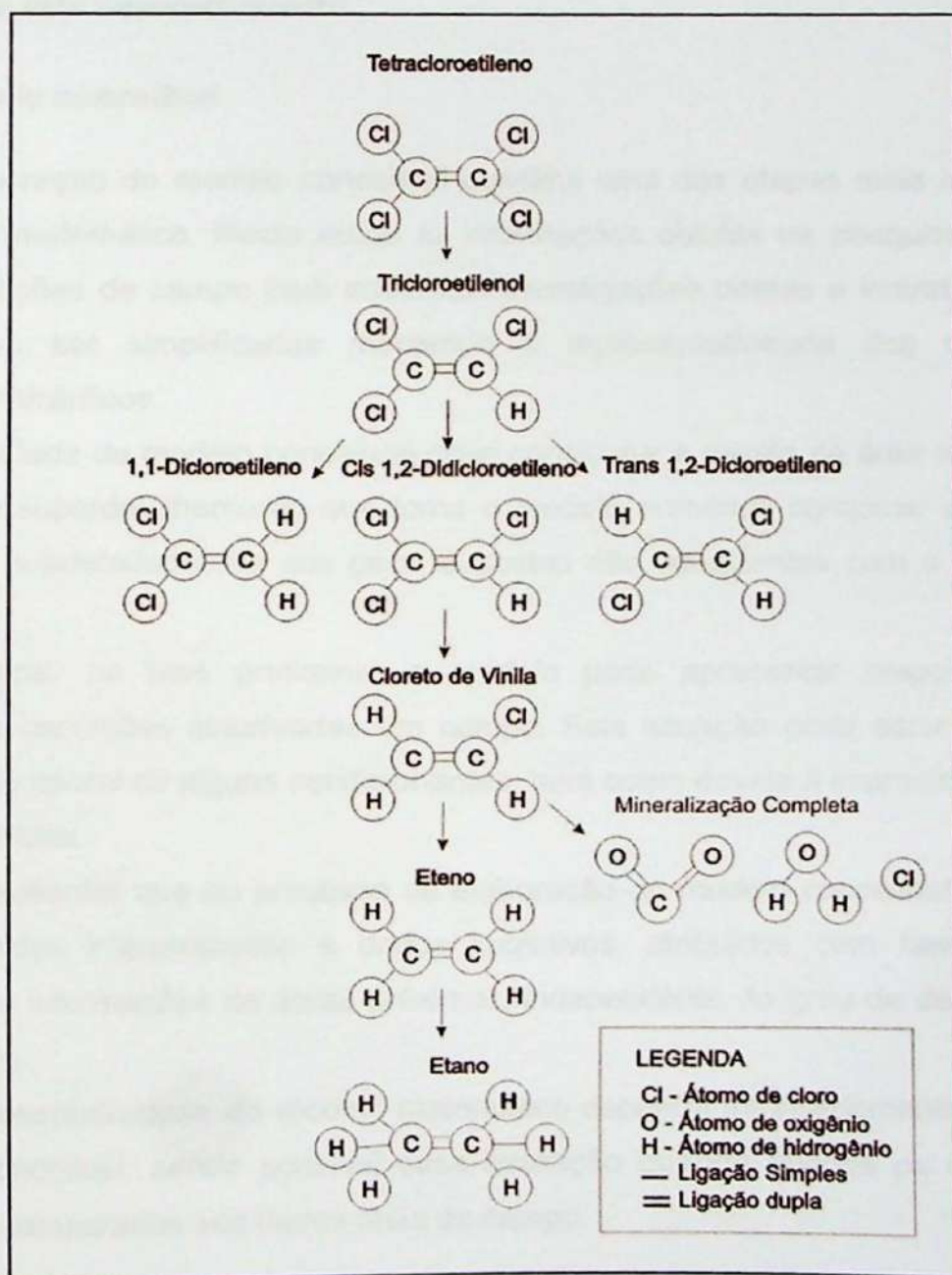
- Redução. Inicia-se com a remoção de um íon halógeno por um metal de transição ou por um complexo formado por metais de transição reduzidos, os quais sofrem oxidação e

liberam um elétron necessário para ocorrer a substituição de um íon halógeno por um de hidrogênio na molécula do composto organoclorado.



Dentre os processos intermediados biologicamente pode ocorrer a decolorinação redutiva em ambiente anaeróbico. Nesta situação, a transformação do composto ocorre por processos metabólicos de respiração, no qual os átomos de cloro são gradativamente substituídos por átomos de hidrogênio (**Figura 1**). Em ambientes oxidantes a biodegradação pode ocorrer pelo consumo do carbono presente no contaminante e pelo cometabolismo onde a biodegradação consiste no resultado de uma reação secundária (Strauss, 1988).

Figura 1 - Seqüência de degradação do composto tetracloroetileno.



Fonte: Wiedemeier (1998)

3.2. Modelos matemáticos

Os primeiros modelos de fluxo apareceram nos anos cinquenta e sessenta, os quais eram predominantemente compostos por caixas contendo areia. Estes modelos físicos foram substituídos por modelos elétricos, baseados na analogia entre a lei de Ohm, para fluxo elétrico e na lei de Darcy para o fluxo de água em meios porosos (Franciss, 1980).

Este avanço para modelos elétricos foi eficaz para simular o fluxo da água subterrânea. No entanto, para as simulações de transporte de contaminantes, tornavam-se ineficientes e por vezes impróprios para esta finalidade.

A partir dos anos oitenta o desenvolvimento tecnológico dos computadores tornou acessível o uso das técnicas de modelamento numérico. A disseminação dessa nova metodologia possibilitou o aprimoramento das técnicas e dos programas de modelagem. Além disso, os crescentes casos de impactação e contaminação de aquíferos também impulsionaram este desenvolvimento.

3.2.1. Modelo conceitual

A elaboração do modelo conceitual constitui uma das etapas mais importantes do modelamento matemático. Nesta etapa as informações obtidas na pesquisa bibliográfica, visitas e inspeções de campo bem como nas investigações diretas e indiretas da área de estudo devem ser simplificadas mantendo a representatividade dos condicionantes geológicos e hidráulicos.

A qualidade do modelo conceitual deve considerar a escala da área a ser modelada evitando-se o superdetalhamento que torna o modelo numérico complexo e nem sempre eficiente, e o subdetalhamento que gera respostas não condizentes com o observado em campo.

Em geral, na fase preliminar o modelo pode apresentar respostas que não satisfazem as condições observadas em campo. Esta situação pode estar relacionada à variabilidade temporal de alguns condicionantes, bem como devido à imprecisão e erros nas medidas efetuadas.

Cabe salientar que no processo de elaboração do modelo conceitual, normalmente são incorporadas interpretações e dados subjetivos, atribuídos com base em valores orientativos ou informações de áreas próximas, independente do grau de detalhamento da área de estudo.

A representatividade do modelo matemático depende intrinsecamente da qualidade do modelo conceitual, sendo possível essa avaliação quando obtidos os resultados das simulações e comparados aos dados reais de campo.

3.2.2. Equação de fluxo

A solução exata da equação que governa o fluxo da água subterrânea torna-se insolúvel visto a enorme complexidade pelos canais de escoamento. Esta dificuldade é contornada pela adoção de valores médios nas variáveis e nas propriedades do meio poroso.

A velocidade da água subterrânea ou velocidade de Darcy consiste em um fluxo volumétrico definido pelo volume escoado por unidade de área total e por unidade de tempo (Cabral, 1993). A equação simplificada da lei de Darcy relaciona a condutividade hidráulica e o gradiente hidráulico definido pela razão das variações de carga hidráulica e da distância. O sinal negativo indica que o escoamento ocorre sempre na direção da altura piezométrica maior para a menor.

$$q = -K \frac{\Delta H}{\Delta L} \quad (7)$$

Onde:

q é a taxa volumétrica de fluxo [$L^3/T/L^2$];

K é a condutividade hidráulica [L/T];

ΔH corresponde à diferença de carga hidráulica;

ΔL é a distância entre os pontos de medida de carga hidráulica.

Desta forma a expressão inicial desenvolvida por Darcy pode ser generalizada para:

$$q = -K \text{ grad } h \quad (8)$$

Onde q é o vetor velocidade aparente formado por componentes nas três direções principais de anisotropia, K corresponde ao tensor da condutividade hidráulica e $\text{grad } h$ é o gradiente da carga hidráulica.

Partindo-se da premissa de que a água não pode ser destruída, mas apenas transportada para outro ponto ou armazenada, a equação de conservação de massa deve ser obedecida (Cabral, 1997).

$$\frac{\partial \eta \rho v_x}{\partial x} + \frac{\partial \eta \rho v_y}{\partial y} + \frac{\partial \eta \rho v_z}{\partial z} = - \frac{\partial \eta \rho}{\partial t} \quad (9)$$

Onde

η = porosidade total

ρ = massa específica

v = velocidade

Nesta equação as três derivadas parciais do primeiro membro representam a quantidade de água recebida nas direções X, Y e Z (tridimensionalmente) e no segundo membro está indicada a variação temporal do armazenamento local. Aplicando-se o

operador vetorial divergente na lei de Darcy (equação 7), obtém-se a equação de fluxo para o caso tridimensional.

$$-div(\rho K grad h) = -\frac{\partial(\eta\rho)}{\partial t} + Rv\rho \quad (10)$$

Aplicando-se o conceito de armazenamento específico, a equação que representa o escoamento no aquífero pode ser escrita como:

$$-div(\rho K grad h) + Rv = S_s \left[\frac{\Delta H}{\partial t} \right] \quad (11)$$

Admitindo-se que os eixos cartesianos utilizados no problema coincidem com as direções principais do tensor da condutividade hidráulica, os elementos não pertencentes à diagonal principal serão nulos, portanto:

$$\frac{\partial}{\partial X} \left[\frac{K_{xx} \partial H}{\partial X} \right] + \frac{\partial}{\partial Y} \left[\frac{K_{yy} \partial H}{\partial Y} \right] + \frac{\partial}{\partial Z} \left[\frac{K_{zz} \partial H}{\partial Z} \right] + Rv = S_s \left[\frac{\Delta H}{\partial t} \right] \quad (12)$$

Onde, H corresponde à carga total [H]; K_{xx} , K_{yy} e K_{zz} são os componentes da condutividade hidráulica [L/T]; S_s é o coeficiente de armazenamento específico [1/L]; Rv corresponde à taxa de recarga por unidade de volume; $[L^3/TL^3]$ representa as fontes (sinal positivo) ou sumidouros de água dentro do aquífero, usualmente poços drenos (sinal negativo).

Utilizando-se situações simplificadas de anisotropia e homogeneidade em uma ou duas dimensões é possível resolver a equação de fluxo de forma analítica. No entanto, métodos numéricos permitem maior amplitude de cenários a serem simulados e maior versatilidade na representação do sistema real, pois permitem discretizar a equação diferencial parcial nas variáveis do espaço (x, y e z) (Clearly, 1989).

O processo de discretização pode ser descrito simplificadaamente como sendo uma amostragem representativa de pontos da função contínua. Este processo é indispensável para que uma função que representa um fenômeno ou processo possa ser submetida a processos automáticos – computacionais.

3.2.3. Elementos do modelo matemático

Consistem na representação numérica obtida a partir do modelo conceitual da área, definida com base em critérios hidrogeológicos traduzidos para a linguagem do programa utilizado. Assim, os procedimentos de discretização da malha, delimitação das condições de contorno e das condições iniciais, devem ser introduzidos adequadamente de forma que o aplicativo matemático represente as condições simuladas o mais próximo possível da realidade.

3.2.3.1. Discretização da malha

A estrutura da grade modelada é influenciada pelo método numérico com o qual o aplicativo efetuará as resoluções das equações diferenciais. Em geral, são utilizados dois tipos de métodos numéricos:

- Métodos de elementos finitos.

Este método consiste na representação discretizada sobre uma área, sendo que a variação de carga hidráulica dentro do elemento é definida pela interpolação de cargas dos nós, neste caso a malha geralmente é formada por triângulos (Iritani, 1998).

- Métodos de diferenças finitas.

Este método consiste na representação discretizada em um ponto, no qual os atributos e carga hidráulica são definidos para o nó da malha, sendo então extrapolados para a área que envolve o nó. A malha é formada por retângulos e os espaçamentos podem variar ao longo de um eixo em relação ao outro (Iritani, 1998).

Este método, empregado nos programas modeladores de fluxo mais utilizados tem a grade ou malha do modelo definida por linhas e colunas, apresentando um ajuste mais grosseiro ao formato da área modelada. A estrutura da grade do modelo, para ambos os métodos, está representada na **Figura 2**.



Fonte: Adaptado de Wiersma (1992).

A estrutura da grade modelada é influenciada pelo método numérico com o qual o aplicativo efetuará as resoluções das equações diferenciais. Em geral, são utilizados dois tipos de métodos numéricos:

- Métodos de elementos finitos.

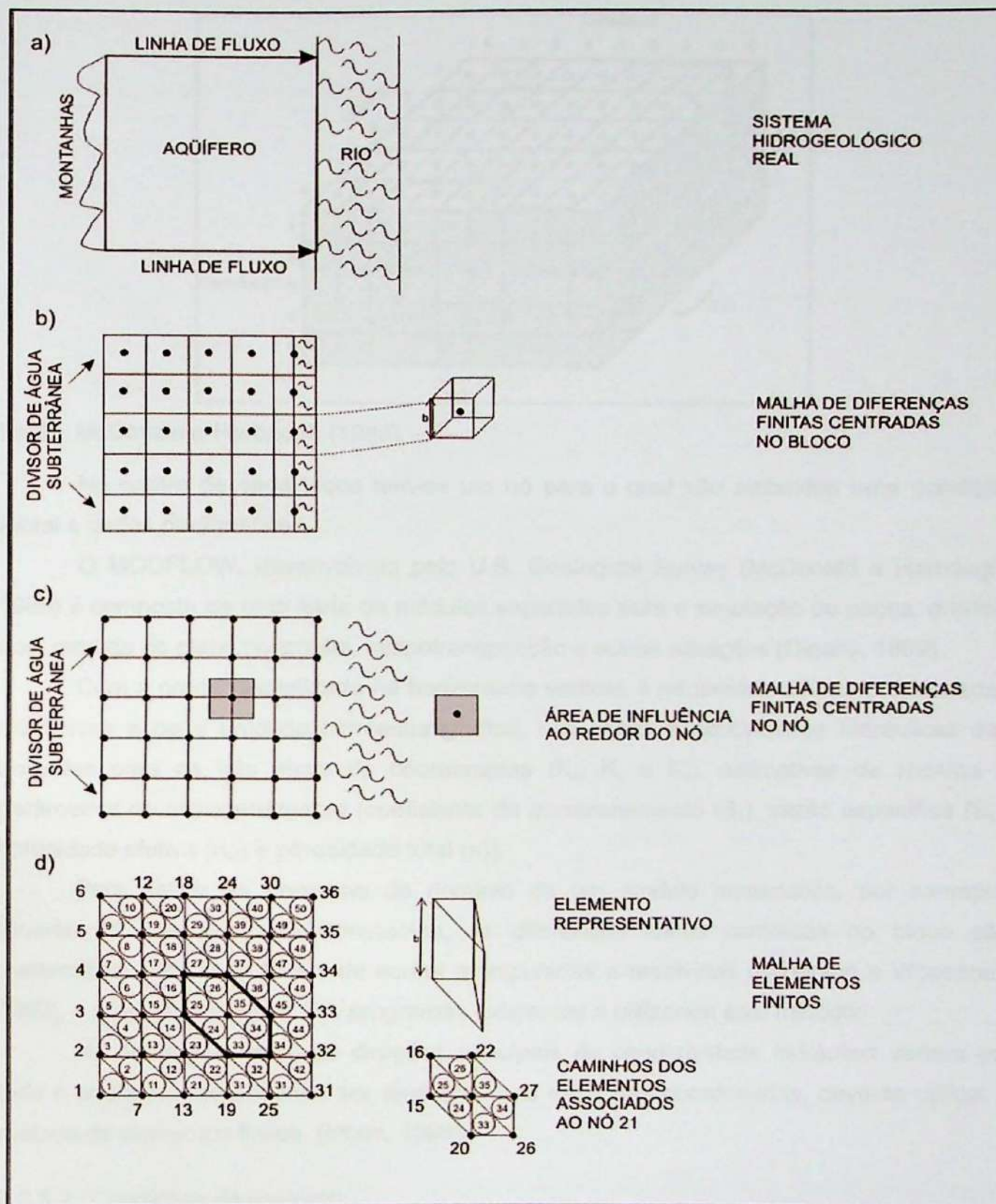
Este método consiste na representação discretizada sobre uma área, sendo que a variação de carga hidráulica dentro do elemento é definida pela interpolação de cargas dos nós, neste caso a malha geralmente é formada por triângulos (Iritani, 1998).

- Métodos de diferenças finitas.

Este método consiste na representação discretizada em um ponto, no qual os atributos e carga hidráulica são definidos para o nó da malha, sendo então extrapolados para a área que envolve o nó. A malha é formada por retângulos e os espaçamentos podem variar ao longo de um eixo em relação ao outro (Iritani, 1998).

Este método, empregado nos programas modeladores de fluxo mais utilizados tem a grade ou malha do modelo definida por linhas e colunas, apresentando um ajuste mais grosseiro ao formato da área modelada. A estrutura da grade do modelo, para ambos os métodos, está representada na **Figura 2**.

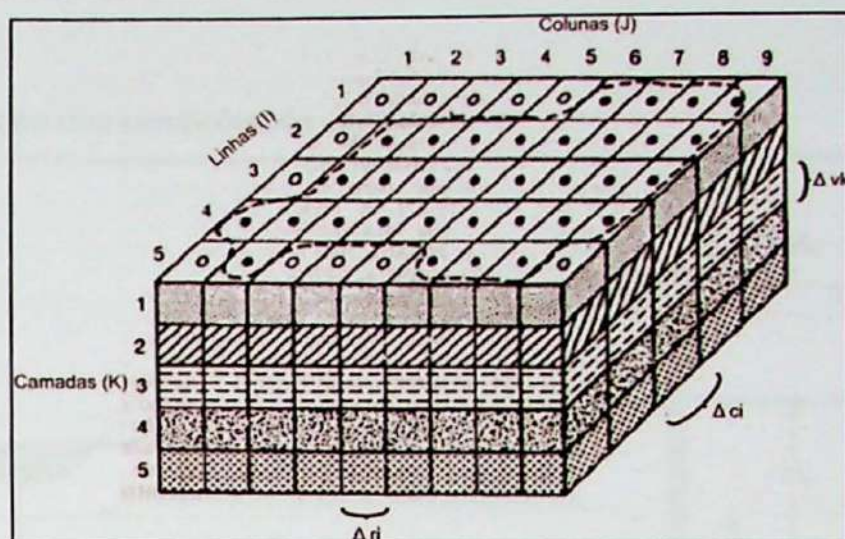
Figura 2 - Representação das malhas de diferenças finitas e elementos finitos.



Fonte: Anderson e Woessner (1992).

A equação de fluxo será solucionada neste estudo pelo programa MODFLOW, que utiliza o método de diferenças finitas para a resolução das equações diferenciais. A representação do aquífero físico em uma malha tridimensional composta por linhas (I), colunas (J) e camadas horizontais (K) está apresentada na **Figura 3**.

Figura 3 - Exemplo de malha tridimensional de diferenças finitas



Fonte: McDonald e Harbaugh (1988).

No centro de cada bloco tem-se um nó para o qual são atribuídos uma condição inicial e dados paramétricos.

O MODFLOW, desenvolvido pelo U.S. Geological Survey (McDonald e Harbaugh, 1988) é composto de uma série de módulos separados para a simulação de poços, drenos, rios, recarga no plano horizontal, evapotranspiração e outras situações (Clearly, 1989).

Com a grade discretizada na horizontal e vertical, é necessário atribuir propriedades hidráulicas a cada unidade hidroestratigráfica, tais como: condutividades hidráulicas das unidades para os três eixos de coordenadas (K_x , K_y e K_z), estimativas de recarga e parâmetros de armazenamento (coeficiente de armazenamento (S_s), vazão específica (S_y), porosidade efetiva (n_{ef}) e porosidade total (n)).

Para definir as fronteiras do domínio de um modelo matemático, por exemplo, através de rios e cargas constantes, as diferenças finitas centradas no bloco são matematicamente mais fáceis de serem manipuladas e resolvidas (Anderson e Woessner, 1992), o que leva a maioria dos programas existentes a utilizarem este método.

No entanto, quando as direções principais de condutividade hidráulica variam em todo o aquífero, não podendo ser ajustadas aos eixos das coordenadas, deve-se utilizar o método de elementos finitos. (Iritani, 1998).

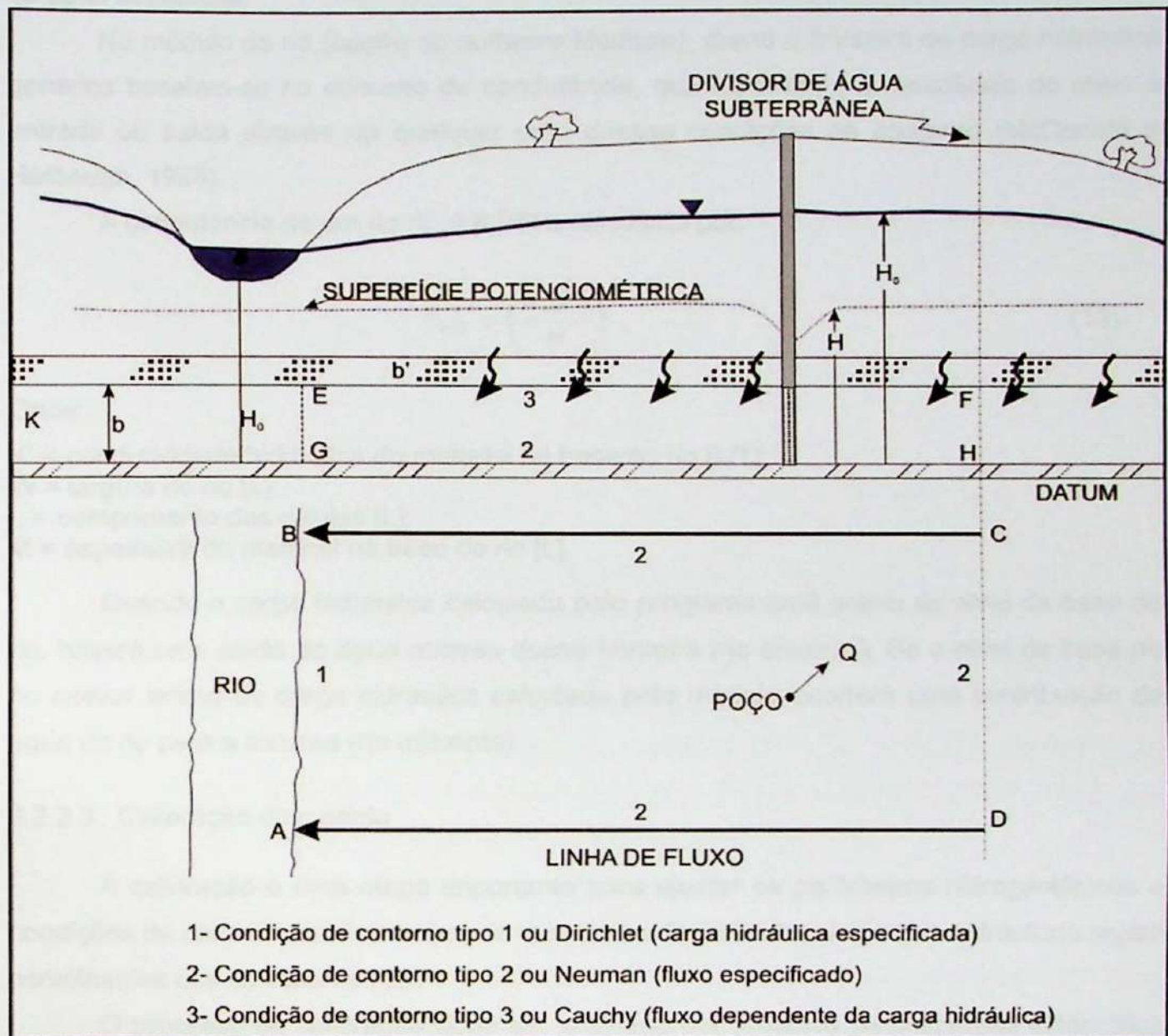
3.2.3.2. Condições de contorno

No modelo matemático, as condições de contorno (**Figura 4**) definem os limites do domínio representando as fronteiras hidráulicas ou físicas existentes no sistema hidrogeológico real.

As barreiras físicas constituem os corpos de água superficial e a presença de rochas impermeáveis. As barreiras hidráulicas não são visíveis, mas controlam o fluxo de água

subterrânea no sistema e podem ser exemplificadas como os divisores de água ou as linhas de fluxo.

Figura 4 - Ilustração das condições de contorno



Fonte: Clearly (1989).

Matematicamente, as condições de contorno podem ser classificadas em três tipos:

- Tipo I ou Dirichlet (carga hidráulica especificada)

Representa uma fronteira com carga hidráulica especificada, podendo ser constante no caso de um lago, ou função do tempo e espaço como nos rios (Clearly, 1989).

- Tipo II ou Neuman (Fluxo especificado)

Refere-se a um fluxo de água subterrânea situada na fronteira de um modelo. Em geral é utilizada uma fronteira de fluxo igual a zero, denominada comumente de não fluxo, representando divisores de água subterrânea ou zonas impermeáveis.

- Tipo III ou Cauchy (Fluxo dependente da carga hidráulica)

O fluxo através de uma fronteira desse tipo é obtido com base na diferença entre uma carga hidráulica especificada e a carga hidráulica calculada pelo modelo (Anderson e Woessner, 1992). Geralmente utiliza-se esse método para definir a drenagem de um corpo de água superficial.

No módulo de rio (opção do *software* Modflow), dreno e fronteira de carga hidráulica genérica baseiam-se no conceito de condutância, que representa a resistência do meio à entrada ou saída através de qualquer uma dessas condições de contorno (McDonald e Harbaugh, 1988).

A condutância de um rio (C_{rio}) [L^2/T] é calculada por:

$$C_{rio} = \left(\frac{K'WL}{M} \right) \quad (13)$$

Onde:

K' = condutividade hidráulica do material na base do rio [L/T];

W = largura do rio [L];

L = comprimento das células [L];

M = espessura do material na base do rio [L].

Quando a carga hidráulica calculada pelo programa está acima do nível de base do rio, haverá uma saída de água através dessa fronteira (rio efluente). Se o nível de base do rio estiver acima da carga hidráulica calculada pelo modelo ocorrerá uma contribuição de água do rio para o sistema (rio influente).

3.2.3.3. Calibração do modelo

A calibração é uma etapa importante para ajustar os parâmetros hidrogeológicos e condições de contorno, de forma que os resultados dos cálculos de cargas hidráulicas sejam semelhantes aos do sistema real.

O processo de calibração pode ser efetuado por módulos de calibração automática através de métodos de regressão não linear (Doherty, 2000), tal como o PEST, ou pelo método mais comum de “tentativa e erro”, onde os parâmetros são ajustados manualmente ao longo de sucessivas simulações (Anderson e Woessner, 1992).

Neste estudo foi utilizado o método manual (tentativa e erro), realizando pequenos ajustes nos valores inicialmente estabelecidos, com base no resíduo obtido entre a carga hidráulica observada (h_{obs}) e a calculada (h_{cal}) pelo programa.

Em geral os índices utilizados para calcular a média das diferenças entre as cargas hidráulicas são:

- ME (*mean error*) erro médio

$$ME = 1/n \sum_{i=1}^n (h_{obs} - h_{cal})_i \quad (14)$$

- MAE (*mean absolute error*) média do resíduo absoluto.

$$MAE = 1/n \sum_{i=1}^n |(h_{obs} - h_{cal})_i| \quad (15)$$

- RMS (*root mean squared*) raiz quadrada da média dos quadrados do resíduo.

$$RMS = \left[1/n \sum_{i=1}^n (h_{obs} - h_{cal})_i^2 \right]^{0.5} \quad (16)$$

Onde n corresponde ao número de valores de calibração

3.3. Mecanismos de transporte

A construção do modelo de transporte de contaminantes incorpora as etapas de elaboração modelo matemático de fluxo, tornando esta etapa mais complexa devido à introdução dos parâmetros que atuam na migração da pluma contaminante.

Neste estudo foi realizada a simulação tridimensional de transporte utilizando os programas RT3D - *Reactive Multi-Species Transport 3 Dimensions* (Clement, 1997) e o MT3DMS® - *Multi-Species Transport in 3-Dimensions* (Zheng e Wang, 2003).

Os processos básicos atuantes no transporte de solutos em meio poroso são a difusão e a advecção. No processo de difusão os íons ou moléculas do composto de interesse se movimentam devido a diferenças de concentração existentes no meio ocorrendo à migração da zona de maior concentração para a de menor concentração. Nas zonas onde o fluxo de água é muito lento ou nulo, este processo de transporte tem papel preponderante sobre o advectivo.

Na advecção, o soluto dissolvido é carregado junto ao fluxo d'água subterrânea, cujo efeito mais importante é o espreadimento do soluto para além da zona que normalmente ocuparia caso o efeito de advecção não existisse. No processo de advecção os contaminantes apresentam uma velocidade igual à média linear da velocidade da água subterrânea (Fetter, 2001).

Concomitante ao processo de transporte, os fenômenos de retardação, adsorção e de degradação (biológica ou inorgânica) podem ocorrer atenuando as concentrações de contaminantes dissolvidos na água subterrânea.

A adsorção de uma substância presente na água pelo solo (i.e. argilas e matéria orgânica) é causada por processos químicos e interações entre os elementos já mencionados.

A afinidade de uma substância em se manter na fase sólida ou dissolvida é mensurada por meio do coeficiente de partição:

$$K_d = \left(\frac{S}{C} \right) \quad (17)$$

Onde:

K_d = coeficiente de partição (L/kg);

S = concentração de contaminante adsorvido (mg/kg) e

C = concentração em equilíbrio na água (mg/L).

Para os compostos orgânicos o coeficiente de adsorção pode ser escrito como:

$$K_d = k_{oc} \cdot f_{oc} \quad (18)$$

Onde:

k_{oc} = coeficiente de partição do composto entre o carbono orgânico do solo e a água;

f_{oc} = quantidade em porcentagem de peso de carbono orgânico no solo.

Obtido o K_d e utilizando os parâmetros de densidade do solo (ρ_s) e a porosidade total (η) é possível determinar o fator de retardamento (R_f), que indica uma relação inversa entre a velocidade do contaminante em relação à da água.

$$R_f = 1 + \frac{(k_d \cdot \rho_s)}{\eta} \quad (19)$$

Quanto aos processos de degradação, um contaminante pode sofrer transformações abióticas, tais como as reações de oxi-redução, hidrólise, substituição e o decaimento radioativo. Já nos processos de biodegradação em geral participam do processo bactérias, fungos ou protozoários que utilizam parte ou todo composto em seu metabolismo.

Estas reações ocorrem de acordo com a equação de decaimento radioativo expressos pela seguinte equação:

$$[C] = [C_0] \exp^{-(\ln 2 / \lambda) t} \quad (20)$$

Onde:

$[C]$ = Concentração do elemento após decaimento;

$[C_0]$ = Concentração do elemento na ausência de decaimento;

λ = Tempo de meia-vida do elemento;

t = Tempo de decaimento.

3.3.1. Modelo matemático de transporte

3.3.1.1. Programa MT3DMS®

O programa MT3DMS® foi desenvolvido por Zheng em 1990 e soluciona as equações para múltiplas espécies de compostos químicos dissolvidos na água subterrânea, considerando apenas a degradação de primeira ordem. Segundo Zheng (1995), a equação tridimensional de transporte transiente de compostos químicos em meios porosos (eq. 21), pode ser obtida combinando os mecanismos de transporte em meios porosos e o decaimento de primeira ordem.

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right]}_{(1)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C)}_{(2)} + \underbrace{\frac{q_s}{\theta} C_s}_{(3)} - \underbrace{\lambda \left[C + \frac{\rho_b}{\theta} \bar{C} \right]}_{(4)} = \underbrace{R \left[\frac{\partial C}{\partial t} \right]}_{(5)} \quad (21)$$

- (1) - termo dispersivo;
- (2) - termo advectivo;
- (3) - termo que descreve a fonte ou sumidouro;
- (4) - termo que descreve reações químicas de decaimento de 1ª ordem e adsorção;
- (5) - termo que descreve o retardamento.

x_i - distância da respectiva coordenada cartesiana no eixo [D];

D_{ij} - Coeficiente de dispersão [L^2T];

C - Concentração do composto químico em fase dissolvida [M/L^3];

v_i - Velocidade da água [L/T], calculada pelo modelo de fluxo;

q_s - Fluxo volumétrico devido a fontes (poços de bombeamento/injeção), por unidade de aquífero [$1/T$];

λ - Constante de decaimento de 1ª ordem [$1/T$];

C_s - Concentração da água injetada [M/L^3];

θ - Porosidade total do solo;

ρ_b - Densidade global do solo;

R - Coeficiente de retardamento descrito por:

$$R = 1 + \frac{\rho_b \partial \bar{C}}{\theta \partial C} \quad (22)$$

$\bar{C}$ - Concentração do composto químico adsorvido na superfície dos sólidos [$M M^{-1}$];

t - Tempo [T]

3.3.1.2. Programa RT3D

O programa RT3D (*Reactive Multispecies Transport in 3 Dimension*), originalmente desenvolvido por Clement (1997), realiza a projeção de transporte de compostos múltiplos considerando as espécies móveis e imóveis. A equação de transporte usada é descrita da seguinte forma:

$$\underbrace{\frac{\partial C_k}{\partial t}}_{(1)} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C_k}{\partial x_j} \right)}_{(2)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C_k)}_{(3)} + \underbrace{\frac{q_s}{\theta} C_{sk}}_{(4)} + \underbrace{r_c}_{(5)} \quad (23)$$

Onde $k = 1, 2, \dots, m$

$$\frac{d\tilde{C}_{im}}{dt} = \tilde{r}_c \quad (24)$$

Onde $im = 1, 2, \dots, (n-m)$

(1) - Termo que define o coeficiente de retardamento para espécie k .

(2) - Termo dispersivo.

(3) - Termo advectivo.

(4) - Termo que descreve a fonte ou sumidouro.

(5) - Termo que define o coeficiente estequiométrico de campo calculado para a reação.

m - número total de espécies móveis.

n - número total de espécies.

C - concentração do composto químico em fase dissolvida de k espécies $[M/L^3]$.

t - tempo $[T]$.

x_i - distância da respectiva coordenada cartesiana no eixo $[D]$.

D_{ij} - coeficiente de dispersão $[L^2/T]$.

v_i - velocidade da água $[L/T]$, calculada pelo modelo de fluxo.

q_s - fluxo volumétrico devido a fontes (poços de bombeamento/injeção), por unidade de aquífero $[1/T]$.

C_s - concentração da água injetada $[M/L^3]$.

θ - porosidade total do solo.

r_c - taxa de todas as reações que ocorrem na fase móvel.

$\tilde{C}_{im}$ - concentração de espécies imóveis de "im" espécies $[M/M]$ ou $[M/L^3]$.

$\tilde{r}_c$ - taxa de todas as reações que ocorrem na fase sólida $[M/MT]$ ou $[ML^3/T]$.

No programa existem diversos módulos que simulam a degradação simples e sequencial via aeróbica ou aneróbica para o tetracloroetileno, tricloroetileno, dicloroetileno e cloreto de vinila.

Utilizando-se o módulo de decaimento sequencial o programa calcula as seguintes equações:

$$R_P \frac{\partial [PCE]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial [PCE]}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial (v_i [PCE])}{\partial x_i} + \frac{q_s}{\theta} [PCE]_s - K_{Pce} [PCE] \quad (24)$$

$$R_T \frac{\partial [TCE]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial [TCE]}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial (v_i [TCE])}{\partial x_i} + \frac{q_s}{\theta} [TCE]_s + Y_{Tce/Pce} K_{Pce} [PCE] - K_{Tce} [TCE] \quad (25)$$

$$R_D \frac{\partial [DCE]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial [DCE]}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial (v_i [DCE])}{\partial x_i} + \frac{q_s}{\theta} [DCE]_s + Y_{Dce/Tce} K_{Pce} [TCE] - K_{Dce} [DCE] \quad (26)$$

$$R_V \frac{\partial [CV]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial [CV]}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial (v_i [CV])}{\partial x_i} + \frac{q_s}{\theta} [CV]_s + Y_{CV/DCE} K_{DCE} [PCE] - K_{CV} [CV] \quad (27)$$

Onde:

- R_P - Coeficiente de Retardamento para espécie tetracloroetileno (PCE)
- R_T - Coeficiente de Retardamento para espécie tetracloroetileno (TCE)
- R_D - Coeficiente de Retardamento para espécie tetracloroetileno (DCE)
- R_C - Coeficiente de Retardamento para espécie tetracloroetileno (CV)
- K_{Pce} - taxa de decaimento de primeira ordem para espécie tetracloroetileno (PCE)
- K_{Tce} - taxa de decaimento de primeira ordem para espécie triclouroetileno (TCE)
- K_{Dce} - taxa de decaimento de primeira ordem para espécie dicloroeteno (DCE)
- K_{Cv} - taxa de decaimento de primeira ordem para espécie cloreto de vinila (CV)
- $Y_{Tce/Pce}$ - 0,792 - coeficiente estequiométrico calculado para reação entre tce e pce
- $Y_{Tce/Dce}$ - 0,738 - coeficiente estequiométrico calculado para reação entre dce e tce
- $Y_{Cv/Dce}$ - 0,644 - coeficiente estequiométrico calculado para reação entre cv e dce
- $[x]$ - Concentração do composto químico em fase dissolvida de k espécies [M/L³];
- t - Tempo [T];
- x_i - Distância da respectiva coordenada cartesiana no eixo [D];
- D_{ij} - Coeficiente de Dispersão [L²/T];
- v_i - Velocidade da água [L/T], calculada pelo modelo de fluxo;
- q_s - Fluxo volumétrico devido a fontes (poços de bombeamento/injeção), por unidade de aquífero [1/T];
- C_s - Concentração da água injetada [M/L³];
- θ - Porosidade total do solo;
- rc - Taxa de todas as reações que ocorrem na fase móvel.

Como pode ser verificado neste tipo de reação são considerados nas reações de degradação, apenas os compostos dissolvidos, condição conservadora adotada pelo programa.

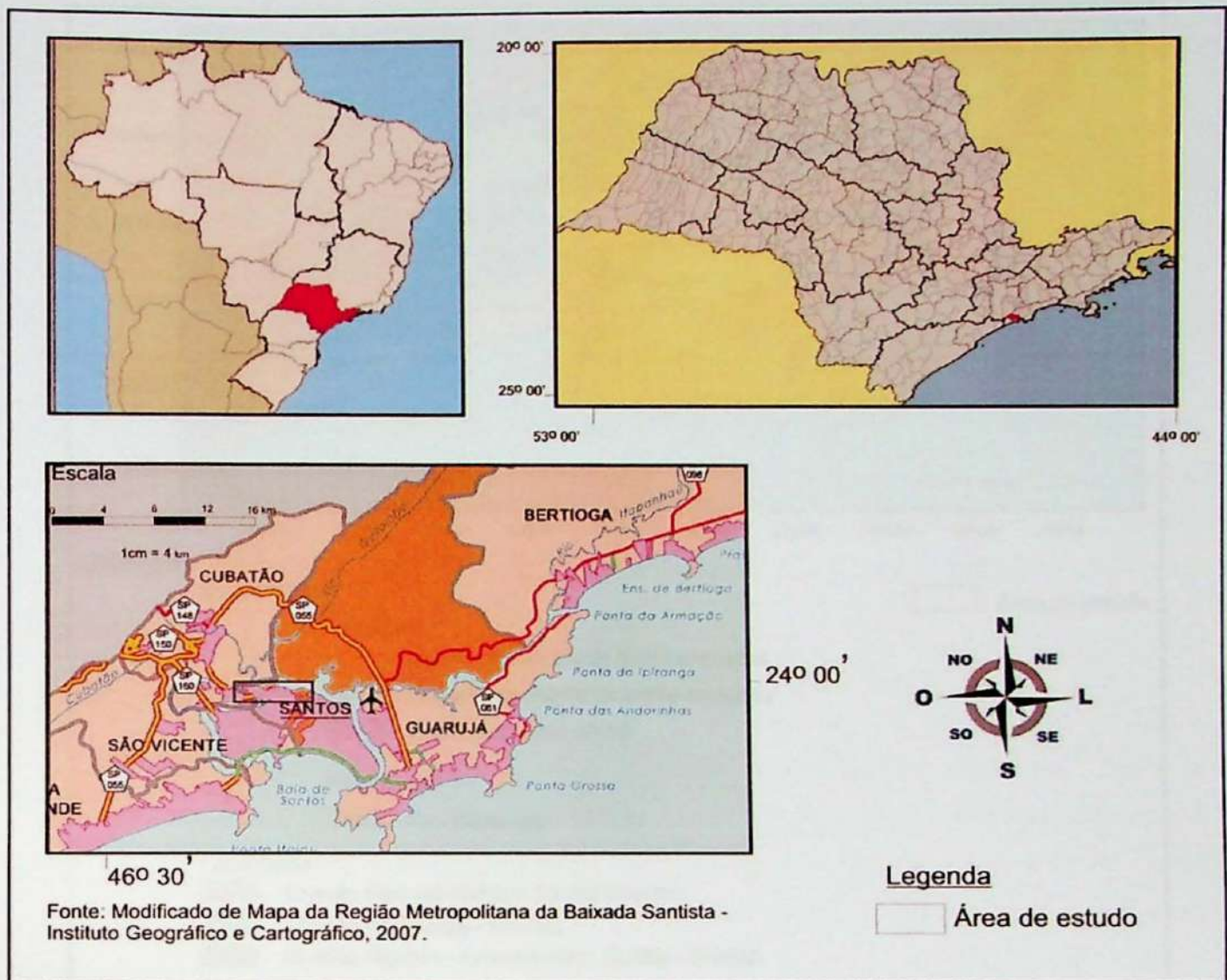
4. ÁREA DE ESTUDO

4.1. Localização e acesso

A área de estudo localiza-se na região costeira litorânea do estado de São Paulo, próximo às coordenadas 23° 55'S e 46° 22'W no município de Santos, bairro da Alemoa ou Alamoia como está apresentado na **Figura 5**.

O acesso de São Paulo (capital) à região pode ser feito pela rodovia dos Imigrantes, até a interligação com a Rodovia Anchieta (SP-150), seguindo até o viaduto Doutor Paulo Bonavides e, por fim, a rua Augusto Scaraboto.

Figura 5 - Mapa de localização da área de estudo.



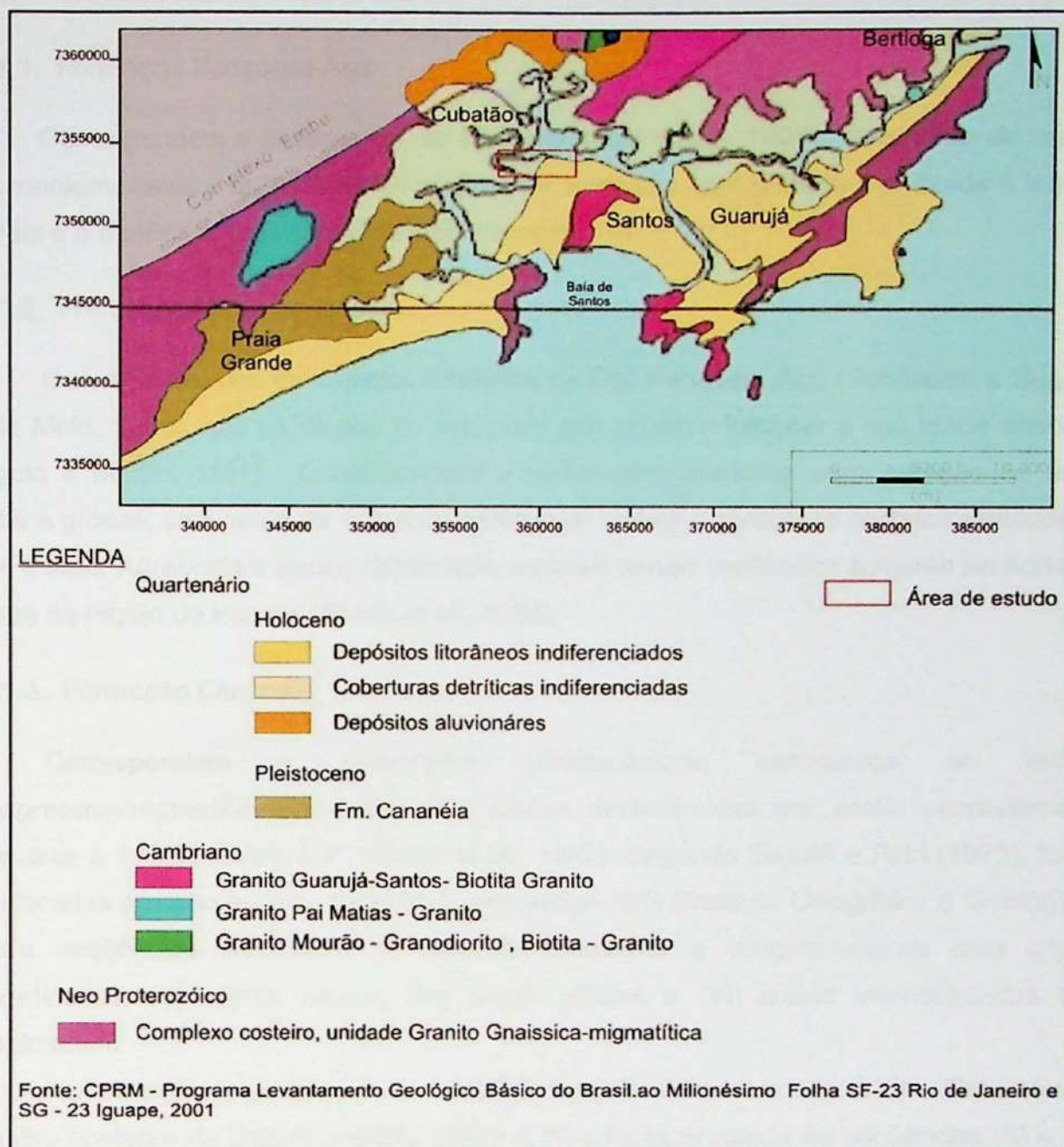
4.2. Contexto Geológico Regional

A área de interesse está inserida em um contexto geológico composto por rochas do embasamento cristalino pré-cambriano e coberturas sedimentares quaternárias (**Figura 6**) (Suguio e Martin, 1994).

O embasamento cristalino estende-se por toda a linha de costa e está representado principalmente pela feição geomorfológica da Serra do Mar (Silveira, 1964). Constituído predominantemente por gnaisses, aos quais associam-se metassedimentos diversos (Hasui, et. al, 1994). Estes litotipos foram atribuídos ao Complexo Costeiro devido à dificuldade de distinguir entre os diversos gnaisses e muitos migmatitos de idades distintas (Hasui et. al., 1984), geralmente cortados por diques de diabásio e lamprófios.

As coberturas sedimentares de idades quaternárias distribuem-se ao longo da planície costeira de forma heterogênea, sendo estes depósitos progressivamente menos abundantes em direção à região da Baía Grande no Rio de Janeiro e mais presentes em direção à região de Iguape.

Figura 6 - Principais litotipos e sua distribuição na região da Baixada Santista.



Durante décadas acreditou-se que os sedimentos foram depositados em único ciclo de sedimentação, contínuo e ininterrupto sem nenhum processo erosivo (Pacheco Silva, 1953). No entanto, o processo formador das planícies costeiras brasileiras está condicionado às variações do nível relativo do mar, associados principalmente às flutuações glácio-eustáticas ocorridas durante dois eventos transgressivos/regressivos principais, no Pleistoceno Superior e Holoceno, ambos em ambientes marinhos rasos.

A proposta estratigráfica regional, segundo Suguio e Martin (1994), apresenta quatro unidades litoestratigráficas da base para o topo, assim denominadas: Fm. Pariquera-Açu, Fm. Morro de Icapara, Fm. Cananéia e Fm. Ilha Comprida.

4.2.1. Unidades litoestratigráficas

4.2.1.1. Formação Pariquera-Açu

Correspondem a sedimentos de idade neógena (Melo, 1990), constituída de orto e paraconglomerados e de sedimentos argilosos e arenosos, cuja gênese é atribuída à leques aluviais e à depósitos lacustres distalmente associados.

4.2.1.2. Formação Morro de Icapara

Ocorre acima dos sedimentos terciários da Fm. Pariquera-Açu (Sundaram e Suguio, 1985; Melo, 1990), não se dispõe de materiais que possam fornecer a sua idade absoluta (Suguio e Martin, 1994). Correspondem a sedimentos arenosos com variação de areia média a grossa, sem qualquer estrutura sedimentar visível e apresenta contatos erosivos na base e topo. Apresentam pouca distribuição espacial sendo verificados somente ao norte de Iguape na região de Icapara (Martin et al., 1988).

4.2.1.3. Formação Cananéia

Correspondem a sedimentos pleistocênicos, associados ao evento transgressivo/regressivo Cananéia, com idades determinadas em corais provavelmente anteriores a 120.000 anos A.P. (Martin et al., 1982). Segundo Suguio e Petri (1973), foram identificadas em sondagens, realizadas pelo antigo IGG (Instituto Geográfico e Geológico), quatro seqüências litológicas: (I) camadas arenosas e conglomeráticas com argilas subordinadas, (II) argilas silticas, (III) areias silticas e (VI) areias inconsolidadas bem selecionadas.

Na acepção original apenas a seqüência (VI) corresponderia à Fm. Cananéia no trabalho posterior de Suguio e Martin (1978 a, b) e foi incorporada às seqüências (II) e (III). Estudos de detalhe (Suguio e Tessler, 1987) permitiram verificar estruturas singenéticas representativas de ambientes deposicionais de mar raso. Areias finas com laminações definidas por minerais opacos e intercalações areno-argilosas, exibindo acamamentos ondulados, lenticulares e *flaser* associados a intensas bioturbações e estruturas de sobrecarga, são possivelmente relacionados à face litorânea superior (*upper shoreface*).

A Fm. Cananéia em geral ocorre continuamente ao longo das planícies costeiras. Na metade sul do litoral paulista, os últimos afloramentos são encontrados no município de Bertioga, próximo ao vale do rio Itapanhaú, bem como alguns resquícios de terraços ao norte da planície de Caraguatatuba.

