



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

Daniel Amgarten Simão

Avaliação da heterogeneidade da condutividade hidráulica de um aquífero sedimentar costeiro, livre e raso, e de seus efeitos para o transporte de contaminantes dissolvidos

Florianópolis - SC
2023

Daniel Amgarten Simão

Avaliação da heterogeneidade da condutividade hidráulica de um aquífero sedimentar costeiro, livre e raso, e de seus efeitos para o transporte de contaminantes dissolvidos

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal de Santa Catarina como requisito para a obtenção do título de mestre em Engenharia Ambiental.

Orientadora: Prof^a. Cátia Regina Silva de Carvalho Pinto, Dr^a.

Florianópolis - SC
2023

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Simão, Daniel Amgarten

Avaliação da heterogeneidade da condutividade hidráulica de um aquífero sedimentar costeiro, livre e raso, e de seus efeitos para o transporte de contaminantes dissolvidos / Daniel Amgarten Simão ; orientador, Cátia Regina Silva de Carvalho Pinto, 2023.

121 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Florianópolis, 2023.

Inclui referências.

1. Engenharia Ambiental. 2. Aquífero sedimentar. 3. Heterogeneidade da condutividade hidráulica. 4. Transporte de contaminantes. 5. Fazenda da Ressacada.. I. Regina Silva de Carvalho Pinto, Cátia. II. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental. III. Título.

Daniel Amgarten Simão

Avaliação da heterogeneidade da condutividade hidráulica de um aquífero sedimentar costeiro, livre e raso, e de seus efeitos para o transporte de contaminantes dissolvidos

O presente trabalho em nível de mestrado foi avaliado e aprovado por banca examinadora composta pelos seguintes membros:

Márcio Roberto Schneider, Dr.
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof^a. Alexandra Vieira Suhogusoff, Dr^a.
Universidade de São Paulo

Certificamos que esta é a **versão original e final** do trabalho de conclusão que foi julgado adequado para obtenção do título de mestre em Engenharia Ambiental.

Prof^a. Alexandra Rodrigues Finotti, Dr^a.
Coordenador do Programa

Prof^a. Cátia Regina Silva de Carvalho
Pinto, Dr^a.
Orientadora

Florianópolis - SC, 2023.

AGRADECIMENTOS

À minha família, principalmente meus pais, Cláudio e Dione, pela educação que me concederam e por todo o apoio e suporte para que eu busque meus objetivos.

À minha companheira, Íris, pela paciência, compreensão, apoio, e por dividir comigo os momentos bons e ruins.

À minha orientadora Prof^a. Cátia, pela liberdade concedida em seguir minhas curiosidades e pelo apoio e orientação durante a dissertação.

Ao Prof. Konrad, pelas conversas e co-orientação no início de meu processo, que auxiliaram a definir meu trabalho.

Ao Prof. Rodrigo, ao Kleber, à Prof^a. Alexandra e ao Márcio, pelos apontamentos e contribuições relevantes para meu trabalho fornecidos na qualificação e na defesa.

A todos os funcionários e professores do PPGEA e da UFSC, que trabalham incessantemente para manter o nível de excelência que tanto o departamento quanto a universidade são conhecidos.

Ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científica e Tecnológico), pela bolsa de estudos e auxílio financeiro concedidos e que possibilitaram minha dedicação integral ao programa de pós-graduação e a condução da pesquisa.

RESUMO

A adequada caracterização da magnitude e distribuição espacial da condutividade hidráulica é essencial para representar os processos de fluxo de águas subterrâneas e de transporte de contaminantes em aquíferos, e portanto, para as atividades de gerenciamento de áreas contaminadas e avaliação de impactos ambientais. Mesmo para aquíferos considerados homogêneos em relação a essa propriedade, heterogeneidades podem afetar significativamente os processos de fluxo e transporte. O objetivo principal deste trabalho envolve a análise quantitativa de propriedades geológicas e hidrogeológicas de um aquífero sedimentar costeiro, arenoso, livre, e raso, tradicionalmente caracterizado como homogêneo, com enfoque na caracterização da heterogeneidade espacial da condutividade hidráulica. O objetivo secundário envolve avaliar indícios de efeitos dessas heterogeneidades para o campo de fluxo do aquífero. Para isto, foram compilados dados de caracterizações geológicas e hidrogeológicas realizadas na área experimental do Núcleo Ressacada de Pesquisas em Meio Ambiente (REMA), na Fazenda da Ressacada da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), onde diversos experimentos controlados de infiltração de combustíveis orgânicos em aquíferos para estudos de remediação já foram realizados nos últimos 20 anos. Foi realizada uma análise descritiva e exploratória desses dados, a partir da qual foi possível estabelecer relações entre fácies sedimentares, granulometria dos sedimentos, e a condutividade hidráulica. Foi desenvolvida uma metodologia para definir grupos de hidrofácies, fácies sedimentares com comportamento hidráulico semelhante, utilizando métodos de aprendizado estatístico supervisionado e não-supervisionado. A partir da utilização do conceito de hidrofácies, foi possível avaliar qualitativamente a distribuição espacial da condutividade hidráulica na área investigada, assim como possíveis efeitos da heterogeneidade geológica no comportamento do campo de fluxo do aquífero e de substâncias dissolvidas em escala local. A conclusão a partir dos resultados desse trabalho é que existem indícios de que o transporte dos contaminantes dissolvidos no aquífero na área experimental do REMA é realizado principalmente através das fácies mais permeáveis, que atuam como caminho preferencial, através dos mecanismos de advecção e dispersão. Fácies menos permeáveis, na forma de lentes de argila, atuam como barreira para o fluxo advectivo, onde o transporte difusivo é dominante.

Palavras-chave: Aquífero sedimentar. Heterogeneidade da condutividade hidráulica. Transporte de contaminantes. Fazenda da Ressacada.

ABSTRACT

The adequate characterization of the magnitude and spatial distribution of hydraulic conductivity is essential to correctly represent the processes of groundwater flow and contaminants transport in aquifers, and therefore, for the activities of contaminated sites management and environmental impacts assessments. Even for aquifers considered homogeneous with respect to this property, heterogeneities can significantly affect flow and transport processes. The main objective of this work involves the quantitative analysis of geological and hydrogeological properties of a coastal, sandy, phreatic, and shallow sedimentary aquifer, traditionally characterized as homogeneous, focusing on the characterization of the spatial heterogeneity of hydraulic conductivity. The secondary objective involves evaluating evidence of effects of these heterogeneities for the aquifer flow field. Data from geological and hydrogeological characterizations carried out in the experimental area of the Núcleo Ressacada de Pesquisas em Meio Ambiente (REMA-UFSC) laboratory, at Ressacada Farm, Florianópolis, where several controlled experiments concerning organic fuels infiltration in the aquifer for remediation studies have already been carried out in the last 20 years. A descriptive and exploratory analysis of these data was carried out, from which it was possible to establish relationships between sedimentary facies, sediment granulometry, and hydraulic conductivity. A methodology was developed to define groups of hydrofacies, sedimentary facies with similar hydraulic behavior, using supervised and unsupervised statistical learning methods. The concept of hydrofacies permitted qualitatively assess the spatial distribution of hydraulic conductivity in the investigated area, as well as possible effects of geological heterogeneity on the behavior of the aquifer flow field and dissolved substances at a local scale. The conclusion from the results of this work is that there are indications that the transport of contaminants dissolved in the aquifer in the experimental area of REMA is carried out mainly through the most permeable facies, which act as a preferential path, through the mechanisms of advection and dispersion. Less permeable facies, in the form of clay lenses, act as a barrier to advective flow, where diffusive transport is dominant.

Keywords: Sedimentary aquifer. Hydraulic conductivity heterogeneity. Contaminant transport. Ressacada Farm.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Comparação de escalas granulométricas diversas.	20
Figura 2 – Exemplo de uma curva granulométrica, com os valores de d_{10} , d_{50} , d_{60} e U	22
Figura 3 – Água ocupando os espaços vazios de materiais terrestres em: a) espaço intergranular de partículas de sedimentos; b) fraturas de rochas; c) cavernas e cavidades de rochas carbonáticas.	25
Figura 4 – Relação entre porosidade total e efetiva, em que o volume total da amostra, V_T , é representado pela área dentro do círculo cinza. a) A água ocupa todos os espaços porosos (espaços azuis, V_V); b) alguns poros estão desconectados dos outros poros (espaços em vermelho) e as águas subterrâneas acessam apenas os espaços porosos conectados (espaços azuis, V_i).	26
Figura 5 – Perfil vertical da distribuição da água em subsuperfície	29
Figura 6 – Carga hidráulica h , carga de pressão ψ e carga de elevação z para um piezômetro.	30
Figura 7 – Sistema de fluxo de águas subterrâneas com linhas de fluxo e linhas equipotenciais.	31
Figura 8 – Esquema do experimento de Darcy	32
Figura 9 – Modelo conceitual das micro-velocidades na escala dos poros (a, b, c), e a representação da velocidade linear média (d)	33
Figura 10 – Modelo conceitual da migração de plumas de contaminação e dos processos hidrodinâmicos a partir de uma fonte tipo pulso, instantânea (a) e de uma fonte contínua (b). Maior densidade de pontos representa maior concentração na fase dissolvida, e o formato da pluma presume meio homogêneo.	37
Figura 11 – Esquema de um volume representativo de um meio poroso.	38
Figura 12 – Localização da Fazenda Experimental da Ressacada e das áreas experimentais do REMA.	46
Figura 13 – Mapa geológico da região da Fazenda Experimental da Ressacada.	49
Figura 14 – Perfil litológico da área experimental na Fazenda da Ressacada.	51
Figura 15 – Fluxograma da metodologia geral deste trabalho.	54
Figura 16 – Localização das sondagens na área investigada com modelo digital de terreno (MDT) da área com resolução de 5 m.	56
Figura 17 – Localização das sondagens das áreas experimentais.	57
Figura 18 – Diagrama da estrutura identificada nas descrições de litofácies das sondagens	60