A espessura dessa formação, com base em furos de sondagens, deve ser superior a 30 m (Geobrás S.A., 1966; Fulfaro et al., 1976), cujas superfícies delimitantes são erosivas

em relação às Formações Pariquera-Açu e Morro de Icapara, sotopostas, bem como em relação a Fm. Ilha Comprida, superposta (Suguio e Martin, 1994).

4.2.1.4. Formação Ilha Comprida

São depósitos formados durante a transgressão Santos (Suguio e Martin, 1978a), principalmente entre os últimos 6.000 e 7.000 anos A.P., cujas idades foram obtidas a partir de datações pelo método do radiocarbono em mais de 100 amostras, coletadas no litoral paulista.

Segundo Suguio e Martin (1994), os sedimentos são em geral muito parecidos aos da Fm. Cananéia, possivelmente devido à semelhança dos ambientes deposicionais, e parte desses sedimentos serem resultado do retrabalhamento da formação mais antiga. Predominam areias finas a muito finas, formando terraços recobertos por cordões litorâneos. Ao lado desses depósitos marinhos ocorrem, freqüentemente, depósitos areno-argilosos de origem flúvio estuarina/lagunar. Depósitos eólicos são pouco conspícuos em toda a planície costeira paulista.

A distribuição desses depósitos é mais restrita na planície costeira Cananéia – Iguape, ocorrendo mais conspicuamente na Ilha Comprida. A partir de Santos os depósitos holocênicos passam a predominar, sendo praticamente exclusivos na porção norte do litoral do estado. A espessura da Fm. Ilha Comprida situa-se entre 10 e 20 m.

A respeito do freqüente uso desta unidade (e também da chamada Formação Cananéia) na literatura sobre Quaternário brasileiro, sua distinção não se valeu de critérios litológicos e sim, cronológicos (Nascimento Junior, 2006). Como notado por Tessler (1988), seriam diferentes séries cronoestratigráficas, e não formações.

5. MÉTODOS DE TRABALHO

5.1. Instalação de poços de monitoramento

O procedimento de instalação de poços de monitoramento foi efetuado ao longo de diversas etapas. Normalmente, durante o processo de instalação contrata-se uma empresa especializada para esta finalidade, cuja equipe de sondadores é acompanhada de um geólogo ou analista ambiental, que é o responsável por realizar a descrição litológica, bem como coordenar a instalação de forma que o poço atenda à finalidade a que se propõe.

A instalação dos poços de monitoramento foi realizada conforme os procedimentos descritos na norma ABNT NBR 13895 – construção de poços de monitoramento e amostragem – procedimento substituído pela ABNT NBR 15495-1:2007 – poços de monitoramento de águas subterrâneas em aquíferos granulares — Parte 1: Projeto e construção.

5.1.1. *Locação e procedimentos de perfuração*

Os locais e a profundidade de cada poço foram definidos previamente levando em consideração o tipo de contaminante, geologia local e nível da água. As perfurações foram feitas utilizando-se trado manual (**Figura 7**) nos primeiros metros e posteriormente bomba balde, usando-se revestimento de aço (**Figura 8**) de quatro polegadas de diâmetro para evitar o colapso das paredes do poço.

Figura 7 - Perfuração a trado



Figura 8 - Inserção do revestimento de aço.



Fonte: arquivos pessoais

O avanço na profundidade continuou com o uso da bomba balde (**Figura 9**). Durante esta etapa foi adicionada uma quantidade de água no interior do tubo com a finalidade de fluidificar o material inconsolidado (areia e argila), o qual foi trazido no interior da bomba e disposto sobre uma lona de PVC.

Figura 9 - Equipamento utilizado para retirada de material inconsolidado



Fonte: arquivos pessoais

Durante esse procedimento, o tipo de sedimento e a profundidade de investigação foram registrados em fichas, bem como a ocorrência de qualquer anormalidade que inviabilizasse a instalação.

Os principais problemas verificados nessa fase foram relativos a fragmentos líticos ou materiais de aterro de dimensões entre seixo e bloco, bem como galerias, estruturas em concreto, encanamentos etc. Nestes casos, a solução encontrada foi o deslocamento do local de perfuração.

5.1.2. Instalação

Ao atingir a profundidade previamente estipulada para o poço, foi inserido no orifício o tubo de revestimento acoplado ao filtro (com ranhuras de 0,75 mm), ambos feitos de PVC geomecânico com diâmetro de duas polegadas.

Realizou-se a centralização do tubo de revestimento e do filtro em relação às paredes do orifício. O espaço anular externo da seção filtrante foi preenchido com pré-filtro tipo pérola, cuja granulometria especificada foi de 1 a 2 mm e, acima do pré-filtro, colocou-se uma camada de bentonita granulada (Compactolit®) e calda de bentonita. Esse procedimento tem como finalidade criar um selo que impeça a mistura de água entre níveis distintos do aquífero.

A proteção sanitária do poço foi feita com um tubo de PVC com diâmetro de quatro polegadas no entorno do tubo de revestimento. Este espaço anular externo foi então preenchido utilizando-se calda de cimento “Portland®” e acima deste foi feita a proteção externa com tampa de aço, “cap” de pressão, cadeado e placa de identificação.

5.1.3. Desenvolvimento do poço

Este procedimento tem como finalidade remover as partículas de solo e bentonita que penetraram no interior do pré-filtro. Para isso utiliza-se uma mangueira acoplada a uma válvula (Watterra®), e realiza-se o pistoneamento do conjunto no interior do poço até ocorrer o esgotamento do mesmo. Este processo é efetuado até se obter uma água com menor turbidez.

5.2. Amostragem de Solo

A amostragem de solo foi realizada conforme a norma técnica definida no Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas da CETESB e utilizou-se também a norma EPA 600/88-89/046 – *Soil Sampling Quality Assurance User's Guide*.

Foram coletadas 20 amostras de solo para análises geoquímicas (carbono orgânico) e 10 amostras para ensaios geotécnicos. Os métodos de coleta para estes dois tipos de amostras estão descritos no item 5.3.1.

5.2.1. Procedimentos de coleta

A coleta de amostras de solo para análise geoquímica (fração de carbono orgânico) foi realizada em intervalos regulares, a cada metro de profundidade, para avaliação visual e para medição de vapores orgânicos *in situ*, utilizando-se um analisador com sensor eletroquímico de ionização da marca *Thermo Gastech Innova SV*[®].

A seleção das amostras foi feita com base nas características organolépticas, tais como odor, coloração e resultados da análise '*in situ*' de vapores orgânicos. Foram coletadas amostras do solo natural e na interface com o aterro.

A coleta de amostras indeformadas para ensaio geotécnico foi realizada em locais cujas características naturais dos solos aparentemente estavam mais preservadas. Para a amostragem foram retirados os primeiros centímetros de solo e aí introduzido um tubo de quatro polegadas até 20 cm de profundidade.

O solo do entorno externo desse tubo foi retirado para facilitar a remoção do tubo contendo a amostra indeformada, a qual foi envolvida em faixas de atadura e posteriormente embebida em parafina.

Este procedimento tem como finalidade preservar a umidade natural durante o deslocamento até o laboratório.

As amostras coletadas para o ensaio geotécnico foram retiradas de dois níveis distintos, referentes à camada de aterro e à camada de solo natural.

5.2.2. Ensaio geotécnico

As amostras indeformadas foram enviadas ao laboratório de Engenharia e Pesquisas Tecnológicas (EPT) para a realização dos seguintes ensaios geotécnicos: análise granulométrica, massa específica aparente (NBR-9813/87), determinação do teor de umidade (NBR-6457/86), índices físicos – relação de volume.

5.3. Medições dos níveis de água

Os níveis de água estáticos dos poços de monitoramento utilizados no modelamento foram obtidos a partir de uma campanha de medição realizada no dia 31/10/2007. Estas medições foram realizadas por 3 equipes de campo num período de 4 horas, aproximadamente.

5.4. Coleta de água subterrânea

O método adotado para a coleta de água subterrânea segue as referências do "Guia de Coleta e Preservação de Amostras de Água e Solo" - CETESB/1988-SP e os procedimentos descritos e na norma ASTM D-6771-02 - "*Standard Practice for Low Flow Purging and Sampling for Wells and Devices Used for Ground Water Quality Investigations*" de janeiro de 2002.

Para a amostragem de água subterrânea, inicialmente são verificadas as condições de estado do poço, condições climáticas nas últimas vinte e quatro horas, medição do nível estático da água e a verificação da existência de fase livre não aquosa (NAPL) com equipamento Solinst® Modelo 122 (Interface Meter).

A amostragem realizada pelo método de baixa vazão (*Low Flow*) tem como finalidade reduzir a turbulência dentro do poço e no pré-filtro, obtendo-se uma amostra representativa do aquífero. Para isso posicionou-se uma bomba pneumática de bexiga na profundidade de sua seção filtrante, controlando-se as vazões da bomba de modo a causar um mínimo de rebaixamento.

Durante a micro purga os parâmetros físico-químicos, tais como oxigênio dissolvido, pH, Eh e condutividade elétrica, foram analisados *in-situ*. Este procedimento é realizado para verificar a estabilização das características da água e esta condição é verificada quando são obtidas as seguintes faixas de valores:

- Nível de água – quando o rebaixamento do nível dinâmico é inferior a 10 cm de coluna d'água;
- Temperatura – variação das três últimas leituras inferior a 3%;
- pH – variação das três últimas leituras inferior a 0,1 unidade;
- Potencial Redox Eh – variação das três últimas leituras inferior a 10 mV;
- Oxigênio Dissolvido OD – variação das três últimas leituras inferior a 10%;
- Condutividade Elétrica – variação das três últimas leituras inferior a 3%.

A estabilização dos parâmetros físico-químicos indica que a água é representativa do aquífero. A amostragem para a análise de compostos orgânicos voláteis foi efetuada após esta etapa e os frascos foram preenchidos com água por completo evitando-se a formação de bolhas de ar.

Estes frascos foram preservados com ácido clorídrico e mantidos refrigerados até a entrega no laboratório. Ao término do procedimento de coleta todos os equipamentos não descartáveis foram descontaminados utilizando detergente líquido não fosfatado (*Extran*®) e água deionizada.

5.5. Análise das amostras de água subterrânea

As análises químicas foram realizadas para a determinação dos compostos orgânicos voláteis (*Volatile Organic Compounds- VOC*), utilizando a metodologia USEPA – 5021A, USEPA SW 8015D e USEPA 8021B.

6. RESULTADOS

6.1. Hidrogeologia

A área apresenta um aquífero granular de porosidade primária localizado nas unidades mais arenosas, cujas zonas de descarga correspondem aos rios Saboó e São Jorge/Casqueiro, bem como algumas drenagens de menor porte que constituem o sistema de fluxo local.

Abaixo dos sedimentos ocorre o embasamento definido como migmatítico gnáissico. Neste contexto, a contribuição do aporte de água ocorre por meio da porosidade secundária gerada pelas falhas e fraturas, e também proveniente da camada sobrejacente de solo residual, constituída por siltitos e arenitos, com quantidades subordinadas de argila e fragmentos líticos. Nesta zona é instalada a maior parte dos poços de captação de água na região.

Nestas unidades do aquífero inferior a principal zona de descarga é o mar, caracterizando o sistema de fluxo regional. A região apresenta baixos gradientes hidráulicos em virtude de estar localizada na planície litorânea e grande variação das cargas hidráulicas influenciadas pelos ciclos de maré. Por fim, os aquíferos litorâneos sofrem influência das condições de equilíbrio hidrodinâmico entre a água doce e a água do mar, fenômeno denominado cunha salina.

6.1.1. Informações dos poços de monitoramento

Foi utilizada neste trabalho a informação de 166 poços de monitoramento. As informações gerais de cada poço estão apresentadas no **Anexo 1**.

6.2. Descrição Litológica

As informações acerca das unidades litoestratigráficas foram obtidas por meio de sondagens e ensaios SPT, sondagens a trado rasas e instalação de poços de monitoramento (**Anexo 1**).

A correlação entre as unidades descritas na literatura e as unidades descritas nas atividades de sondagem foi realizada com base no trabalho de Massad (1985), que correlaciona os ensaios SPT às Formações Cananéia e Ilha Comprida.

Por fim, foi proposta a seguinte divisão nas unidades geológicas para os perfis de solo (do topo para a base do perfil): sedimentos de mangues, pântanos e baixos (SMP), sedimentos flúvio-lagunares (Formação Ilha Comprida) (SFL), sedimentos flúvio-marinhos (SFM), sedimentos fluviais (aluviões) (SFA), argilas transicionais (Formação Cananéia) (A), solos residuais (SR) e embasamento gnáissico-migmatítico (MGn). A seguir, são descritas as características de cada uma destas unidades:

6.2.1. Sedimentos de Mangues, Pântanos e Baixos (SMP)

6.2.1.1. Sedimentos de Mangues, Pântanos e Baixos Arenosos (SMPAr)

Predomina areia fina argilosa a pouco argilosa até termos mais siltosos, podendo conter lentes de argila de espessuras milimétricas com pouca compactação. Apresenta cor marrom escura a cinza-escura, contendo freqüentemente restos de vegetais.

6.2.1.2. Sedimentos de Mangues, Pântanos e Baixos Argilosos (SMGAg)

Correspondem aos termos mais argilosos, em geral: argila siltosa e mais raramente argila pouco siltosa a argila arenosa (areia fina), muito mole e de coloração variada (marrom-escura, cinza -escura ou preta).

6.2.2. Sedimentos Flúvio Lagunares (Formação Ilha Comprida) (SFL)

6.2.2.1. Sedimentos Flúvio Lagunares Arenosos (SFLAr)

São constituídos por areia fina siltosa a areia fina pouco argilosa, fofa a pouco compacta, de coloração cinza a cinza-escura. São comuns lentes de argila siltosa cinza-escura de espessura milimétrica. Podem ocorrer gradações locais para areia fina a média.

6.2.2.2. Sedimentos Flúvio-Lagunares Argilosos (SFLAg)

São constituídos por argila, argila siltosa e argila pouco siltosa com intercalações de lentes de areia muito fina a fina, de espessura milimétrica. Eventualmente ocorre argila siltosa, pouco arenosa e, mais raramente, argila arenosa (areia fina). Apresenta alta plasticidade, muito mole a mole, de coloração cinza escura a cinza-escura esverdeada. Ocorrem com freqüência restos vegetais e restos de conchas.

6.2.3. Sedimentos Flúvio-Marinhos (SFM)

Esta unidade é composta por areia fina a média, siltosa ou não, e areia fina a média argilosa, fofa a compacta, de coloração cinza-clara e mais raramente, amarela e cinza-

escura. Podem representar depósitos fluviais mais finos assentados sobre os depósitos de areia grossa aluvial ou depósitos de areia marinha litorânea.

6.2.4. *Sedimentos Fluviais (Aluviões) (SFA)*

Esta unidade é composta por areia média e, mais raramente, areia fina a grossa, pouco argilosa, pouco compacta a medianamente compacta e subordinadamente, fofa ou compacta, de coloração cinza a cinza-clara ou cinza amarelada. Apresenta freqüentemente pedregulhos. Eventualmente pode ser siltosa a pouco siltosa.

6.2.5. *Argilas Transicionais (Formação Cananéia) (A)*

Esta unidade é composta por argilas pouco siltosas com restos de conchas e argila siltosa, pouco arenosa, média a rija e raramente mole, de coloração cinza-escura.

6.2.6. *Solo Residual (SR)12125*

Esta unidade é composta por silte argiloso a silte argiloso pouco arenoso, micáceo e/ou caulinitico, de coloração cinza-esverdeada, mole no topo e rijo a duro em maiores profundidades. Subordinadamente podem ocorrer intercalações de argila siltosa média a dura e de areia fina a média, pouco argilosa, medianamente compacta e compacta.

6.2.7. *Embasamento Gnaisses e Migmatitos (MGn)*

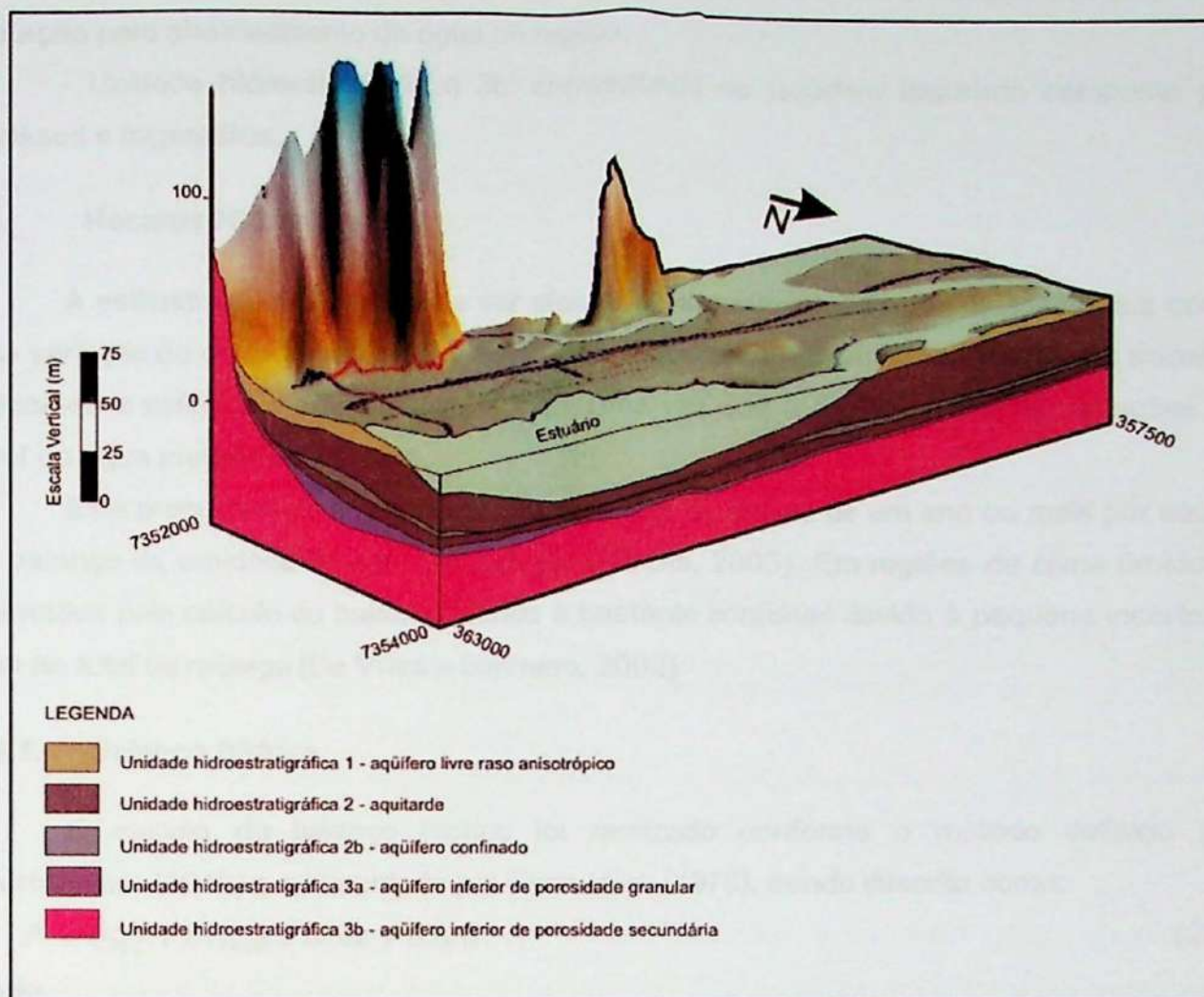
Esta unidade é composta por gnaisses com migmatitos subordinados. No **Anexo 2** estão apresentados os perfis de direções N-S e NE-SW com a disposição das principais unidades litoestratigráficas.

6.3. *Modelo Conceitual*

A elaboração do modelo conceitual assumiu as simplificações pertinentes quanto à geologia e hidrogeologia local, evitando-se o subdetalhamento de forma a manter o modelo matemático representativo.

Os dados obtidos nas sondagens investigativas e SPT e nas instalações dos poços de monitoramento permitiram uma melhor caracterização do aquífero. Na **Figura 10** está representada a divisão das unidades aquíferas e aquítarde em um bloco diagrama onde é possível verificar os domínios destas unidades na área de estudo.

Figura 10 - Unidades hidroestratigráficas.



Fonte: arquivos pessoais

Os estratos de ocorrência regional apresentam uma boa continuidade lateral e pouca variabilidade composicional conferindo verticalmente uma sucessão de cinco camadas definidas com base no predomínio de sedimentos mais arenosos ou argilosos.

Estas camadas compartmentam:

- Unidade hidroestratigráfica 1: aquífero livre anisotrópico e heterogêneo de porosidade intergranular ocorrendo nas porções superiores (com espessura de aproximadamente 10m).
- Unidade hidroestratigráfica 2: aquítarde subjacente (com espessura de aproximadamente 40m).
- Unidade hidroestratigráfica 2b: ocorre dentro da unidade 2 e corresponde a uma camada intermediária arenosa (com aproximadamente 5m de espessura) a qual constitui um aquífero confinado.
- Unidade hidroestratigráfica 3a: sobreposta ao embasamento e é constituída por sedimentos siltosos e arenosos, bem como solo residual (com espessuras variáveis entre 1

e 5m em geral, podendo atingir até 20m). Neste estrato são feitos a maioria dos poços de captação para abastecimento de água na região.

- Unidade hidroestratigráfica 3b: corresponde ao aquífero fraturado composto por gnaisses e migmatitos.

6.4. Recarga Hidráulica

A estimativa de recarga pode ser efetuada por meio de diversos métodos, tais como pela variação do nível d'água (VNA), estimativa darcyniana e balanço hídrico. Neste trabalho utilizou-se a estimativa pelo balanço hídrico, uma vez que a região apresenta variações do nível da água afetadas pela maré.

Este procedimento é adequado para escalas de tempo de um ano ou mais por causa do balanço de umidade do solo (Wahnfried e Hirata, 2005). Em regiões de clima úmido, a estimativa pelo cálculo do balanço hídrico é bastante confiável devido à pequena incerteza, face ao total de recarga (De Vries e Simmers, 2002).

6.4.1. Balanço hídrico

O cálculo do balanço hídrico foi realizado conforme o método definido por Thornthwaite (1948) e apresentado por Fenn et al. (1975), sendo descrito como:

$$P = Q_{off} + ET_{real} + \Delta S_{uz} + \Delta S_{gw} \quad (28)$$

Onde:

P : precipitação (L)

Q_{off} : fluxos superficiais ou subterrâneos para fora da área de estudo (L)

ET_{real} : evapotranspiração real (L)

ΔS_{uz} : Variação na armazenagem de água na zona não saturada (L)

ΔS_{gw} : recarga (L)

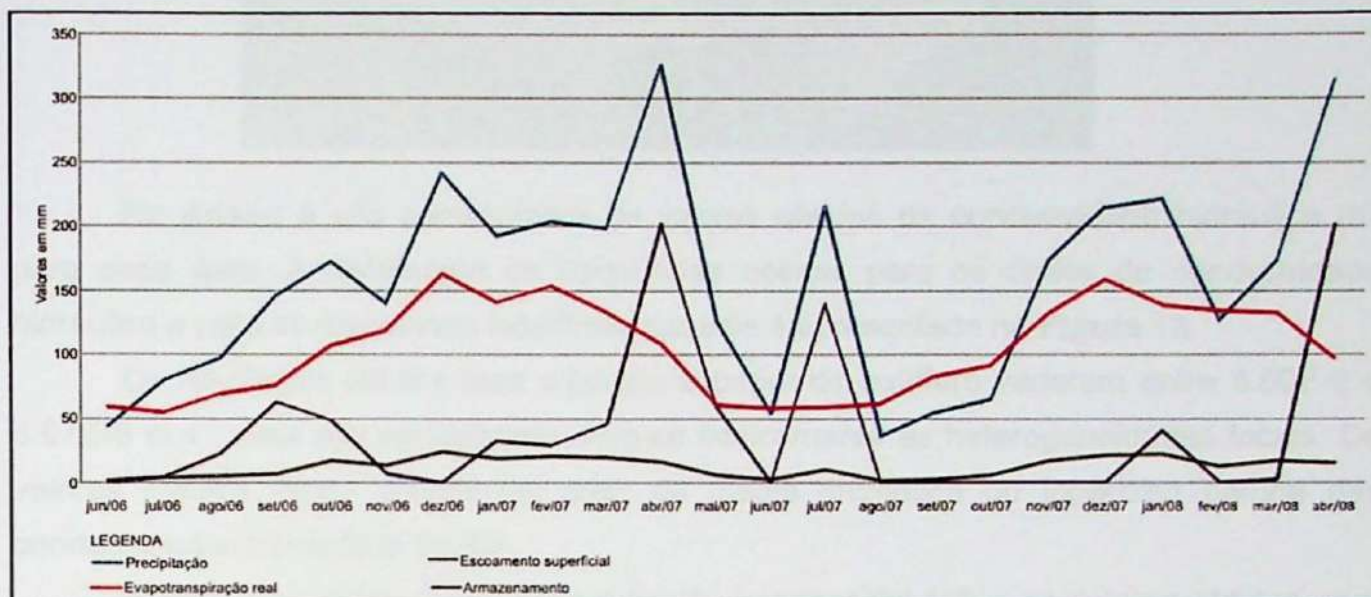
Os dados de precipitação e de evapotranspiração mensal são apresentados no **Anexo 3**, juntamente com os demais parâmetros do balanço hídrico, os quais foram calculados conforme descrito no trabalho de Wahnfried e Hirata (2005).

A região foi analisada durante o período de junho de 2006 a abril de 2008 e a data inicial foi definida com base na época do ano com os menores índices pluviométricos visando reduzir erros assumindo-se uma recarga mínima ou ausente durante este período.

Foi obtida uma recarga de 508,73 mm/ano, em uma área de aproximadamente 5,5 km² sendo atribuído ao modelo um valor de 500 mm/ano. Cabe ressaltar que estes dados devem ser utilizados como valores orientativos, uma vez que a quantificação está sujeita a erros e desvios dentro dos parâmetros utilizados no cálculo do balanço hídrico.

As precipitações mais significativas ocorreram durante os meses novembro a maio analisando-se o período de um ano completo. O armazenamento mais significativo na zona saturada ocorre dentro do período de outubro a abril, como pode ser observado na **Figura 11**.

Figura 11 - Parâmetros do balanço hídrico na região de Santos, SP.



6.5. Condutividades hidráulicas

As condutividades hidráulicas foram obtidas por meio dos ensaios de permeabilidade, também conhecido como *bail-test*. Este procedimento consiste na aquisição das medidas de recuperação ou rebaixamento do nível da água em função do tempo.

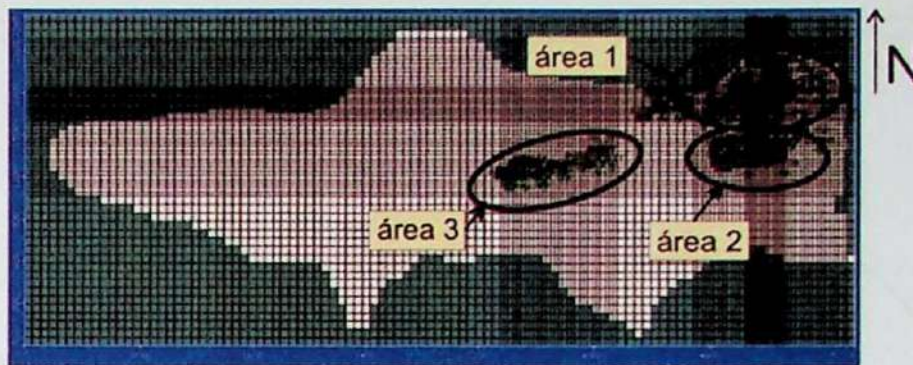
Os resultados de condutividade hidráulica foram calculados pelo *software Aquifer Test for windows*[®], versão 4.1 da *Waterloo Hidrogeologic, Inc.*[®] por meio do método de Horslev foram determinadas as condutividades hidráulicas.

6.5.1. Resultados dos *bail-tests*

Os ensaios de permeabilidade foram feitos para os poços rasos, limitados a profundidades de até 8 m em geral. Nesta porção do aquífero, denominada como aquífero superior, ocorrem os principais casos de contaminação na região e, por consequência, é a zona de interesse para as atividades de monitoramento da água subterrânea.

Os resultados das condutividades estão concentrados em três regiões dentro da área modelada (**Figura 12**). Devido a esta distribuição heterogênea dos dados no interior da área, estes resultados foram tratados para cada uma dessas zonas definidas como área 1, 2 e 3, bem como todos em conjunto.

Figura 12 - Localização das áreas de realização dos ensaios de permeabilidade.



No **Anexo 4** são apresentados os valores obtidos de condutividade hidráulica (K) para cada área. A distribuição de freqüências obtidas para os dados de condutividade hidráulica e para os respectivos logaritmos naturais é apresentada na **Figura 13**.

Os resultados obtidos para a porção superior do aquífero variaram entre $8.60\text{E-}6$ e $6.07\text{E-}8 \text{ m.s}^{-1}$, esta alta variabilidade deve-se basicamente às heterogeneidades locais. Os valores médios foram obtidos por meio da média aritmética do logaritmo natural das condutividades hidráulicas ($\ln(K)$).

A este valor médio foi aplicada a função exponencial (e^x) e os valores obtidos para cada zona, bem como os valores máximos e mínimos de condutividade são apresentados na **Tabela 2**.

Tabela 2 - Valores obtidos de condutividade hidráulica.

Local	Média do $\ln(K)$	Condutividade hidráulica $K \text{ (m s}^{-1}\text{)}$			DP*	CV*
		$K_{\text{médio}}^{**}$	$K_{\text{máximo}}$	$K_{\text{mínimo}}$		
Área 1	-14,91	$3,35\text{E-}07$	$4,33\text{E-}06$	$6,08\text{E-}08$	$1,07\text{E-}06$	1,49
Área 2	-13,60	$1,24\text{E-}06$	$1,16\text{E-}05$	$1,96\text{E-}07$	$2,51\text{E-}06$	1,14
Área 3	-14,18	$6,95\text{E-}07$	$4,20\text{E-}06$	$2,02\text{E-}07$	$1,01\text{E-}06$	1,00
Geral	-14,22	$6,56\text{E-}07$	$8,60\text{E-}06$	$6,07\text{E-}08$	$1,90\text{E-}06$	1,39

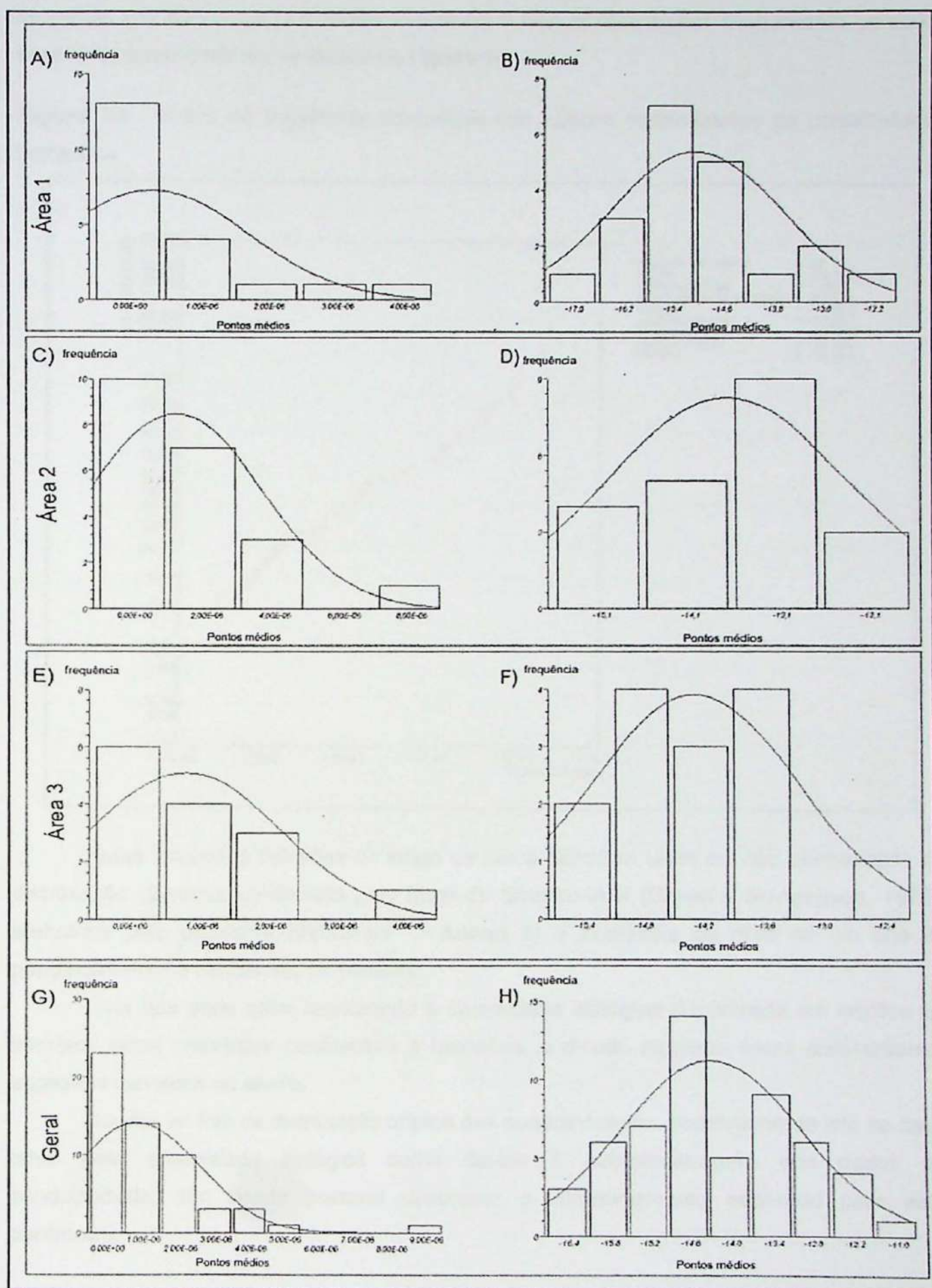
* Os valores de média e de desvio padrão (DP) e coeficiente de variação (CV) utilizados nessas operações não foram normalizados pela função logarítmica.

** Média obtida pelos valores de condutividade normalizados.

Pode-se verificar que na área 1 foram obtidos os menores valores de condutividade hidráulica, sendo o valor médio obtido para a área 3 bem próximo do valor médio geral.

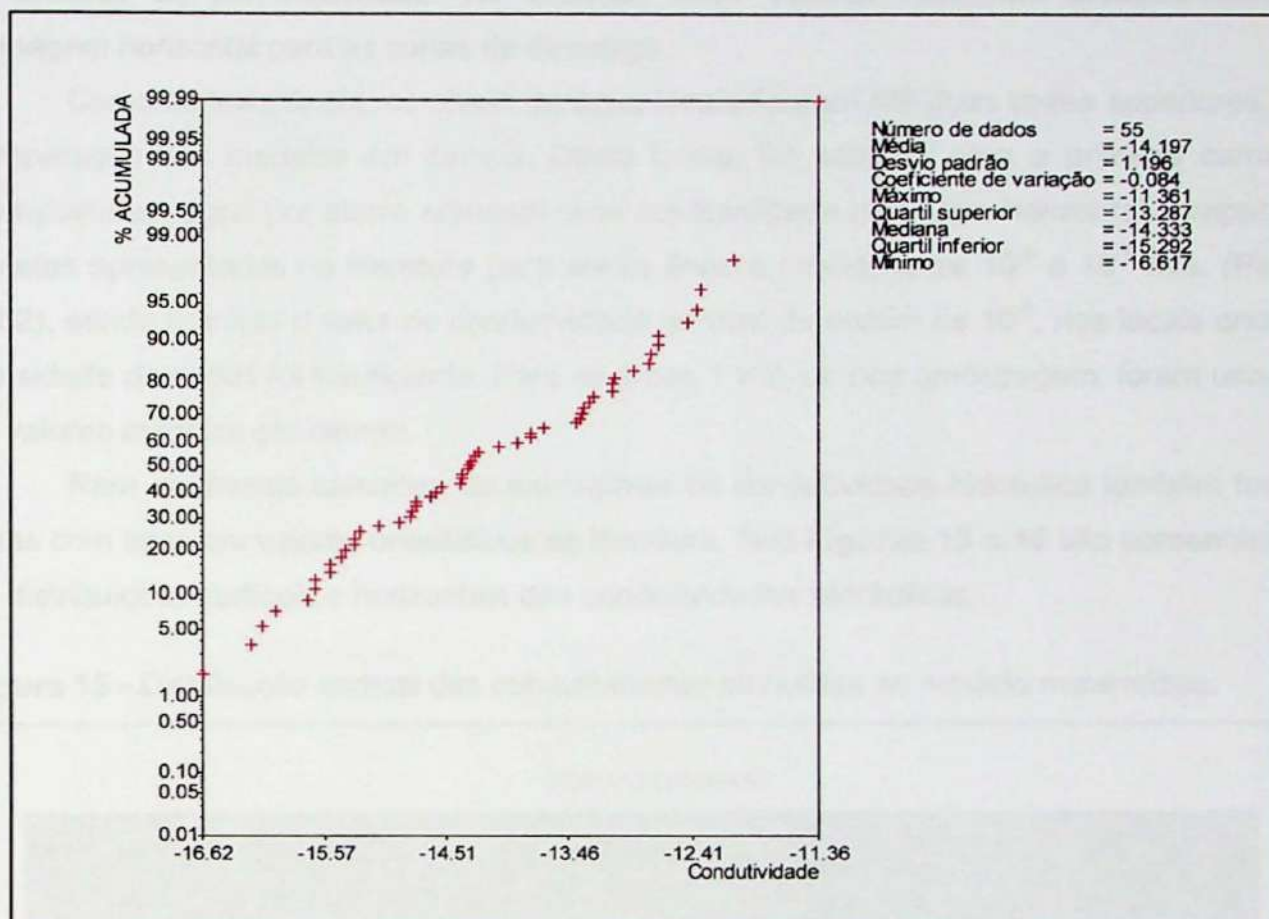
Os histogramas de condutividade hidráulica (A, C, E e G) apresentam distribuição assimétrica positiva, e os valores de coeficiente de variação (CV) sugerem que o tipo de distribuição seria log-normal, condição esperada para distribuição deste parâmetro (Kitanidis, 1997).

Figura 13 - Histogramas dos resultados de condutividade hidráulica.



A curva de frequência acumulada obtida para os valores normalizados pelo logaritmo lançadas em escala de probabilidade aritmética não apresentaram alinhamento conforme uma reta, como pode ser verificado na **Figura 14**.

Figura 14 - Curva de frequência acumulada dos valores normalizados de condutividade hidráulica.



Estas pequenas inflexões ao longo da curva denotam além da não normalidade da distribuição (também confirmada pelo teste de *Shapiro-Wilk* (Green e Mangerison, 1979), efetuados pelo programa StatsDirect® – **Anexo 5**) a existência de mais de um tipo de população dentro do domínio do modelo.

Este fato pode estar relacionado à diversidade litológica encontrada em regiões de interface entre ambientes continentais e marinhos, e devido algumas áreas apresentarem espessas camadas de aterro.

Quanto ao fato da distribuição atípica das condutividades, possivelmente isto se deve tanto pela diversidade litológica como devido à sub-amostragem dos dados de condutividade, não sendo possível descrever o comportamento esperado para este parâmetro.

6.5.2. Condutividade hidráulica adotada no modelo matemático de fluxo

Os diferentes litotipos verificados na área de estudo resultaram na compartimentação de oito zonas de diferentes condutividades hidráulicas.

No modelo matemático de fluxo foram atribuídas à primeira e à segunda camada condutividades hidráulicas horizontais da ordem de 10^{-6} , conforme os valores obtidos com os ensaios de permeabilidade. No entanto, estes valores reduziram drasticamente a drenagem horizontal para as zonas de descarga.

Como consequência, os níveis da água locais ficaram até duas vezes superiores em comparação aos medidos em campo. Desta forma, foi adotada para a primeira camada (composta em geral por aterro arenoso) uma condutividade hidráulica horizontal compatível àquelas apresentadas na literatura para areias finas a média, entre 10^{-5} e 10^{-4} m/s, (Pinto, 2002), sendo mantido o valor de condutividade vertical da ordem de 10^{-6} , nos locais onde a densidade de dados foi insuficiente. Para as áreas 1 e 2, de boa amostragem, foram usados os valores medidos em campo.

Para as demais camadas, as estimativas de condutividade hidráulica também foram feitas com base em valores orientativos da literatura. Nas Figuras 15 e 16 são apresentadas as distribuições verticais e horizontais das condutividades hidráulicas.

Figura 15 - Distribuição vertical das condutividades atribuídas ao modelo matemático.

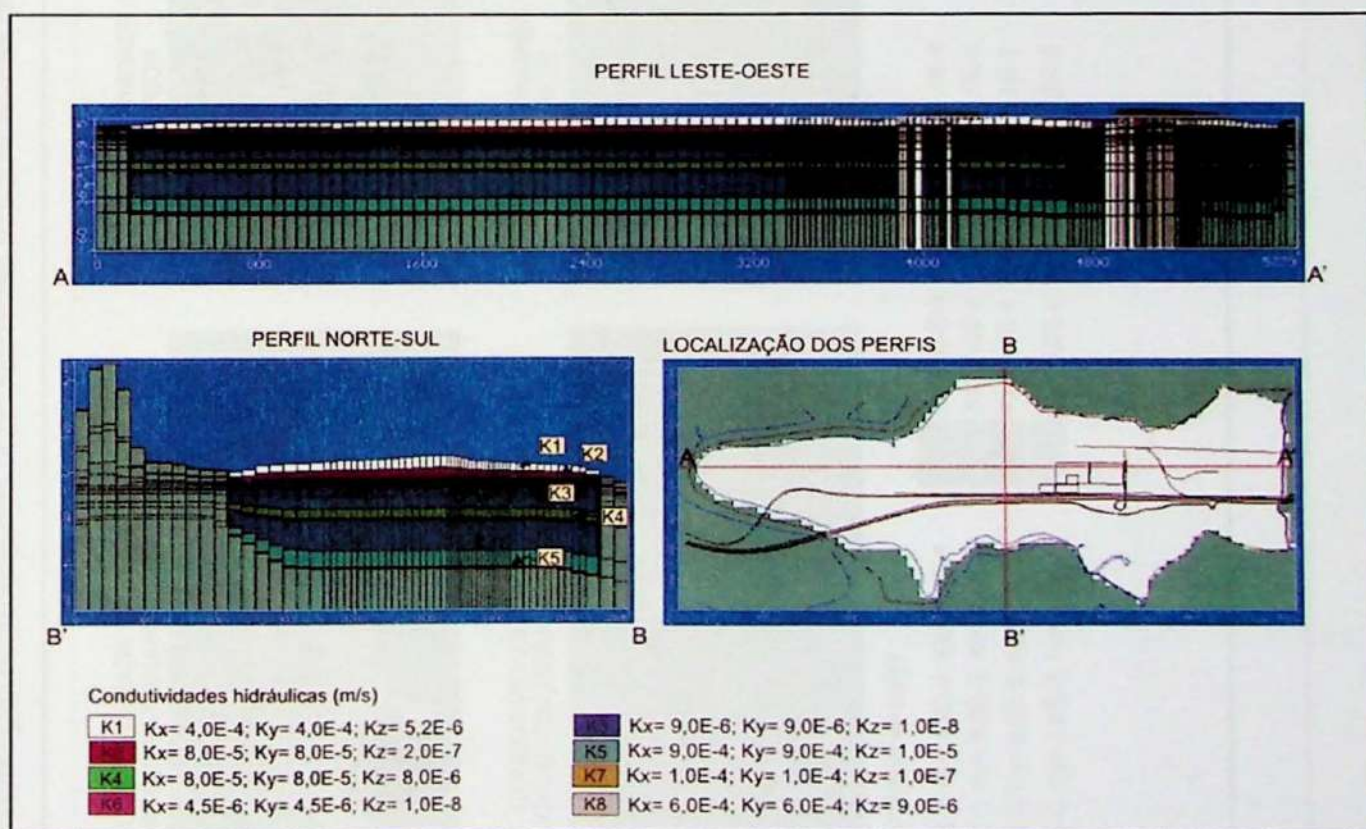
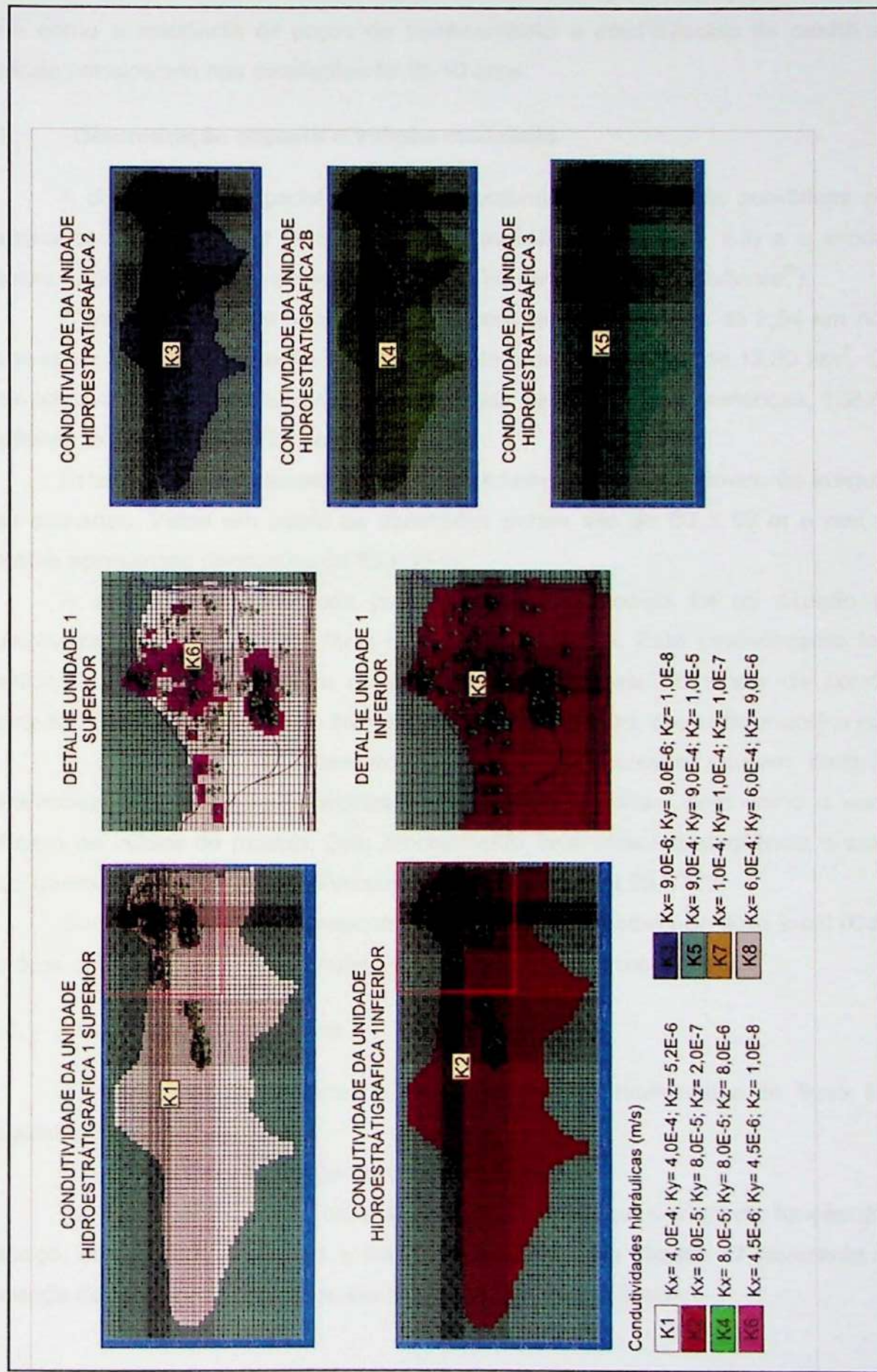


Figura 16 - Distribuição horizontal das condutividades hidráulicas nas diferentes unidades hidroestratigráficas.



7. MODELO NUMÉRICO DE FLUXO ESTACIONÁRIO GERAL

O modelo de fluxo adotado foi do tipo estacionário, portanto, as variações de maré não serão consideradas nas cargas hidráulicas calculadas para os poços de monitoramento, bem como a existência de poços de bombeamento e interferências da cunha salina. O período considerado nas simulações foi de 10 anos.

7.1. Discretização espacial e volume modelado

A discretização espacial inicialmente assumiu seis camadas numéricas principais, delineadas com base nas unidades hidroestratigráficas (**Capítulo 6.3**) e o modelamento dessas superfícies foi feito através do software Surfer 8.0 (*Golden Software®*).

A malha do modelo gerado possui dimensões aproximadas de 2,34 km na direção norte-sul e 5,89 km na direção leste-oeste, com área aproximada de 13,80 km². O modelo final ajustado resultou em uma malha discretizada de 13 camadas numéricas, 128 colunas e 59 linhas, totalizando 98176 células.

Estas células apresentam dimensões variadas na vertical, devido às irregularidades das camadas. Vistas em planta as dimensões gerais são de 60 x 60 m e nas áreas de detalhe apresentam dimensões de 15 x 15 m.

A orientação estabelecida para a malha do modelo foi na direção norte-sul, coincidente com a direção do fluxo da água subterrânea. Este procedimento teve como finalidade alinhar a malha com os componentes principais do tensor de condutividade hidráulica (conforme exposto no item 3.3.2 Equações de fluxo, especificamente a eq. 12).

O processo de detalhamento das áreas de interesse causam distorções nas dimensões das células que encontram-se fora dessas zonas, bem como o aumento do número de células do modelo. Este procedimento teve como consequência o aumento do erro (*normalized RMS*) que era inicialmente de 7,908% para 29,372%.

Devido a esse fato foi proposta a criação de um modelo de fluxo local (**Capítulo 8**) na área de interesse para as simulações de transporte de contaminante.