Figura 19 – Fluxograma com a metodologia desenvolvida para definição de grupos de hidrofácies nas sondagens analisadas	65
Figura 20 – Histograma (a) e gráfico quantil-quantil (b) para a porosidade total dos sedimentos	67
Figura 21 – Histograma (a) e gráfico quantil-quantil (b) para porosidade efetiva dos sedimentos	67
Figura 22 – Histograma para as frações de areia média-grossa (a), areia fina (b), silte (c) e argila (d).	68
Figura 23 – Histograma (a) e gráfico quantil-quantil (b) para os valores de teores de finos das amostras retiradas da área experimental da Ressacada	69
Figura 24 – Histograma (a) e gráfico quantil-quantil (b) para os valores de teores de finos transformados para o logaritmo natural (ln)	69
Figura 25 – Boxplot dos valores de K ($\times 10^{-3} \text{ cm/s}$) para os diferentes métodos de interpretação de testes 'slug' (a), e para as diferentes campanhas realizadas e respectivos métodos.	71
Figura 26 – Gráfico com as medições de K interpretadas com o método de Bouwer e Rice (1976) em relação aos diferentes poços que foram testados.	72
Figura 27 – (a) Histograma com valores de K para as campanhas com método de interpretação Bouwer-Rice; (b) Gráfico QQ desses valores.	72
Figura 28 – (a) Histograma com valores de lnK para as campanhas com método de interpretação Bower-Rice; (b) Gráfico QQ desses valores.	73
Figura 29 – (a) Histograma dos valores de K nas amostras das sondagens SD2 e SD3; (b) Gráfico quantil-quantil em relação à distribuição normal.	75
Figura 30 – (a) Histograma dos valores de lnK nas amostras das sondagens SD2 e SD3; (b) Gráfico quantil-quantil em relação à distribuição normal.	76
Figura 31 – Matriz de correlação com mapa de calor para os coeficientes de correlação de Spearman (diagonal inferior) e de Pearson (diagonal superior) entre as propriedades medidas nas amostras das sondagens SD2 e SD3.	77
Figura 32 – (a) Histograma dos teores de finos nas amostras das sondagens SD2 e SD3; (b) Gráfico quantil-quantil em relação à distribuição normal.	78
Figura 33 – (a) Histograma dos teores de finos nas amostras das sondagens SD2 e SD3 transformados para o logaritmo natural (ln); (b) Gráfico quantil-quantil em relação à distribuição normal.	78
Figura 34 – Gráfico de dispersão da relação entre o teor de finos e K para as amostras retiradas das sondagens SD2 e SD3.	79
Figura 35 – Perfil de profundidade para o teor de finos (%) e K para as amostras das sondagens SD2 (a) e SD3 (b).	80

Figura 36 – Relação entre teor de finos, condutividade hidráulica, e elementos descritivos das litofácies associadas às amostras retiradas das sondagens SD2 e SD3: (a) textura primária; (b) textura secundária; (c) cor; (d) elementos adicionais.	81
Figura 37 – Histograma dos valores de teores de finos (a) para as amostras das sondagens PE1, PE2 e PE3; e gráfico quantil-quantil em relação à distribuição normal (b).	82
Figura 38 – Perfil vertical dos valores de teores de finos (%) nas amostras das sondagens (a) PE1, (b) PE2 e (c) PE3.	83
Figura 39 – Perfil vertical dos valores de teores de finos (%) para todas as amostras das sondagens PE1, PE2 e PE3, com diferenciação por textura secundária (a) e cor (b) da fácies associada à amostra.	84
Figura 40 – Histograma dos valores de teores de finos (a) para as amostras das sondagens nas áreas experimentais; e gráfico quantil-quantil em relação à distribuição normal (b).	85
Figura 41 – Perfil vertical dos valores de teores de finos (%) para todas as amostras das sondagens realizadas nos experimentos OQP-B100 e BAF-B20.	85
Figura 42 – Perfil vertical dos valores de teores de finos (%) para todas as amostras das sondagens realizadas nos experimentos ANM-B100, ANM-B20 e BAA-B20.	86
Figura 43 – Perfil vertical dos valores de teores de finos (%), para todas as amostras das sondagens realizadas nas áreas dos experimentos, discriminados pelos elementos descritivos identificados.	87
Figura 44 – Perfil vertical em profundidade dos valores de $\ln K$ para todos os testes <i>slug</i> interpretados pelo método de Bower-Rice realizados nas áreas dos experimentos discriminados pelos elementos descritivos identificados.	88
Figura 45 – Regressão linear realizada com os valores padronizados ($Z_{\ln K} \times Z_{\ln(Finos)}$) das amostras das sondagens SD2 e SD3, em que R^2 é o coeficiente de determinação da regressão e RSE é o erro padrão residual.	90
Figura 46 – Gráfico de dispersão para os valores da média ponderada de $Z_{\ln(Finos)}$ representativos das litofácies versus os valores de $Z_{\ln(Finos)}$ das amostras.	90
Figura 47 – Histograma (a) e gráfico QQ (b) para a distribuição dos valores da média ponderada de $Z_{\ln(Finos)}$ representativos das litofácies.	91
Figura 48 – Histograma (a) e gráfico QQ (b) para a distribuição dos valores médios de $Z_{\ln K}$ representativos das litofácies.	92

Figura 49 – Histogramas dos grupos identificados pelo algoritmo de quebras naturais de Jenks, com respectivas médias (\bar{x}), medianas (M) e variâncias (σ^2).	93
Figura 50 – Porcentagem de litofácies associadas aos diferentes grupos de hidrofácies em função da profundidade	94
Figura 51 – Localização dos experimentos analisados e de alguns dos poços em seus entornos.	95
Figura 52 – Distribuição vertical de hidrofácies para os poços PM01 e PE2 (a); seção transversal de pluma de gasolina com etanol para o experimento ANM-E85 (b); e localização dos poços de monitoramento do experimento (c)	96
Figura 53 – Distribuição vertical de hidrofácies para o experimento BAF-B20 . . .	97
Figura 54 – Distribuição vertical de hidrofácies para os poços do experimento BAA-B20 (a), seção transversal de pluma de BTEX após período de 1.6 anos (b), e localização dos poços e sondagens da área BAA-B20 (c)	98
Figura 55 – Distribuição vertical de hidrofácies para os poços do experimento ANM-B100 (a) e seção transversal de pluma de acetato após período de 19.9 meses (b)	99
Figura 56 – Distribuição vertical de hidrofácies para os poços do experimento ANM-B20 e para o piezômetro PZ2	101
Figura 57 – Distribuição vertical de hidrofácies para os poços do experimento OQP-B100 (a) e seção transversal de pluma de acetato após período de 12.3 meses (b)	102
Figura 58 – Perfil vertical das hidrofácies em três dimensões com vista sudeste-noroeste da área investigada	104
Figura 59 – Perfil vertical das hidrofácies em três dimensões com vista a partir do sudoeste-nordeste da área investigada	105

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Tabela com informações sobre os experimentos realizados na fazenda.	45
Tabela 2 – Informações de localização, profundidade e cota do terreno sobre as sondagens investigativas e os poços de monitoramento do Grupo 1.	55
Tabela 3 – Informações sobre as sondagens realizadas na rede de monitoramento de cada experimento.	57
Tabela 4 – Tabela com o número de medições associados a cada sondagem para as propriedades densidade real, massa específica, porosidade total, porosidade efetiva, granulometria (porcentagem de areia média-grossa e fina, de silte, argila, assim como de finos).	58
Tabela 5 – Poços em que os testes 'slug' foram realizados, profundidades do início e fim das seções filtrantes e seus respectivos comprimentos. .	59
Tabela 6 – Estatística descritiva para as frações granulométricas dos sedimentos, densidade real, massa específica, porosidade total e porosidade efetiva.	66
Tabela 7 – Estatística descritiva dos valores de K ($\times 10^{-3} \text{ cm/s}$) para os todos os poços em que os testes 'slug' foram realizados, divididas também por método de interpretação dos dados dos ensaios.	70
Tabela 8 – Estatística descritiva dos valores de $\ln K$ para os poços em que os testes 'slug' foram realizados e para as campanhas com método de interpretação Bouwer-Rice.	73
Tabela 9 – Estatística descritiva para os valores de K medidos pelo permo-porosímetro a gás para as amostras de SD2 e SD3	74
Tabela 10 – Grupos de hidrofácies identificados e valores médios.	94