7.2. Condições de contorno

As condições de contorno adotadas no modelo matemático de fluxo foram dos seguintes tipos:

- Tipo 1 ou Dirichlet (carga hidráulica especificada)

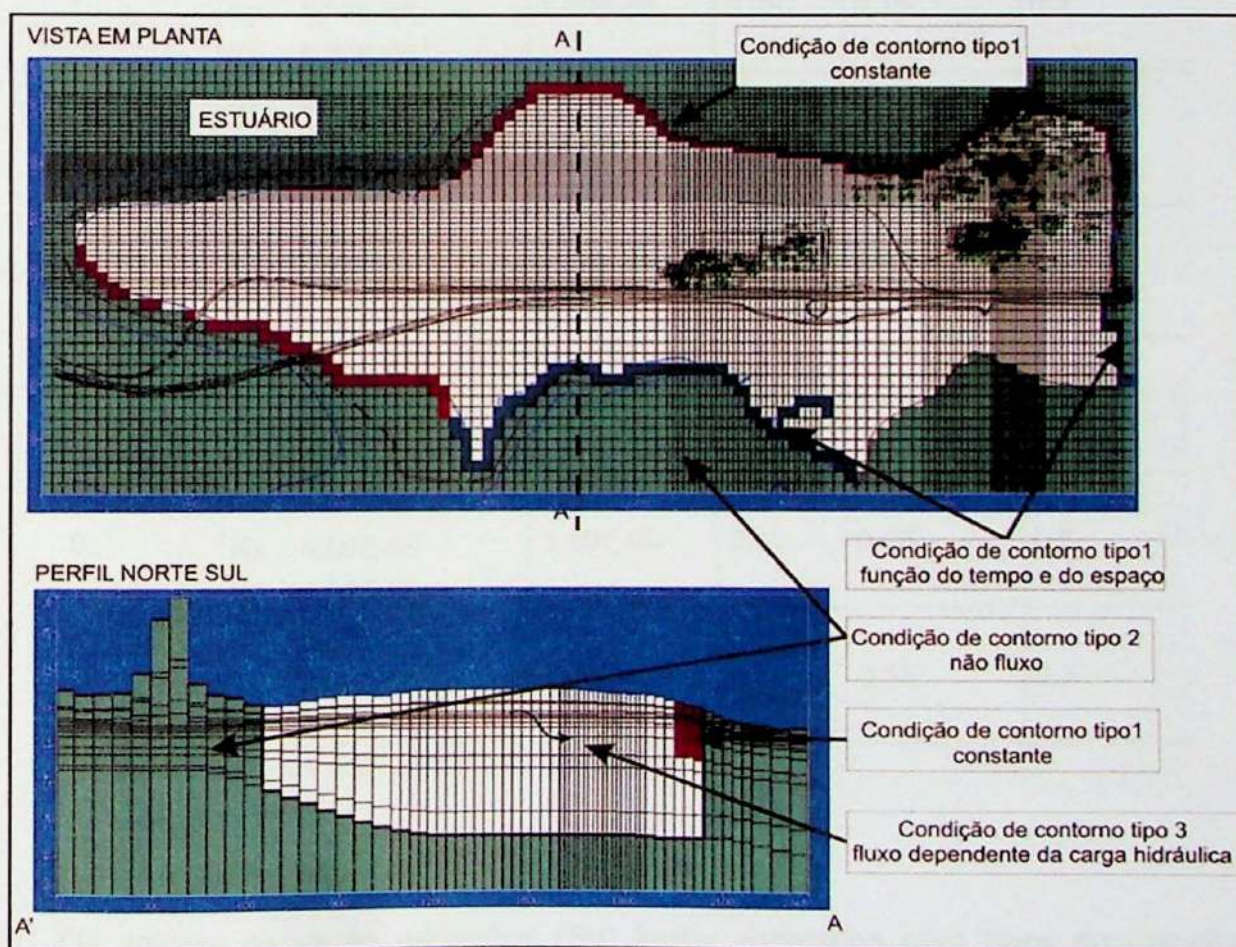
As condições de cargas hidráulicas especificadas, que variam em função do tempo e espaço, correspondem aos rios e córregos da região. Na **Figura 17** (referente à terceira camada do modelo) os contornos em azul correspondem aos rios:

Rio São Jorge/Casqueiro – Localizado a sudoeste da área e sua nascente situa-se próximo ao segmento de embasamento e estende-se ao longo deste até a zona estuarina onde se junta a outros segmentos de rios. Para este contorno foi assumido um baixo gradiente variando de 4,5 m até 0 m e fluxos de baixa velocidade, típica de rios inseridos em planícies litorâneas, com valor médio de $2,510^{-3}$ m/s.

Rio Saboó – Localizado na porção leste do modelo, cuja nascente situa-se fora da área modelada. Para este contorno foram assumidos gradientes hidráulicos e velocidades semelhantes ao do Rio São Jorge/Casqueiro.

Córrego afluente do rio Saboó – Localizado na porção centro-leste da área e devido a este rio apresentar menor porte em comparação aos demais, ele está inserido na primeira camada do modelo, não sendo visível na **Figura 17** que representa a terceira camada. Este córrego apresenta pequenas dimensões (até dois metros de largura). Entretanto, realiza a drenagem de toda área alagada, sendo que os gradientes adotados foram de 3,5 a montante e 0 a jusante na conexão com o rio Saboó.

Figura 17 - Condições de contorno atribuídas ao modelo matemático de fluxo.



Em vermelho, na **Figura 17**, está representado o contorno de carga especificada de fluxo constante igual a 0. Esta condição de contorno é atribuída ao nível do mar.

- Tipo 2 ou Neuman

Esta condição de contorno representa uma fronteira para o fluxo de água subterrânea, correspondente ao embasamento na porção sul e ao redor da área do domínio do modelo, estendendo-se ao longo desse limite a profundidades superiores a 45 m.

- Tipo 3 ou Cauchy

O fluxo de água através de uma fronteira é calculado com base na carga hidráulica especificada e na calculada pelo modelo.

7.3. Parâmetros hidrogeológicos

Foram atribuídas às unidades hidroestratigráficas (**Capítulo 5.3**), em função do tipo de sedimentos, os parâmetros hidrogeológicos apresentados na **Tabela 3**.

Tabela 3 - Parâmetros hidrogeológicos considerados no modelo.

Camadas	Condutividade hidráulica (m/s)	Ss	Sy	n _{ef}	n
1	Kx 4,00E-04 Ky 4,00E-04 Kz 5,20E-06	1,00E-05	0,28	0,15	0,3
2	Kx 8,00E-05 Ky 8,00E-05 Kz 2,00E-07	1,00E-05	0,20	0,15	0,3
3	Kx 9,00E-06 Ky 9,00E-06 Kz 1,00E-08	1,00E-05	0,12	0,05	0,5
4	Kx 8,00E-05 Ky 8,00E-05 Kz 8,00E-06	1,00E-05	0,28	0,15	0,3
5	Kx 9,00E-06 Ky 9,00E-06 Kz 1,00E-08	1,00E-05	0,12	0,05	0,5
6	Kx 9,00E-05 Ky 9,00E-05 Kz 1,00E-05	1,00E-05	0,28	0,15	0,3

Ss = coeficiente de armazenamento específico

Sy = vazão específica

n_{ef} = porosidade efetiva

n = porosidade total

Os valores de vazão específica (Sy) foram estimados com base no trabalho de Jonhson (1967) apud Healy & Cook, (2002), conforme o predomínio da composição do sedimento das unidades hidroestratigráficas.

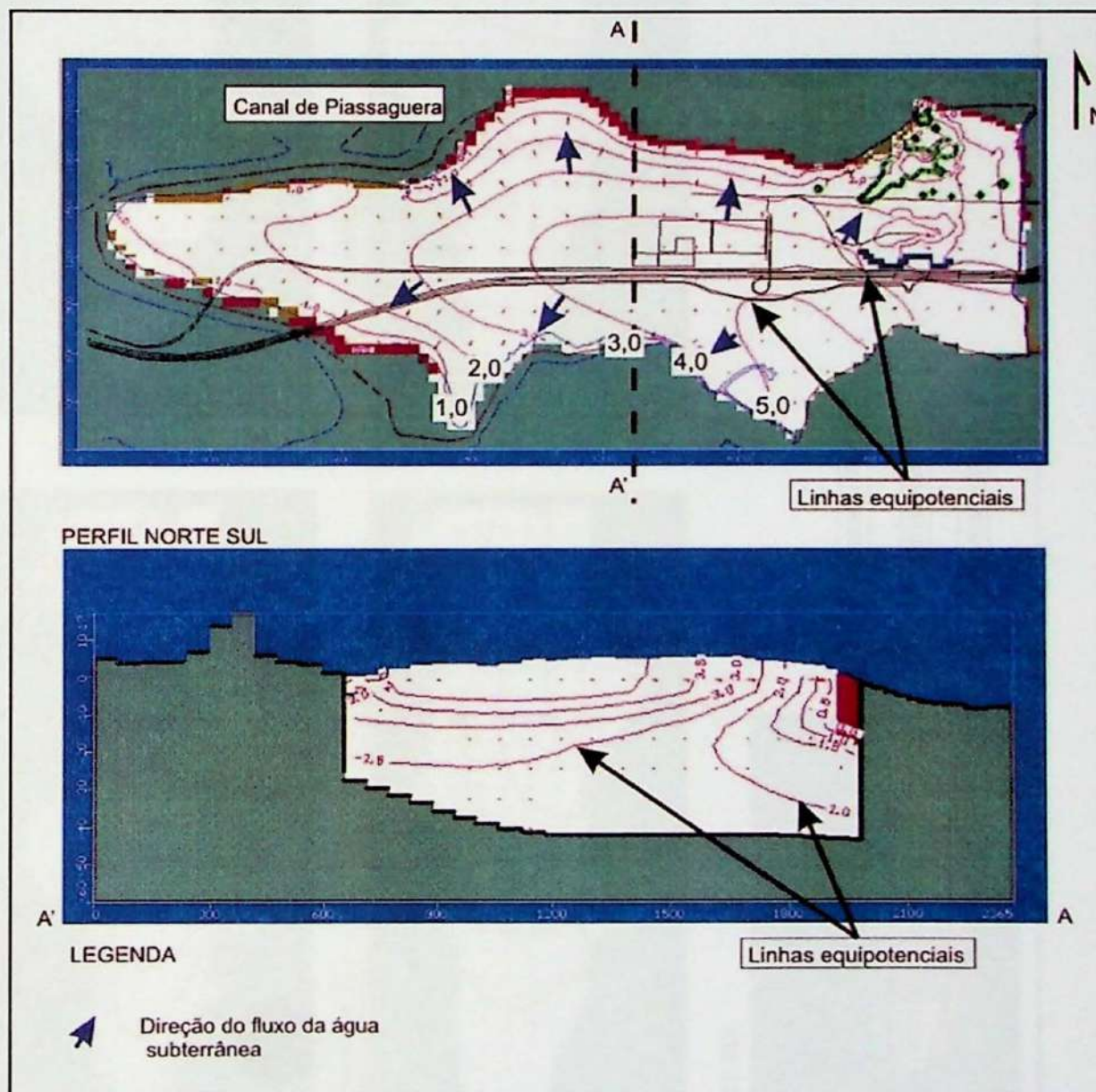
A recarga admitida no modelo de fluxo foi de 500 mm/ano. Este valor de recarga foi atribuído para toda a área da superfície modelada representando um volume total de água de aproximadamente $2,75 \times 10^6 \text{ m}^3/\text{ano}$.

7.4. Padrão potenciométrico regional

O padrão de fluxo da água subterrânea para a unidade hidroestratigráfica 1 apresenta concordância com a superfície topográfica da região, cujas linhas de fluxo são condicionadas pelos contornos naturais de recarga e descarga.

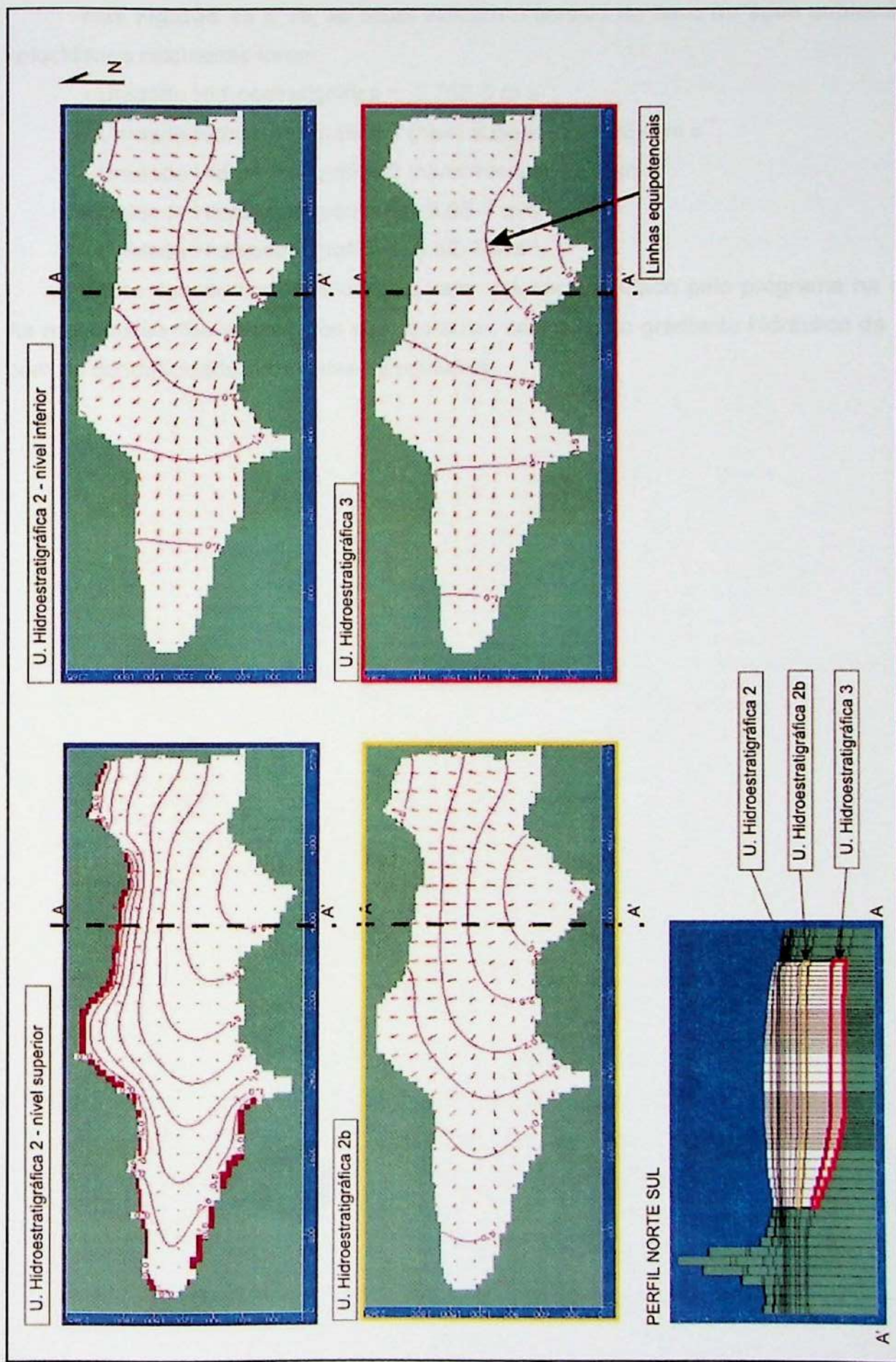
Verifica-se na distribuição das equipotenciais um divisor de águas com orientação aproximada leste-oeste que influencia na distribuição dos fluxos locais (**Figura 18**).

Figura 18 - Mapa potenciométrico da primeira unidade hidroestratigráfica e perfil geral.



Os fluxos regionais apresentam uma componente principal no sentido Noroeste-Norte-Nordeste, cuja zona principal zona de descarga é o canal de Piaçaguera e o mar (**Figura 19**).

Figura 19 - Mapas potenciométricos das unidades hidroestratigráficas inferiores.



O padrão potenciométrico obtido foi satisfatório conforme o previsto para as unidades hidroestratigráficas definidas no modelo conceitual.

Nas **Figuras 18 e 19**, as setas indicam o sentido do fluxo da água subterrânea, as velocidades calculadas foram:

- Unidade Hidroestratigráfica 1: $3,75\text{E-}5 \text{ m s}^{-1}$;
- Unidade Hidroestratigráfica 2 (nível superior): $4,25\text{E-}6 \text{ m s}^{-1}$.
- Unidade Hidroestratigráfica 2 (nível inferior): $2\text{E-}7 \text{ m s}^{-1}$.
- Unidade Hidroestratigráfica 2b: $9,6\text{E-}7 \text{ m s}^{-1}$.
- Unidade Hidroestratigráfica 3: $6,3\text{E-}7 \text{ m s}^{-1}$.

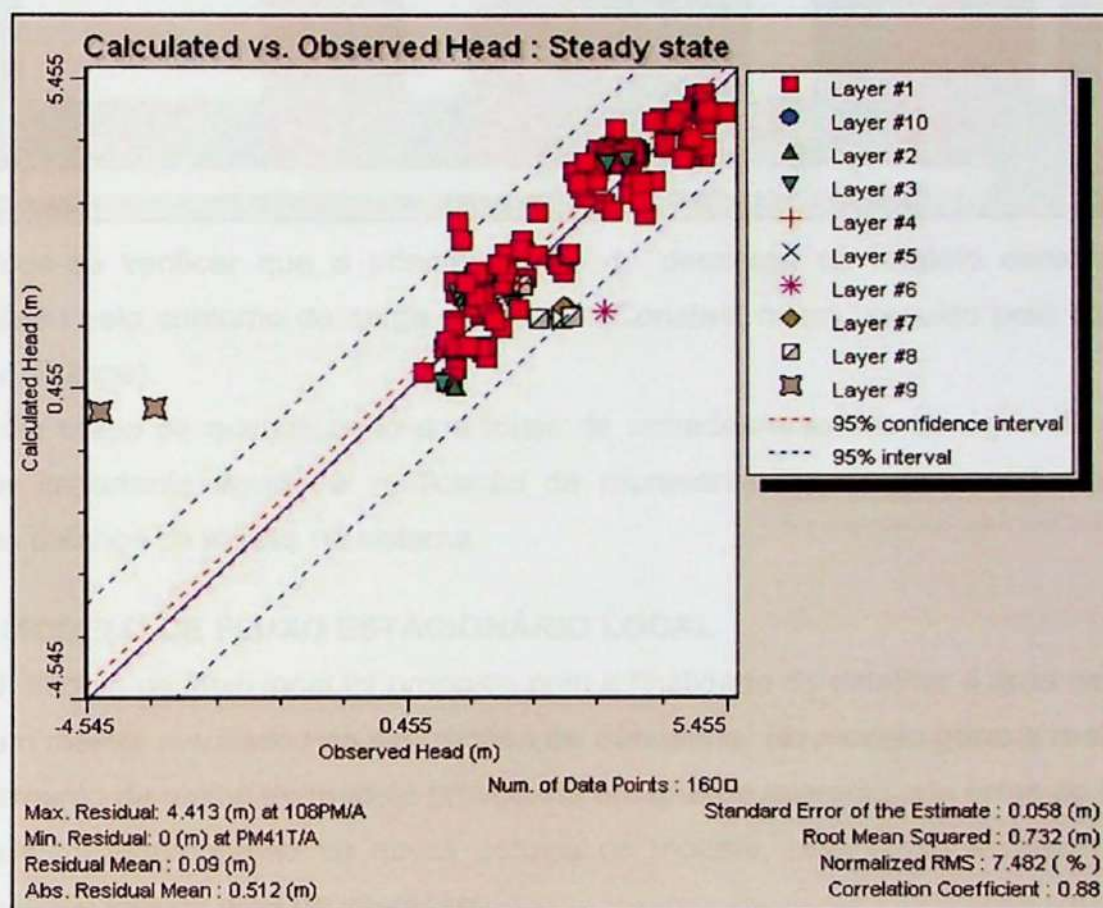
Estes valores correspondem ao valor máximo calculado pelo programa na camada. As magnitudes das velocidades são coerentes com o baixo gradiente hidráulico da região e com as condutividades atribuídas às unidades.

7.5. Avaliação do modelo de fluxo regional

A representatividade do modelo foi realizada por meio da comparação dos valores de carga hidráulica calculados pelo modelo com aqueles obtidos em campo. O programa *visual MODFLOW*[®] realiza os cálculos de erro médio (*mean error* – ME), média do resíduo absoluto (*mean absolute error*- MAE) e o erro médio quadrático (*root mean squared*- RMS), que são utilizados para esta avaliação.

A calibração é considerada satisfatória, quando o RMS obtido é inferior a 10% da diferença de cargas hidráulicas observadas e o erro médio é próximo a zero. O RMS obtido para o modelo foi de 7,482%, (**Figura 20**) utilizando-se os dados de 160 poços nesse processo.

Figura 20 - Gráfico de calibração do modelo de fluxo.

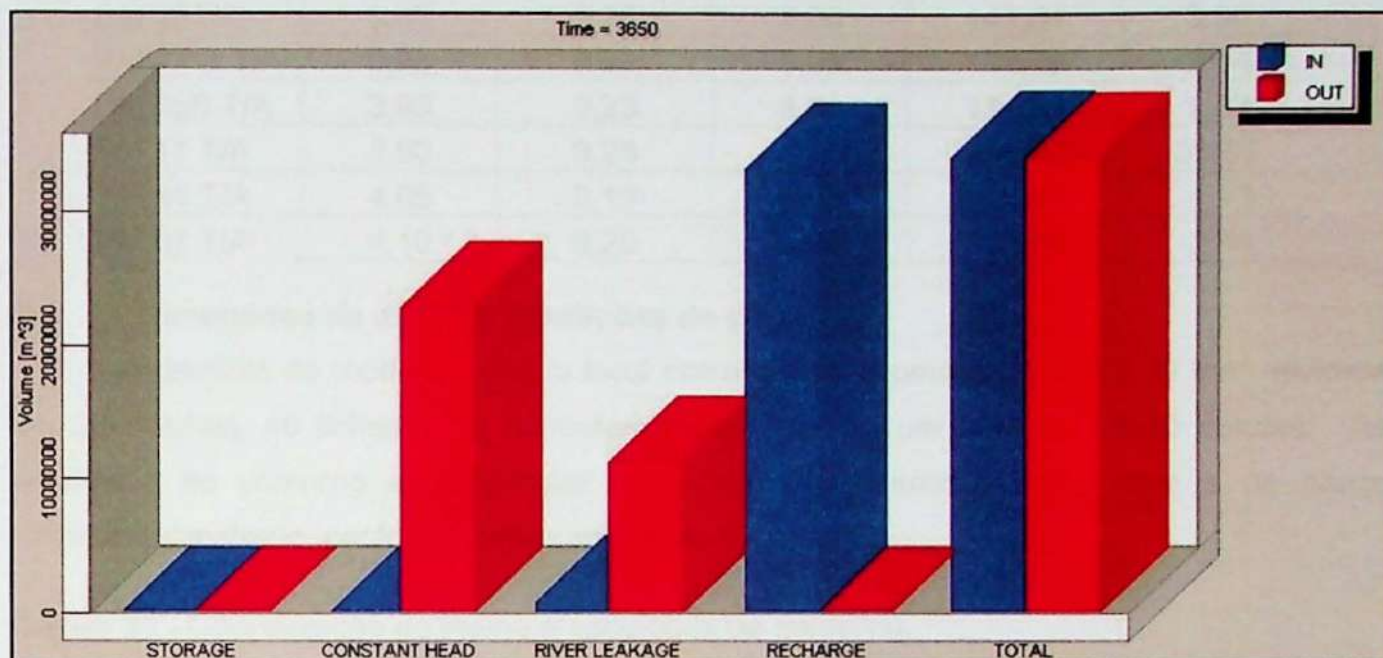


Os totais de entradas e saídas de água no sistema foram calculados pelo *Visual MODFLOW*[®], apresentando uma quantidade total de saídas e entradas de 3,413602E+07 e 3,41691E+07 m³, respectivamente. Representando uma diferença percentual relativa ao valor de entradas de 0,0969% (**Figura 21**), sendo esta diferença muito baixa.

Na entrada de dados do modelo, a recarga hidráulica constitui a principal fonte de água para o sistema (3,328162E+06 m³ ano⁻¹). No entanto, o contorno dos rios acrescenta uma parcela de 2,60% em relação ao valor total de entradas de água no sistema. As saídas

ocorrem principalmente pelos contornos de carga hidráulica especificadas: rios (33%) e contorno de carga constante representando o mar (67%).

Figura 21 - Balanço de massa do modelo de fluxo regional.



Pode-se verificar que a principal zona de descarga do modelo constitui o mar, representado pelo contorno de carga constante (*Constant head*), seguido pelo contorno de rios (*river leakage*).

Esta etapa de quantificação dos totais de entradas e saídas de água do sistema é uma fase importante devido à verificação da representatividade do modelo matemático quanto ao balanço de massa no sistema.

8. MODELO DE FLUXO ESTACIONÁRIO LOCAL

O modelo de fluxo local foi proposto com a finalidade de detalhar a área de interesse e obter um melhor resultado nas simulações de transporte. No modelo geral a realização de um refinamento da malha do modelo provocaria um grande aumento nos erros de calibração em virtude da incorporação de novas células no modelo, bem como a deformação das demais células fora da área de interesse.

Na **Tabela 4** são apresentados os valores de erro relativo (%) referente ao valor de carga hidráulica real e o valor calculado utilizando o modelo de fluxo geral (MFG) após refinamento da malha e o modelo de fluxo local (MFL).

Cabe ressaltar que embora os resultados obtidos de carga hidráulica sejam muito diferentes, as propriedades hidrogeológicas utilizadas em ambos são as mesmas.

Como pode ser verificado na **Tabela 4**, o erro relativo obtido para o modelo de fluxo regional (MFG) está entre 134,86 e 209,33%, muito superiores quando comparados aos obtidos para o modelo de fluxo local (MFL), cujo erro máximo foi de 33,33%.

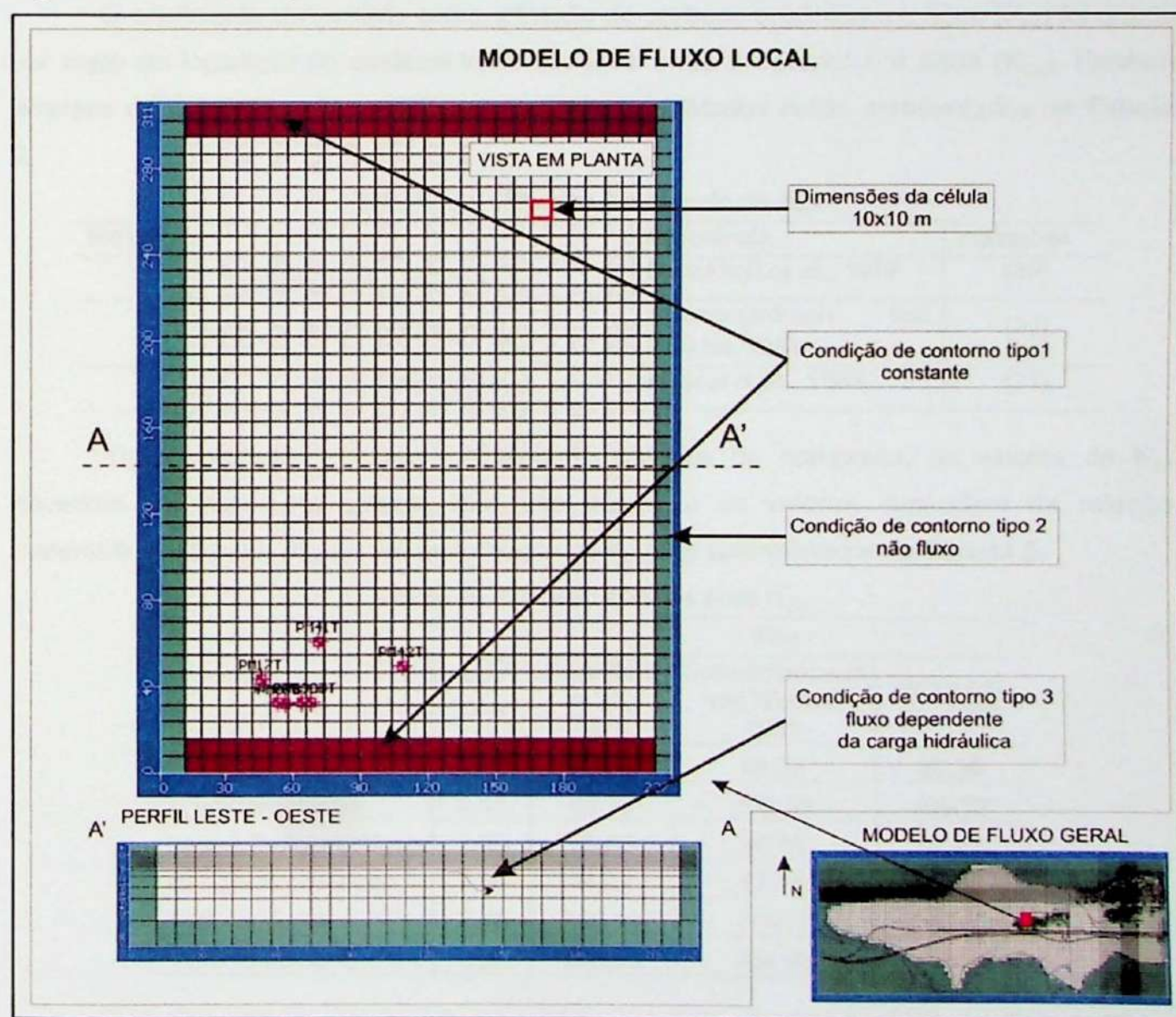
Tabela 4 - Dados de Carga Hidráulica.

Poço	Carga Hidráulica (m)			Erro relativo (%)	
	Observada	MFG	MFL	MFG	MFL
PM 42T	3,62	9,17	3,99	153,31	10,22
PM 39T/A	3,85	9,28	4,00	141,04	3,90
PM 07 B T/A	3,85	9,20	3,99	138,96	3,64
PM 39B T/A	3,93	9,23	3,99	134,86	1,53
PM 17 T/A	3,00	9,28	4,00	209,33	33,33
PM 41 T/A	4,05	9,13	3,98	125,43	-1,73
PM 07 T/A	4,10	9,29	4,00	126,59	-2,44

8.1. Dimensões da malha e condições de contorno

O domínio do modelo de fluxo local corresponde a uma área de 67,39 km², dividida em 29 colunas, 40 linhas e 13 camadas, representando um total de 15080 células. As condições de contorno estabelecidas para o modelo foram de não fluxo e de carga hidráulica constante, conforme representado na **Figura 22**.

Figura 22 - Discretização da malha e condições de contorno.



A condição de contorno constante atribuída foi de 4,0 m (montante) e de 3,7 m (jusante).

9. MODELO DE TRANSPORTE

9.1. Propriedades químicas dos compostos de interesse

Muitos compostos orgânicos quando presentes em água apresentam a característica de serem adsorvidos nas superfícies dos sólidos. Disto resulta que o contaminante (soluto) move-se em velocidade menor que da água subterrânea, fenômeno reconhecido por retardamento. Como a água subterrânea movimenta-se muito lentamente assume-se que tenha transcorrido tempo suficiente para que a sorção atinja condições de equilíbrio.

Sob esta condição trabalha-se com uma isoterma conhecida por isoterma de equilíbrio de sorção, sendo neste trabalho aplicada a isoterma de Freundlich, sob a condição de equilíbrio linear.

Para compostos orgânicos esta isoterma pode ser simplificada numa relação direta entre a fração do carbono orgânico (f_{oc}) e o coeficiente de partição baseado no carbono orgânico (K_{oc}), cuja resultante é o coeficiente de distribuição (K_d).

O coeficiente de partição entre a fração de carbono orgânico e a água (K_{oc}) foi obtido por meio do logaritmo do coeficiente de partição entre o octanol e a água (K_{ow}). Existem diversos métodos de estimar o K_{oc} , alguns desses métodos estão apresentados na **Tabela 5**.

Tabela 5 - Métodos de cálculo de K_{oc} .

Método	Referência	equações
$\log K_{oc} = 0,21 + \log K_{ow}$	Karickhoff et al., 1979	(29)
$\log K_{oc} = 0,49 + 0,72 \log K_{ow}$	Schwarzenbach and Westall, 1981	(30)
$\log K_{oc} = 0,088 + 0,909 \log K_{ow}$	Hasset et al., 1983	(31)

Em se tratando de uma propriedade química do composto, os valores de K_{oc} deveriam ser fixos. No entanto isso não ocorre e os valores dependem da relação matemática utilizada, alguns valores obtidos de K_{oc} são apresentados na **Tabela 6**.

Tabela 6 - Valores obtidos para K_{oc} .

Composto	Log log K_{ow}	K_{oc}		
		Karickhoff et al., 1979	Schwarzenbach and Westall, 1981	Hasset et al., 1983
Cloreto de Vinila	1,62	25,70	45,33	36,36
1,1-dicloroetileno	2,13	83,18	105,58	105,72
trans-1,2-dicloroetileno	2,09	75,86	98,81	97,23
cis-1,2-dicloroetileno	1,86	44,67	67,48	60,08
Tricloroetileno	2,42	162,18	170,77	193,99
Tetracloroetileno	3,4	208,93	204,93	244,21

Os valores da fração de carbono orgânico no solo são apresentados na **Tabela 7**.

Tabela 7 - Resultados de carbono orgânico total (valores em %) para amostras de solo.

Identificação	Profundidade	
	0, 50 m	2,00 m
Solo 01	9,15	7,72
Solo 02	7,35	9,94
Solo 03	3,19	9,37
Solo 04	3,61	1,90
Solo 05	2,85	2,02
Solo 06	5,27	8,80
Solo 07	2,40	0,86
Solo 08	1,38	7,40
Solo 09	4,40	4,03
Solo 10	2,79	1,90
Média	4,239	5,394

Na **Tabela 8** são apresentados os valores calculados de K_d , bem como os demais parâmetros de entrada nos modelos de transporte.

Tabela 8 - Parâmetros utilizados no modelo de transporte de contaminantes.

Camada	Coeficiente de distribuição K_d (1/(mg/L))				Dispersão	
	PCE	TCE	DCE	CV	Vert/Long	Hor/Long
1	2,70E-5	5,39E-6	2,64E-6	6,79E-6	0,1	0,1
2	6,72E-6	4,24E-6	1,36E-6	2,38E-6	0,1	0,1
3	6,72E-6	4,24E-6	1,36E-6	2,38E-6	0,1	0,1
4	6,72E-6	4,24E-6	1,36E-6	2,38E-6	0,1	0,1
5	6,72E-6	4,24E-6	1,36E-6	2,38E-6	0,01	0,1
6	6,72E-6	4,24E-6	1,36E-6	2,38E-6	0,01	0,1
7	6,72E-6	4,24E-6	1,36E-6	2,38E-6	0,01	0,1
8	6,72E-6	4,24E-6	1,36E-6	2,38E-6	0,01	0,1
9	6,72E-6	4,24E-6	1,36E-6	2,38E-6	0,01	0,1
10	2,70E-5	5,39E-6	2,64E-6	6,79E-6	0,1	0,1
11	6,72E-6	4,24E-6	1,36E-6	2,38E-6	0,1	0,1
12	2,70E-5	5,39E-6	2,64E-6	6,79E-6	0,1	0,1
13	6,72E-6	4,24E-6	1,36E-6	2,38E-6	0,1	0,1

* Fonte: Quiot, et al. (2005)

Além desses parâmetros foram inseridos os valores de constante de degradação de primeira ordem (?) dos compostos: PCE ($0,003 \text{ dia}^{-1}$), TCE ($0,002 \text{ dia}^{-1}$), DCE ($0,0005 \text{ dia}^{-1}$) e VC ($0,003 \text{ dia}^{-1}$), conforme apresentado em Quiot et al. (2005).

9.2. Análise do comportamento dos programas sob condições hipotéticas

Com a finalidade de se compreender o comportamento dos programas de simulação de transporte (MT3DMS® e RT3D 2.5®) modificando-se os mecanismos de transporte, e os valores de coeficiente de partição (K_d), foram desenvolvidos modelos que satisfizessem estas condições, cujos resultados são apresentados nos itens de 8.2.1 à 8.2.4.

9.2.1. Análise do comportamento dos programas sem considerar as reações de decaimento

Efetuada-se a simulação em ambos os programas, utilizando a opção sem cinética de reação (*no kinetic reaction*) e mantendo-se as mesmas condições de fluxo para um único composto, cujo coeficiente de distribuição (K_d) adotado foi de $1E-06$, foram obtidos os mesmos resultados em ambos os programas.

Esta condição foi prevista com base nas equações apresentadas no Capítulo 3.4.1, uma vez que a única diferença entre os programas nos termos que calculam a dispersão, retardamento, difusão, fontes e sumidouros do soluto referem-se ao índice k (na equação 23 do RT3D2.5[®]) que representa os diversos tipos de compostos utilizados na modelagem.

9.2.2. Análise do comportamento dos programas sem considerar a adsorção

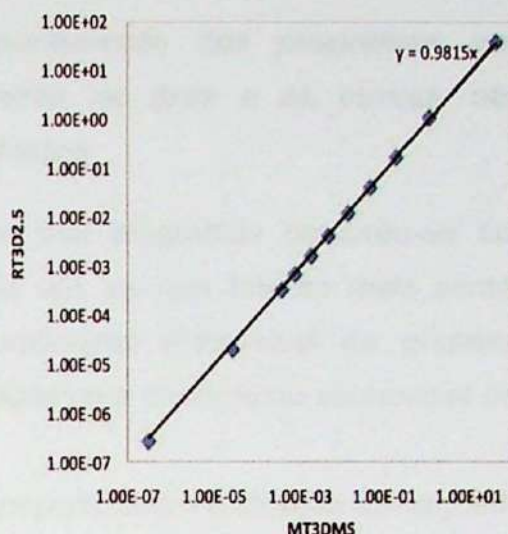
Uma vez que na situação descrita no item anterior os resultados obtidos foram os mesmos em ambos os programas, resolveu-se verificar os resultados sem o efeito da adsorção do soluto, para este procedimento utilizou-se a opção *no sorption is simulated* em ambos os programas.

O tipo de reação utilizado nos programas foram de decaimento irreversível de primeira ordem para o programa MT3DMS[®] e a reação com decaimento sequencial de PCE, TCE, DCE e CV para o programa RT3D2.5[®].

Neste caso, realizou-se a simulação para apenas um composto como forma de igualar as condições de comparação entre os programas, e não considerar os produtos gerados nas reações subseqüentes (calculado apenas pelo programa RT3D2.5[®]). Para este composto foi atribuída uma mesma taxa de decaimento de 0.002 d^{-1} . Os resultados obtidos nos programas RT3D2.5[®] e MT3DMS[®] são apresentados na forma de um gráfico de dispersão na **Figura 23**.

Como pode ser verificado na **Figura 23** os valores obtidos foram muito próximos. No entanto, o MT3DMS[®] mostrou-se mais conservador em relação ao RT3D2.5[®], cujos resultados de concentração em função do tempo são em geral 0,98 vezes o valor calculado pelo MT3DMS[®].

Figura 23 - Gráfico de dispersão das concentrações obtidas nos programas MT3DMS® e RT3D2.5® sem considerar o efeito da adsorção do soluto



Uma vez que a adsorção não está sendo considerada e os demais parâmetros avaliados no item 9.2.1, comportam-se da mesma forma em ambos os programas, as variações de concentrações nesse caso devem-se aos processos de decaimento efetuados pelos programas.

Verifica-se também que a adsorção exerce um fator importante no cálculo da degradação dos compostos uma vez que ela está incorporada nas equações: 21 (MT3DMS® termos 4 e 5) e 24, 25, 26 e 27 (RT3D 2.5® termo 5).

9.2.3. Análise do comportamento dos programas considerando elevada adsorção

Sob as mesmas condições descritas no item 9.2.2 foi elaborado um modelo, cuja única modificação foi referente ao valor do coeficiente de adsorção, sendo atribuído a este parâmetro o valor de 1 (mg/L)^{-1} .

Os resultados obtidos no programa MT3DMS® indicaram uma curva com tendência semelhante à apresentada nas demais simulações com valor obtido para o período de 100 dias de 76,923mg/L e após 3650 dias o valor foi de 0.0236 mg/L, indicando que os cálculos de degradação exerceram grande relevância na redução das concentrações uma vez que o elevado valor de adsorção não possibilitou o deslocamento da pluma.

Nos resultados obtidos pelo RT3D2.5® a concentração permaneceu constante durante todo o período simulado (3650 dias = 99,996 mg/L), situação inadequada para a análise desse tipo de composto.

Verifica-se que a adsorção exerce importância fundamental tanto no deslocamento da pluma contaminante quanto nos cálculos de degradação efetuados pelos programas.

Após esta etapa de compreensão da interferência exercida pelos parâmetros que controlam o transporte de contaminantes na água subterrânea, em seguida enfatizou-se as

propriedades químicas dos compostos de interesse e a sua relação com as características determinadas na área de estudo.

9.2.4. Análise do comportamento dos programas considerando as condições hidrogeoquímicas verificadas na área e as curvas obtidas para concentrações hipotéticas em função do tempo

Devido às limitações dos programas procurou-se comparar dentre os tipos de reações efetuadas por cada um, as que fossem mais semelhantes. Sendo escolhida a opção de reação com decaimento irreversível de primeira ordem para o programa MT3DMS® e a opção de reação com decaimento sequencial de PCE, TCE, DCE e CV para o programa RT3D2.5®.

As simulações de transporte foram efetuadas da seguinte forma:

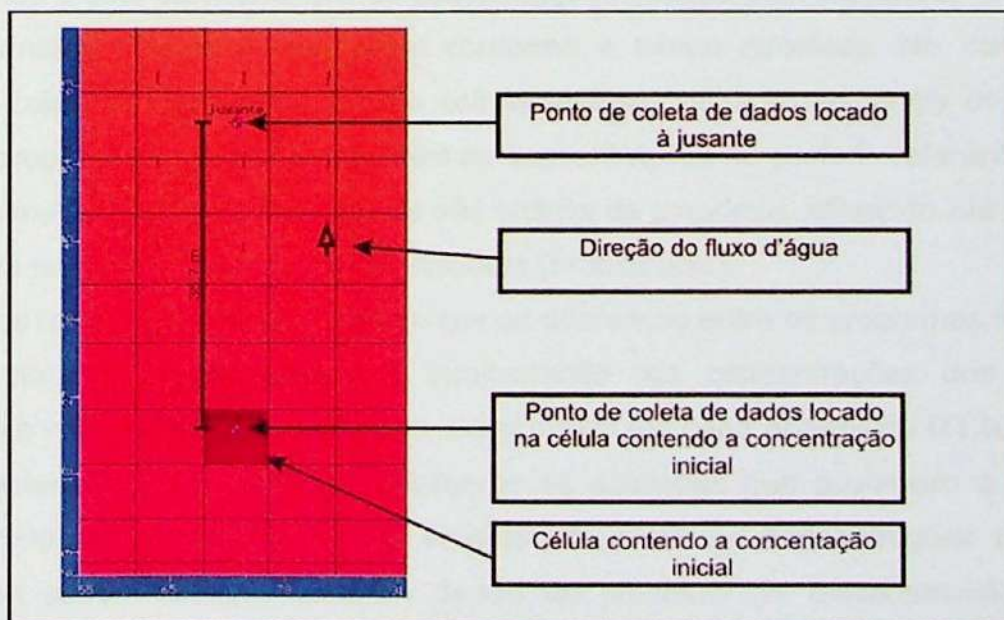
- Programa RT3D: um modelo para PCE isoladamente e outro considerando todos os compostos em conjunto.

- Programa MD3DMS: um modelo para PCE, TCE, DCE e CV isoladamente.

Para que fosse definido com maior precisão o comportamento das curvas de concentração nos pontos analisados dentro do domínio do tempo e espaço, foi assumida uma concentração hipotética de 100 mg/L do composto a ser analisado em uma única célula do modelo (7,5 m x 6,4 m e 5,6 m). Esta simulação viabilizou a realização dos cálculos de concentração pela planilha e a sua comparação conjunta.

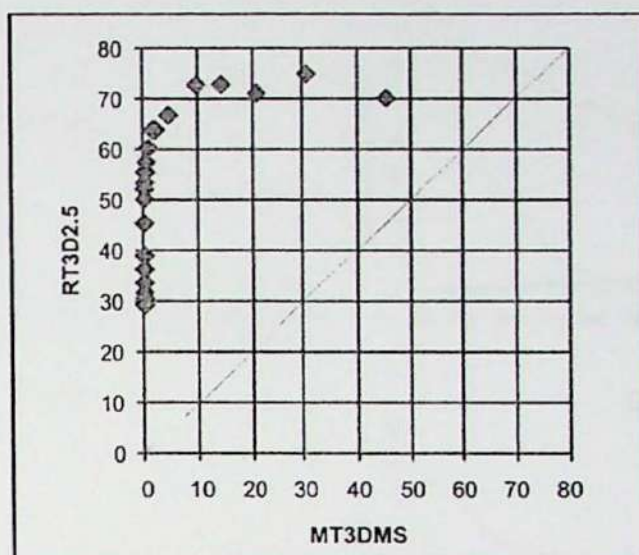
Na **Figura 24** está representada a célula contendo a concentração inicial e dois pontos de coleta de informações, sendo um locado no centro da pluma e outro a jusante na direção do centro da pluma.

Figura 24 - Localização dos pontos de coleta de dados das simulações.



Na **Figura 25** são apresentados os resultados obtidos nos programas MT3DMS® e RT3D2.5® na forma de um gráfico de dispersão utilizando uma concentração inicial (hipotética) de 100 mg/l de PCE.

Figura 25 - Resultados obtidos nas simulações para PCE nas metodologias analisadas.



Verifica-se na **Figura 25** que os resultados apresentaram valores muito discrepantes quando comparados com a **Figura 23**, onde a adsorção não foi considerada.

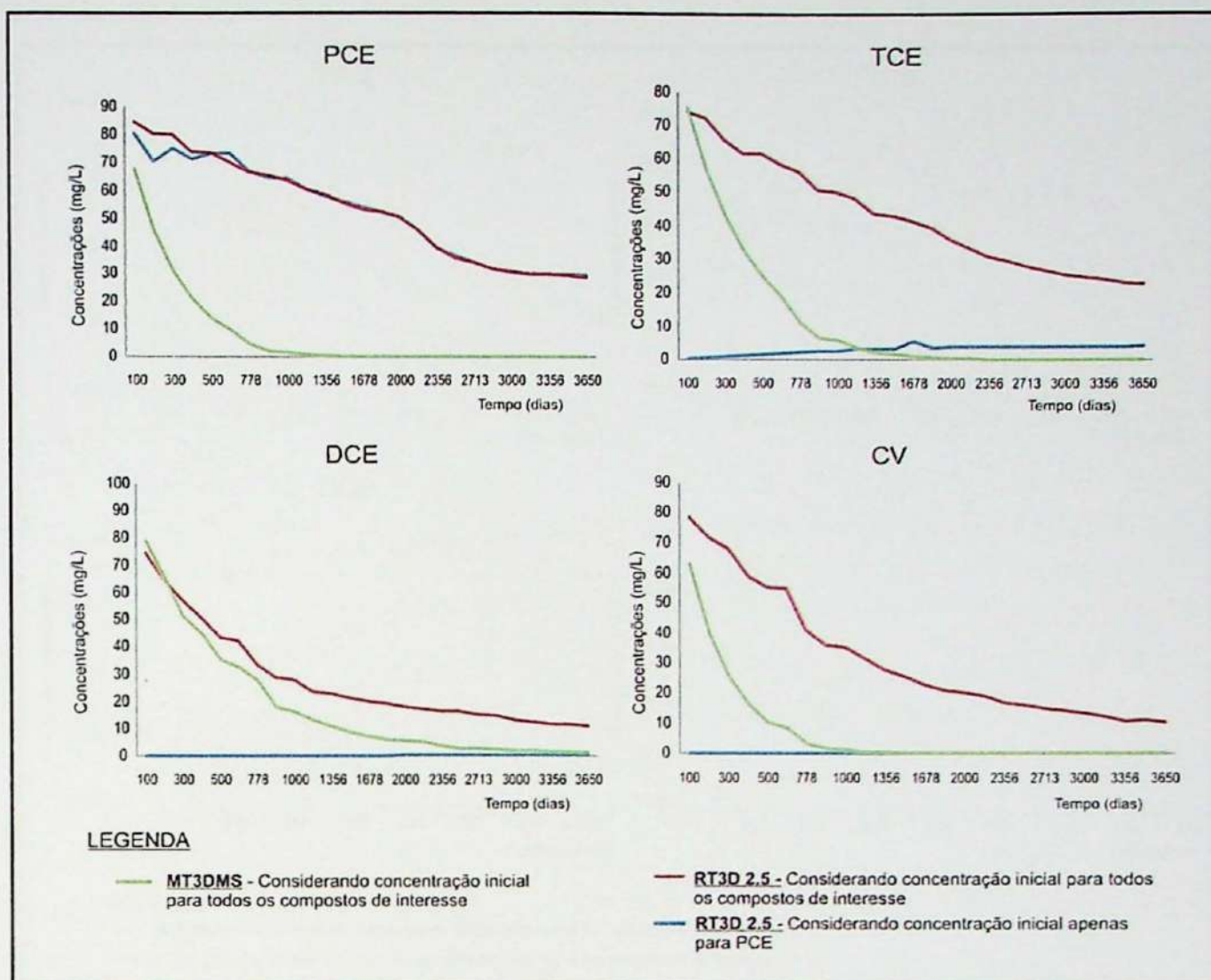
Na **Figura 26** são apresentados os gráficos de concentração em função do tempo para um ponto definido no centro da célula contendo a concentração inicial (representando o primeiro estágio de tempo).

Como pode ser verificado na **Figura 26** as curvas de concentrações em função do tempo, obtidas com o programa MT3DMS® apresentaram comportamento logarítmico, enquanto as curvas obtidas com o RT3D2.5® são mais suavizadas e apresenta um comportamento mais linear.

Devido a esta característica, as concentrações obtidas pelo MT3DMS® e pelo RT3D2.5® apresentam diferenças crescentes conforme o tempo simulado. No caso do PCE (composto cujas concentrações iniciais sofrem apenas redução ao longo do tempo em ambos os programas), as diferenças entre as concentrações no período referente à metade do tempo simulado ($t=1825$ dias) são de três ordens de grandeza, atingindo até seis ordens de grandeza no período final do tempo simulado ($t=3650$ dias).

Estes resultados indicam também que as diferenças entre os programas MT3DMS® e RT3D2.5® não se devem apenas à incorporação das concentrações dos compostos formados em reações subseqüentes aos já existentes (no caso apenas do RT3D2.5®), além dessa característica diferem-se principalmente as equações que governam o decaimento dessas substâncias. Outro fator a ser considerado é que as concentrações no ponto de amostragem sofrem redução também devido ao processo de deslocamento da pluma contaminante.