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
1.1	OBJETIVOS	17
1.1.1	Objetivo geral	17
1.1.2	Objetivos específicos	17
2	REFERENCIAL TEÓRICO	18
2.1	FUNDAMENTOS GEOLÓGICOS	18
2.1.1	Depósitos sedimentares	18
2.1.2	Propriedades sedimentológicas	19
2.1.2.1	Composição mineralógica	19
2.1.2.2	Tamanho, forma e orientação	20
2.1.2.3	Grau de seleção	21
2.1.2.4	Densidade de pertículas (real)	22
2.1.3	Ambientes e sistemas deposicionais	23
2.2	FUNDAMENTOS HIDROGEOLÓGICOS	24
2.2.1	Propriedades hidrogeológicas	24
2.2.1.1	Porosidade	24
2.2.1.2	Porosidade efetiva	26
2.2.1.3	Permeabilidade	27
2.2.2	Águas subterrâneas, aquíferos e quantificação de fluxo e transporte	28
2.2.2.1	Fluxo de águas em subsuperfície	29
2.2.2.2	Lei de Darcy e condutividade hidráulica	31
2.2.2.3	Transporte de solutos e equação de advecção-dispersão	34
2.2.2.4	Volume elementar representativo	37
2.2.3	Heterogeneidades de aquíferos	39
2.2.3.1	Heterogeneidade da condutividade hidráulica	40
2.2.3.2	Representação da estrutura espacial da condutividade hidráulica	41
3	MATERIAIS E MÉTODOS	44
3.1	DESCRIÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO	44
3.1.1	Aspectos geológicos e geomorfológicos	47
3.1.2	Clima	52
3.1.3	Hidrogeologia	52
3.2	METODOLOGIA	54
3.2.1	Pesquisa bibliográfica e compilação dos dados	54
3.2.2	Avaliação, preparação e processamento dos dados	54
3.2.3	Análise descritiva e exploratória	61
3.2.4	Definição das hidrofácies	62

3.2.5	Ferramentas	64
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	66
4.1	ANÁLISES DESCRITIVAS E EXPLORATÓRIAS	66
4.1.1	Propriedades gerais dos sedimentos	66
4.1.2	Condutividade hidráulica	70
4.1.2.1	Ensaio de campo - testes <i>slug</i>	70
4.1.2.2	Ensaio de laboratório - Permo-porosímetro a gás	74
4.1.3	Relações entre condutividade, granulometria e litofácies	77
4.2	DEFINIÇÃO DE HIDROFÁCIES	89
4.3	RELAÇÕES ENTRE HIDROFÁCIES E PLUMAS DAS ÁREAS EXPERIMENTAIS	95
5	CONCLUSÕES	106
	REFERÊNCIAS	108
	APÊNDICE A – DENDROGRAMA DO AGRUPAMENTO HIERÁRQUICO REALIZADO COM OS VALORES DE Z_{lnK} A PARTIR DE DISTÂNCIAS EUCLIDIANAS AO QUADRADO PELO MÉTODO DE WARD	120

1 INTRODUÇÃO

A contaminação de aquíferos é um dos grandes problemas ambientais que a sociedade moderna enfrenta. No Brasil, 52% dos municípios dependem total (36%) ou parcialmente (16%) das águas subterrâneas para o abastecimento público (HIRATA *et al.*, 2019). Representações acuradas e confiáveis dos processos responsáveis pelo transporte de contaminantes dissolvidos em aquíferos são de grande relevância para o gerenciamento de risco e a avaliação de impactos de contaminações. Esses processos são tradicionalmente representados por modelos matemáticos de fluxo e transporte de contaminantes baseados na Lei de Darcy e na equação de advecção-dispersão (ADE) (FETTER; BOVING; KREAMER, 2017).

Informações relativas à magnitude e distribuição espacial de propriedades dos aquíferos investigados são necessárias para representar as dinâmicas de fluxo e transporte em subsuperfície a partir dessas equações. Entretanto, para aquíferos sedimentares, os complexos processos de erosão, transporte e deposição de sedimentos, que condicionam a arquitetura geológica desses aquíferos, resultam quase sempre em uma distribuição espacial heterogênea em diversas escalas para os parâmetros hidrogeológicos. A condutividade hidráulica (K) tem sido atribuída como a propriedade mais significativa controlando o transporte de solutos em aquíferos (DAGAN, 1989; KOLTERMANN; GORELICK, 1996; FOGG; CARLE; GREEN, 2000; SALAMON; FERNÁNDEZ-GARCIA; GÓMEZ-HERNÁNDEZ, 2007; SUDICKY; ILLMAN *et al.*, 2010; MOLZ, 2015; LANGE, 2020; GUO *et al.*, 2021; REN *et al.*, 2022). Esse parâmetro pode variar em até 13 ordens de magnitude (FREEZE; CHERRY, 1979), e variações consideráveis podem ocorrer em uma escala espacial muito pequena (ALLEN-KING *et al.*, 1998; BOHLING *et al.*, 2012).