Figura 26 - Evolução das concentrações dos compostos de interesse no ponto locado sobre a pluma de concentração no tempo $t=0$ dias.

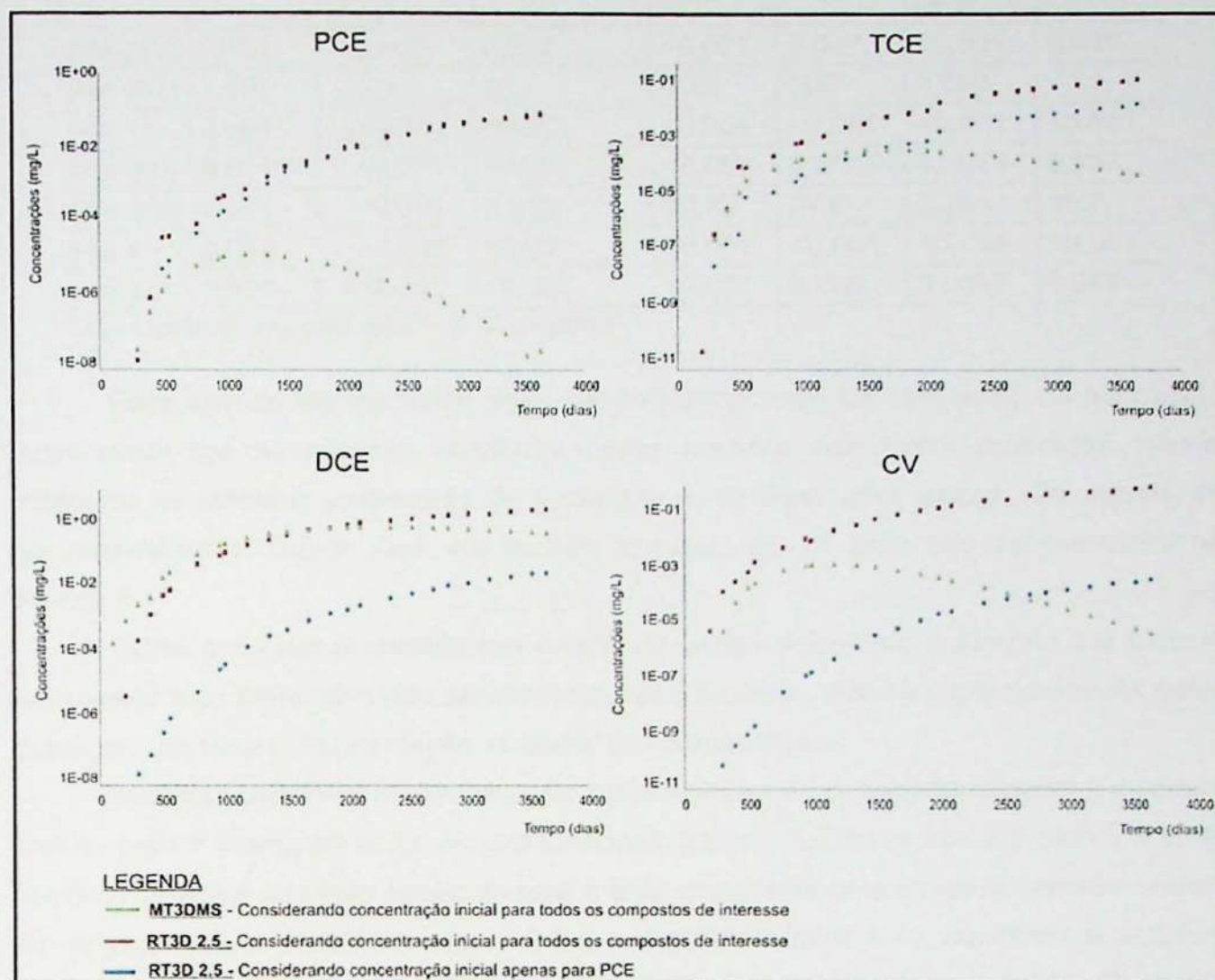


Na **Figura 27** são apresentadas as curvas de concentrações de um ponto locado a jusante da pluma.

Considerando o espaço de tempo até aproximadamente a metade do período simulado, a curva de concentrações de DCE é crescente e mais conservadora no programa MT3DMS®. Após esse período ocorre a inflexão da curva (MT3DMS®) e a manutenção da tendência de crescimento da curva do programa RT3D2.5®, situação não verificada para nenhuma outra ocasião, cujos compostos apresentam meia vida menor.

Nota-se que nas curvas obtidas utilizando-se o MT3DMS® (programa menos conservador) para os compostos PCE, TCE e CV, ocorre a inflexão acentuada da curva por conta dos processos de degradação, uma vez que esses compostos apresentam taxas de degradação maiores em comparação ao DCE.

Figura 27 - Evolução das concentrações dos compostos de interesse no ponto situado à jusante da pluma.



A curva determinada pelos pontos azuis representa a formação dos compostos TCE, DCE e CV a partir das reações de degradação subsequente de uma concentração inicial de PCE, efetuadas pelo programa RT3D2.5[®]. Desta forma, pode ser verificado que a incorporação desses produtos formados são de grande importância para simular a evolução das concentrações em função do tempo.

9.3. Comparação dos resultados obtidos pelos programas MT3DMS[®] e RT3D 2.5[®]

Os dados de concentração definidos para o tempo inicial das simulações de transporte são referentes ao mês de agosto de 2008. Estes resultados analíticos estão apresentados na **Tabela 9**.

Tabela 9 - Análise dos compostos de interesse dissolvidos na água subterrânea, concentrações em mg/L.

PM	LQ	PCE	TCE	1,1-DCE	Cis-1,2-DCE	Trans-1,2-DCE	CV
PM 07A	0,001 - 1	0,002	0,037	<0,001	0,027	<0,001	0,0087
PM 07B	0,001 - 1	2,3	78,1	0,25	109	0,358	7,1
PM 17	0,001 - 1	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001
PM 39A	0,001 - 1	<0,001	<0,001	<0,001	0,0057	0,0014	0,037
PM-39B	0,001 - 1	<0,001	0,016	0,079	27,6	0,26	15,7
PM 41	0,001 - 1	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001
PM 42	0,001 - 1	<0,001	<0,001	<0,001	0,058	0,0016	0,044

LQ- Limite de quantificação do laboratório

Para que as comparações entre os dois programas de simulação de transporte ocorressem sob as mesmas condições, estes modelos não foram calibrados, sendo mantidos os mesmos parâmetros de transporte e de fluxo para ambos. Os mapas de isoconcentrações obtidos para um período simulado de 10 anos são apresentados no **Anexo 6**.

Como pode ser observado nos mapas de isoconcentrações, o formato das plumas bem como suas dimensões são semelhantes, características definidas principalmente pelas condições de fluxo e de retardação da pluma de contaminação.

Mesmo tratando-se de um grupo de contaminantes de densidade superior à da água, exceto para o cloreto de vinila, as profundidades impactadas limitam-se à profundidade de até 8 m. Esta é a condição esperada para a área que possui uma espessa camada selante de argila nesta profundidade que separa o aquífero superior do aquífero e aquífero fraturado. As concentrações obtidas ao final do período simulado (t=3650 dias) são apresentadas na **Tabela 10**.

Tabela 10 - Resultados de concentrações (mg/l) obtidos pelos programas RT3D2.5[®] e MT3DMS[®].

Poços	PCE		TCE		DCE		CV	
	MT3DMS	RT3D2.5	MT3DMS	RT3D2.5	MT3DMS	RT3D2.5	MT3DMS	RT3D2.5
PM 7B	6,90E-06	2,56E-04	7,10E-05	2,46E-02	1,03E-01	2,91E-01	1,67E-08	1,82E-02
PM 7	1,46E-04	1,45E-02	3,79E-03	7,59E-01	3,91E-01	9,75E-01	4,05E-06	1,03E-01
PM 17	1,20E-05	2,09E-04	3,16E-03	9,90E-02	1,18E-01	2,91E-01	2,50E-08	1,63E-02
PM 39 ^a	2,71E-04	4,80E-04	4,80E-04	8,95E-02	4,61E-01	5,39E-01	8,62E-08	1,07E-01
PM 39B	6,47E-05	2,29E-06	2,75E-05	3,50E-04	8,50E-01	4,74E-01	7,84E-11	1,38E-01
PM 41	6,50E-05	2,44E-09	2,48E-07	3,47E-06	1,11E-01	1,20E-01	1,24E-14	9,71E-03
PM 42	1,40E-14	1,09E-19	4,07E-16	1,13E-14	3,34E-08	2,90E-05	1,62E-25	1,34E-05
CETESB	4,00E-02		7,00E-02		5,00E-02*		5,00E-03	

*Valor de referencia atribuído ao somatório de Cis e Trans 1,2 DCE.

Como pode ser verificado nos resultados obtidos, o programa RT3D2.5[®] mostrou-se mais conservador, sendo que apenas para os dicloroetenos (DCE) os valores apresentam-se dentro da mesma ordem de grandeza em ambos os programas, situação semelhante a apresentada na **Figura 27**.

Referente às concentrações de cloreto de vinila calculadas pelo programa RT3D2.5[®], a manutenção dos valores acima do valor de intervenção da CETESB (2005) deve-se possivelmente ao efeito da incorporação de cloreto de vinila gerado a partir dos processos de reações subseqüentes de decomposição de PCE, TCE e DCE, proporcionando uma situação mais próxima da realidade.

Essa situação é evidenciada pela diferença das ordens de grandeza dos valores obtidos pelo MT3DMS[®] e RT3D2.5[®] para cloreto de vinila (superior a cinco ordens), uma vez que o programa MT3DMS[®] não considera a incorporação dos produtos gerados nas reações subseqüentes. Quando comparados aos outros compostos, em média, as diferenças entre os resultados obtidos pelas duas metodologias são em torno de 2 ordens de grandeza.

Por fim, os valores obtidos para o PM 42, indicam concentrações muito inferiores em comparação aos demais poços, sendo que isto possivelmente está relacionado ao fato do poço estar localizado em uma posição mais afastada da zona de influência da pluma de contaminação.

10. DISCUSSÃO

Os modelos geralmente utilizam parâmetros e propriedades médias, representativas de regiões específicas. Estes parâmetros baseiam-se em dados medidos em campo, através de uma série de testes hidráulicos, hidroquímicos e métodos indiretos.

Todos estes métodos possuem certo grau de incerteza inerente, ao qual se alia a própria variabilidade espacial hidrogeológica, interpretações e extrapolações a partir de dados existentes.

Um dos parâmetros que pode apresentar incertezas importantes nos cálculos efetuados pelo modelo é a recarga resultante do balanço hídrico no qual não são conhecidos todos os parâmetros, sendo realmente mensurados apenas os valores de precipitação. Os demais parâmetros resultam de relações e processos empíricos com as inerentes incertezas associadas.

O processo de calibração pode produzir resultados similares e aceitáveis de calibração com várias combinações destes parâmetros e, para avaliar os efeitos desta variabilidade, é necessário realizar uma análise de sensibilidade do modelo devido a estas incertezas.

Durante o processo de calibração do modelo, ele se revelou mais sensível a variações de condutividade hidráulica do que de recarga ou condições de contorno. Em especial, o modelo é muito sensível a alterações das propriedades condutivas na unidade intermediária superior e camadas superficiais. Pequenas modificações nestas zonas de condutividade hidráulica provocam erros muito grandes na calibração.

Modificando-se os valores de recarga e condutividade hidráulica das zonas consideradas de sensibilidade moderada a praticamente nula, foi verificado um aumento de até 10% do RMS e de erro médio (menor correlação). As maiores alterações dos resultados ocorreriam nos poços locados no freático, sendo os poços de monitoramento locados na argila menos suscetíveis, devido ao confinamento.

Dentre as etapas da modelagem, a de calibração é a que demanda maior tempo. No presente caso, a calibração foi feita com base em dados reais, porém de distribuição bastante irregular, conforme já mencionado. Idealmente, seria que esse processo pudesse ser aprimorado à medida que surgissem novas informações, principalmente naqueles locais sub-amostrados.

11. CONCLUSÕES

O modelo matemático consiste em uma representação simplificada da realidade e a sua concepção envolve o entendimento da geometria do aquífero e dos parâmetros hidrogeológicos utilizados.

O modelo geral contempla uma ampla área e a grande densidade de dados obtidos concentra-se em determinados locais. Portanto, a extrapolação para o restante da área modelada implica em atribuir dados de referência (bibliográficos) para as áreas onde as informações são escassas e, conseqüentemente, obter um modelo final que pode não ser tão fidedigno.

A escala de trabalho também é um fator limitante no modelamento, uma vez que o procedimento de refinamento da malha de um modelo em escala regional provoca grandes distorções nas células fora da área de interesse e, por conseqüência, o aumento dos erros no processamento dos dados.

Por conta desse fato é interessante que seja desenvolvido um modelo regional para o reconhecimento do padrão potenciométrico da área de interesse e posteriormente seja realizado um modelo de detalhe utilizando os atributos e parâmetros definidos no modelo regional.

O modelo matemático de modo geral, apresentou uma boa concordância com o resultado esperado da hidrogeologia do local de estudo e mesmo na calibração os erros resultantes do processamento estão dentro dos valores assumidos como baixos.

Durante a etapa de calibração o modelo mostrou-se muito susceptível às alterações nas condutividades hidráulicas, em especial das camadas superiores. A modificação de outros parâmetros altera muito pouco os cálculos de carga hidráulica.

Quanto aos modelos de transporte, certamente estes consistem na etapa mais complexa do modelamento de aquíferos. As características que influenciam na dinâmica dos contaminantes e cinética de reações são mais complexas de se precisar e de se realizar as simplificações pertinentes. Isto deve-se à variabilidade hidrogeoquímica e as combinações desses fatores nos processos de degradação/adsorção do soluto.

Alguns desses fatores relacionam-se ao tipo de ambiente (redutor/oxidante), pH, presença de microorganismos, temperatura e a presença de outros compostos que podem participar ou catalisar as reações.

Além destes parâmetros mais relacionados ao ambiente hidrogeológico, somam-se as características químicas intrínsecas de cada tipo de contaminante, tal como taxa de degradação e o coeficiente de partição características que também não apresentam um valor definitivo.

Certamente, o grande número de variáveis e suas inter-relações dificultam a elaboração de um modelo. No entanto, um bom detalhamento das principais condicionantes e a cubagem do volume e massa inicial do contaminante são indispensáveis para um modelo mais realista.

Neste estudo foi avaliada a resposta em ambos os programas, modificando-se os parâmetros de dispersão, advecção, retardação e degradação, conforme definidas nas equações dos programas MT3DMS[®] (eq. 21) e RT3D2.5[®] (eq. 24, 25, 26 e 27).

Comparando as duas equações, observou-se que os termos que envolvem a advecção, fontes e sumidouros e dispersão são similares. A diferença entre os resultados obtidos pelas equações reside nos termos que descrevem o retardamento e a degradação.

Na equação do MT3DMS[®] estes termos envolvem as concentrações dissolvidas na água e as adsorvidas no solo em relação aos respectivos coeficientes de decaimento. No RT3D2.5[®] (utilizando-se a opção de decaimento seqüencial) os cálculos de degradação não são efetuados para os compostos adsorvidos, desta forma o resultado obtido foi mais conservador do que em comparação ao MT3DMS[®].

Situação oposta foi obtida na simulação sem considerar o efeito da adsorção, na qual o programa MT3DMS[®] apresentou uma resposta mais conservadora, indicando que programa RT3D2.5[®] tende a valores mais conservadores à medida que o coeficiente de adsorção aumenta. No caso extrapolado onde foi admitido um K_d de 1 (mg/L)^{-1} , manteve-se constante a massa de PCE no programa RT3D2.5[®] durante um período de 10 anos.

Com base nessa premissa os programas podem apresentar um comportamento relativo mais conservador ou otimista das concentrações conforme o K_d obtido para a área de estudo.

A obtenção desse parâmetro (K_d) depende das análises da fração de carbono orgânico do solo e do método de obtenção do K_{oc} , o qual mesmo se tratando de uma propriedade química, os valores podem ser muito variados em função da metodologia utilizada.

Sob as condições hidrogeoquímicas locais, observa-se pelo comportamento das curvas de evolução de concentração em função do tempo uma tendência de comportamento mais linear do programa RT3D2.5[®] em relação às curvas apresentadas pelo MT3DMS[®], que apresentam um comportamento mais logarítmico.

Os resultados mostraram que as diferenças entre os programas MT3DMS[®] e RT3D2.5[®] não se devem apenas à incorporação das concentrações dos compostos formados em reações subseqüentes aos já existentes (no caso apenas do RT3D2.5[®]). Também diferem as equações que governam o decaimento dessas substâncias. Outro fator a ser considerado é que as concentrações no ponto de amostragem sofrem redução também devido ao processo de deslocamento da pluma contaminante.

A curva calculada pelo programa MT3DMS[®] obtida para o composto DCE apresenta uma taxa de decaimento menor em relação aos outros compostos. Desta forma, as principais variações nas suas concentrações devem-se ao deslocamento da pluma em função do tempo.

As curvas obtidas utilizando-se o MT3DMS[®] para os compostos PCE, TCE e CV, mostram inflexão acentuada por conta dos processos de degradação, uma vez que esses compostos apresentam taxas de decaimento maiores em comparação ao DCE.

Avaliando os resultados das simulações com as informações reais de concentração em um período de 10 anos foi observado que a manutenção das altas concentrações de cloreto de vinila calculadas pelo RT3D2.5[®] devem-se principalmente pela incorporação dos compostos gerados nas reações subseqüentes.

Para a situação considerada neste trabalho, o RT3D2.5[®] foi o programa que processou os dados e informações de forma mais adequada, tendo sido obtidos os resultados mais conservadores e também mais realistas.

12. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDERSON, M. P.; WOESSNER, W.W. *Applied Groundwater Modeling: simulation of flow and advective transport*. San Diego: Academic Press, 1992. p. 381.

CABRAL, J. Movimento das águas subterrâneas. In: FEITOSA, F.A.C. e FILHO, J.M. (coord) *Hidrogeologia: Conceitos e aplicações*. Fortaleza: Companhia de Pesquisa de Recurso Minerais, LABHID-UFPE, 1997. p. 3-10.

CLEARLY, R. W. Águas subterrâneas. In: RAMOS, F.; GARCIA, A. O.; Engenharia hidrológica. Coleção ABRH. Rio de Janeiro, 1989. p. 1-112. (Hidrogeologia).

CLEMENT, T. P. RT3D v2.5 A Modular computer code for simulating reactive multi-species transport in 3-dimensional groundwater systems. Richland, WA: Pacific Northwest National Laboratory, 1997. 59 p. Disponível em: <<http://bioprocess.pnl.gov/rt3d.htm>>. Acesso em 12 fev. 2008.

COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL – CETESB

Valores orientadores para solo e água subterrânea no estado de São Paulo. São Paulo, 2005. Disponível em: http://www.cetesb.sp.gov.br/Solo/relatorios/tabela_valores_2005.pdf
Acesso em: 10 de novembro de 2008.

COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL – CETESB

Manual de produtos perigosos. Disponível em: <http://www.cetesb.sp.gov.br/Emergencia/produtos/produto_consulta_nome.asp>
Acesso em: 14 de agosto de 2008.

CPRM. Programa levantamento geológico do Brasil ao milionésimo: Folha SF-23 e SG -23. Rio de Janeiro, 2001. 2 Mapas. 1 CDROM.

DE VRIES, J. J. e SIMMERS, I. Groundwater recharge: an overview of processes and challenges. *Hydrogeology Journal*. Springer-Verlag, Berlin. v. 10, n.1. p. 5-17, 2002.

DOHERTY, J. *Model-independent parameter estimation*. Watermark. Numerical Computing, 2000. 255p.

- EPA (US. Environmental Protection Agency). Toxicological review of vinyl chloride. Boletim técnico EPA/635R-00/04. Washington, 2000, p. 197.
- EPA (US. Environmental Protection Agency). Toxicological review of tetrachloroethylene. Boletim técnico EPA/635/R-08/011A. Washington, 2008, p. 556.
- FENN, D.; HANLEY, K.; DE GEARE, T. Use of water balance method for predicting leach at generation from solid waste disposal sites. US Environmental Protection Agency Report, 1975.
- FETTER, C. W. Contaminant hidrogeology. Prentice hall, New Jersey, 1999, 2 ed. p. 500.
- FETTER, C. W. *Applied hydrogeology*. Upper Saddle River, NJ. Prentice Hall, 4 ed. 2001, p. 598.
- FRANCISS, F. O. *Hidráulica de meios permeáveis Escoamento em meios porosos*. São Paulo: EDUSP, 1980. p.169.
- FULVARO, V. J.; PONÇANO, W. L.; BISTRICHI, C. A.; STEIN, D.P. Escorregamentos de Caraguatatuba: expressão atual e registro na coluna sedimentar da planície costeira adjacente. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE GEOLOGIA DE ENGENHARIA, 1., 1976. Rio de Janeiro. Anais v.2, p. 342-350.
- GEOBRÁS, S. A. Complexo Valo Grande, Mar Pequeno e Rio Ribeira de Iguape. Relatório Geobrás S/A, Engenharia e Fundações. Serviço do Vale do Ribeira. Departamento de Águas e Energia Elétrica, v.2, 1966.
- GREEN, J. R. e MANGERISON, D. *Statistical treatment of experimental data*. Elsevier Science Publishing Company, New York, 1979. 382 p.
- HASSETT, J.J.; BANWART, W.L.; GRIFFEN, R.A. Correlation of compound properties with sorption characteristics of nonpolar compounds by soils and sediments: Concepts and Limitations. In: FRANCIS, C.W. and AUERBACH, S.I., Editores. *Environmental and solid wastes characterization, treatment and disposal*. MA, USA. Butterworth Publishers, 1983. p 512.
- HASUI, Y.; CREMONINI, O. A. ; BORN, H. . Considerações sobre o Grupo Açungui em São Paulo e porção adjacente do Paraná. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE GEOLOGIA, 33., 1984. Rio de Janeiro. Anais SBG, 1984 v. 7. p. 3297-3306.

HASUI, Y.; MIOTO, J. A.; MORALES, N. Geologia do Pré Cambriano. In: *Solos do Litoral de São Paulo*. São Paulo: ABMS (Associação Brasileira de Mecânica dos Solos), 1994. p. 41-69.

HEALY, R. W.; COOK, P. G. Using groundwater levels to estimate recharge. *Hydrogeology Journal*, Berlin, v.10, p.91 – 109, 2002.

INSTITUTO GEOGRÁFICO E CARTOGRÁFICO. Mapa da Região Metropolitana da Baixada Santista: 2007. Escala 1:400.000.

IRITANI, M. A. Modelação matemática tridimensional para a proteção das captações de água subterrânea, SP, 1998. Tese de Doutorado. Inst. de Geociências, Universidade de São Paulo.

KARICKHOFF, S. W.; BROWN, D. S.; SCOTT, T. A. Sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments. *Water Research*, v. 13, p. 241-248, 1979.

KITANIDIS, P. K. *Introduction to geostatistics – applications in hydrogeology*. Cambridge University Press, 1997. 249 p.

LAUDEWERYYS, R. Toxicologie industrielle et intoxications professionnelles. Masson, Paris, 1992. 3 ed. 692 p.

MCDONALD, M.G e HARBAUGH, A. W. A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model. Reston, Virginia: U.S. Geological Survey Techniques of Water-Resources Investigations, 1988. B.6, A1, B586p.

MARTIN, L.; BITTENCOURT, A. C. S. P.; VILAS-BOAS, G.S. Primeira ocorrência de corais pleistocênicos da costa brasileira: datação do máximo da penúltima transgressão. *Ciências da Terra*, v.1, p. 16-17, 1982.

MARTIN, L.; SUGUIO, K.; FLEXOR, J. M. Hauts niveaux marins pléistocènes du littoral brésilien. *Palaeogeograph, Palaeoclimatology, Palaeocology*, v. 68, p. 231 – 239, 1988.

MASSAD, F. *As Argilas quaternárias da baixada santista: características e propriedades geotécnicas*, 1985. Tese de Livre-Docência- Escola Politécnica da USP, Universidade de São Paulo.

MELO, M. S. *A formação Pariquera-Açu e depósitos relacionados: sedimentação e geomorfogênese*, 1990. Dissertação de mestrado – Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo.

NASCIMENTO JUNIOR, D. R. *A Morfologia e sedimentologia ao longo do sistema praia-duna frontal de Ilha Comprida, SP*, 2006. Dissertação de mestrado – Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo.

PACHECO SILVA, F. Controlling the Stability of a Foundation Through Neutral Pressure Measurements. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON SOIL MECHANICS AND FOUNDATION ENGINEERING, 1953. Suisse. v.1, p.299-301.

PINTO, C. S. *Curso básico de mecânica dos solos*. São Paulo, Ed. Oficina de textos, 2002. p.355.

QUIOT, F.;ROLLIN, C.; BOUR, O.; JORDANA, S.; RUIZ, E.; GUIMERÀ, J.; SCHWARTZ, J.; POIROT, N.; DAN, A.; GOBLET, P. Modeling of chlorinated solvents transport and natural attenuation in groundwater, 2005. Disponível em: http://transpol.ineris.fr/pdf/compte_rendu/Consoil05_Modeling_of_chlorinated_solvents_transport_and_natural_attenuation_in_groundwater.pdf, ultimo acesso em: 10 de novembro de 2008.

SALGADO, P.E. T. e MARONA,H. R. N. Informações gerais e ecotoxicológicas de solventes clorados, Salvador. Centro de Recursos Ambientais-CRA, 2004, p.510.

SCHWARZENBACH, R. P. e WESTALL, J. Transport of nonpolar organic compounds from surface water to groundwater. Laboratory Sorption Studies. Environmental Science Technology, v. 15, p. 1360, 1981. Disponível em: < http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/esthaq/1981/15/i11/f-pdf/f_es00093a009.pdf?sessid=6006l3>. Acesso em 14 de agosto de 2008.

STRAUSS, P. Natural attenuation of organic compounds. *Center for public Environmental Oversight*, Aug. 1998.

SILVEIRA, J. D. da. Morfologia do litoral. In: AZEVEDO, A. *Brasil a terra e o homem: As bases físicas*. São Paulo, 1964 v.1, p. 253-305.

SUGUIO, K. e PETRI, S. Stratigraphy of the Iguape-Cananéia lagoonal region sedimentary deposits, São Paulo State, Brasil. Part I: Field observations and grain size analysis. *Boletim IG*. São Paulo v. 4, p. 1-20, Instituto do Geociências, Universidade de São Paulo, 1973.

SUGUIO, K e MARTIN, L. Quaternary marine formations of the states of São Paulo and Southern Rio de Janeiro. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON COASTAL EVOLUTION IN THE QUARTENARY, 1978. São Paulo. Special publication, 1978a v.1, p. 55.

SUGUIO, K. e MARTIN, L. Mapas das formações quaternárias do litoral paulista e sul fluminense. Secretaria de Obras e do Meio Ambiente, DAEE. São Paulo, 1978b. 8 folhas. Escala 1:100000.

SUGUIO, K. e TESSLER, Characteristics of a Pleistocene nearshore deposits: an example from the southern State of São Paulo coastal plain. In: INQUA INTERNATIONAL CONGRESS, 12., 1987. Ottawa. Quaternary of South America and Antarctic Peninsula, v.5, p. 257-268.

SUGUIO, K. e MARTIN, L. Geologia do Quaternário. In: ABMS (Associação Brasileira de Mecânica dos Solos). *Solos do Litoral de São Paulo*, São Paulo, 1994. p. 69-95.

SUNDARAM, D. e SUGUIO, K. Nota Preliminar sobre uma assembléia mioflorística da Formação Pariquera-Açu, Estado de São Paulo. In: *Coletânea de trabalhos paleontológicos*, Brasília: DNPM, 1985. p.503-506.

TESSLER, M. G. 1988. Dinâmica sedimentar quaternária no litoral sul paulista, Estado de São Paulo. São Paulo, Instituto de Geociências da Universidade de São Paulo. Tese de doutoramento, 1 v., 1 mapa, 277 pag.

THORNTHWAITE, C. W. An approach toward a rational classification of climate. *Geograph Rev.* v. 38, p 58 – 94, 1948.

WAHNFRIED, I. D e HIRATA, R. Comparação dos métodos de estimativa de recarga de aquíferos em Uma planície aluvionar na bacia hidrográfica do alto Tietê (São Paulo). *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*. São Paulo. v.10, n.2, p15-25, 2005.

WIEDEMEIER, T. H. et al. Technical protocol for evaluating natural attenuation of chlorinated solvents in ground water: EPA/600/R-98/128. Cincinnati, Ohio: USEPA, 1988. Disponível em: <[http:// http://www.epa.gov/ada/download/reports/protocol.pdf](http://www.epa.gov/ada/download/reports/protocol.pdf)> Acesso em: 10 de novembro de 2008.

ZHENG, C. *MT3D1.1: A modular three-dimensional multi- species transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems* - Software documentation. Ada, Oklahoma: U.S.E.P.A, Report. 1990.

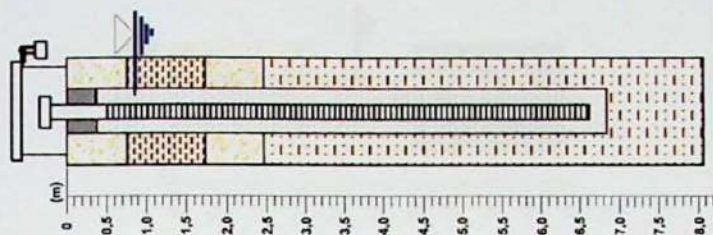
ZHENG, C.; BENNETT, G.D. *Applied contaminant transport modeling: theory and practice*. USA: Van Nostrand Reinhold, 1995. 440p.

ZHENG, C.; WANG, P., MGO Modular Groundwater Optimizer Incorporating MODFLOW/MT3DMS: Documentation and User's Guide. The University of Alabama, in cooperation with Groundwater Systems Research Ltd, 2003.

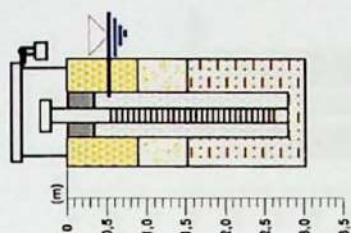
Anexo 1

Perfil construtivo e litológico dos poços de monitoramento.

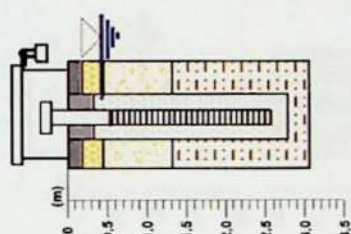
PM-07T



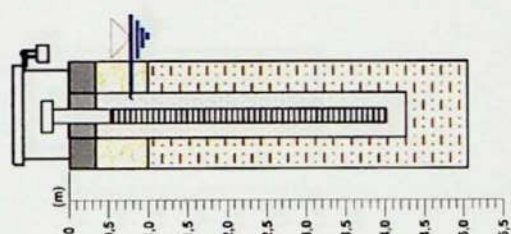
PM-06T



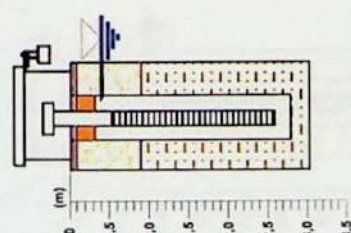
PM-05T



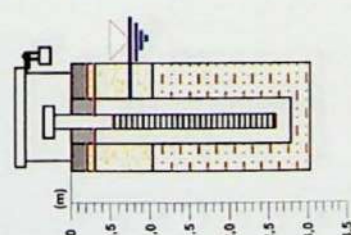
PM-04T



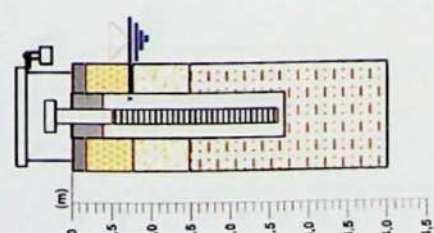
PM-03T



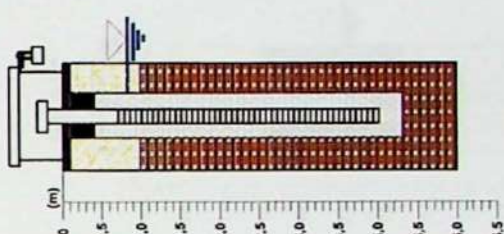
PM-02T



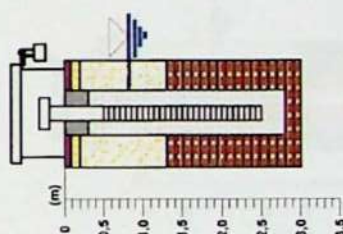
PM-01T



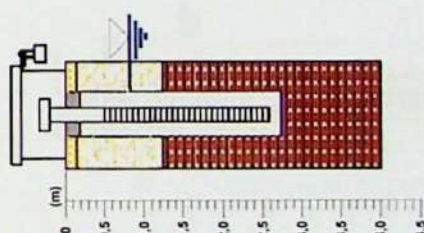
PM-13T



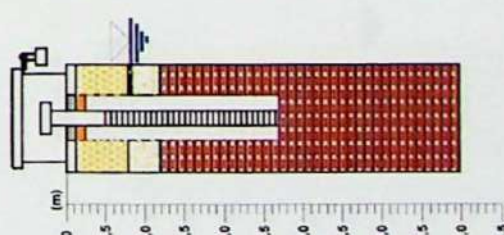
PM-12T



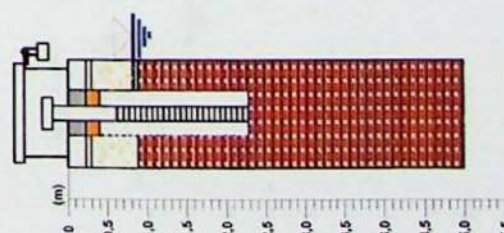
PM-11T



PM-10T



PM-09T



LEGENDA

Asfalto/concreto

Cobertura vegetal

Pedregulhos

Alterro / areia grossa com grânulos

Sedimentos de Mangues, Pantânicos e Baixos (SMP)

Sedimentos de Mangues, Pantânicos e baixos Arenosos (SMPAr)

Areia Média

Areia Fina / Muito Fina Silteosa

Areia Argilosa

Sedimentos de Mangues, Pantânicos e baixos Argilosos (SMGAg)

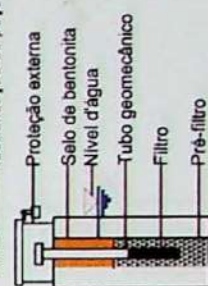
Argila

Argila Muito Arenosa/Silteosa

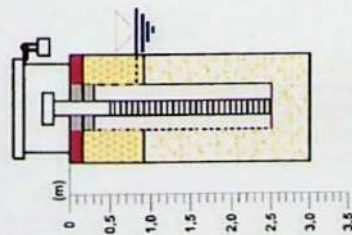
Argila Silteosa / com Areia Fina

Perfil Construtivo do Poço

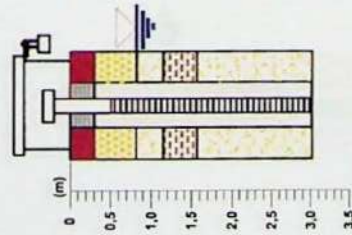
PM-xx — Identificação do poço



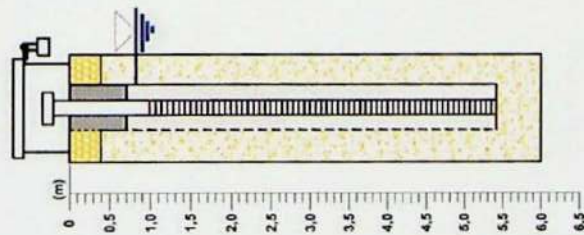
PM-15T



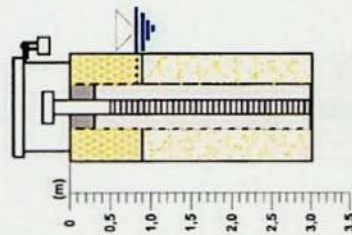
PM-16T



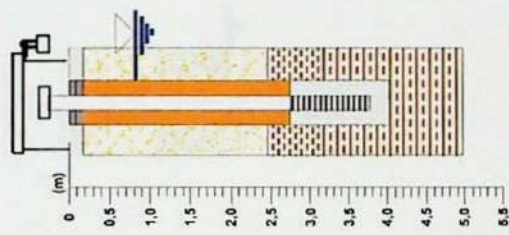
PM-17T



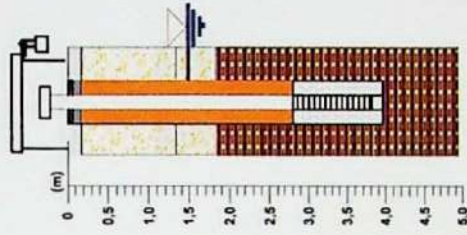
PM-18T



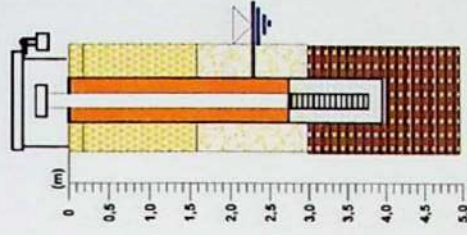
PM-19T



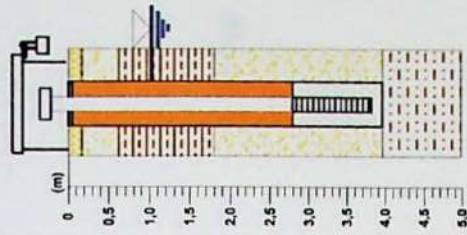
PM-20T



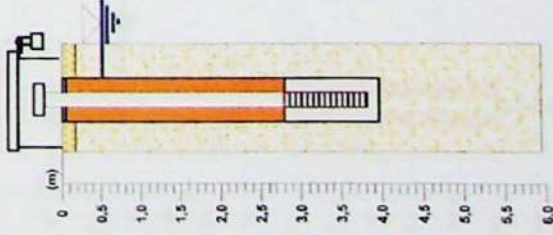
PM-21T



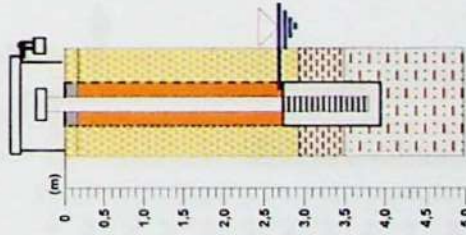
PM-22T



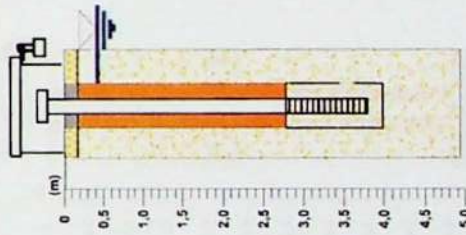
PM-23T



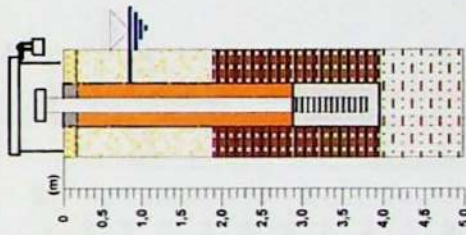
PM-24T



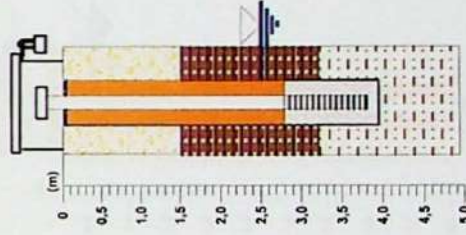
PM-25T



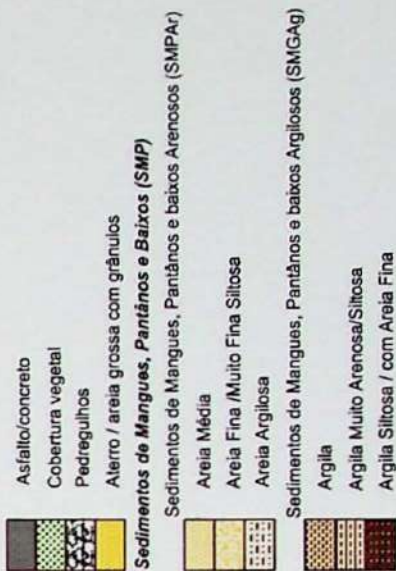
PM-26T



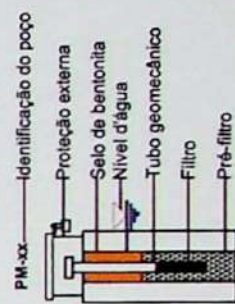
PM-27T



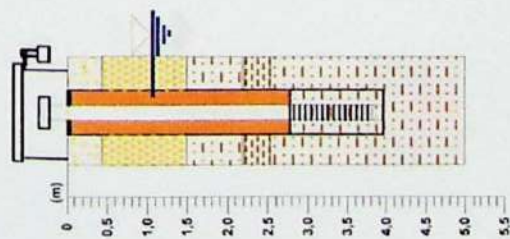
LEGENDA



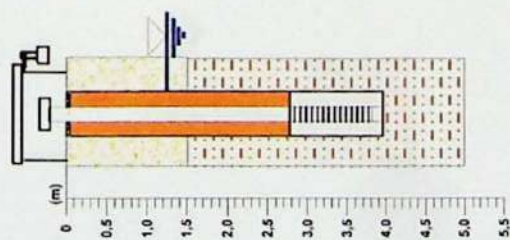
Perfil Construtivo do Poço



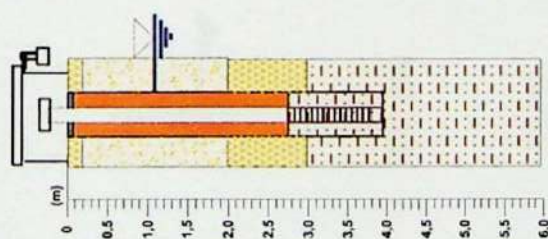
PM-28T



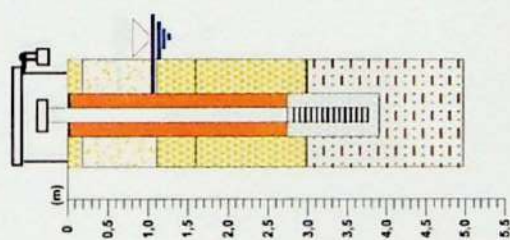
PM-29T



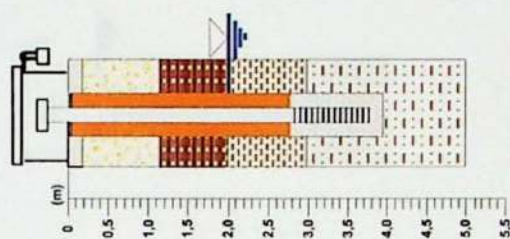
PM-30T



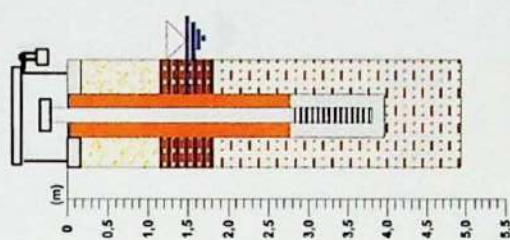
PM-31T



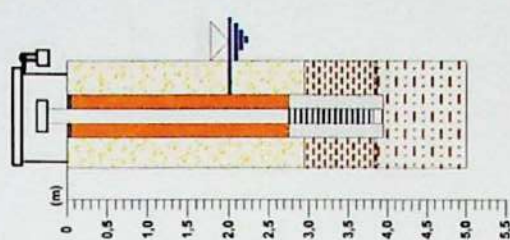
PM-32T



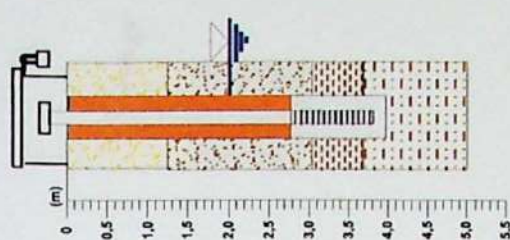
PM-33T



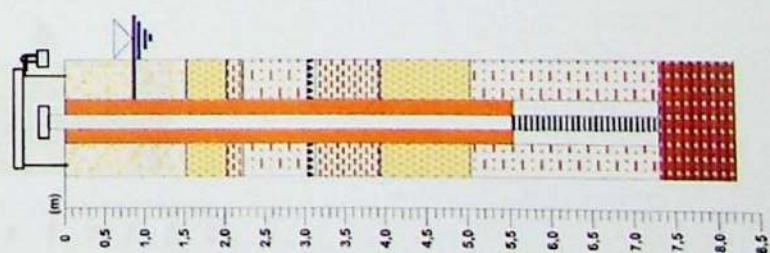
PM-37T



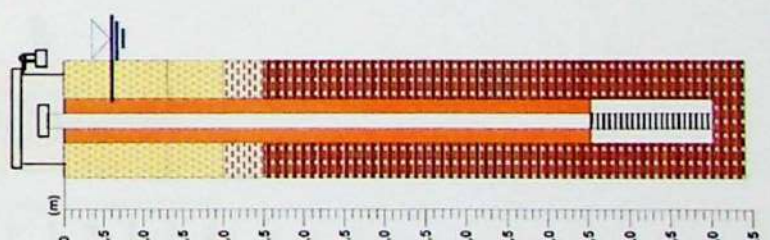
PM-38T



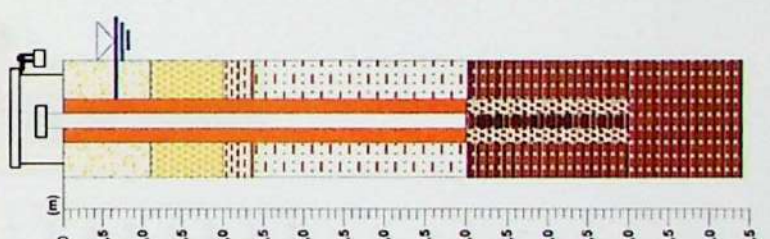
PM 07BT



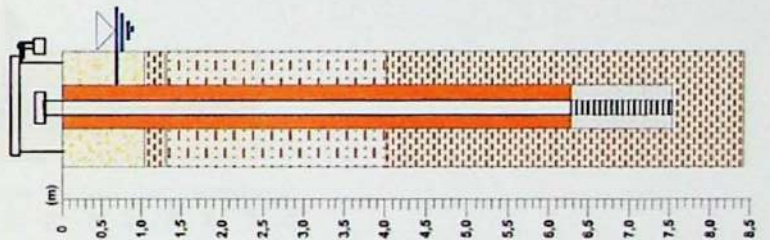
PM 28BT



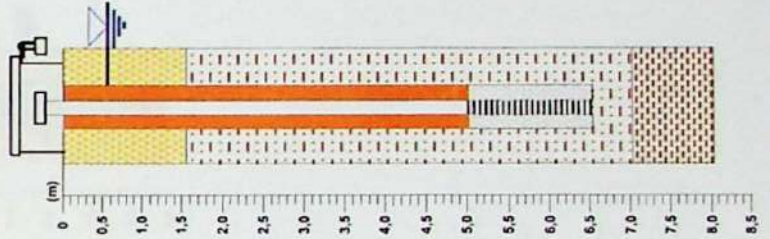
PM 39BT



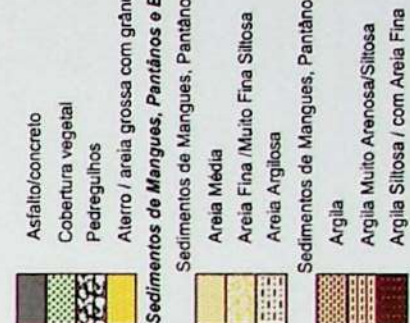
PM 41T



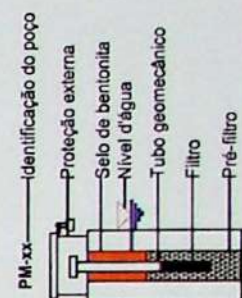
PM 42T



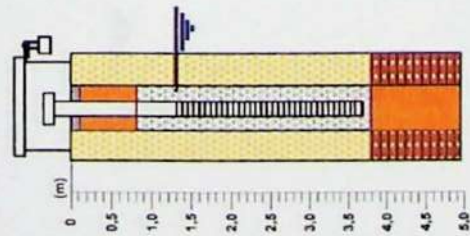
LEGENDA



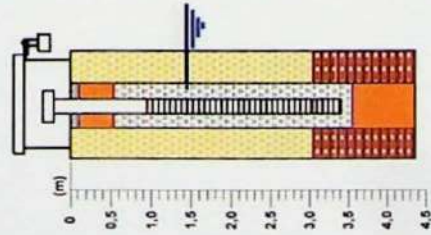
Perfil Construtivo do Poço



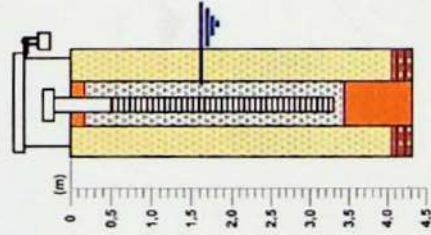
73 PM



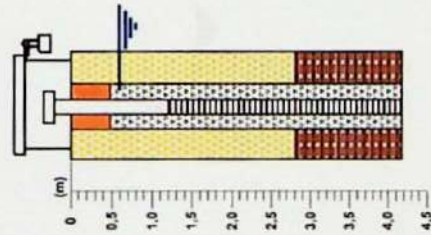
74 PM



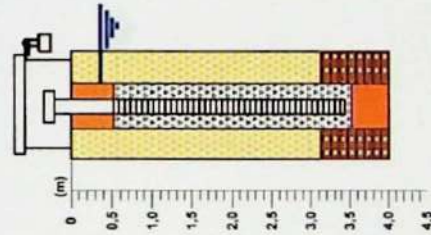
75 PM



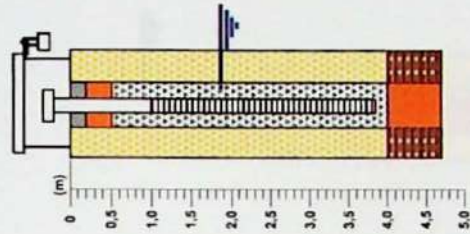
76 PM



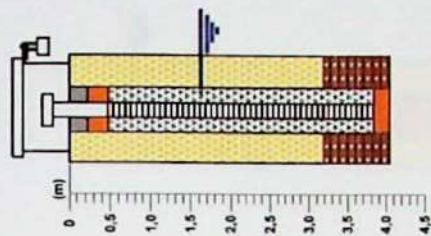
77 PM



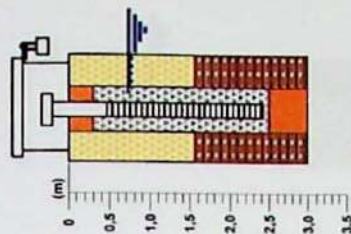
78 PM



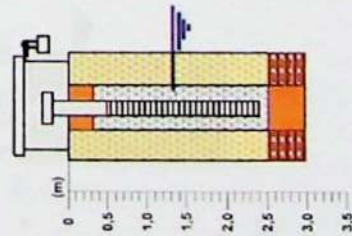
79 PM



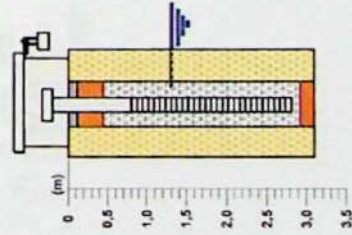
80 PM



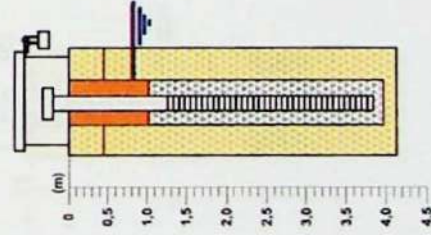
81 PM



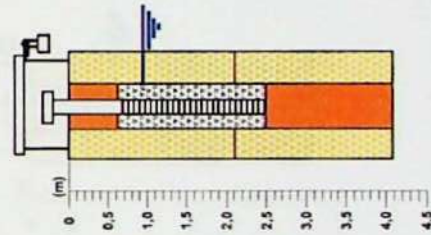
82 PM



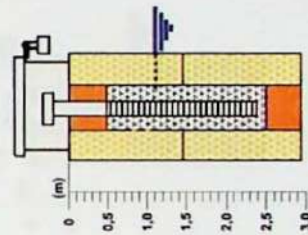
83 PM



84 PM



85 PM



LEGENDA

Asfalto/concreto
Cobertura vegetal
Pedregulhos

Alarço / areia grossa com grânulos

Sedimentos de Mangues, Pantânos e Baixos (SMP)

Sedimentos de Mangues, Pantânos e baixos Arenosos (SMPAr)

Areia Média

Areia Fina / Muito Fina Silteosa

Areia Argilosa

Sedimentos de Mangues, Pantânos e baixos Argilosos (SM/GAg)

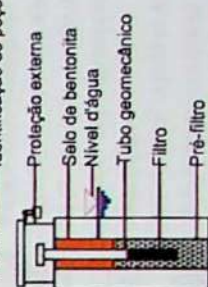
Argila

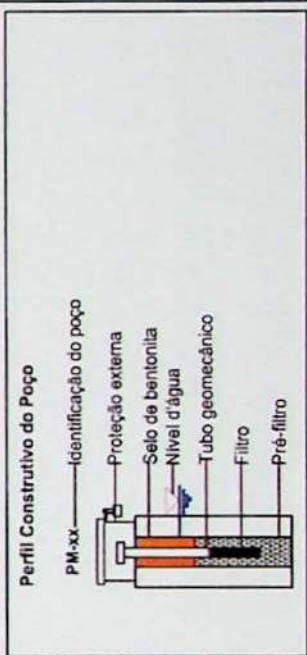
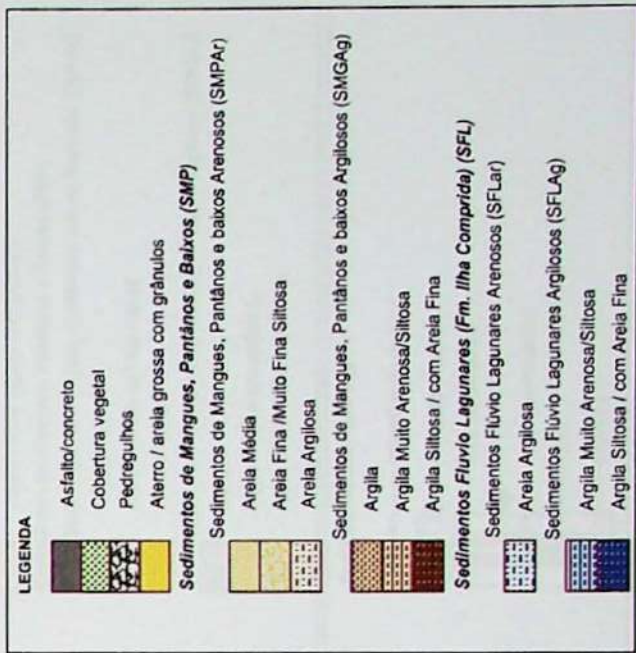
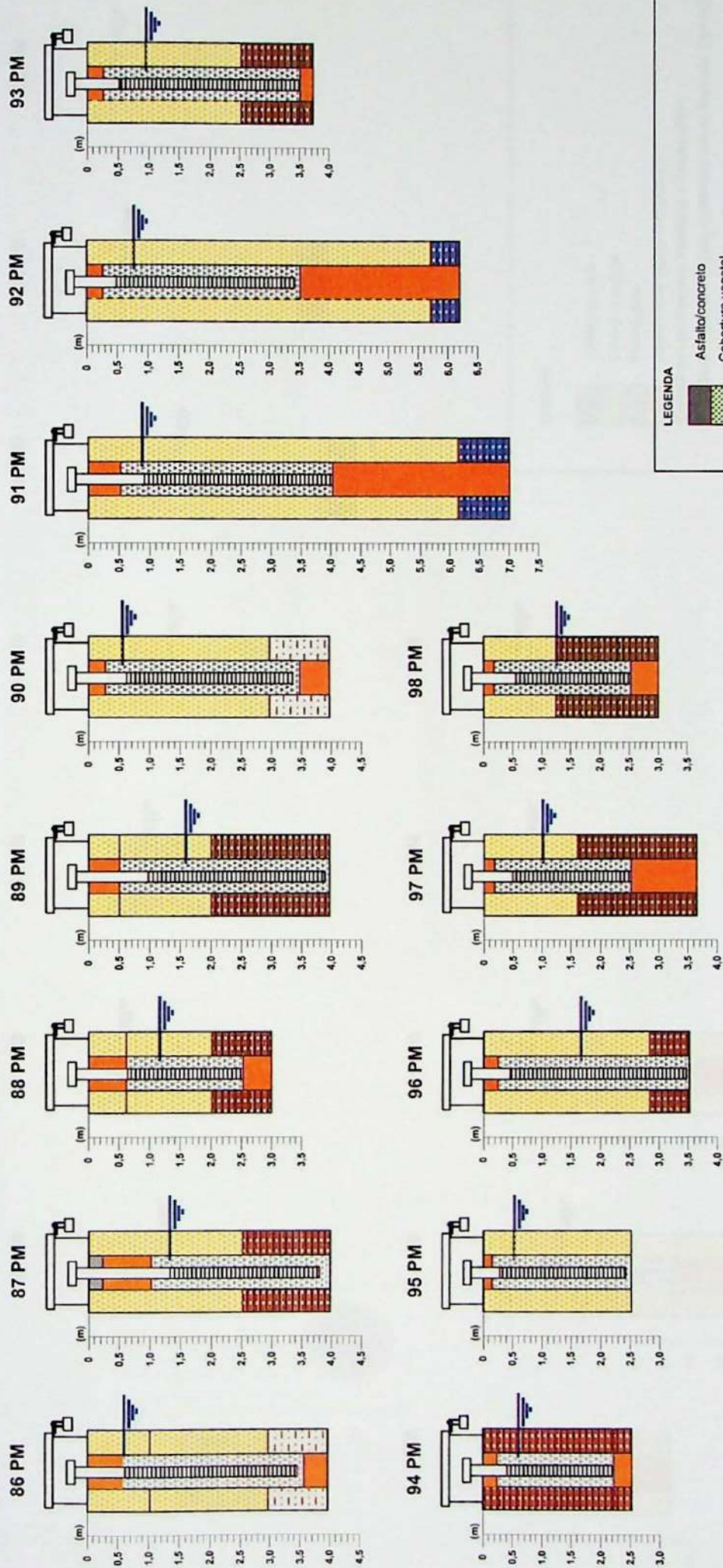
Argila Muito Arenosa/Silteosa

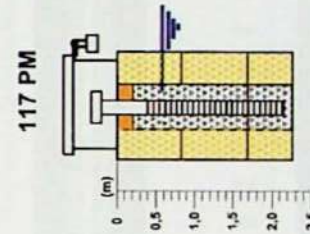
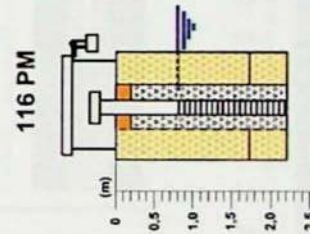
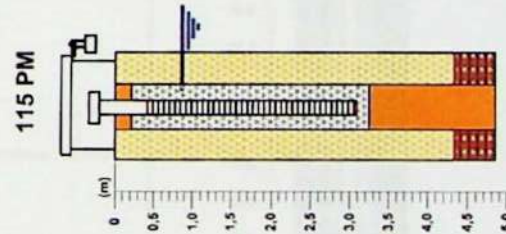
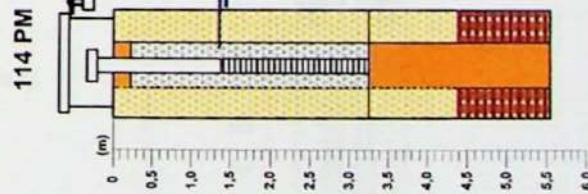
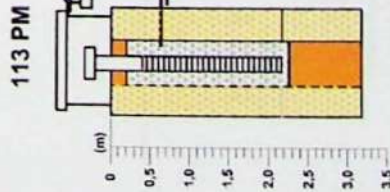
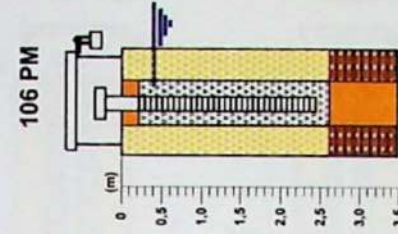
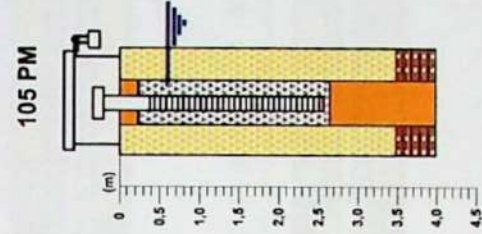
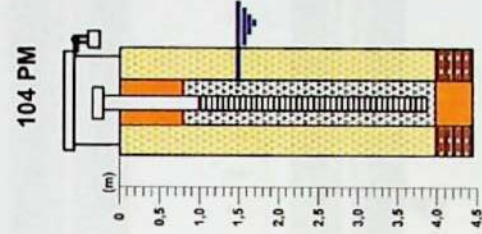
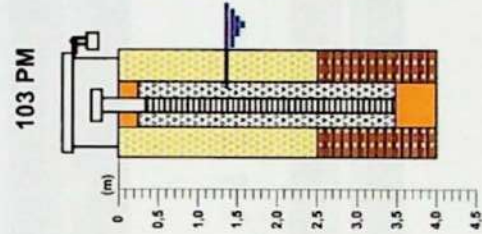
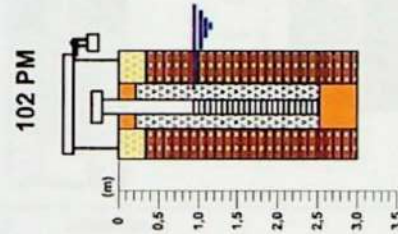
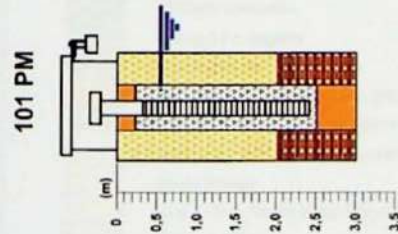
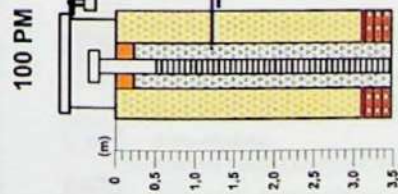
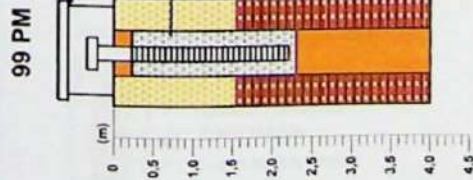
Argila Silteosa / com Areia Fina

Perfil Construtivo do Poço

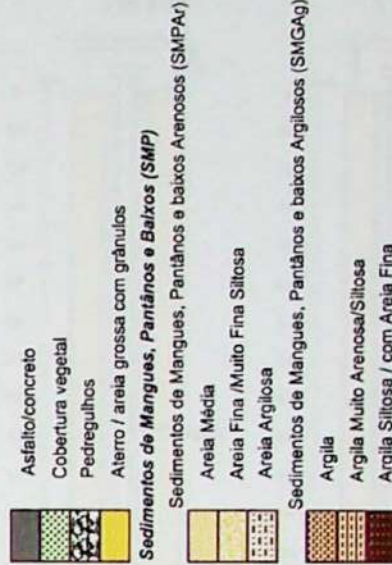
PM-xx Identificação do poço



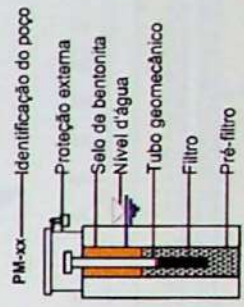


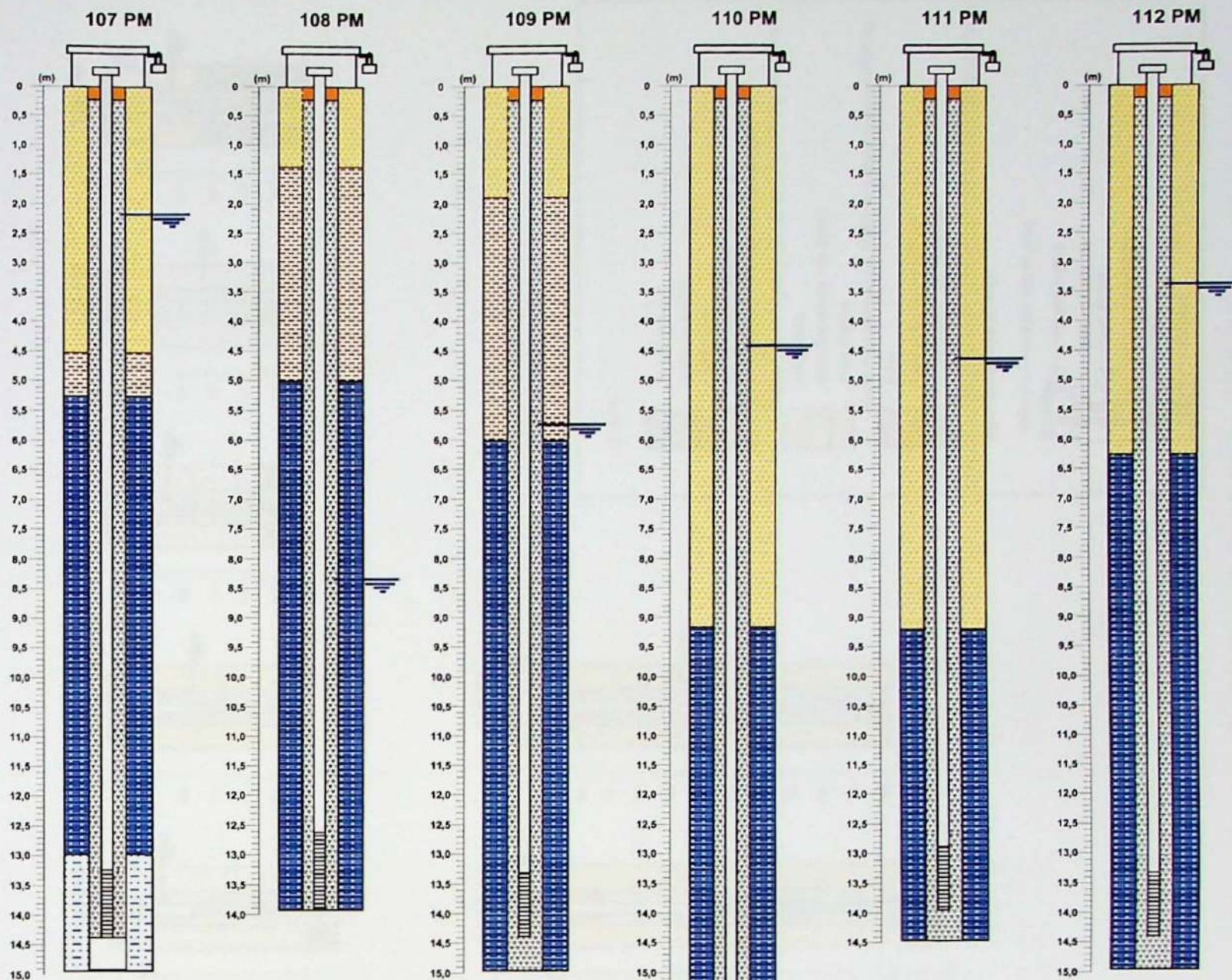


LEGENDA



Perfil Construtivo do Poço





LEGENDA

- Asfalto/concreto
- Cobertura vegetal
- Pedregulhos
- Aterro / areia grossa com grânulos

Sedimentos de Mangues, Pantânos e Baixos (SMP)

Sedimentos de Mangues, Pantânos e baixos Arenosos (SMPAr)

- Areia Média
- Areia Fina /Muito Fina Siltosa
- Areia Argilosa

Sedimentos de Mangues, Pantânos e baixos Argilosos (SMGAg)

- Argila
- Argila Muito Arenosa/Siltosa
- Argila Siltosa / com Areia Fina

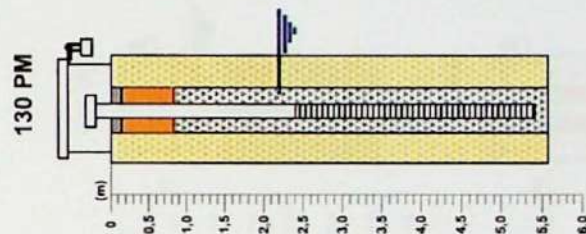
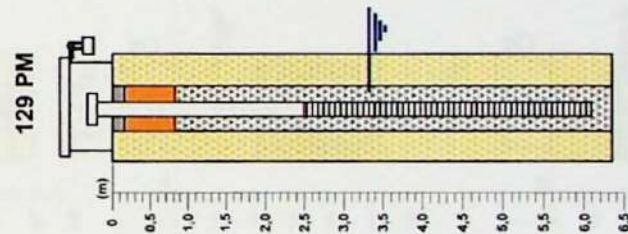
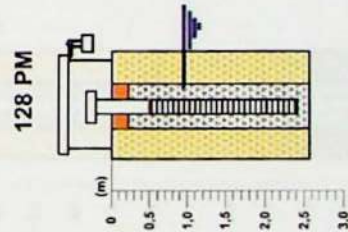
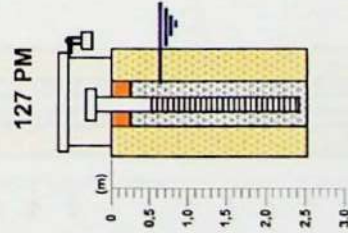
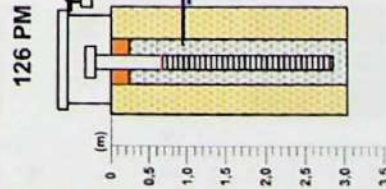
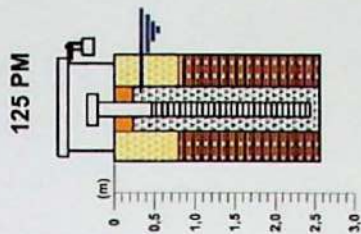
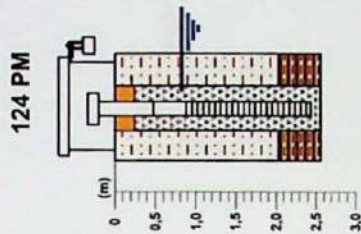
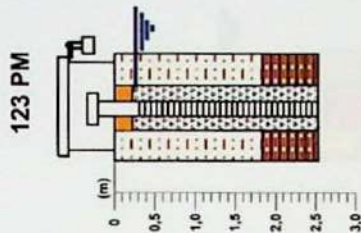
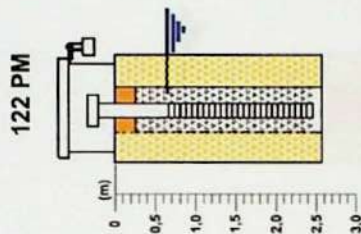
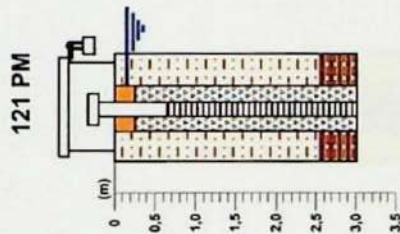
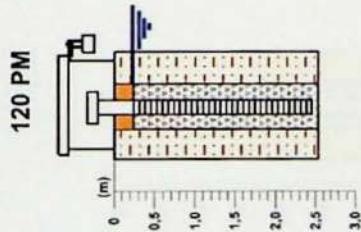
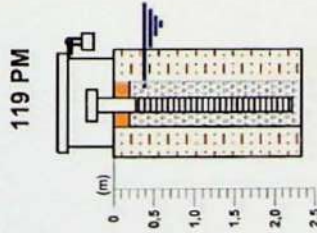
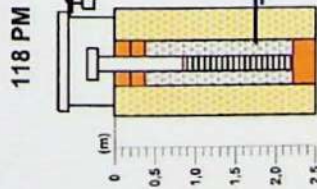
Sedimentos Flúvio Lagunares (Fm. Ilha Comprida) (SFL)

Sedimentos Flúvio Lagunares Arenosos (SFLAr)

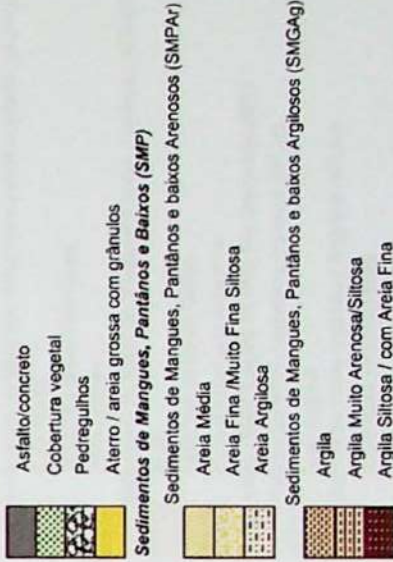
- Areia Argilosa
- Sedimentos Flúvio Lagunares Argilosos (SFLAg)
- Argila Muito Arenosa/Siltosa
- Argila Siltosa / com Areia Fina

Perfil Construtivo do Poço

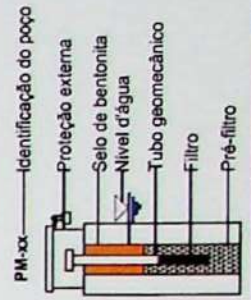


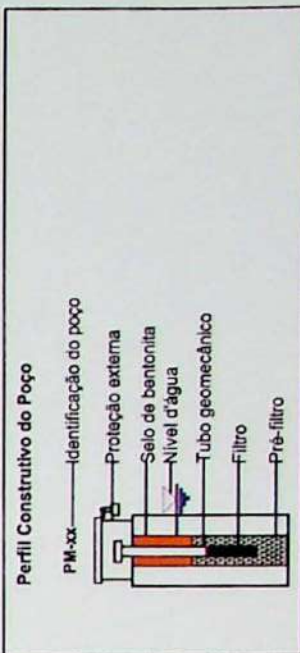
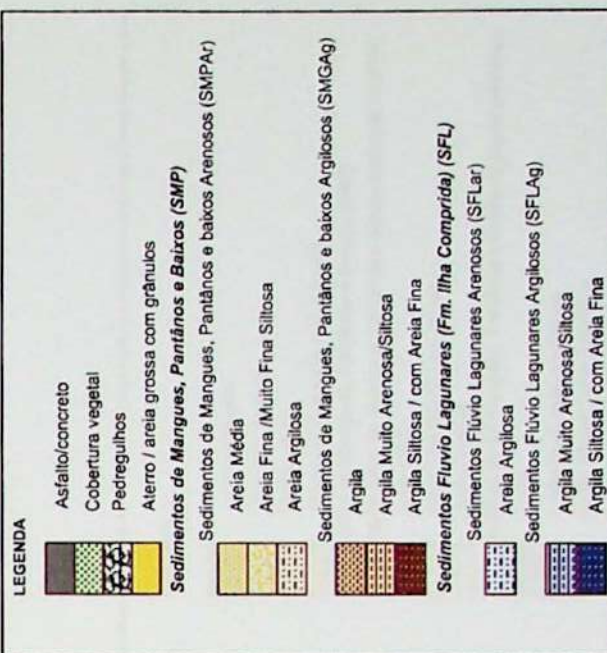
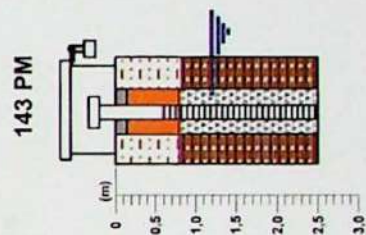
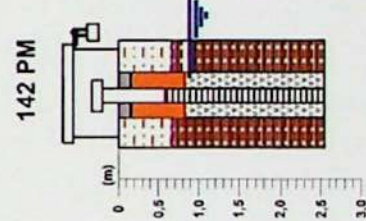
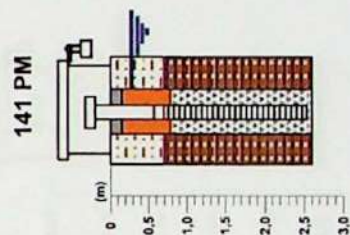
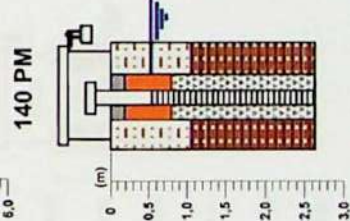
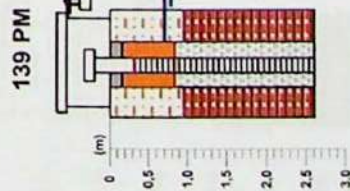
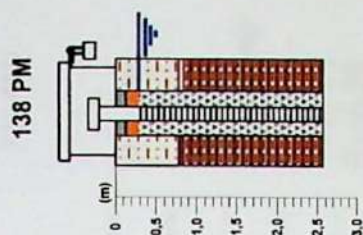
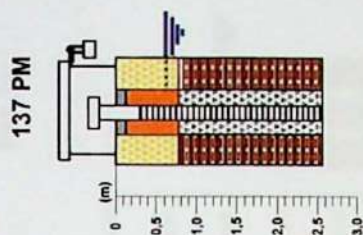
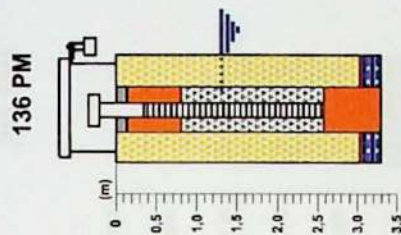
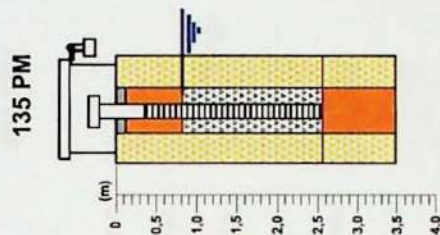
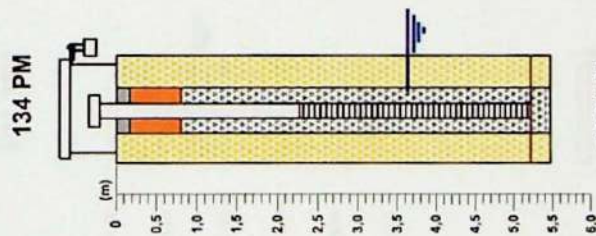
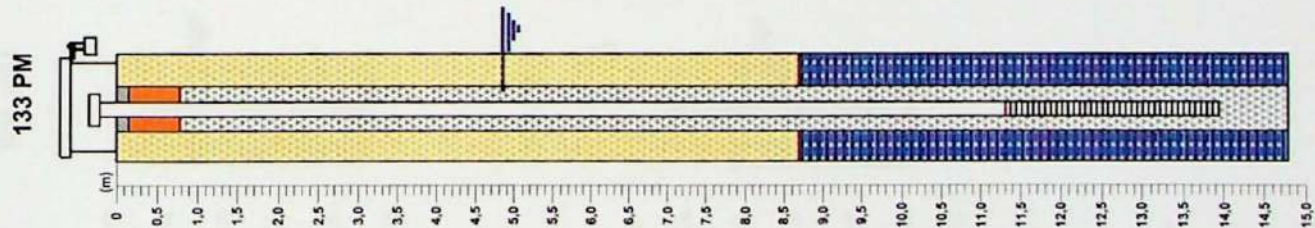
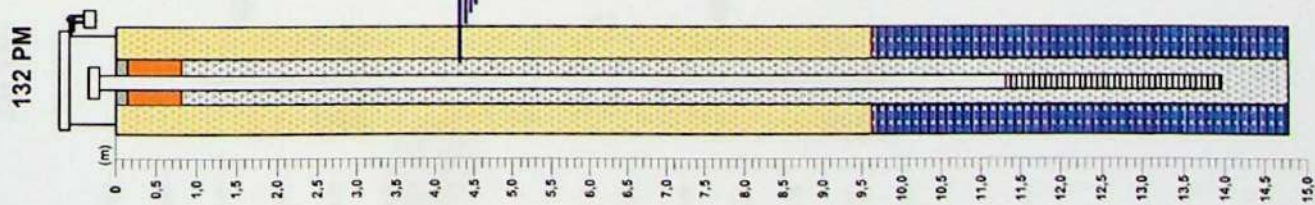
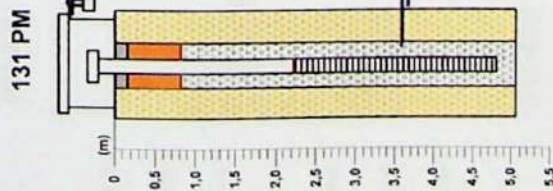


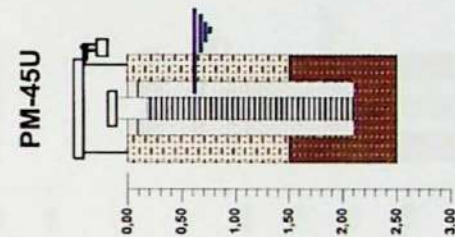
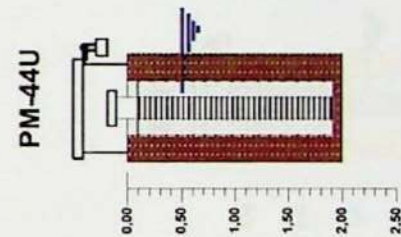
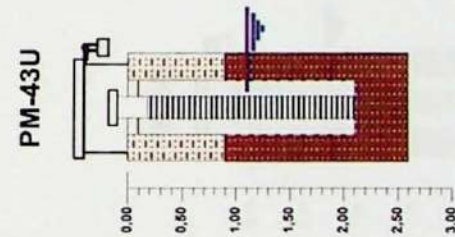
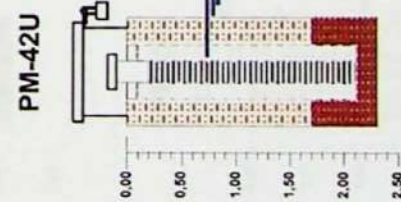
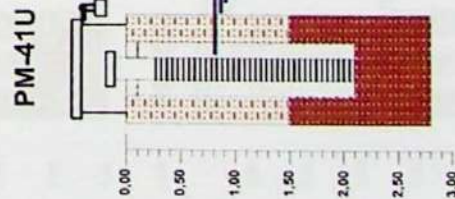
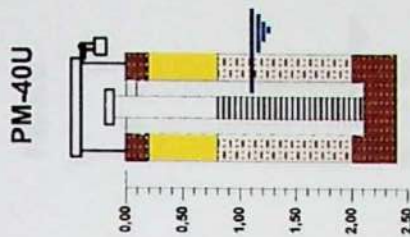
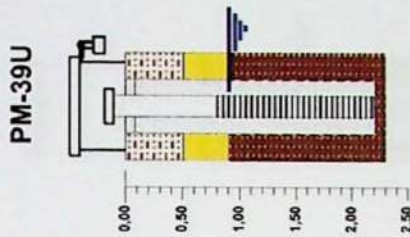
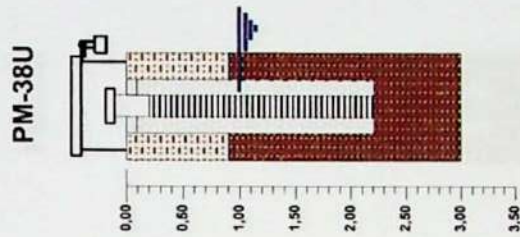
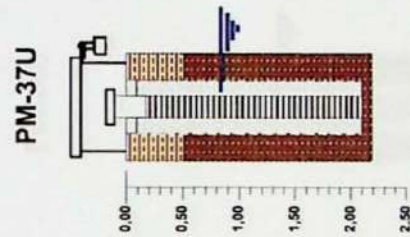
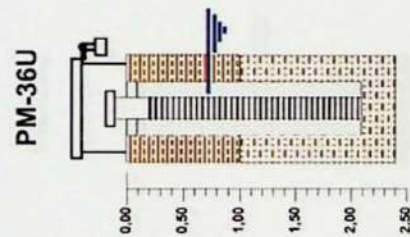
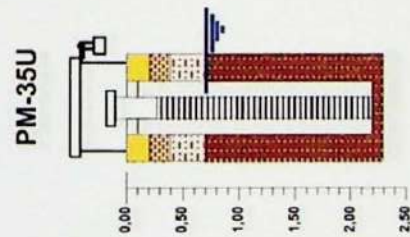
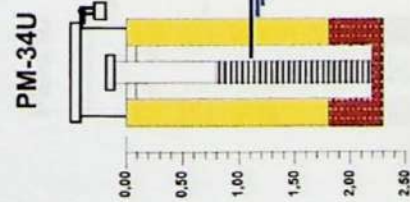
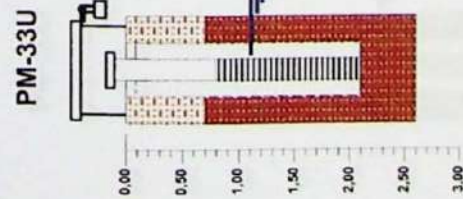
LEGENDA



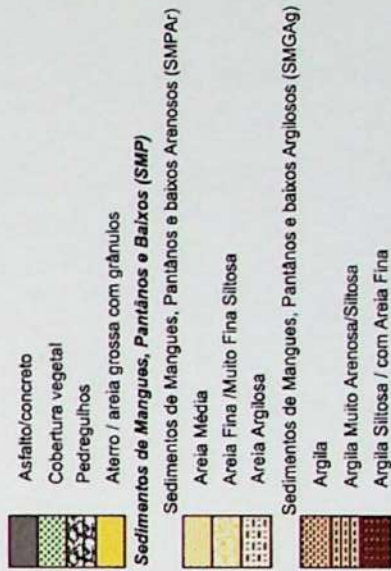
Perfil Construtivo do Poço



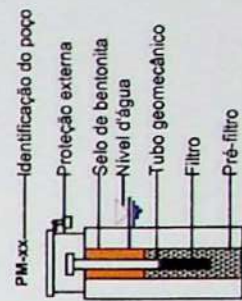


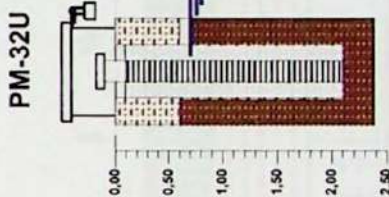
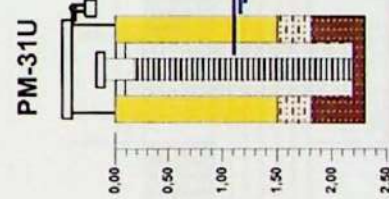
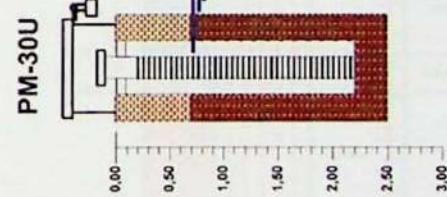
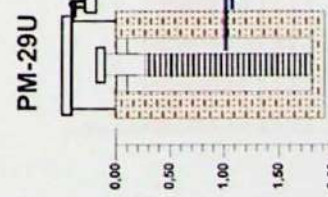
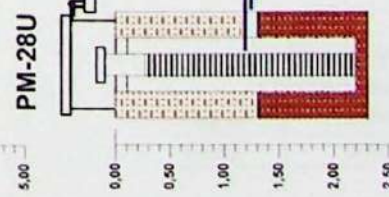
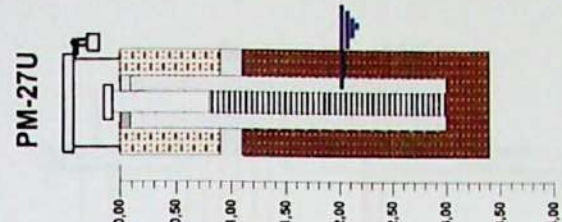
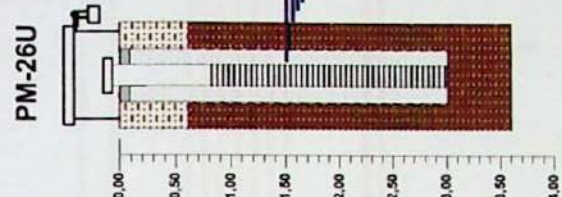
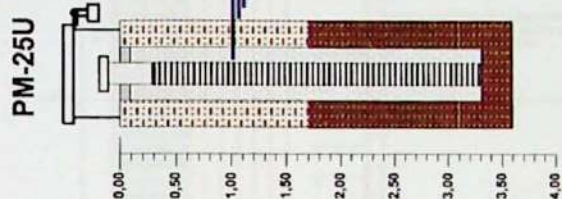
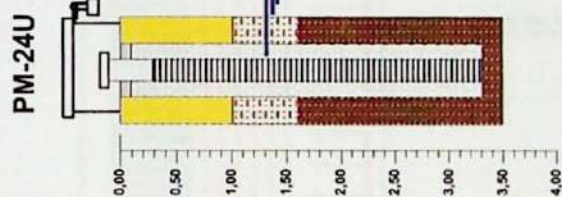
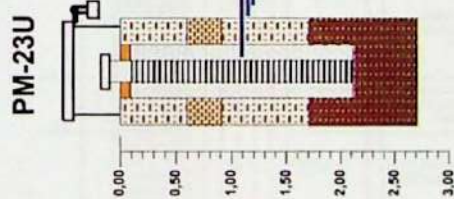
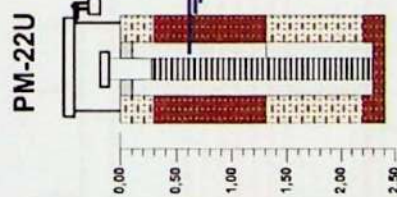
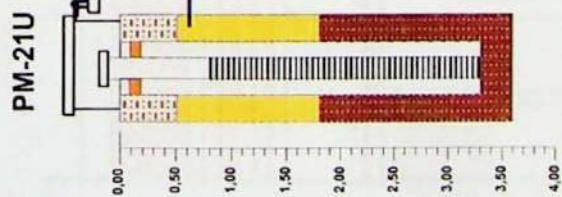
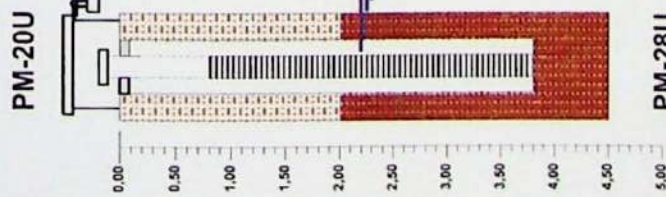


LEGENDA



Perfil Construtivo do Poço

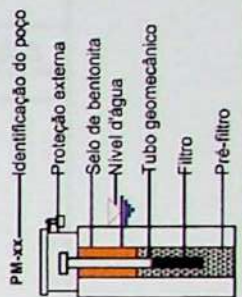




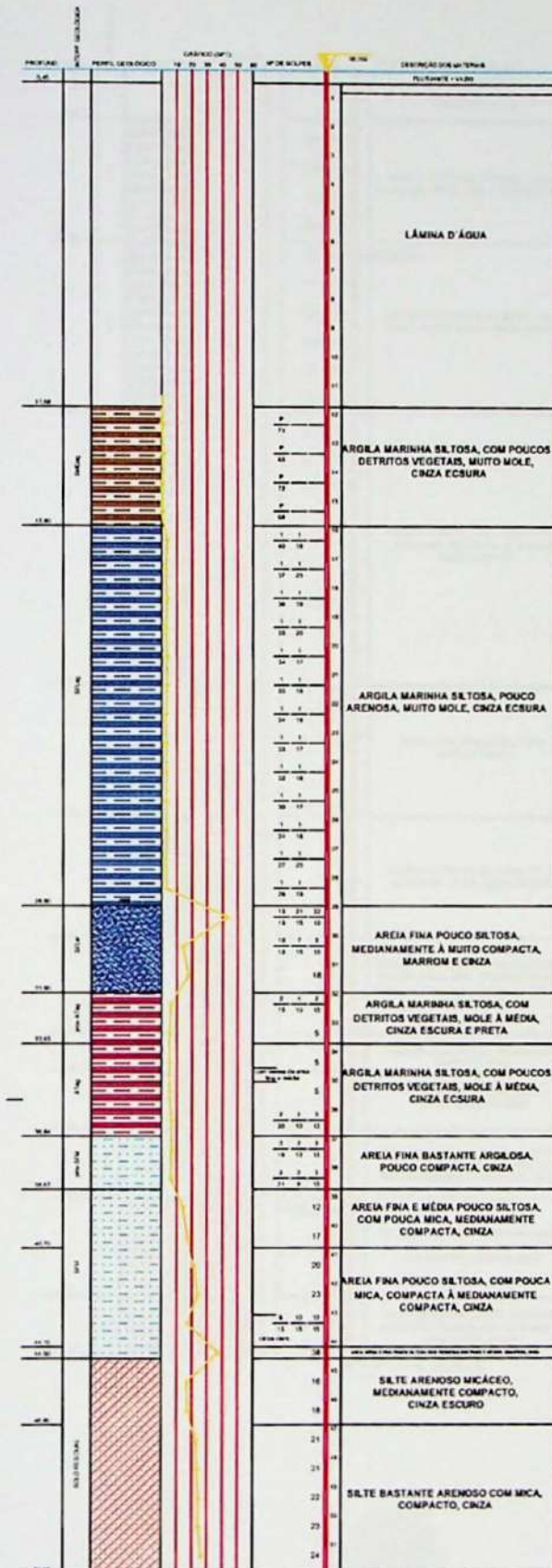
LEGENDA

- Asfalto/concreto
- Cobertura vegetal
- Pedregulhos
- Aterro / areia grossa com grânulos
- Sedimentos de Mangues, Pantânos e baixos Arenosos (SMPAr)
- Sedimentos de Mangues, Pantânos e baixos Argilosos (SMGAg)
- Areia Média
- Areia Fina / Muito Fina Siltosa
- Areia Argilosa
- Argila
- Argila Muito Arenosa/Siltosa
- Argila Siltosa / com Areia Fina

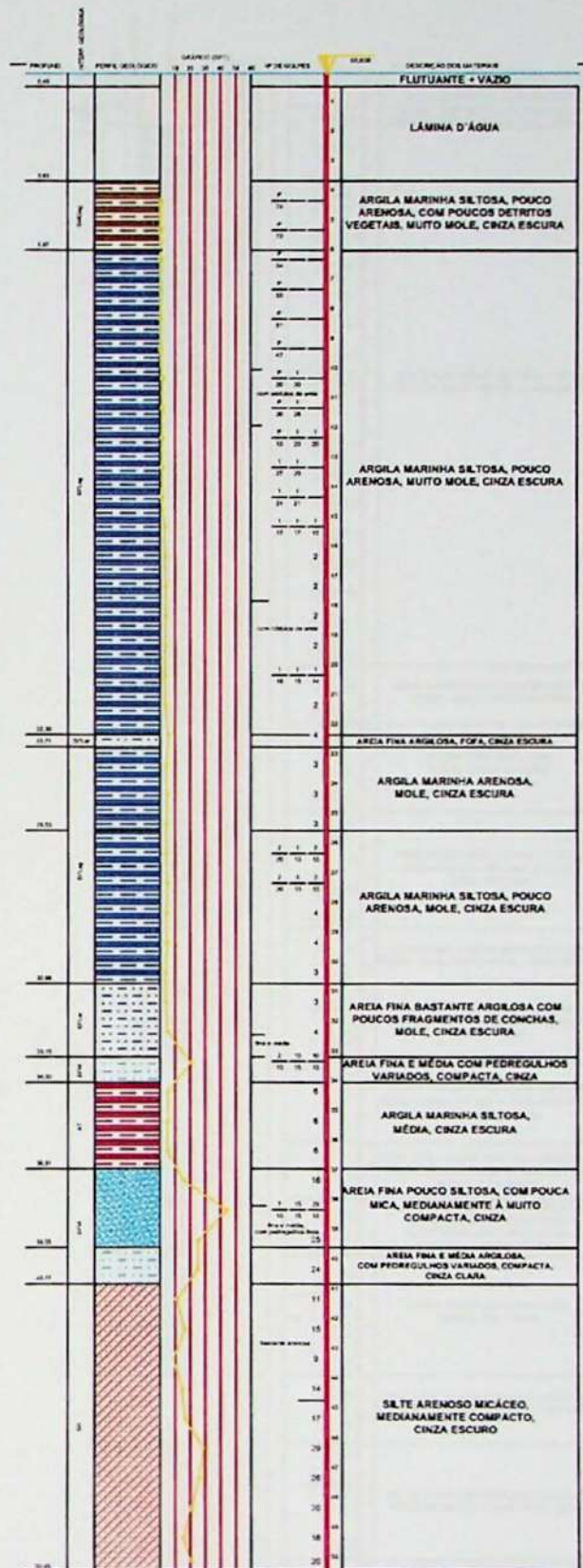
Perfil Construtivo do Poço



Sondagem - 01B



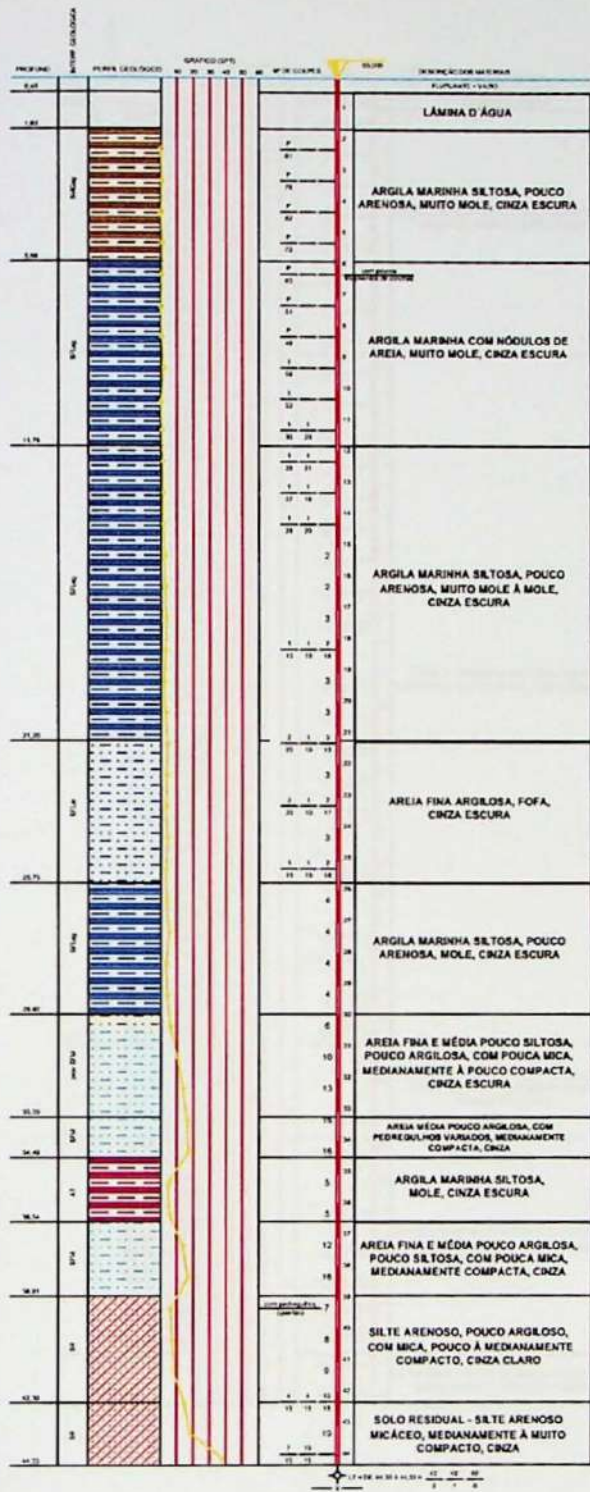
Sondagem - 03B



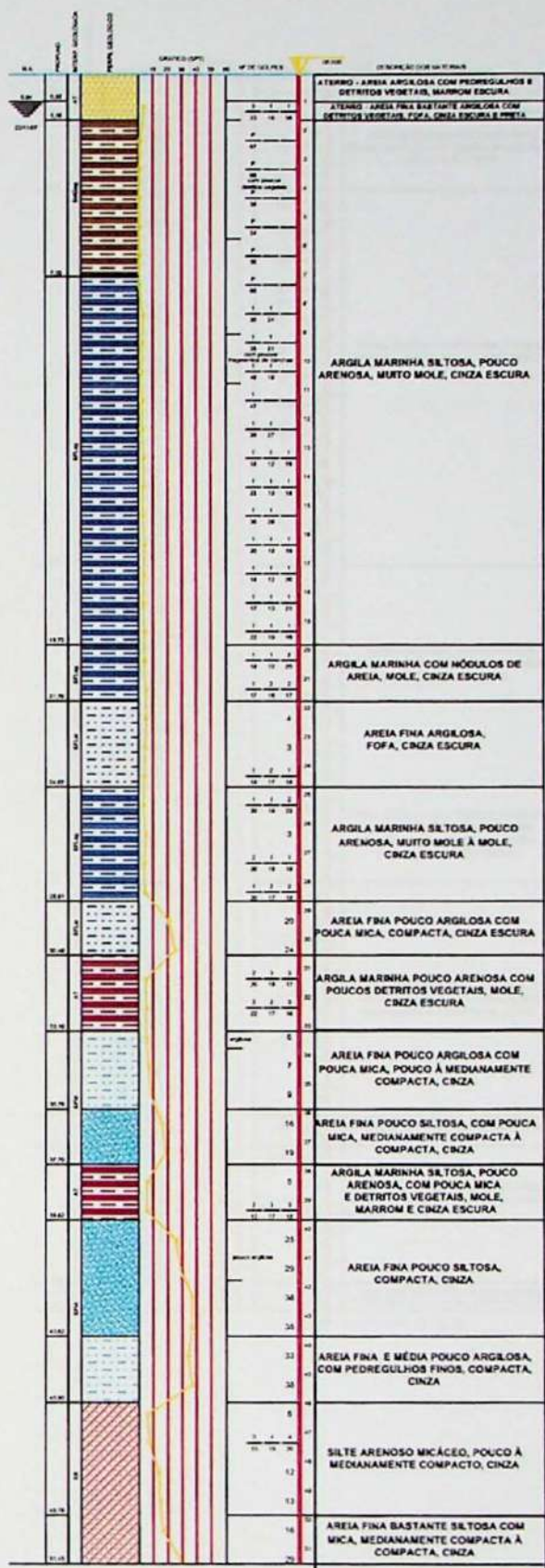
Anexo I - Figura de sondagem SPT

Sondagem S 01B		Sondagem S 03B	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7354100.878	Norte	7354053.038
Leste	361927.1545	Leste	362211.8027