Um dos principais efeitos da heterogeneidade da condutividade hidráulica consiste na flutuação espacial do campo de velocidades dos aquíferos, que afeta a advecção, a dispersão e a degradação de contaminantes dissolvidos (DEVLIN, 2020). Quando existem regimes hidrológicos variáveis no tempo, comum em regiões úmidas e costeiras, os efeitos da heterogeneidade no fluxo e no transporte podem ser ainda mais complexos (RAMA *et al.*, 2019). Caracterizar a distribuição espacial da heterogeneidade, entretanto, não é trivial. Na prática, é extremamente difícil e custoso amostrar a totalidade de uma área investigada, assim como realizar medições representativas de sua magnitude, pois além de afetar a distribuição espacial, a heterogeneidade condiciona que a magnitude da propriedade depende da escala de medição (ROVEY; CHERKAUER, 1995). Como lidar com as heterogeneidades dos meios geológicos naturais é um dos desafios prioritários da hidrologia de subsuperfície, e até hoje uma das grandes barreiras para a compreensão do fluxo de águas subterrâneas e do transporte de solutos, e conseqüentemente fonte de incertezas para a tomada de decisão no

contexto do gerenciamento ambiental (KITANIDIS, 2015; DOHERTY; MOORE, 2020).

A abordagem tradicional ao quantificar processos de fluxo e transporte em subsuperfície envolve simplificações como modelos determinísticos, redução de dimensionalidades (modelos bidimensionais), definição de volumes macroscópicos de aquíferos adotados como homogêneos e representativos, representação do fluxo como estacionário no tempo, e determinação de parâmetros efetivos, geralmente ajustados através da calibração (CORSEUIL; SCHNEIDER *et al.*, 2006; DE MARSILY *et al.*, 2005; SANCHEZ-VILA; GUADAGNINI; CARRERA, 2006; KITANIDIS, 2015). Na engenharia, esse paradigma foi suficiente para problemas em que o campo de velocidades de um aquífero não afeta significativamente os processos analisados, como previsões do rebaixamento de poços de captação de água, ou problemas em que a escala de heterogeneidade espacial e temporal é muito menor que a escala do problema investigado, como avaliação do fluxo de águas subterrâneas em escala regional ou avaliação da contaminação de aquíferos em prazo muito longo (PAYNE; QUINNAN; POTTER, 2008).

Nos últimos 40 anos, no entanto, diversos estudos concluíram que o modelo conceitual tradicional de representação dos aquíferos e dos processos de transporte de solutos não atende às expectativas de previsões acuradas e confiáveis, e que negligenciar as propriedades heterogêneas dos meios geológicos naturais resulta em estimativas enviesadas dos parâmetros e estruturas de modelos, levando a consideráveis incertezas nos seus resultados (MATHERON; DE MARSILY, 1980; KOLTERMANN; GORELICK, 1996; PTAK; PIEPENBRINK; MARTAC, 2004; KONIKOW, 2011; ZHENG; BIANCHI; GORELICK, 2011; ANDERSON; SIEGEL, 2013; HADLEY; NEWELL, 2014; USEPA, 2017; GUO *et al.*, 2021). A variação espacial da distribuição de contaminantes causada pelas heterogeneidades tem um impacto significativo no controle de risco e na definição de estratégias de remediação (MAXWELL; CARLE; TOMPSON, 2008). Entretanto, até hoje a abordagem clássica ainda é utilizada na prática da modelagem em subsuperfície (KITANIDIS, 2017).

Em meios porosos, caminhos preferenciais na subsuperfície implicam subestimativas do tempo que contaminantes levam para atingir um receptor, como um poço de captação de águas subterrâneas para abastecimento público ou um corpo d'água superficial, quando a abordagem tradicional é utilizada (RIVA *et al.*, 2008; BIANCHI *et al.*, 2011). Lentes de argila e materiais de baixa condutividade em meio a sedimentos mais permeáveis implicam na persistência da contaminação por mais tempo que o estimado a partir do paradigma tradicional (LABOLLE; FOGG, 2001; FEEHLEY; ZHENG; MOLZ, 2000). A conectividade dessas estruturas de alta ou baixa condutividade é essencial para compreender o transporte de solutos, a qual pode ser melhor caracterizada através de incorporação de informações geológicas nos modelos (FOGG; ZHANG, 2016). Dessa forma, na atualidade a caracterização e representação da variabilidade natural

da condutividade hidráulica tem sido frequentemente realizada a partir de caracterizações geoestatísticas, que baseiam-se em estruturas de correlação espacial, e que possibilitam incorporar informações geológicas (ANDERSON; AIKEN *et al.*, 1999; DE MARSILY *et al.*, 2005; BIANCHI *et al.*, 2011; FOGG; ZHANG, 2016; SAVOY *et al.*, 2017; TERAMOTO; CHANG, 2018; REN *et al.*, 2022).

O maior obstáculo para melhor representação das heterogeneidades de aquíferos é atualmente mais informacional do que computacional (EATON, 2006). Uma melhor compreensão das heterogeneidades de aquíferos e de seus efeitos nos processos de fluxo e transporte foi possível através de estudos em localidades extensivamente caracterizadas (ZHENG; BIANCHI; GORELICK, 2011; SUDICKY; ILLMAN, 2011; ANDERSON; SIEGEL, 2013). Alguns desses locais incluem depósitos arenosos que tradicionalmente são classificados e caracterizados como homogêneos, mas que em escalas relevantes para problemas de contaminação pontual de aquíferos apresentam de fato heterogeneidades que condicionam comportamentos complexos de plumas de contaminação (LEBLANC *et al.*, 1991; DE MARSILY *et al.*, 2005; SUDICKY; ILLMAN, 2011). A coleta de mais dados não necessariamente resulta em uma melhor caracterização dos aquíferos para um problema de interesse, mas sim o melhor uso de dados disponíveis (MALIVA, 2016).

Na fazenda experimental da Ressacada, área ao sul da Ilha de Santa Catarina, Florianópolis, pertencente à Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), existe uma área experimental em que o laboratório do Núcleo Ressacada de Pesquisas em Meio Ambiente (REMAS), em parceria com a Petrobrás, conduz experimentos em escala de campo desde 1998 para estudar o comportamento de combustíveis orgânicos no meio subterrâneo, a remediação de solos e aquíferos, e também para auxiliar na elaboração de modelos matemáticos de fluxo e transporte que possam ser utilizados na tomada de decisão no contexto do gerenciamento de áreas contaminadas (FERNANDES, 2002; SCHNEIDER, 2005; CORSEUIL; SCHNEIDER *et al.*, 2006; COSTA, 2008; CORSEUIL; MONIER *et al.*, 2011; CHIARANDA, 2011; RAMOS *et al.*, 2013; FEDRIZZI, 2016; MÜLLER, 2017).

O aquífero local é sedimentar costeiro raso, e arenoso, caracterizado por um regime hidráulico variável, que afeta os processos hidrodinâmicos na área experimental. Tradicionalmente caracterizado como homogêneo, em escala regional, o depósito apresenta, no entanto, heterogeneidades geológicas que, em conjunto com o regime de fluxo instável, resultam em variabilidades no fluxo do aquífero e em incertezas em relação aos efeitos combinados das variabilidades espaciais e temporais dos processos hidrodinâmicos (RAMA, 2019). Métodos de biorremediação de aquíferos, como atenuação natural monitorada e bioestimulação, têm recebido cada vez mais atenção como alternativas viáveis e com bom custo-benefício para remediação de aquíferos. O entendimento das heterogeneidades do meio subterrâneo é crítico para que essas al-

ternativas sejam utilizadas com eficácia (PAYNE; QUINNAN; POTTER, 2008; DEVLIN, 2020).

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo geral

O objetivo principal deste trabalho envolve a análise quantitativa de propriedades geológicas e hidrogeológicas de um aquífero sedimentar costeiro, livre, e raso, com enfoque na caracterização da heterogeneidade espacial da condutividade hidráulica. O objetivo secundário envolve avaliar indícios de efeitos dessas heterogeneidades para o campo de fluxo do aquífero.

1.1.2 Objetivos específicos

- Compilar e sistematizar dados de caracterizações geológicas e hidrogeológicas realizadas na área experimental do REMA na Fazenda da Ressacada da UFSC;
- Processar, explorar e analisar quantitativamente os dados compilados, com foco na caracterização da heterogeneidade da condutividade hidráulica na região investigada;
- Definir hidrofácies, a partir da correlação entre litofácies identificadas na área de estudo, a condutividade hidráulica e a granulometria fina dos sedimentos;
- Avaliar e discutir qualitativamente a distribuição espacial das hidrofácies, assim como os efeitos das heterogeneidades para a migração de contaminantes nos experimentos conduzidos na área de estudo.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 FUNDAMENTOS GEOLÓGICOS

2.1.1 Depósitos sedimentares

A crosta terrestre é constituída por diferentes materiais, essencialmente minerais, rochas, sedimentos, solos e água. Esses materiais estão em constante transformação e interação. A porção sólida é formada pelas rochas e os produtos de sua intemperização, solos e sedimentos.