Sondagem - 04B



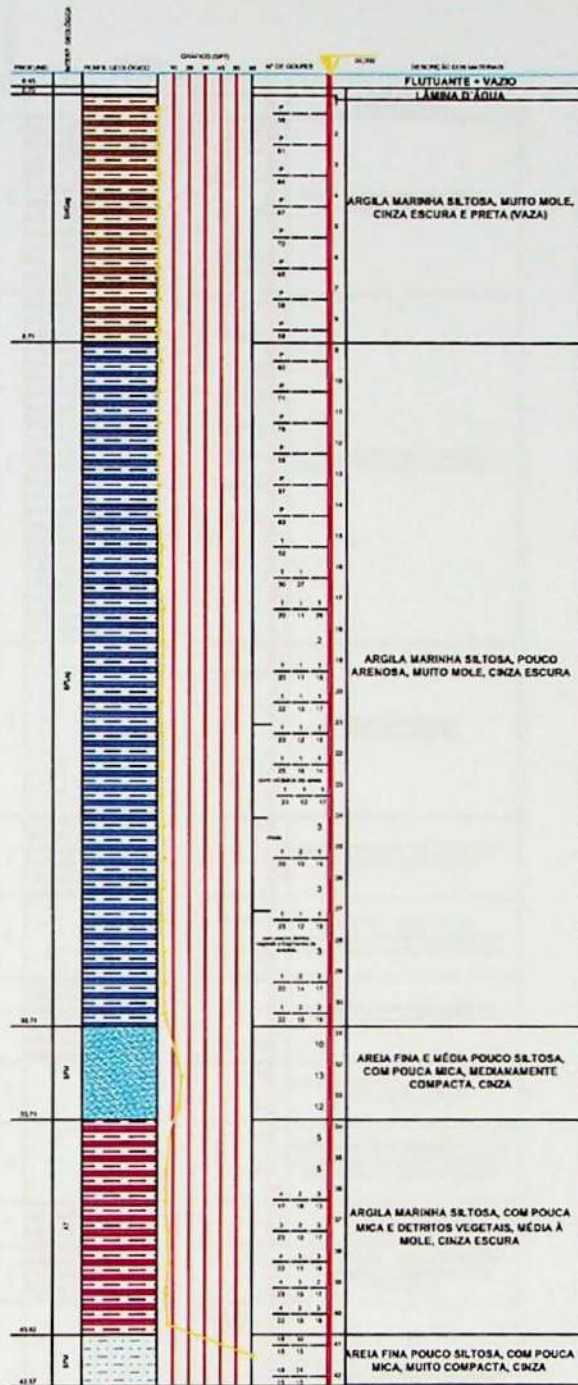
Sondagem - 05B



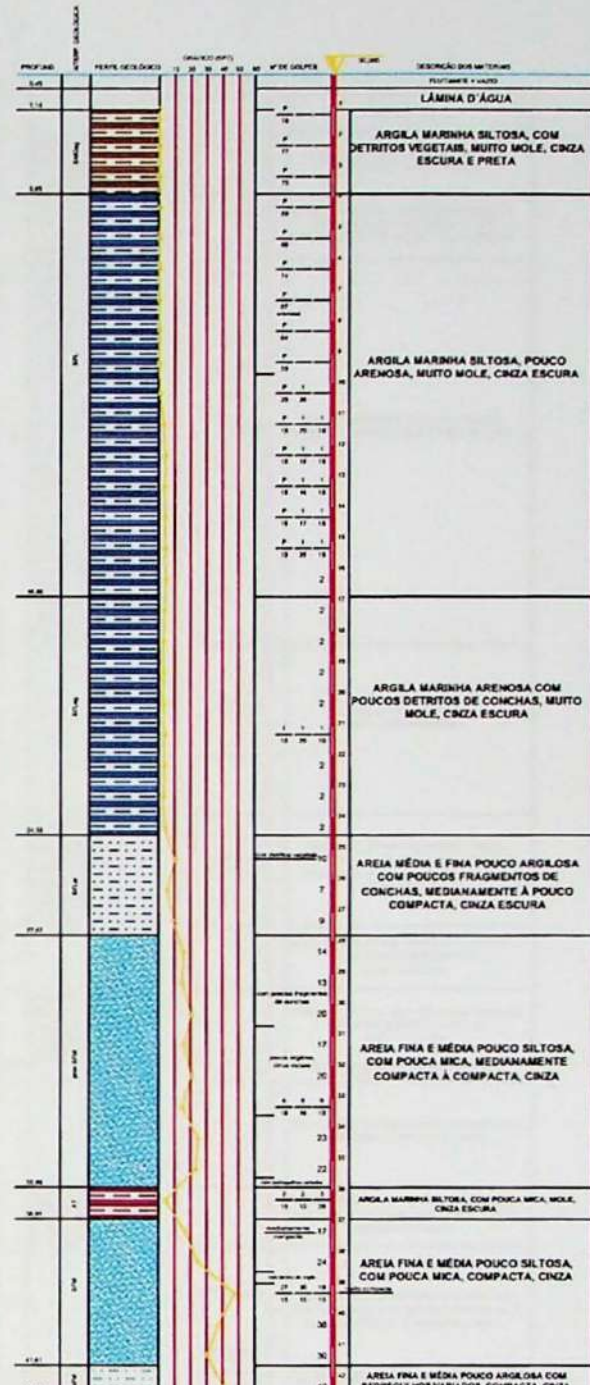
Anexo I - Figura de sondagem SPT

Sondagem S 04B		Sondagem S 05B	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7354029, 118	Norte	7354005, 198
Leste	362355, 3228	Leste	362498, 8429

Sondagem - 06B



Sondagem - 07B

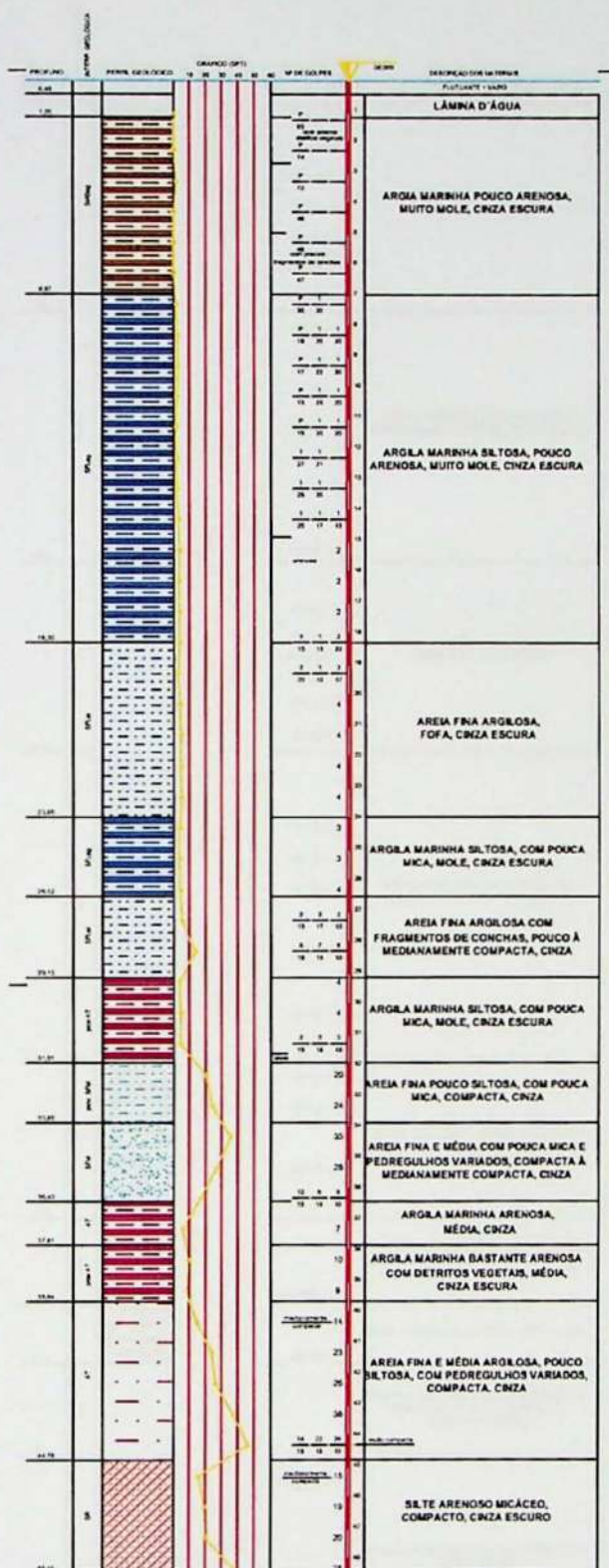


1:100

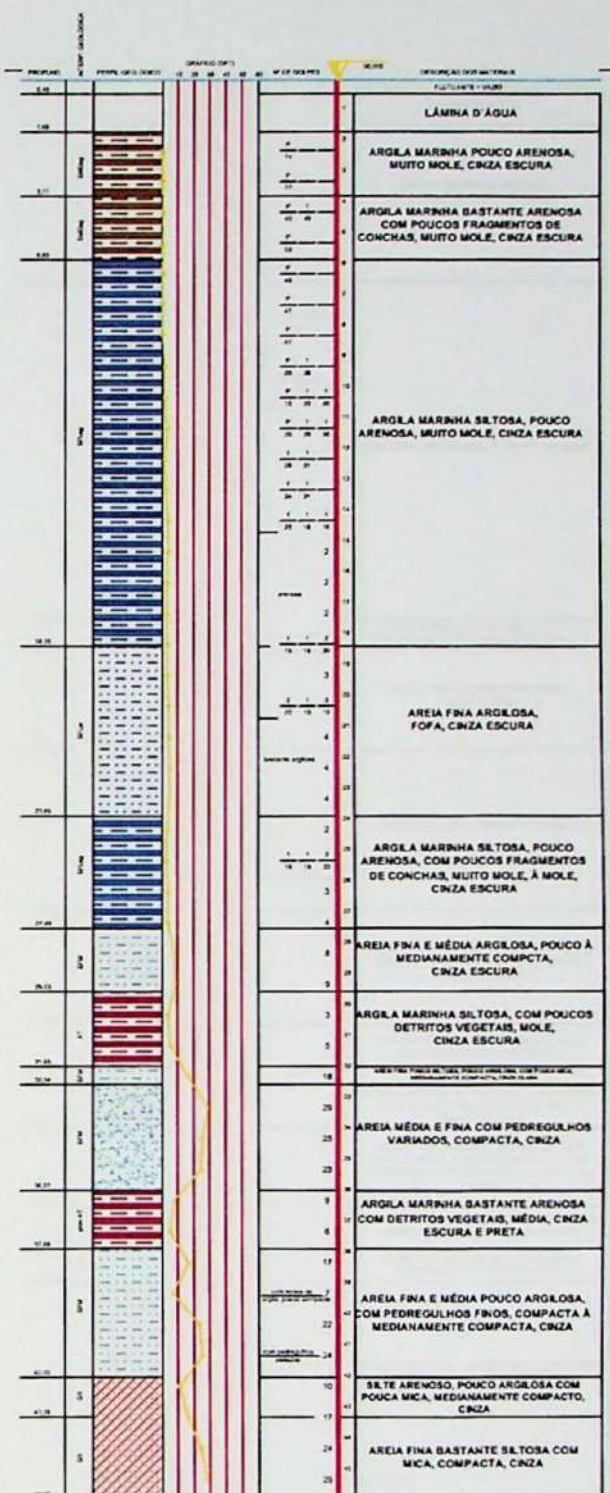
Anexo I - Figura de sondagem SPT

Sondagem S 06B		Sondagem S 07B	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7353974.102	Norte	7353950.182
Leste	362644.7552	Leste	362790.6674

Sondagem - 08B



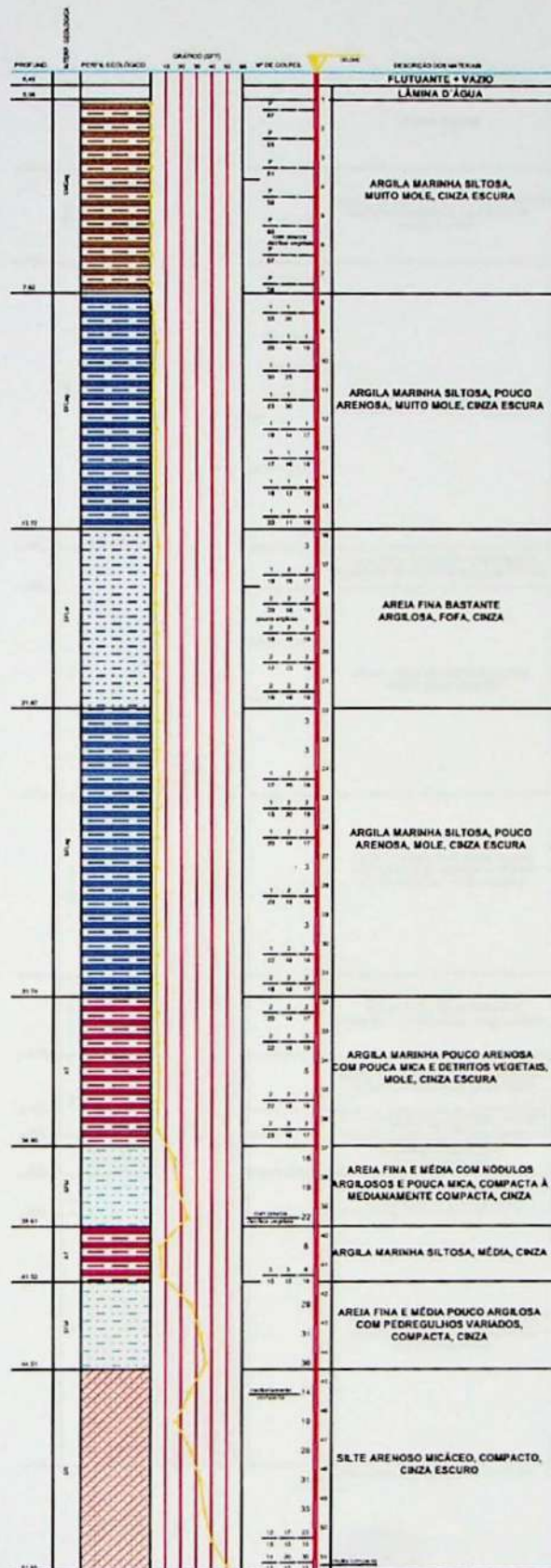
Sondagem - 09B



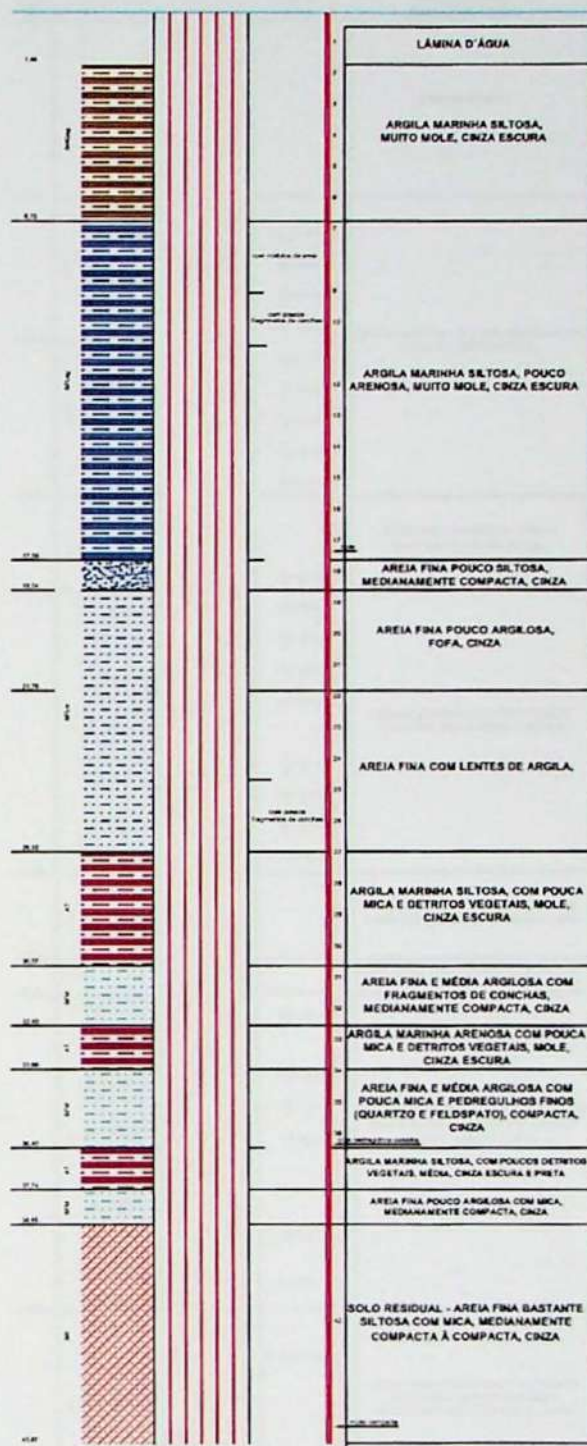
Anexo I - Figura de sondagem SPT

Sondagem S 08B		Sondagem S 09B	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7353923.87	Norte	7353902.342
Leste	362931.7954	Leste	363077.7077

Sondagem - 10B



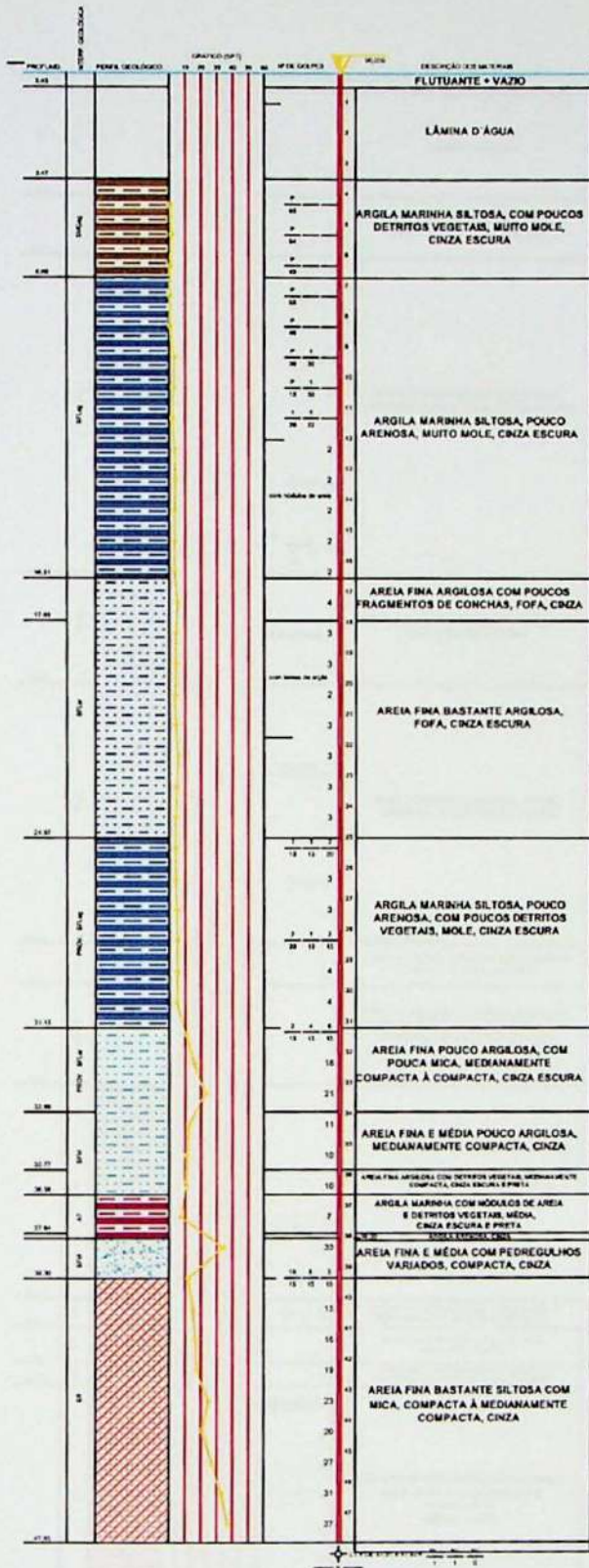
Sondagem - 11B



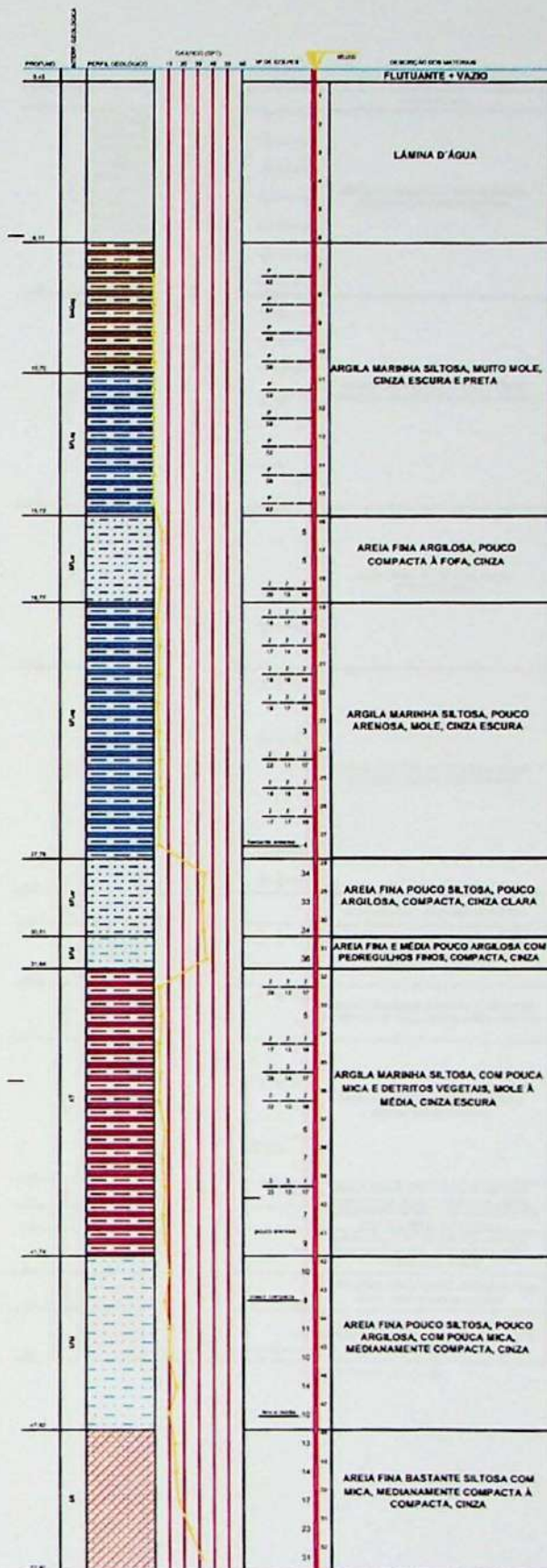
Anexo I - Figura de sondagem SPT

Sondagem S 10B		Sondagem S 11B	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7353871.246	Norte	7353849.718
Leste	363221.2278	Leste	363367.14

Sondagem - 12B



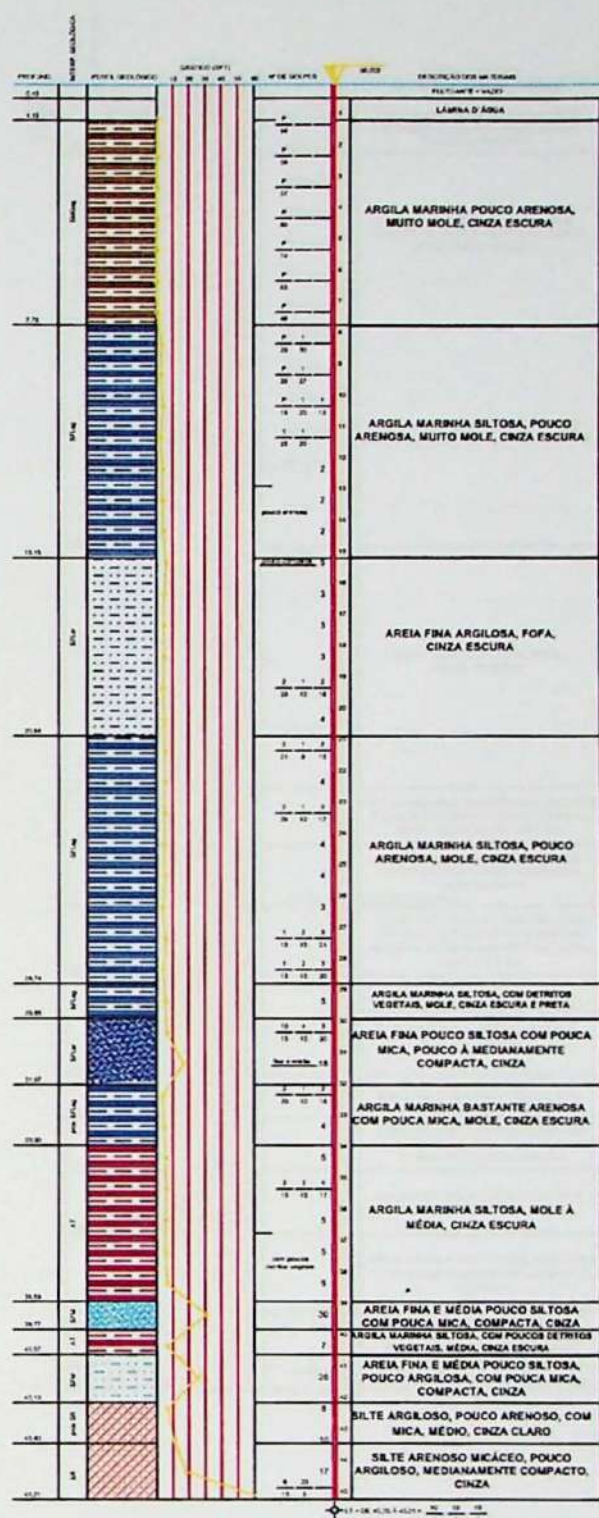
Sondagem - 14B



Anexo I - Figura de sondagem SPT

Sondagem S 12B		Sondagem S 14B	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7353825.798	Norte	7353976.494
Leste	363510.6602	Leste	361903.2343

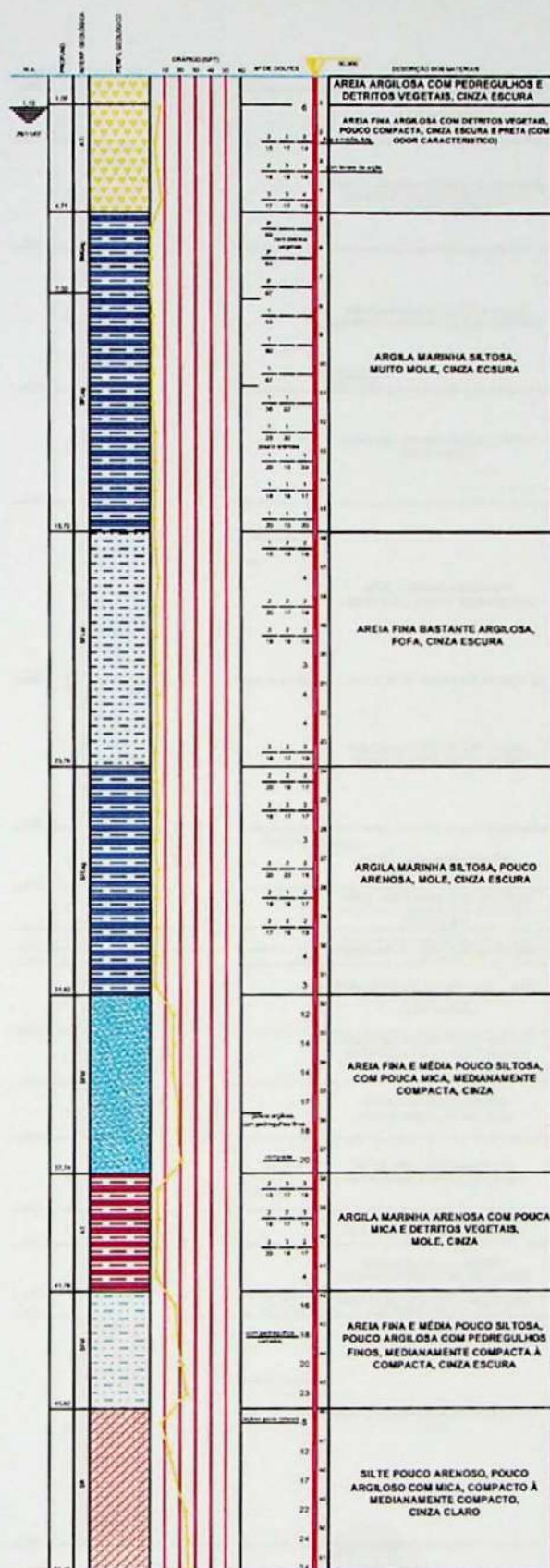
Sondagem - 16B



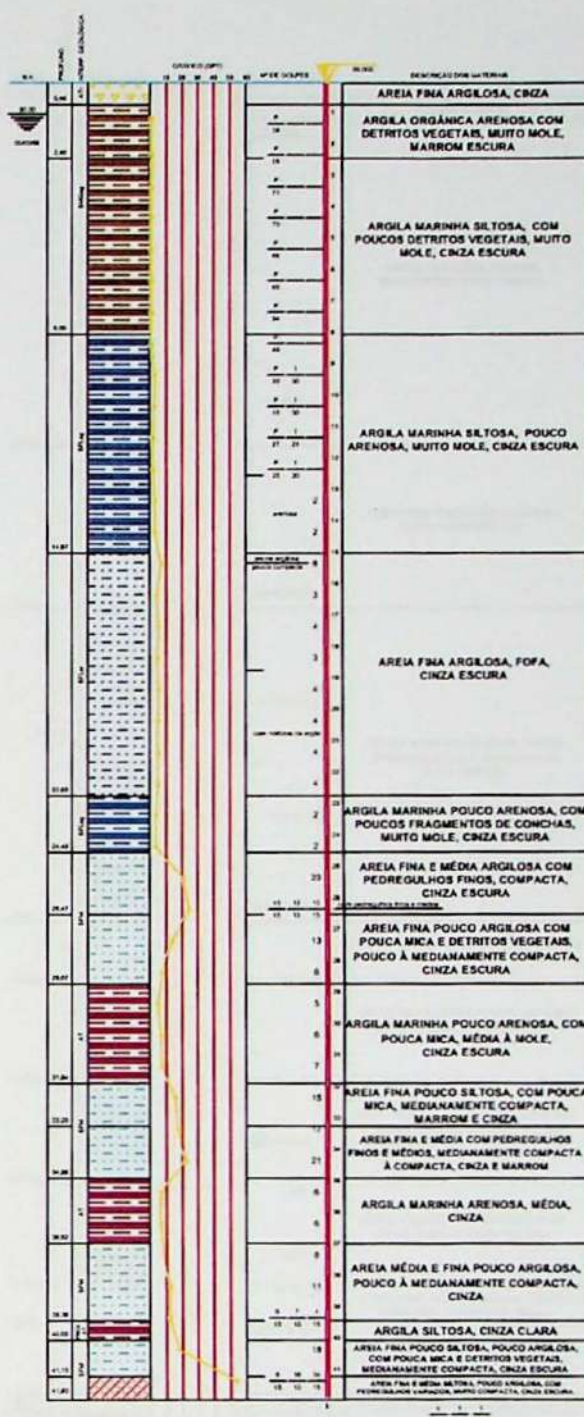
Anexo I - Figura de sondagem SPT

Sondagem S 15B		Sondagem S 16B	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7353952.574	Norte	7353931.046
Leste	362049.1465	Leste	362190.275

Sondagem - 18B



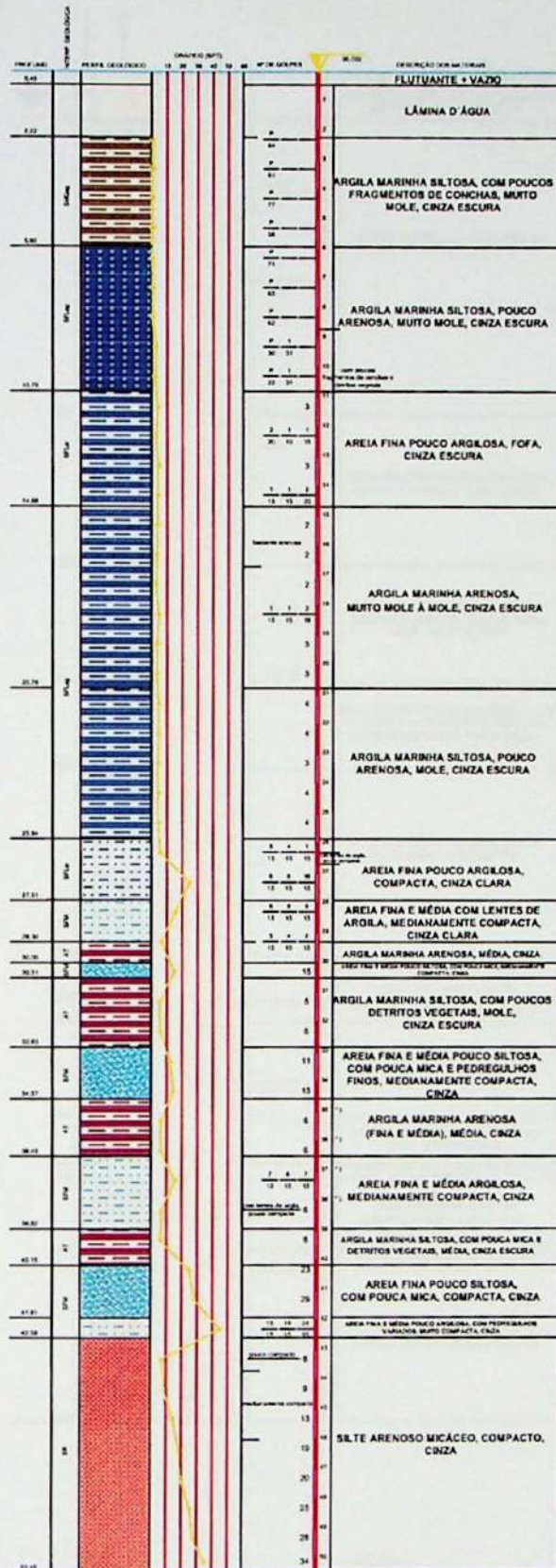
Sondagem - 19B



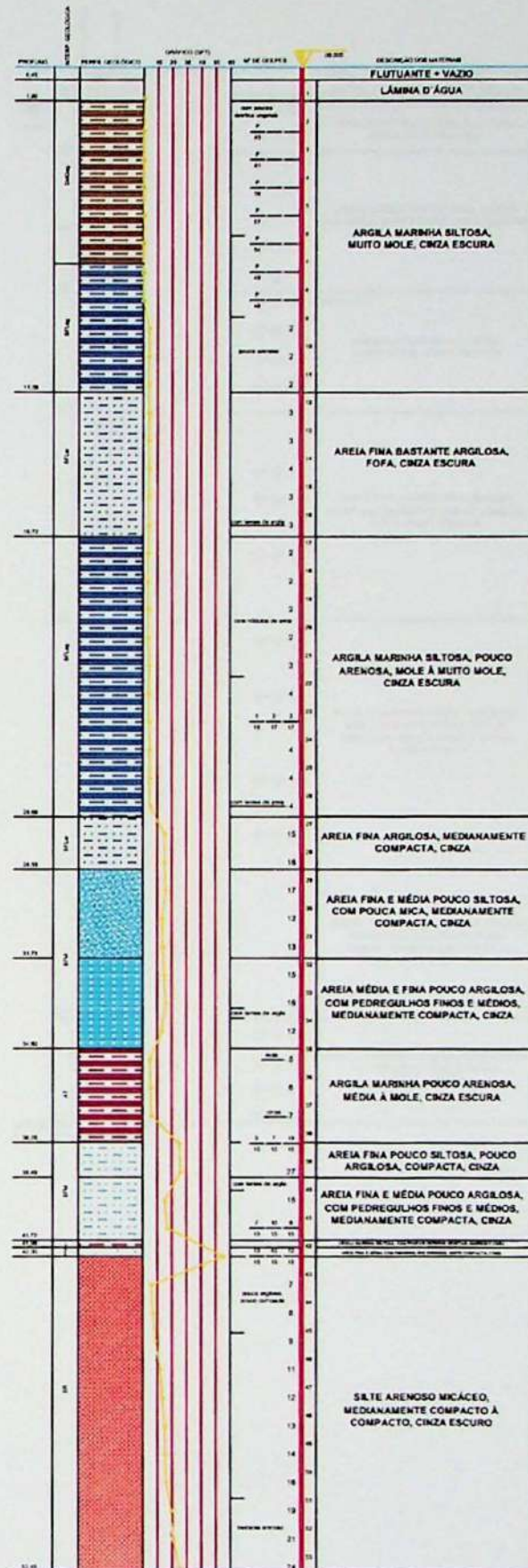
Anexo I - Figura de sondagem SPT

Sondagem S 18B		Sondagem S 19B	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7353876.03	Norte	7353849.718
Leste	362484.4911	Leste	362625.6192

Sondagem - 22B



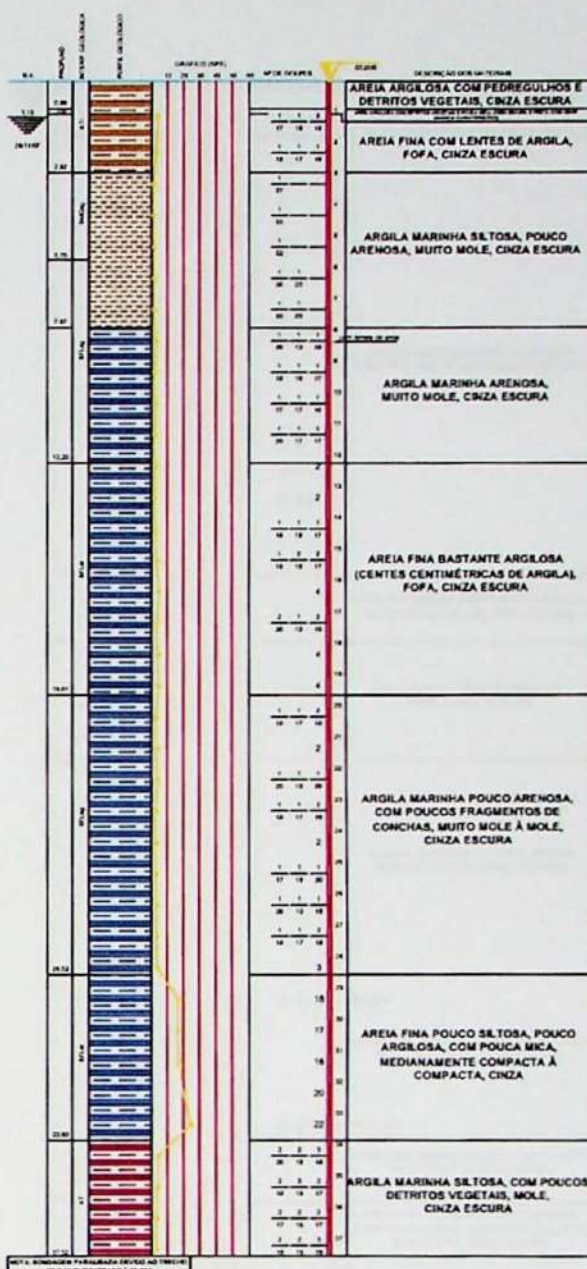
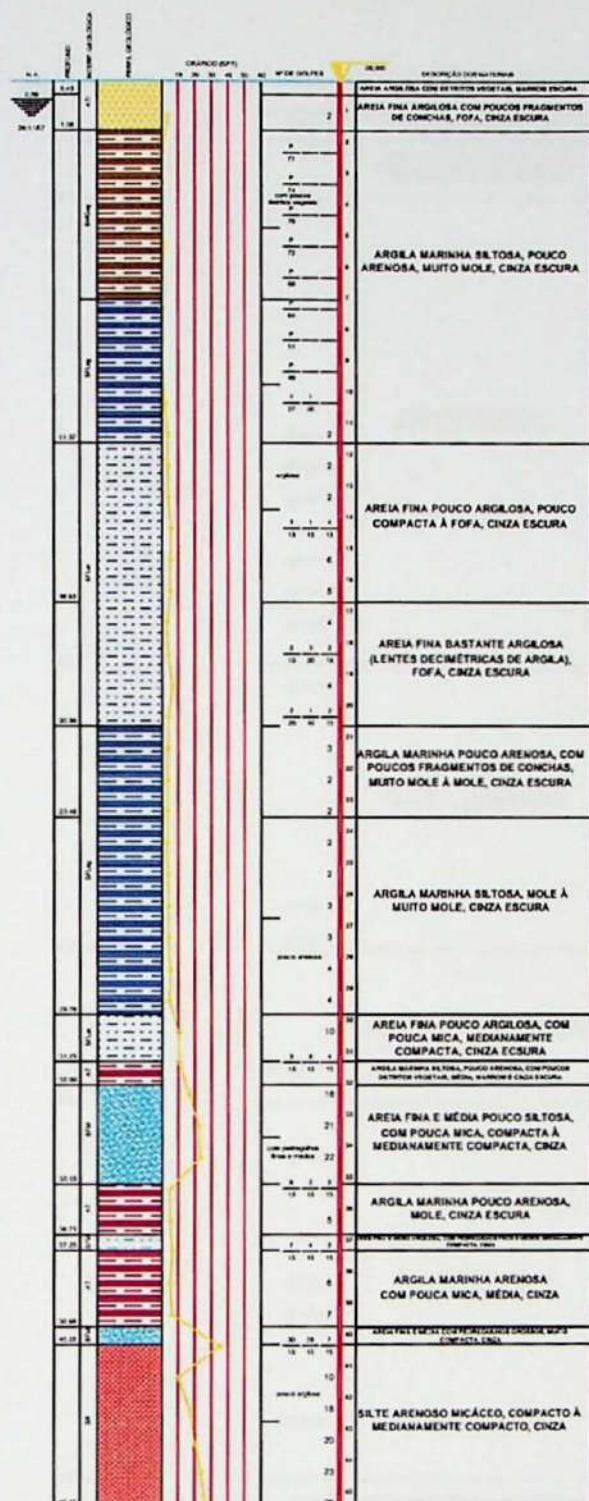
Sondagem - 23B



Anexo I - Figura de sondagem SPT

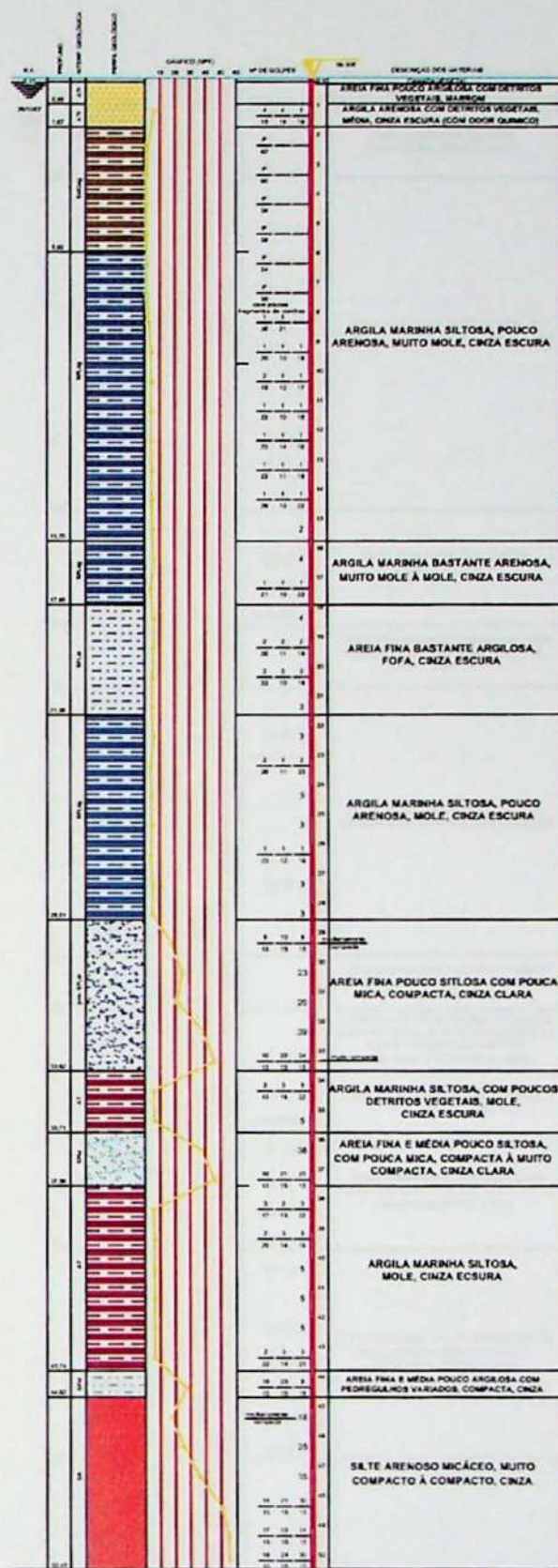
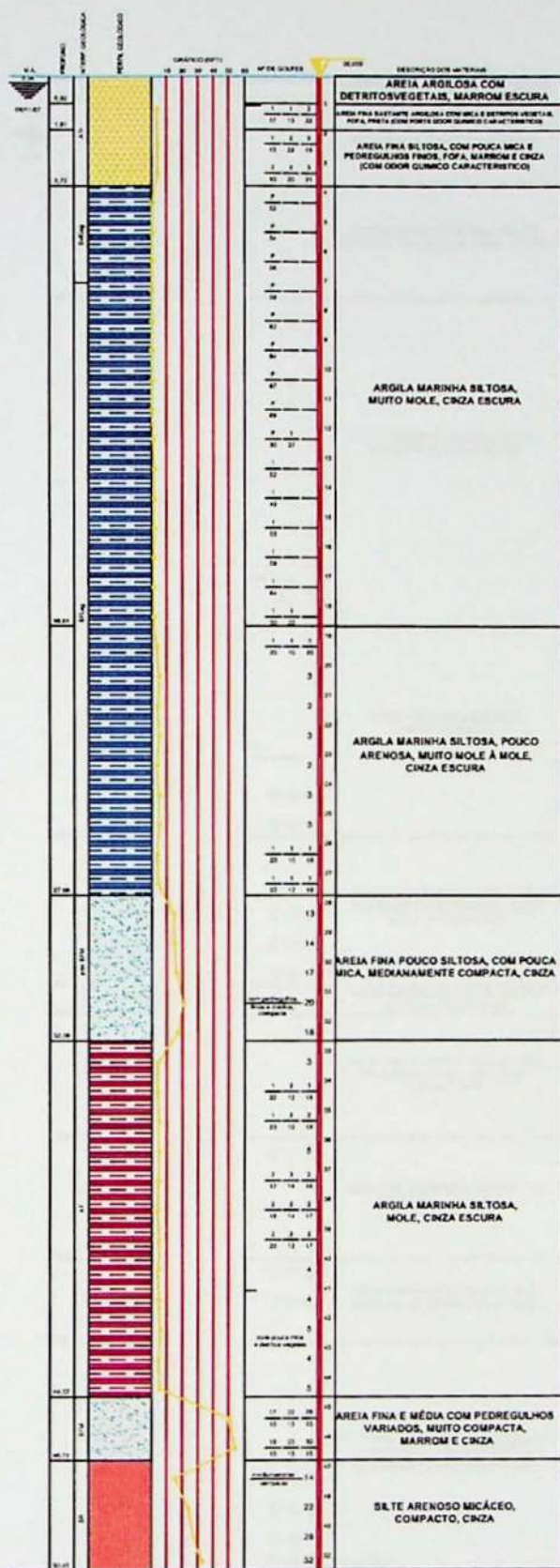
Sondagem S 22B		Sondagem S 23B	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7353849.718	Norte	7353823.406
Leste	361888.8825	Leste	362025.2267

Sondagem - 28B



Sondagem S 278		Sondagem S 288	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7353715.766	Norte	7353701.413
Leste	362596.9151	Leste	362745.2195

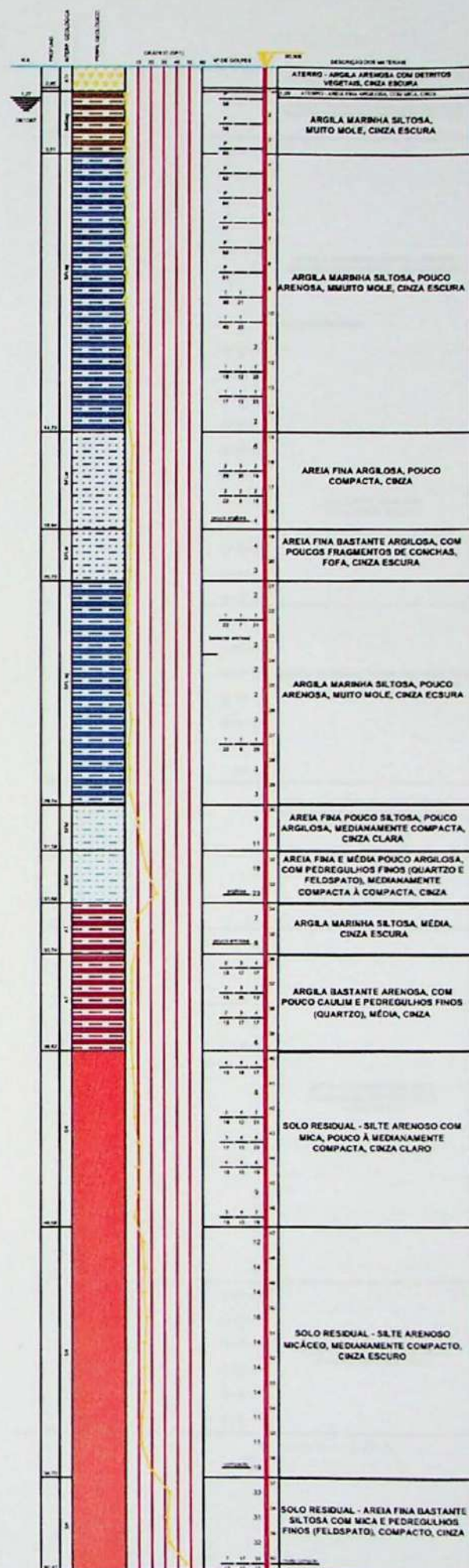
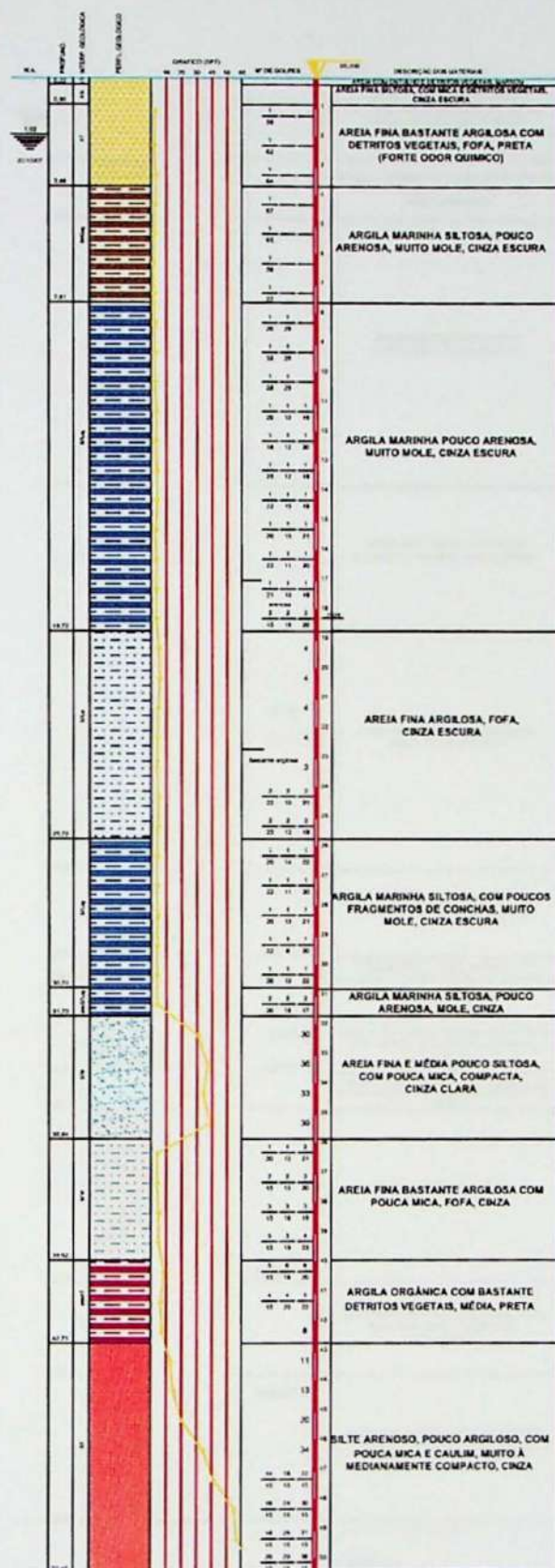
Sondagem - 32B



Anexo I - Figura de sondagem SPT

Sondagem S 30B		Sondagem S 32B	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7353727.726	Norte	7353675.102
Leste	361857.7864	Leste	362140.0428

Sondagem - 35B



Sondagem S 33B

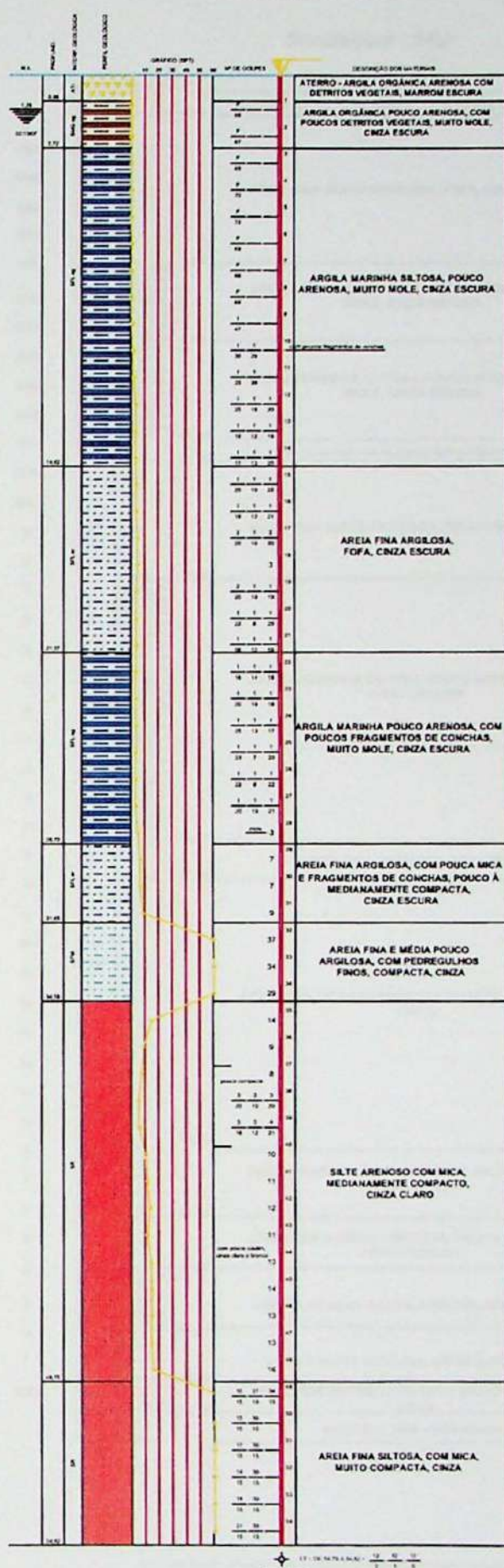
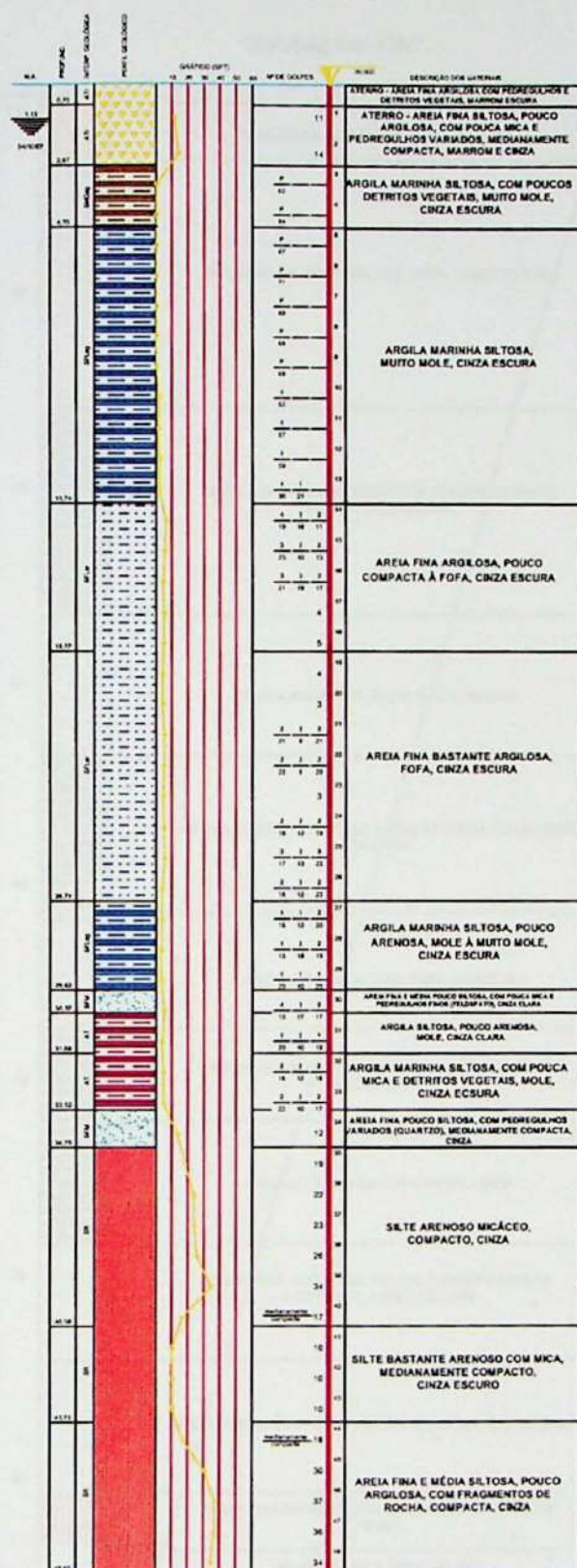
Sondagem S 358

Coordenadas

Coordenadas

Norte	7353651.181	Norte	7353596.165
Leste	362290.7389	Leste	362582.5633

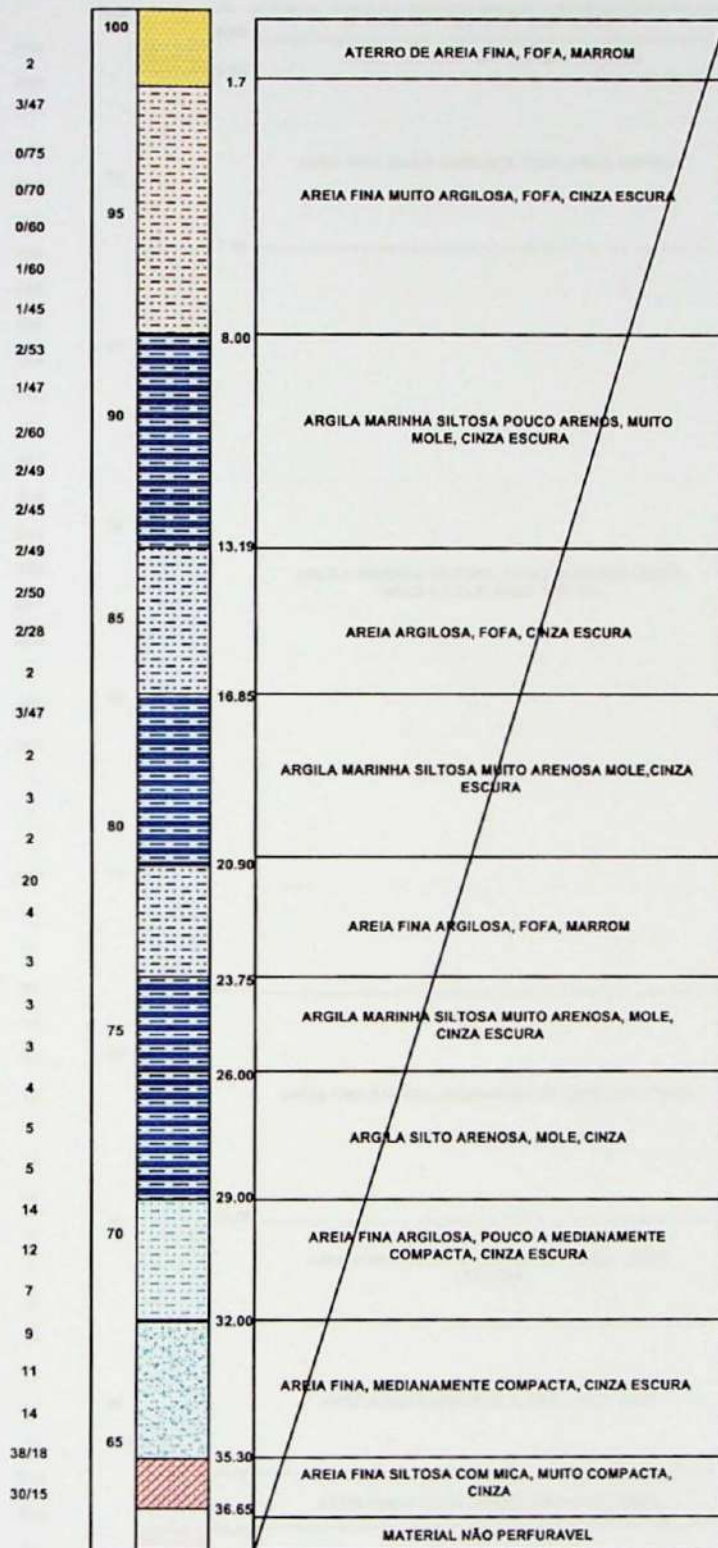
Sondagem - 37B



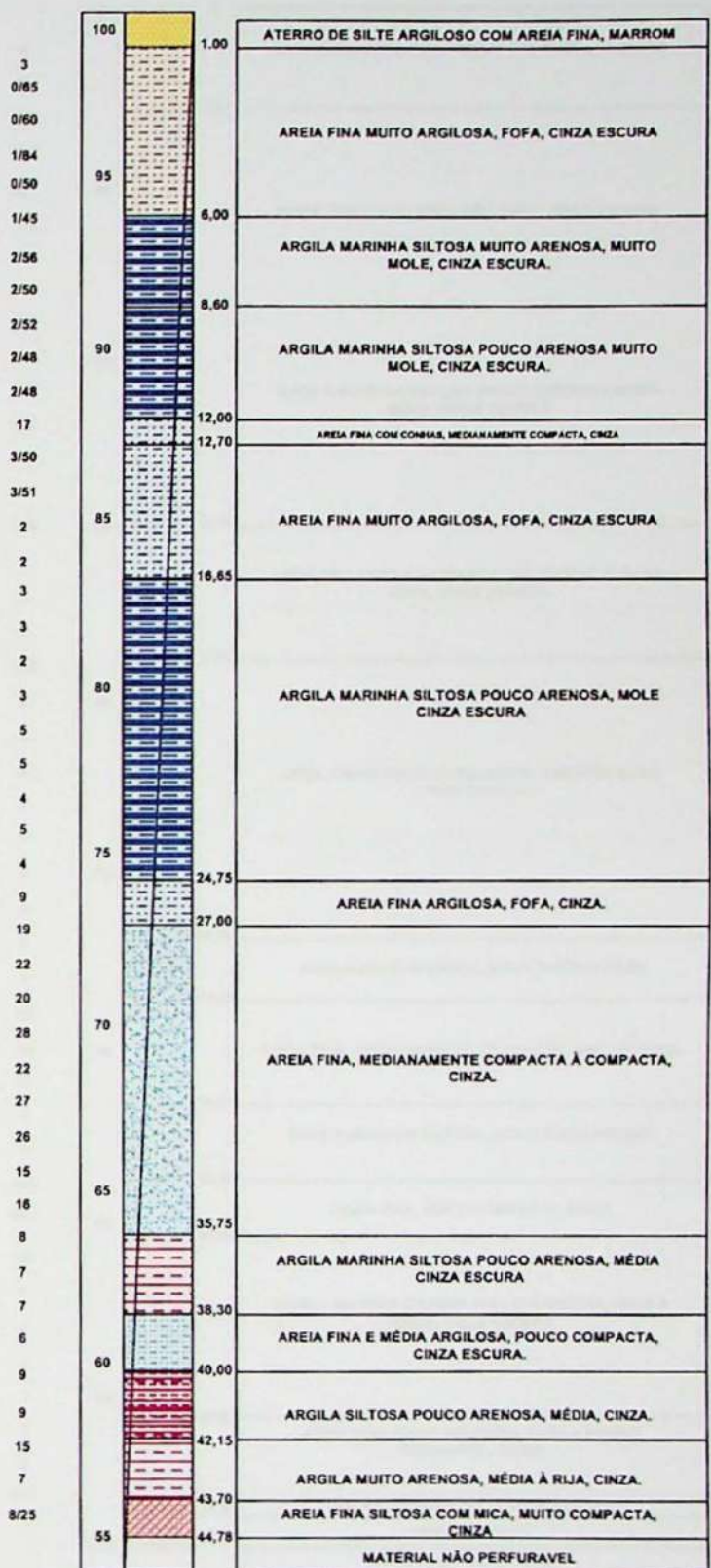
Anexo I - Figura de sondagem SPT

Sondagem S 36B		Sondagem S 37B	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7353569.853	Norte	7353545.933
Leste	362726.0834	Leste	362874.3874

Sondagem-13U



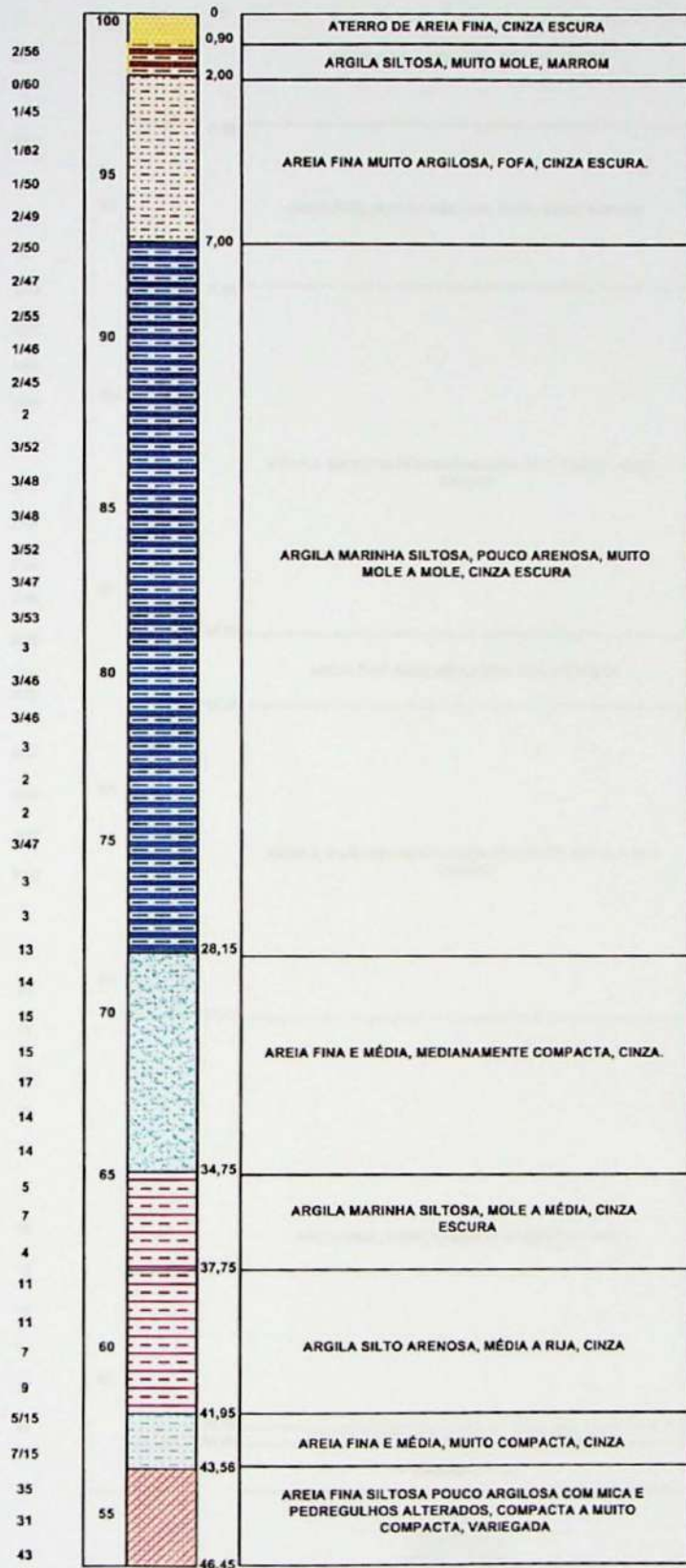
Sondagem - 14U



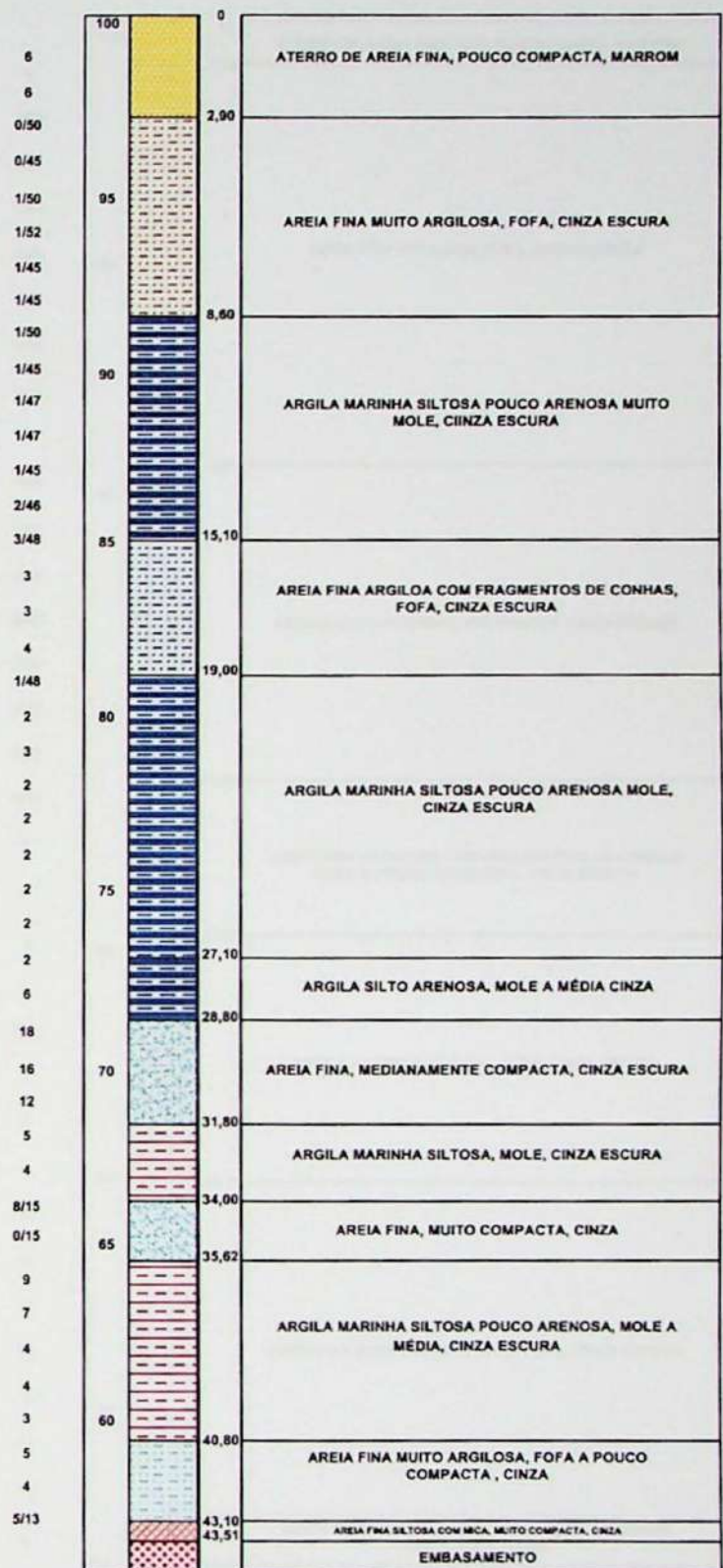
Anexo I - Figura de sondagem SPT

Sondagem S 13U		Sondagem S 14U	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7353226.83	Norte	7353244.304
Leste	360991.106	Leste	361053.3156

Sondagem - 15U



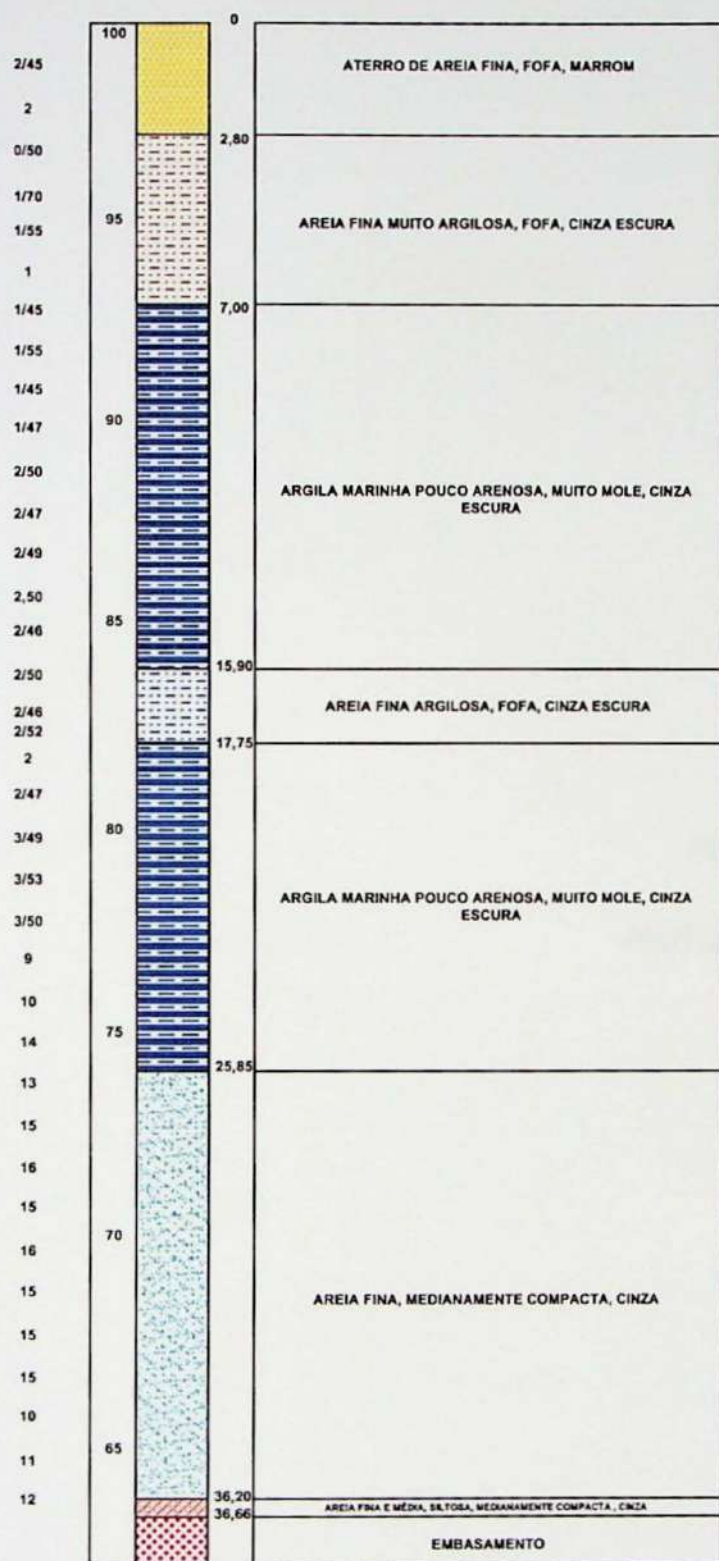
Sondagem - 16U



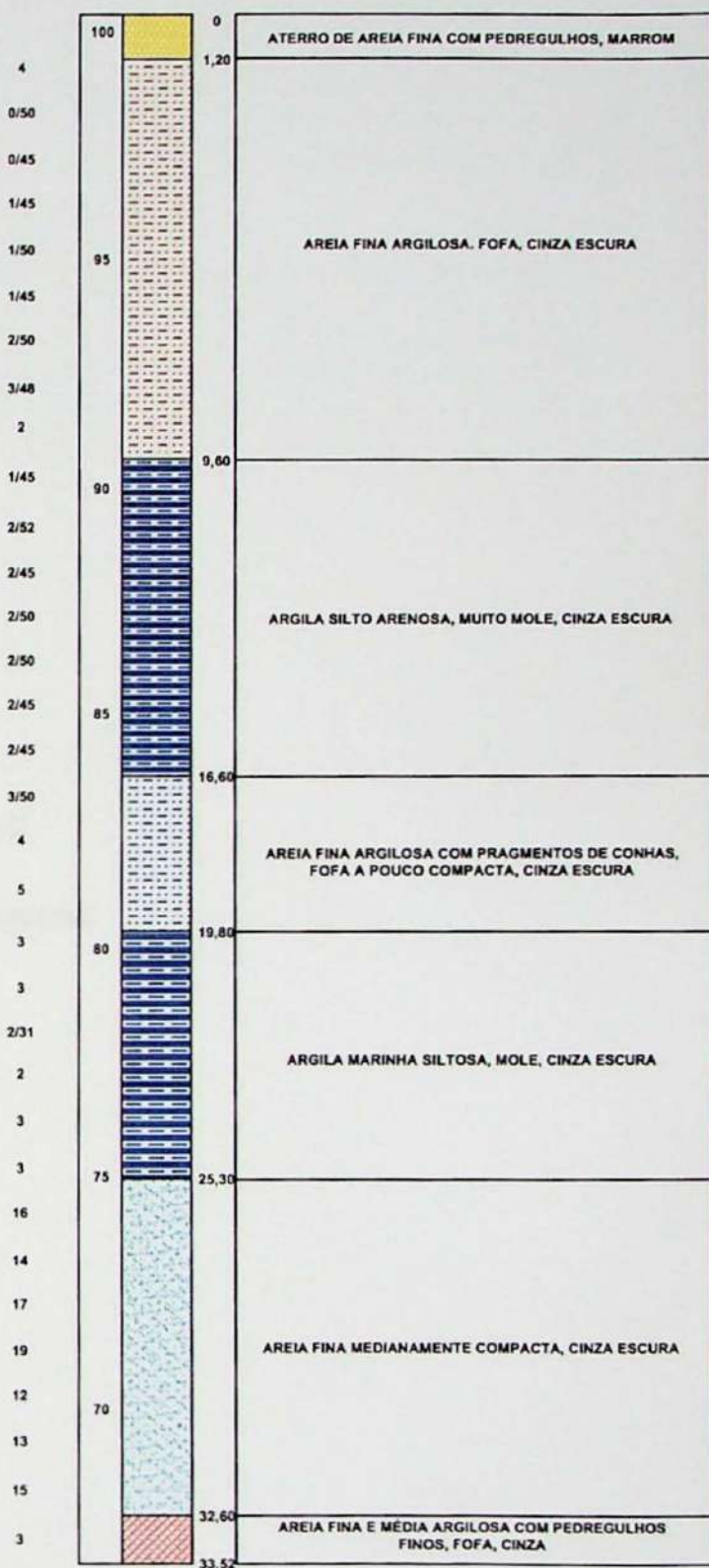
Anexo I - Figura de sondagem SPT

Sondagem S 15U		Sondagem S 16U	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7353193.278	Norte	7353211.452
Leste	361045.6268	Leste	361103.6425

Sondagem - 17U



Sondagem - 18U

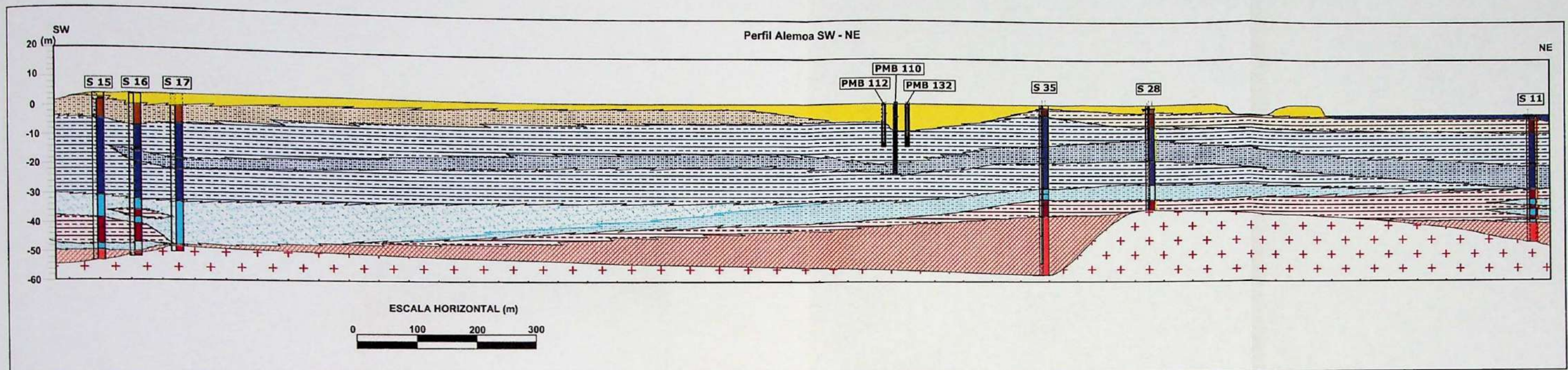


Anexo I - Figura de sondagem SPT

Sondagem S 17U		Sondagem S 18U	
Coordenadas		Coordenadas	
Norte	7353226.83	Norte	7353177.901
Leste	361157.4644	Leste	361151.1735

Anexo 2

Perfis litológicos



A

A'

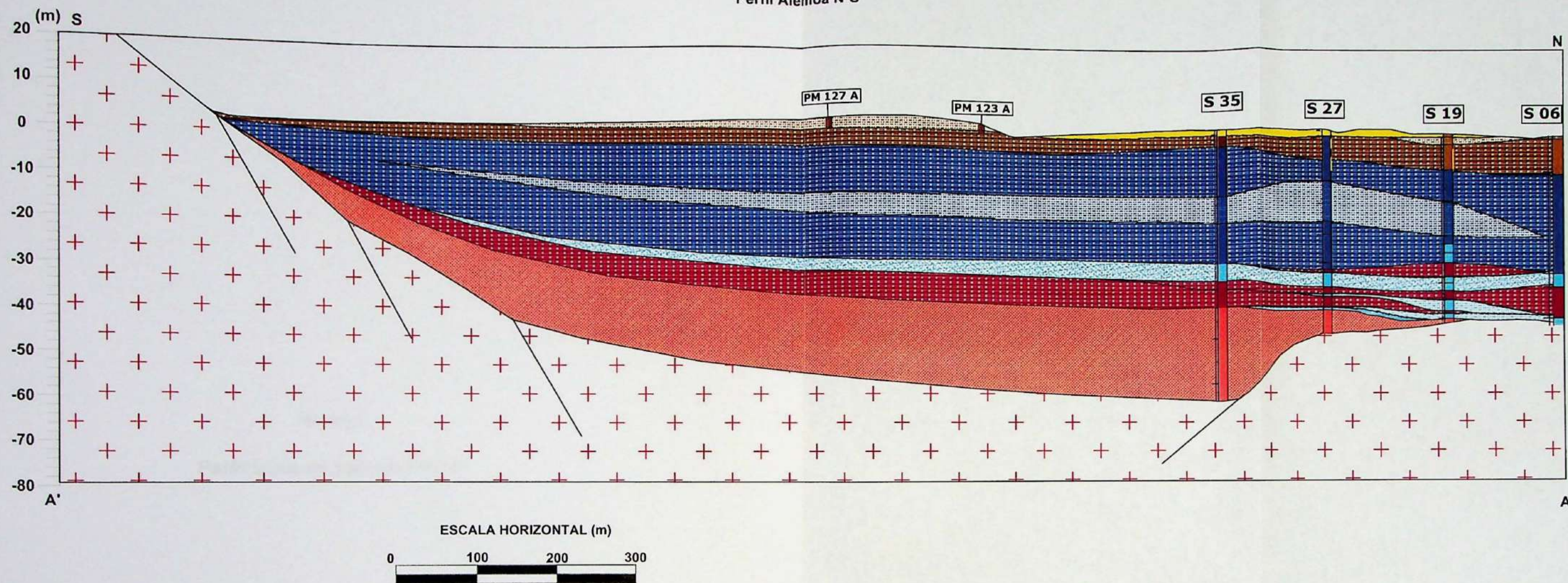
Legenda

	Sedimentos de Mangues, Pântanos e Baixos (SMP)
	Sedimentos de Mangues, Pântanos e Baixos Arenosos (SMPAr)
	Sedimentos de Mangues, Pântanos e Baixos Argilosos (SMGAg)
	Sedimentos Flúvio Lagunares (Formação Ilha Comprida) (SFL)
	Sedimentos Flúvio Lagunares Arenosos (SFLAr)
	Sedimentos Flúvio Lagunares Argilosos (SFLAg)
	Sedimentos Flúvio Marinhos (SFM)
	Sedimentos Fluviais (Aluviões) (SFA)
	Argilas Transicionais (Formação Cananéia) (A)
	Solo Residual (SR)
	Embasamento Gnaisses e Migmatitos (MGn)

Localização do Perfil



Perfil Alemoa N-S



Legenda

	Sedimentos de Mangues, Pântanos e Baixos (SMP)
	Sedimentos de Mangues, Pântanos e Baixos Arenosos (SMPAr)
	Sedimentos de Mangues, Pântanos e Baixos Argilosos (SMGAg)
	Sedimentos Flúvio Lagunares (Formação Ilha Comprida) (SFL)
	Sedimentos Flúvio Lagunares Arenosos (SFLAr)
	Sedimentos Flúvio Lagunares Argilosos (SFLAg)
	Sedimentos Flúvio Marinheiros (SFM)
	Sedimentos Fluviais (Aluviões) (SFA)
	Argilas Transicionais (Formação Cananéia) (A)
	Solo Residual (SR)
	Embasamento Gnaisses e Migmatitos (MGn)

Localização do Perfil



Parâmetros do balanço hídrico

Parâmetro	Unidade	Valor	Valor	Valor
Q _{precipitação}	m³/s	10,00	10,00	10,00
Q _{evaporação}	m³/s	1,00	1,00	1,00
Q _{transpiração}	m³/s	1,00	1,00	1,00
Q _{infiltração}	m³/s	1,00	1,00	1,00
Q _{escoamento superficial}	m³/s	1,00	1,00	1,00
Q _{escoamento subterrâneo}	m³/s	1,00	1,00	1,00
Q _{armazenamento}	m³/s	1,00	1,00	1,00
Q _{recarga}	m³/s	1,00	1,00	1,00
Q _{deflúvio}	m³/s	1,00	1,00	1,00
Q _{total}	m³/s	10,00	10,00	10,00

Anexo 3

Parâmetros do balanço hídrico

Parâmetros do balanço hídrico

	2006						
Parâmetro (mm)	Jun.	Jul.	Ago.	Set.	Out.	Nov.	Dez.
ET_{pot}^*	59,00	55,00	70,00	76,00	107,00	119,00	163,00
P^*	44,00	79,7	97,3	146,00	172,4	139,7	242,00
C' (ou f)	0,05	0,05	0,05	0,05	0,1	0,1	0,1
Q_{off}	2,2	4,0	4,87	7,3	17,24	13,97	24,2
I	41,8	75,72	92,44	138,7	155,16	125,73	217,8
$I - ET_{pot}$	-17,20	20,72	22,44	62,70	48,16	6,73	54,80
$SNEG(I - ET_{pot})$	-17,20	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Suz s/lim CC	133,18	153,89	176,33	239,03	287,19	293,92	348,72
Suz	133,18	150,00	150,00	150,00	150,00	150,00	150,00
ΔS_{uz}	-16,82	16,82	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
ET_{regi}	59,00	55,00	70,00	76,00	107,00	119,00	163,00
ΔS_{gw}	0,00	3,89	22,44	62,70	48,16	6,73	54,80
Recarga total	198,71						

*Dados obtidos em <http://www.ciiagro.sp.gov.br>

Parâmetros do balanço hídrico

Parâmetro (mm)	2007											
	Jan.	Fev.	Mar.	Abr.	Mai.	Jun.	Jul.	Ago.	Set.	Out.	Nov.	Dez.
ET_{pot}^*	141,00	154,00	133,00	108,00	61,00	58,00	59,00	62,00	83,00	92,00	132,00	159,00
P*	192,70	203,70	198,70	326,50	126,60	54,40	215,80	36,10	54,60	65,20	173,40	215,40
C' (ou f)	0,10	0,10	0,10	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,10	0,10	0,10
Q_{off}	19,27	20,37	19,87	16,33	6,33	2,72	10,79	1,81	2,73	6,52	17,34	21,54
I	173,43	183,33	178,83	310,18	120,27	51,68	205,01	34,30	51,87	58,68	156,06	193,86
$I-ET_{pot}$	32,43	29,33	45,83	202,18	59,27	-6,32	146,01	-27,71	-31,13	-33,32	24,06	34,86
$SNEG(I-ET_{pot})$	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-6,32	0,00	-27,71	-58,84	-92,16	0,00	0,00
Suz s/lim CC	381,15	410,48	456,31	658,48	717,75	143,40	289,41	123,99	100,34	80,00	104,06	138,92
Suz	150,00	150,00	150,00	150,00	150,00	143,40	150,00	123,99	100,34	80,00	104,06	138,92
ΔS_{uz}	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-6,60	6,60	-26,01	-23,66	-20,34	24,06	34,86
ET_{real}	141,00	154,00	133,00	108,00	61,00	58,00	59,00	62,00	83,00	92,00	132,00	159,00
ΔS_{gw}^*	32,43	29,33	45,83	202,18	59,27	0,28	139,41	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Recarga total	508,73											

*Dados obtidos em <http://www.ciiagro.sp.gov.br>

Parâmetros do balanço hídrico

Parâmetro (mm)	2008			
	Jan.	Fev.	Mar.	Abr.
ET_{pot}^*	139,00	135,00	133,00	97,00
p^*	222,10	126,50	172,90	314,20
C' (ou f)	0,10	0,10	0,10	0,05
Q_{off}	22,21	12,65	17,29	15,71
I	199,89	113,85	155,61	298,49
$I - ET_{pot}$	60,89	-21,15	22,61	201,49
$SNEG(I - ET_{pot})$	0,00	-21,15	0,00	0,00
Suz s/lim CC	150,00	129,65	152,26	353,75
Suz	150,00	129,65	150,00	150,00
ΔS_{uz}	20,20	-20,35	20,35	0,00
ET_{real}	139,00	135,00	133,00	97,00
ΔS_{gw}	40,69	0,00	2,26	201,49
Recarga total	244,44			

*Dados obtidos em <http://www.ciiagro.sp.gov.br>

ANEXO 4 - DADOS DE CONDUTIVIDADES HIDRÁULICAS

Estação	Condutividade (cm/s)	Temperatura (°C)	Profundidade (m)	Observações
10-100	100000.00	20.00	1.00	
10-101	100000.00	20.00	1.00	
10-102	100000.00	20.00	1.00	
10-103	100000.00	20.00	1.00	
10-104	100000.00	20.00	1.00	
10-105	100000.00	20.00	1.00	
10-106	100000.00	20.00	1.00	
10-107	100000.00	20.00	1.00	
10-108	100000.00	20.00	1.00	
10-109	100000.00	20.00	1.00	
10-110	100000.00	20.00	1.00	
10-111	100000.00	20.00	1.00	
10-112	100000.00	20.00	1.00	
10-113	100000.00	20.00	1.00	
10-114	100000.00	20.00	1.00	
10-115	100000.00	20.00	1.00	
10-116	100000.00	20.00	1.00	
10-117	100000.00	20.00	1.00	
10-118	100000.00	20.00	1.00	
10-119	100000.00	20.00	1.00	
10-120	100000.00	20.00	1.00	

Anexo 4

Dados de condutividades hidráulicas

Valores de condutividade hidráulica para a área 1

Poços	Coordenadas UTM		K _{recuperação}	K _{rebaixamento}
	Leste	Norte		
39PMB	362324,91	7353977,83	9,08E-08	-
59PMA	-	-	9,99E-08	-
61PMA	-	-	1,03E-06	-
70PMA	-	-	6,07E-08	-
75PM	362412,92	7353618,32	5,98E-07	-
77PMB	362186,11	7353695,87	2,32E-07	-
78PMB	362131,60	7353477,79	1,47E-07	-
84PMB	362168,47	7353578,12	3,78E-07	-
87PMB	361600,85	7353544,84	2,19E-07	-
88PMB	361961,81	7353645,36	2,06E-06	-
90PMB	362265,53	7353429,12	2,77E-06	-
95PMB	362490,76	7353764,55	5,65E-07	-
100PMB	362702,67	7353566,99	1,58E-07	-
101PMB	362645,28	7353689,34	1,12E-07	-
103PMB	362835,06	7353346,02	4,50E-07	-
110PMB	362321,04	7353548,03	5,94E-07	-
115PMB	362051,56	7353532,20	1,77E-07	-
116PMB	362339,69	7353809,01	1,58E-07	-
119PMB	362195,60	7353278,56	4,33E-06	-
122PMB	362431,75	7353223,67	1,78E-07	-

Valores de condutividade hidráulica para a área 2

Poços	Coordenadas UTM		K recuperação	K rebaixamento
	Leste	Norte		
PM20u	362080,48	7353209,50	3,59E-07	-
PM21u	362187,56	7353193,16	2,82E-06	-
PM22u	362237,14	7353186,31	1,60E-06	-
PM23u	362297,09	7353177,49	3,85E-06	-
PM24u	362275,70	7353148,52	1,14E-06	-
PM25u	362271,18	7353142,28	2,46E-06	-
PM26u	362267,46	7353124,13	3,26E-07	-
PM27u	362283,42	7353131,93	1,96E-07	-
PM28u	362203,39	7353162,84	1,68E-06	-
PM29u	362225,07	7353128,09	2,73E-07	-
PM30u	362135,97	7353144,64	8,06E-07	4,48E-07
PM31u	362117,22	7353150,69	4,04E-06	1,97E-06
PM32u	362127,48	7353176,64	5,60E-07	-
PM33u	362128,84	7353107,06	8,46E-07	2,27E-06
PM34u	362096,27	7353110,51	4,10E-07	8,16E-07
PM35u	361962,04	7353109,57	8,62E-06	2,78E-06
PM37u	361997,64	7353104,74	1,73E-06	2,37E-06
PM38u	362061,43	7353098,60	9,71E-07	5,72E-07
PM39u	362028,78	7353103,99	2,27E-06	1,92E-06
PM43u	362009,12	7353223,38	6,48E-07	5,43E-06
PM45u	362151,42	7353216,39	3,79E-06	1,95E-05

Valores de condutividade hidráulica para a área 3

Poços	Coordenadas UTM		K recuperação	K rebaixamento
	Leste	Norte		
PM-30T	7353227,50	360915,08	1,03E-06	-
PM-31T	7353188,16	360890,00	4,69E-07	-
PM-33T	7353272,38	361194,14	5,57E-07	-
PM-38T	7353228,69	361048,43	3,62E-07	-
PM-25T	7353219,19	360789,97	4,20E-06	-
PM-28T	7353176,15	360558,01	2,19E-07	-
PM-29T	7353175,50	360505,89	3,73E-07	-
PM-16T	7353219,25	360555,33	1,59E-06	-
PM-19T	7353155,55	360727,68	4,28E-07	-
PM-21T	7353143,12	360768,40	2,02E-07	-
PM-22T	7353192,75	360762,85	1,52E-06	-
PMW-01	7353170,00	360948,00	2,43E-06	1,07E-06
PMW03	7353171,00	360922,00	8,44E-07	4,58E-07
PMW-04	7353160,00	360867,00	1,15E-06	6,75E-07

Anexo 5

Análise estatística dos dados de condutividade hidráulica

- Área 1

Dados de condutividade

Shapiro-Wilk W test for non-normality

Sample name: A
Uncensored data = 20
Censored data = 16
Mean = 7.20E-07
Standard deviation = 0.000001
Squares about mean = 2.30E-11

W = 0.374234

P < 0.0001

Sample unlikely to be from a normal distribution

Dados do ln da condutividade

Shapiro-Wilk W test for non-normality

Sample name: A
Uncensored data = 20
Censored data = 16
Mean = -14.9105
Standard deviation = 1.187255
Squares about mean = 26.781895

W = 0.785525

P = 0.0011

Sample unlikely to be from a normal distribution

Área 2

Dados de condutividade

Shapiro-Wilk W test for non-normality

Sample name: A
Uncensored data = 21
Censored data = 17
Mean = 0,000002
Standard deviation = 0,000002
Squares about mean = 7,83E-11

W = 0,530432

P < 0,0001

Sample unlikely to be from a normal distribution

Dados do ln da condutividade

Shapiro-Wilk W test for non-normality

Sample name: A
Uncensored data = 21
Censored data = 17
Mean = -13,597672
Standard deviation = 1,015143
Squares about mean = 20,610308

W = 0,928407

P = 0,1894

No evidence of non-normality

Área 3

Shapiro-Wilk W test for non-normality

Dados de condutividade

Sample name: A
Uncensored data = 14
Censored data = 0
Mean = 0,000001
Standard deviation = 0,000001
Squares about mean = 1,57E-11

W = 0,772433

P = 0,0023

Sample unlikely to be from a normal distribution

Shapiro-Wilk W test for non-normality

Dados do ln da condutividade

Sample name: A
Uncensored data = 14
Censored data = 0
Mean = -14,178972
Standard deviation = 0,858313
Squares about mean = 9,577107

W = 0,958902

P = 0,705

No evidence of non-normality

Geral

Shapiro-Wilk W test for non-normality

Dados de condutividade

Sample name: A
Uncensored data = 55
Censored data = 51
Mean = 0.000001

Standard deviation = 0.000002
Squares about mean = 1.31E-10

W = 0.457227
P < 0.0001

Sample unlikely to be from a normal distribution

Shapiro-Wilk W test for non-normality
Dados do ln da condutividade

Sample name: A
Uncensored data = 55
Censored data = 51
Mean = -14.222844
Standard deviation = 1.175992
Squares about mean = 74.679688

W = 0.910106
P = 0.0023

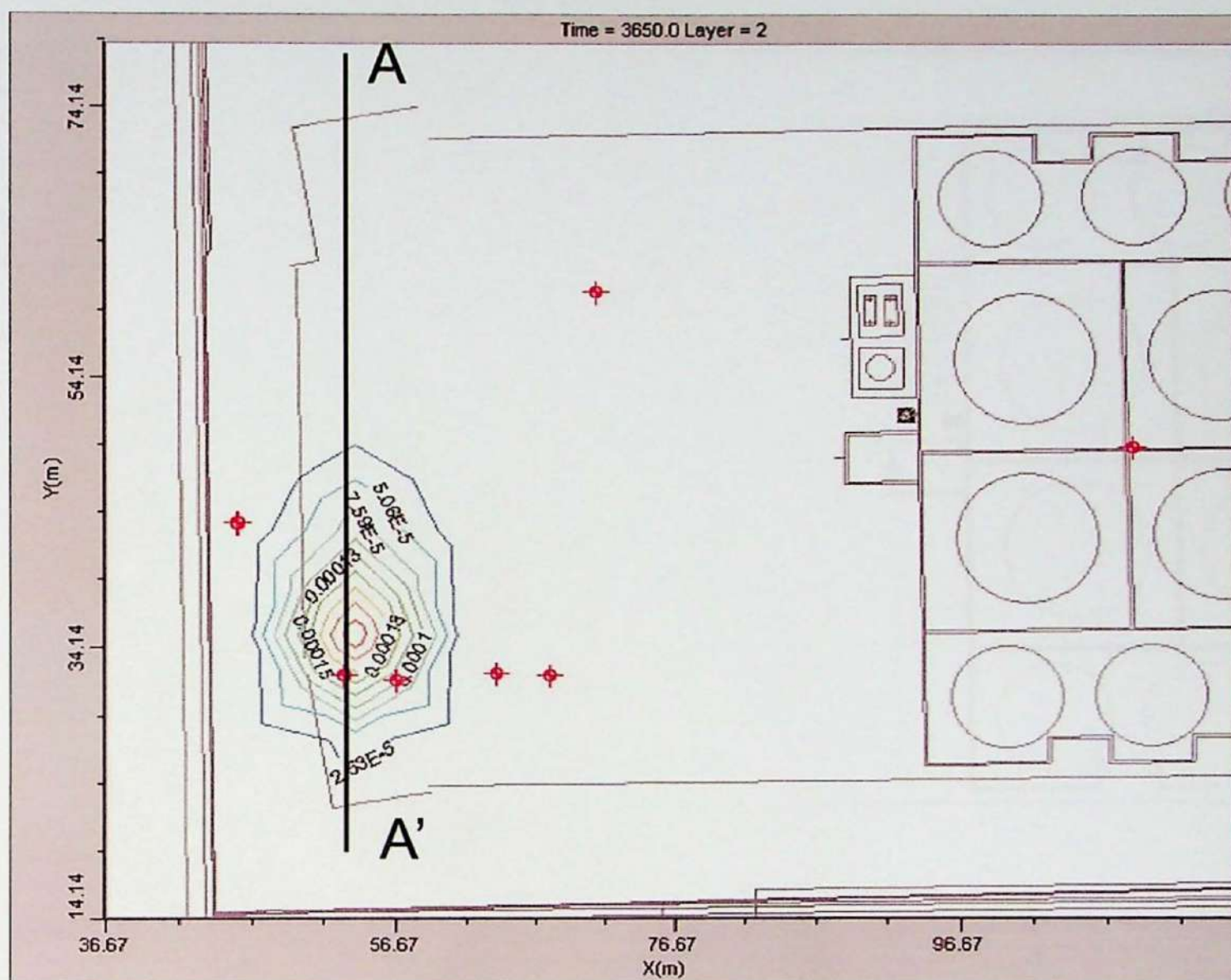
Sample unlikely to be from a normal distribution

Anexo 6

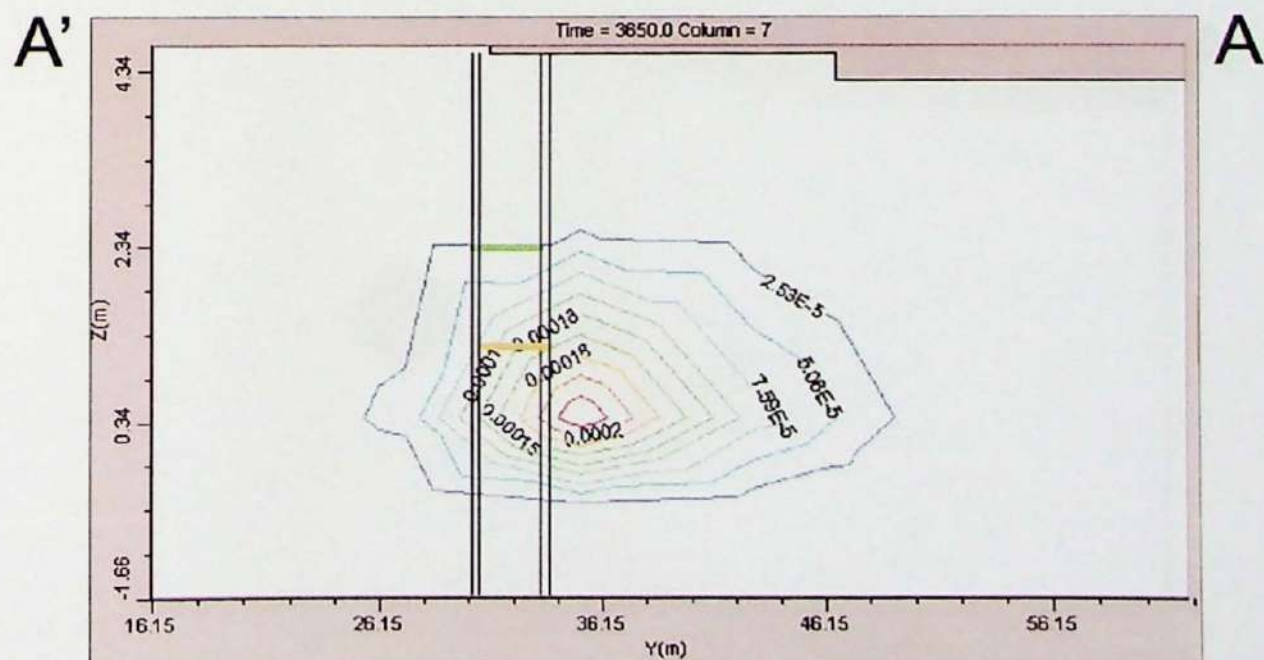
Mapa de Isoconcentrações

Mapa de Isoconcentrações de Tetracloroetileno (PCE) MT3DMS

Vista em planta

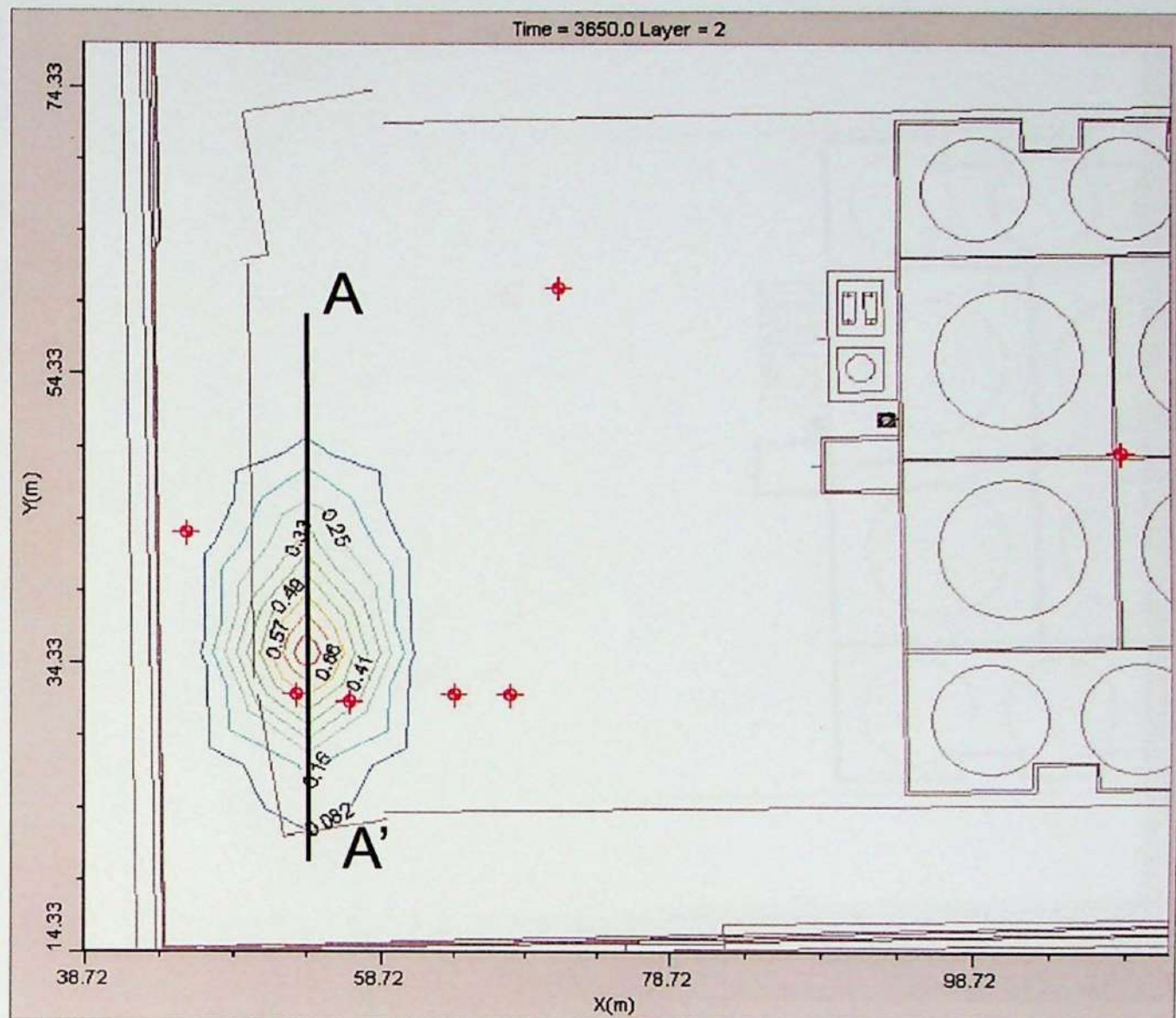


Vista em perfil

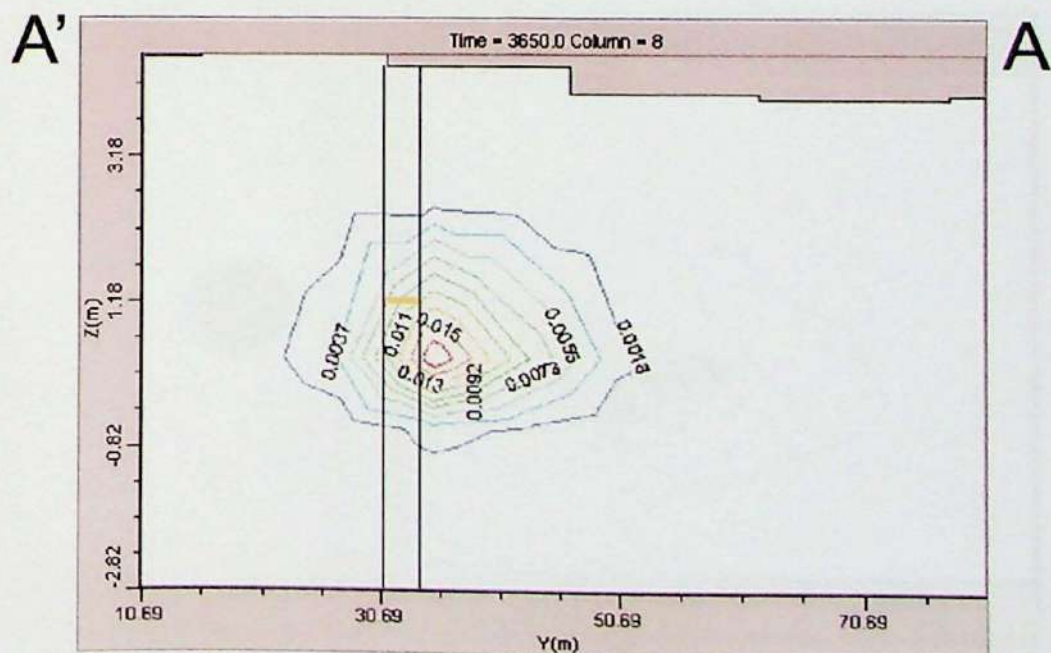


Mapa de Isoconcentrações de Tetracloroetileno (PCE) RT3D2.5

Vista em planta

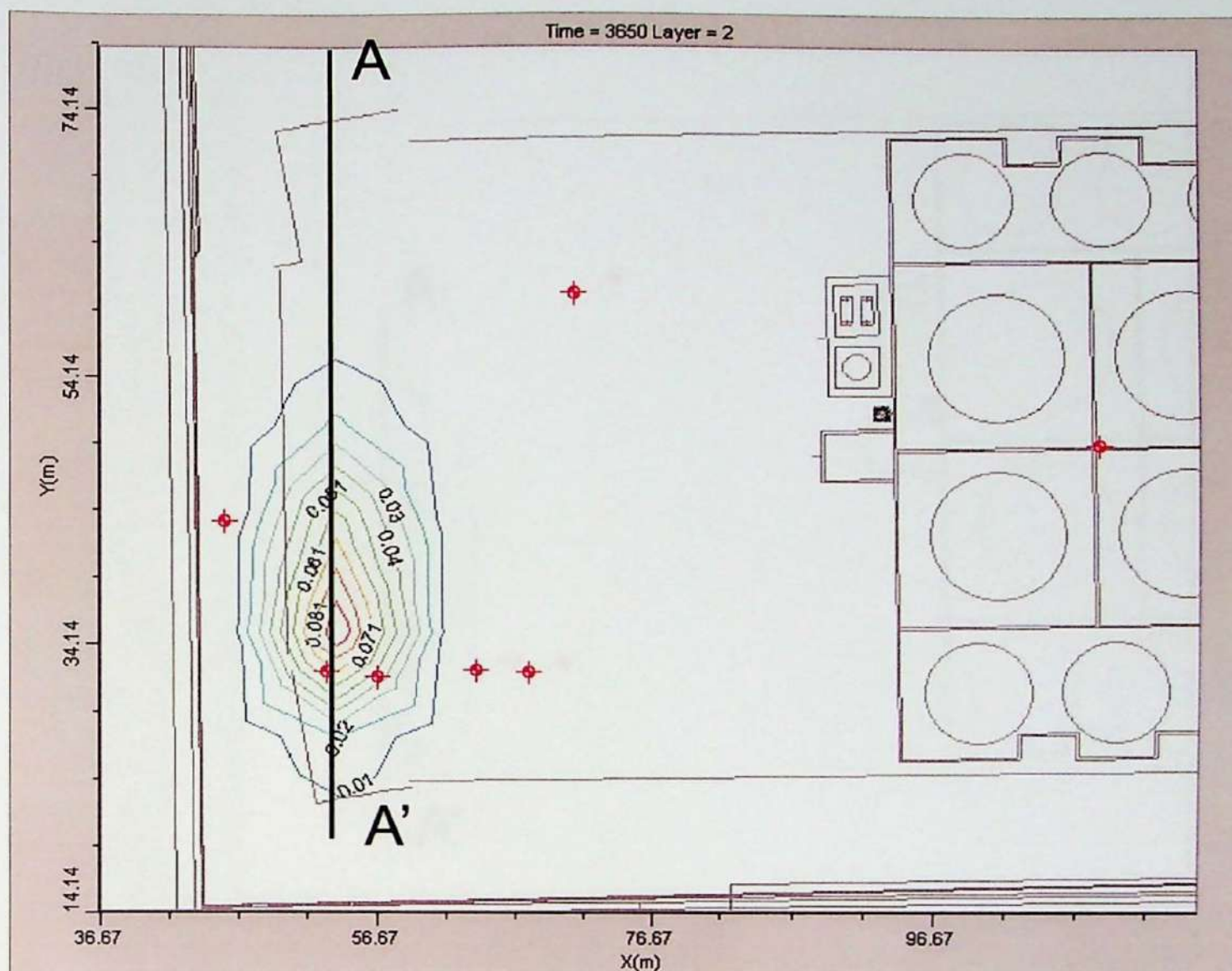


Vista em perfil

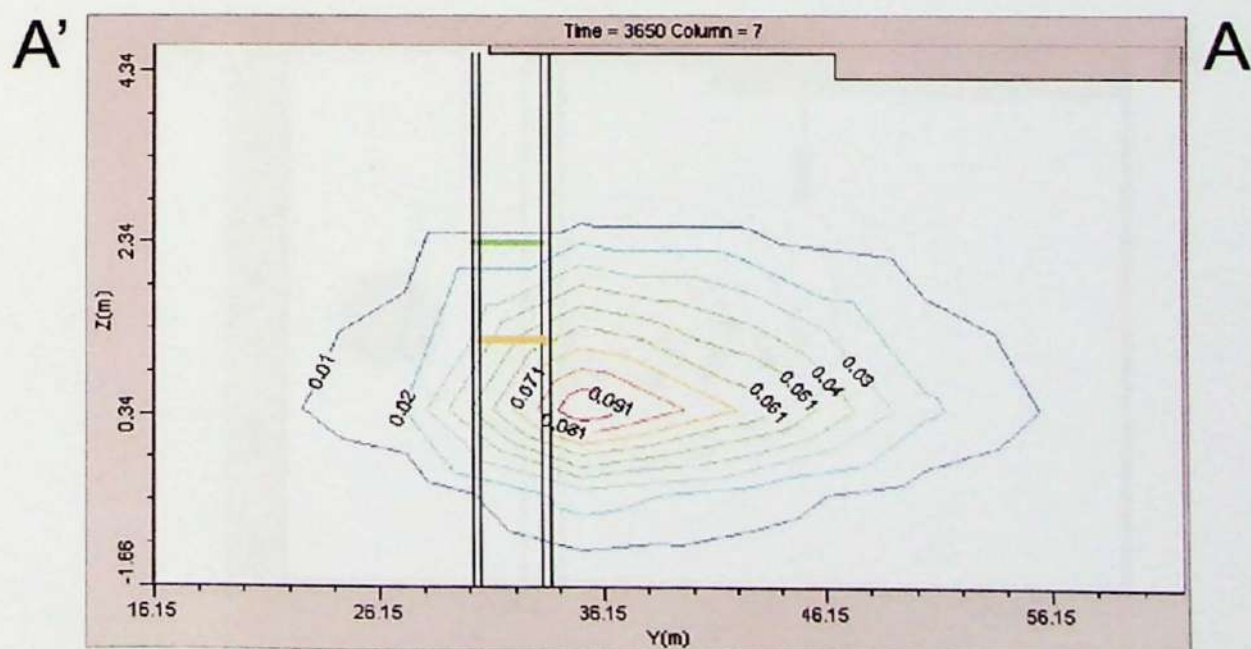


Mapa de Isoconcentrações de Tricloroetileno (TCE) MT3DMS

Vista em planta

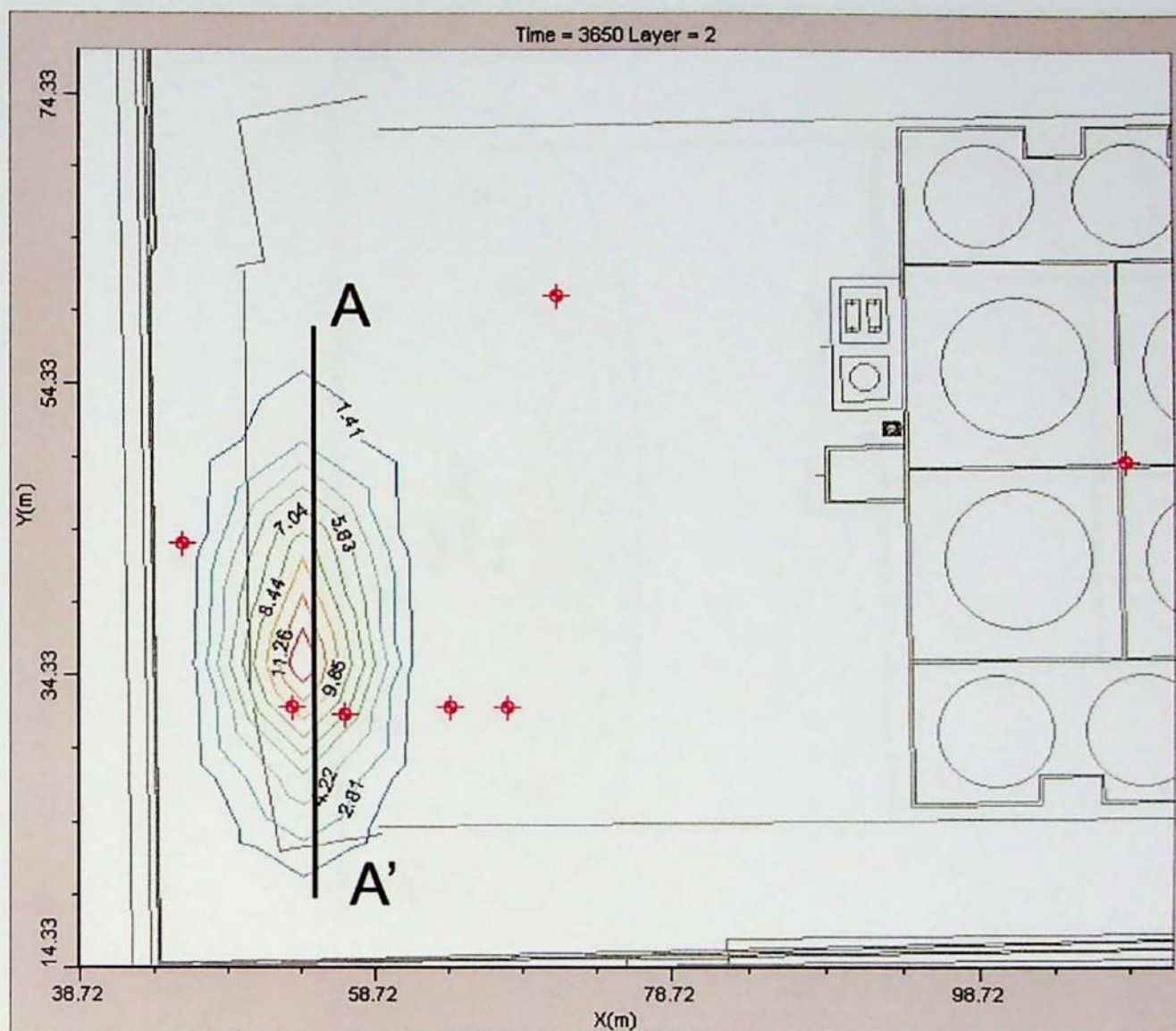


Vista em perfil

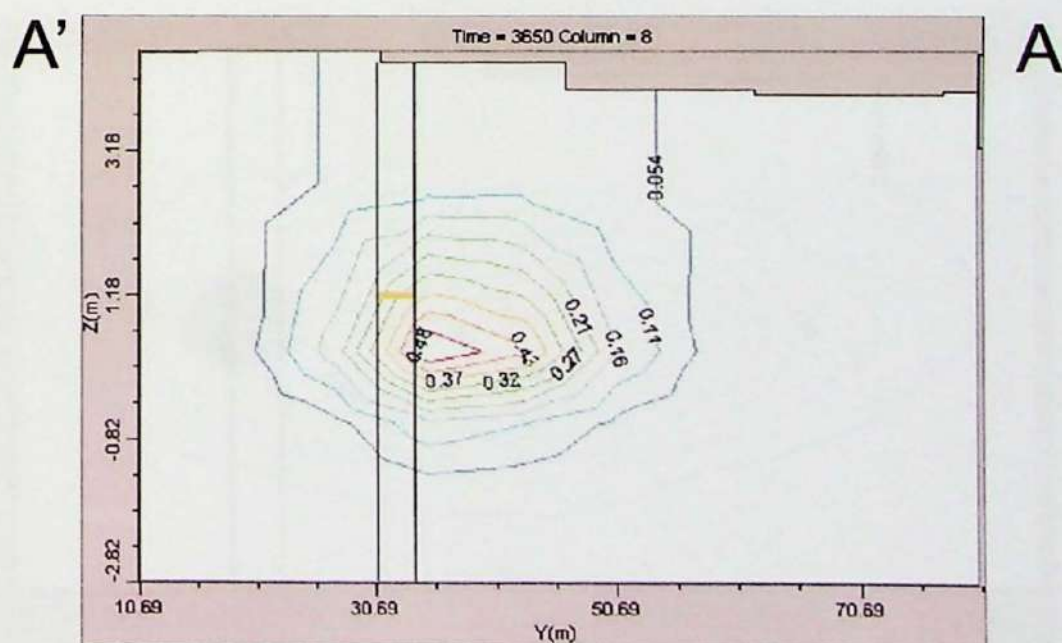


Mapa de Isoconcentrações de Tricloroetileno (TCE) RT3D2.5

Vista em planta

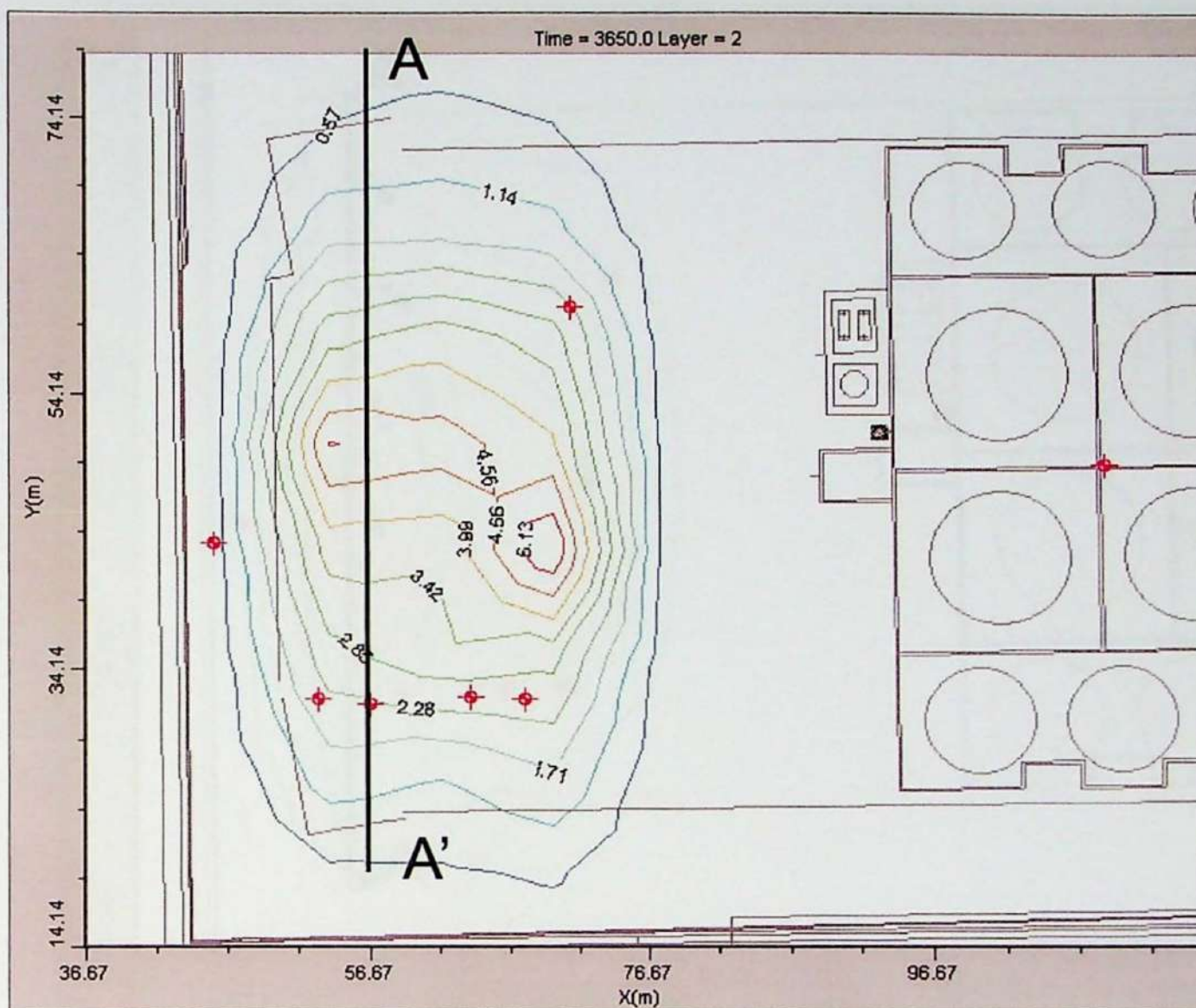


Vista em perfil

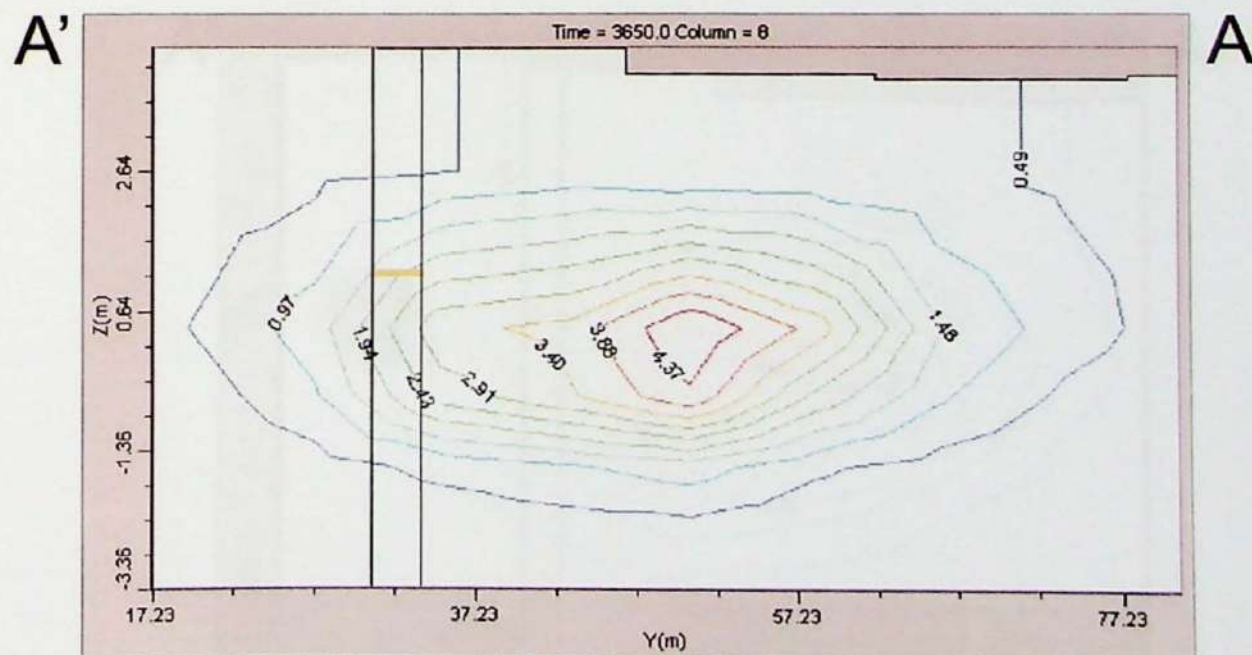


Mapa de Isoconcentrações de Dicloroetilenos (DCE) MT3DMS

Vista em planta

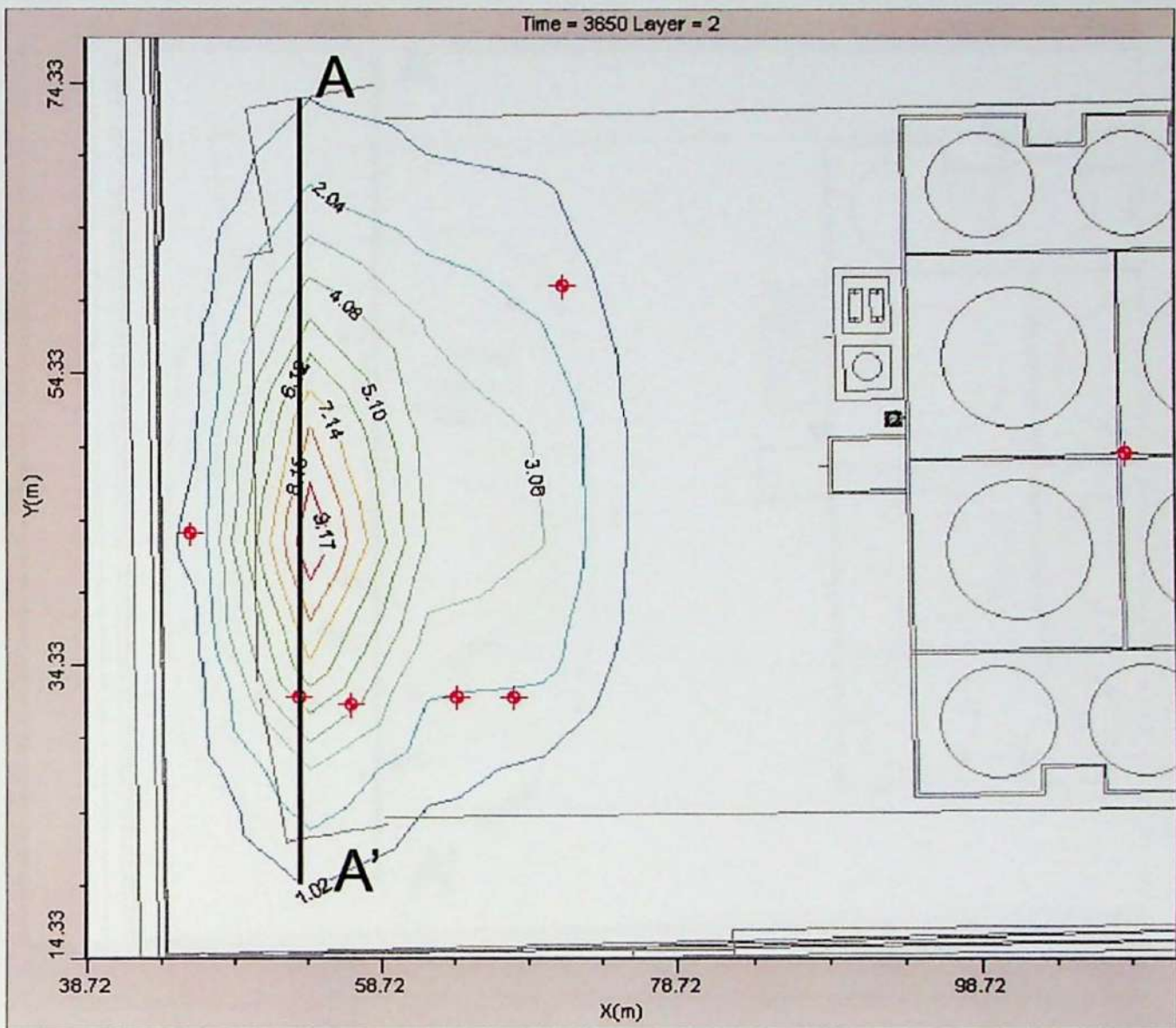


Vista em perfil

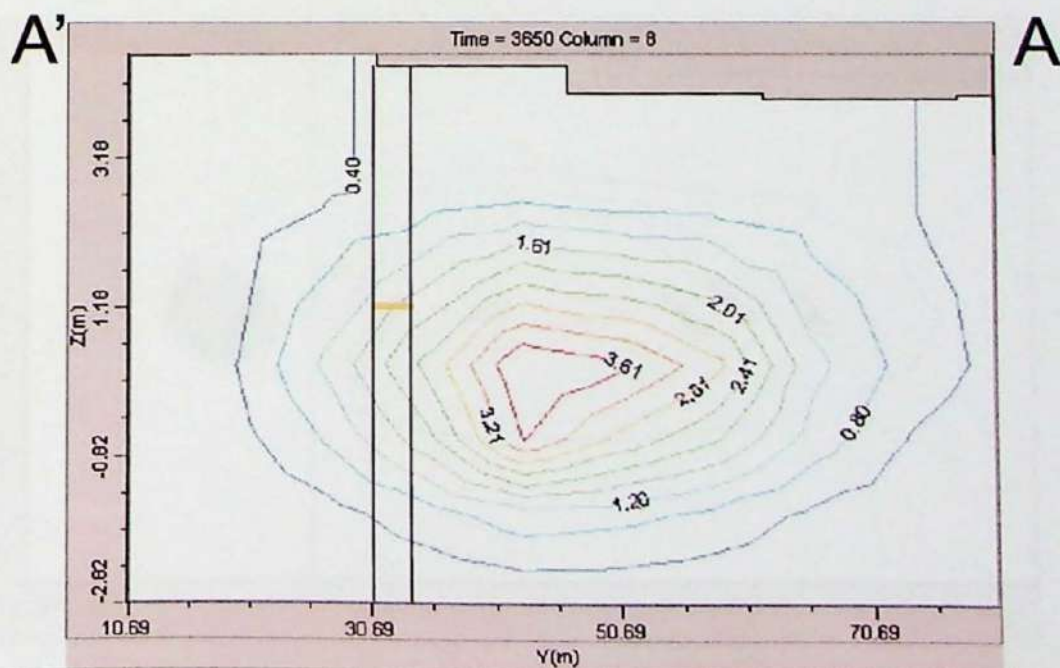


Mapa de Isoconcentrações de Dicloroetilenos (DCE)
RT3D2.5

Vista em planta

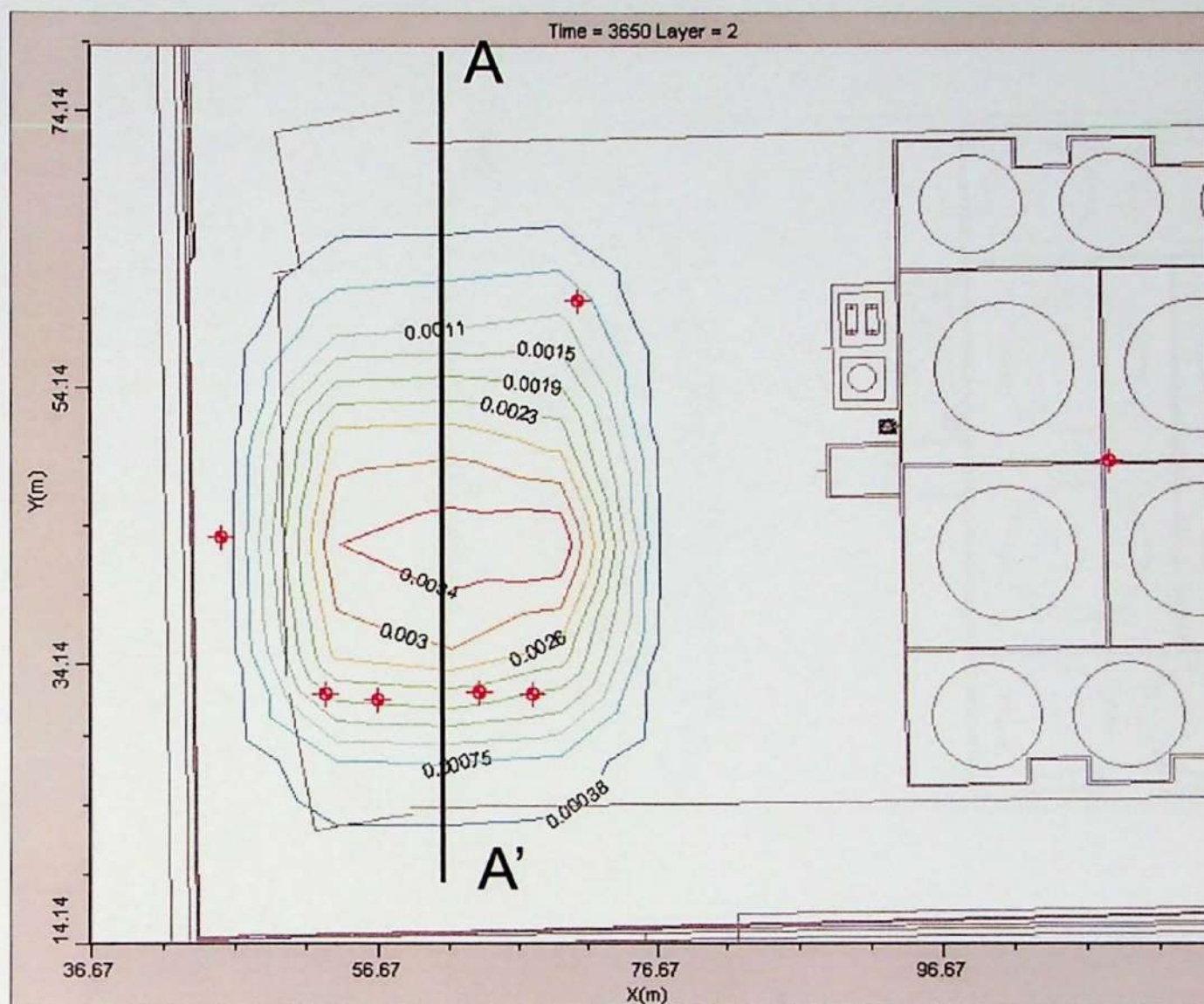


Vista em perfil

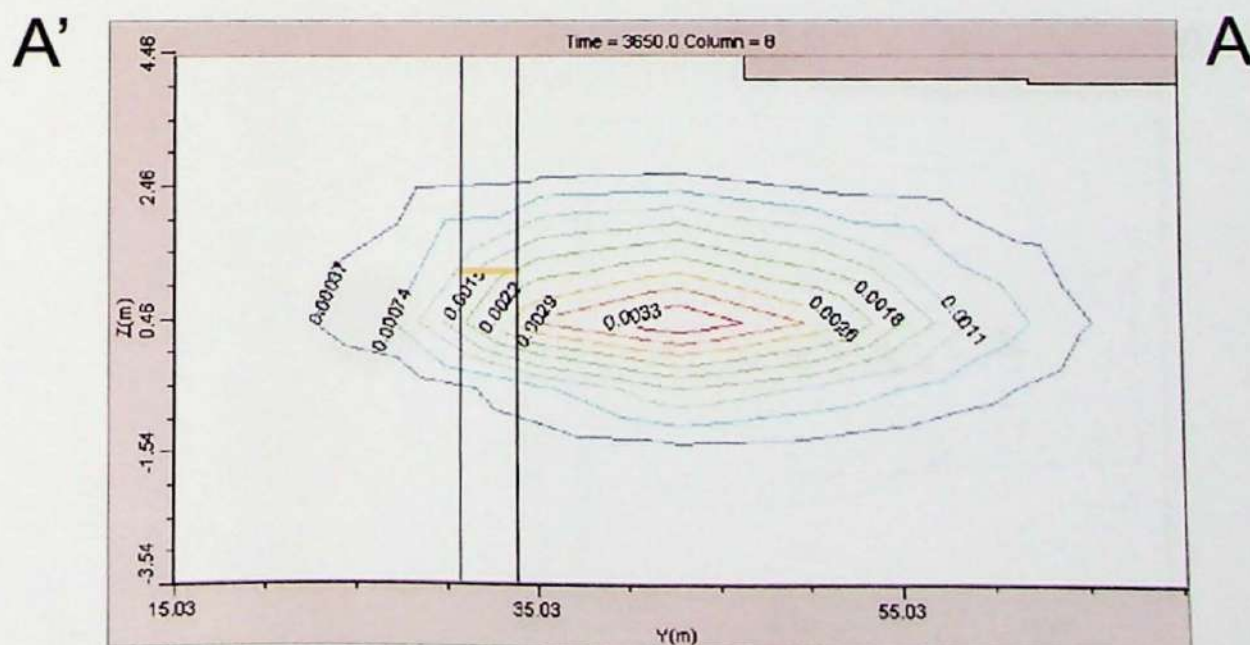


Mapa de Isoconcentrações de Cloreto de Vinila (CV) MT3DMS

Vista em planta

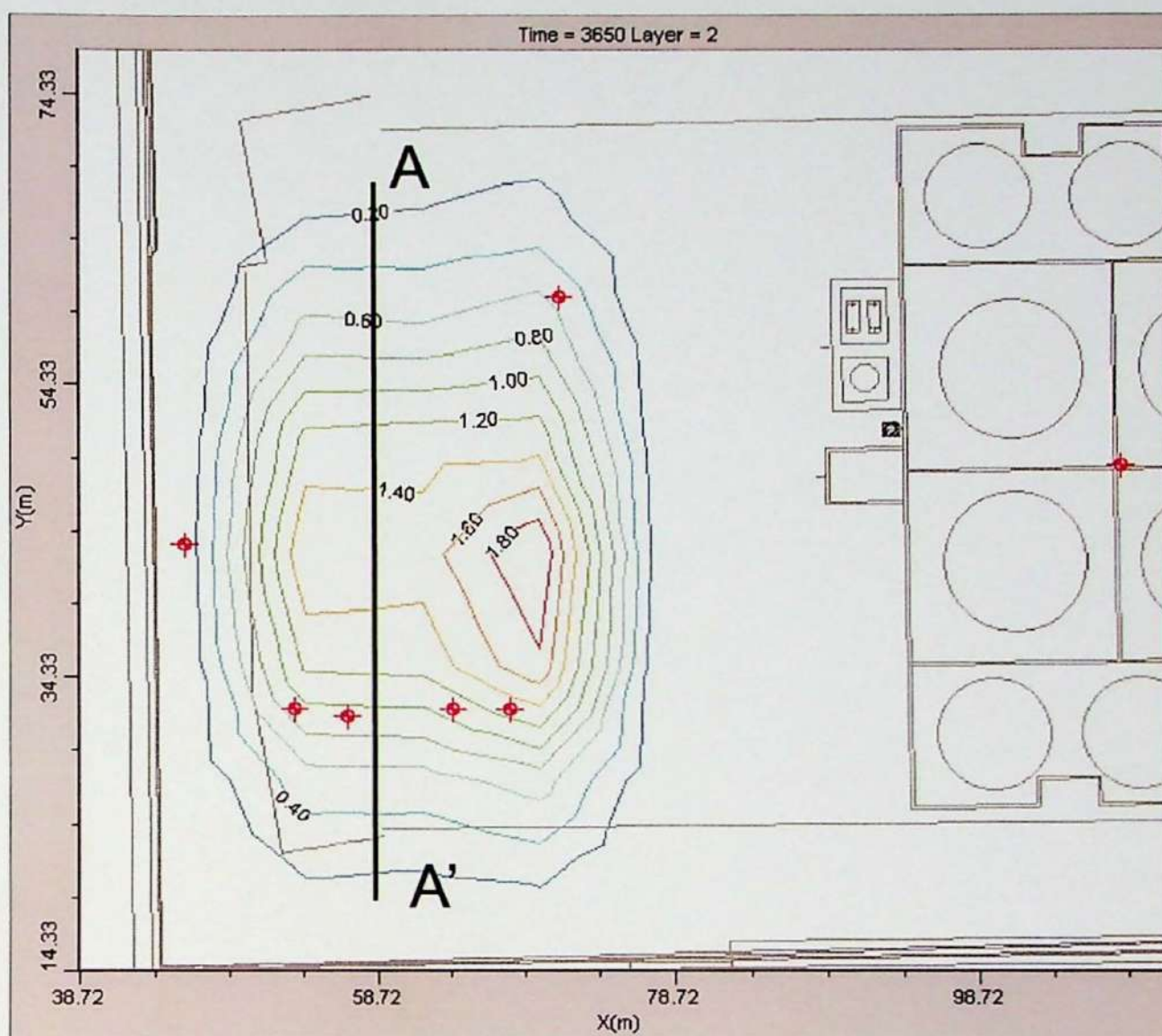


Vista em perfil

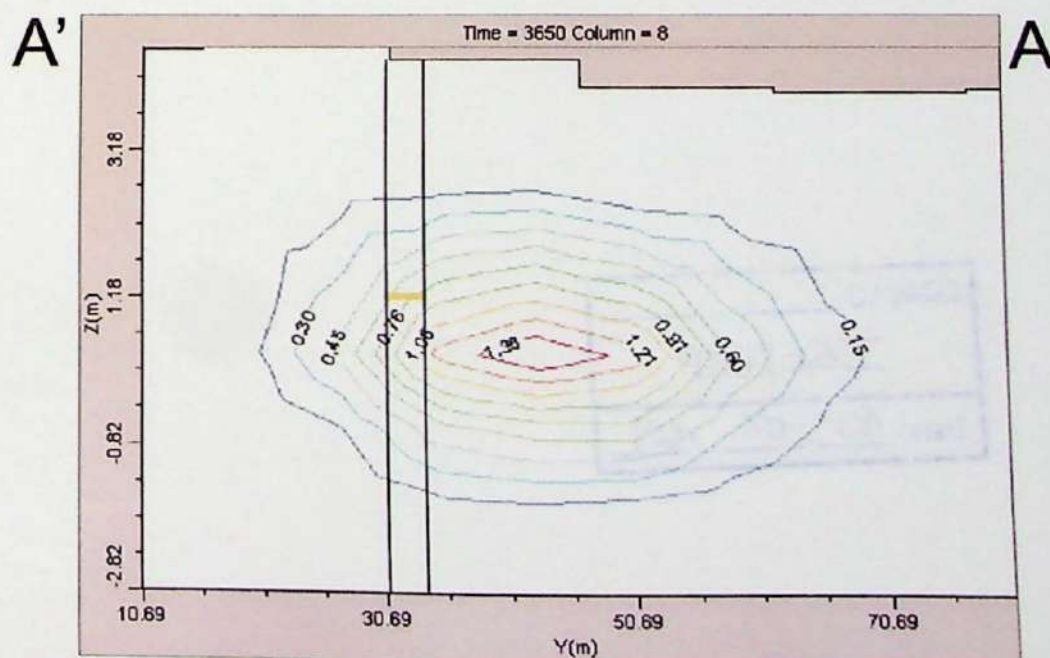


Mapa de Isoconcentrações de Cloreto de Vinila (CV) RT3D2.5

Vista em planta



Vista em perfil



DOAÇÃO

IGc/USP

Data: 10 / 02 / 09