Esses basicamente são constituídos por associações de minerais, que são as unidades fundamentais dos materiais terrestres (EARLE, 2019). Minerais são compostos inorgânicos e que apresentam uma composição química estável e definida, enquanto que rochas e sedimentos são feitos de minerais mas não possuem uma composição química definida (KLEIN; PHILPOTTS, 2012).

Rochas ígneas e metamórficas formam 95% das rochas, e granito e basalto são as rochas mais comuns entre as ígneas (EARLE, 2019). Em sua maioria têm origem a bilhões de anos atrás, em um período geológico conhecido como Pré-Cambriano (TEIXEIRA *et al.*, 2003). Na crosta continental formam o embasamento cristalino, o qual acomoda os materiais superficiais da crosta e molda o relevo da superfície terrestre.

Agentes geológicos exógenos à crosta são responsáveis pelo intemperismo dessas rochas, o qual inclui dois fenômenos diferentes que alimentam um ao outro. Um é a desintegração mecânica das rochas em fragmentos menores, denominados clastos; o outro é a alteração química dos minerais presentes na rocha para formas mais estáveis no ambiente superficial (EARLE, 2019). Seus principais produtos são detritos de minerais resistentes (como quartzo, feldspato), minerais neoformados (argilominerais), e íons em solução aquosa (SUGUIO, 2003).

Esses detritos acumulam-se sobre as rochas no local de sua formação, gerando uma camada de materiais soltos denominada manto de intemperismo (FELIX; HORN FILHO, 2020). Nas porções mais superficiais, misturam-se com materiais orgânicos originando os solos (EARLE, 2019).

Grande parte dos produtos do intemperismo, no entanto, é erodida e transportada por agentes como o vento, a gravidade, o gelo ou a água. Quando a energia de transporte não é mais suficiente, esses materiais depositam-se nas zonas topográficas mais baixas, originando depósitos de sedimentos (NICHOLS, 2009).

Sedimentos recém-depositados encontram-se na forma de fragmentos soltos, sem coesão, e por isso são denominados materiais inconsolidados. Sedimentos inconsolidados atuais estão associados ao Quaternário, que corresponde ao período geológico mais moderno da subdivisão da era Cenozóica, reconhecendo-se normalmente duas épocas: Pleistoceno e Holoceno (SUGUIO, 2003).

Diferentemente do período Terciário, o Quaternário caracterizou-se por profundas mudanças climáticas que afetaram as mais diversas regiões do globo terrestre, de forma que nesse período desenvolveu-se muito do que hoje representa a superfície terrestre (SOUZA *et al.*, 2018).

O estudo dos depósitos sedimentares e suas origens é realizado pelo sub-campo da geologia denominado sedimentologia (SUGUIO, 2003). Seus objetivos envolvem o estudo dos processos de formação, transporte e deposição dos sedimentos em ambientes continentais e marinhos (NICHOLS, 2009).

2.1.2 Propriedades sedimentológicas

Sedimentos constituem a unidade básica de um depósito sedimentar. Podemos estudar e classificar os depósitos a partir das características mineralógicas e texturais de seus sedimentos, que apresentam variação de acordo com sua área fonte, o agente de transporte, o mecanismo de deposição, o ambiente em que ocorre a sedimentação e o tempo de retrabalhamento (maturação) (FELIX; HORN FILHO, 2020)

2.1.2.1 Composição mineralógica

A composição mineralógica dos sedimentos em um depósito apresenta estrita relação entre a área fonte (que determina a origem dos sedimentos) e os agentes de transporte envolvidos, que, por sua vez, determinam os mecanismos de deposição atuantes (FELIX; HORN FILHO, 2020).

Em nosso planeta, a maior parte dos minerais é constituída por combinações de dois dos elementos mais abundantes, oxigênio e silício, que formam uma estrutura tetraédrica, característica do grupo majoritário de minerais denominado silicatos, que inclui o quartzo, feldspato, mica, anfibólio, piroxênios, olivina, e uma variedade de argilominerais (EARLE, 2019). Depósitos de sedimentos clásticos compostos desses tipos de minerais são os mais comuns, e são denominados siliclásticos.

Durante os processos intempéricos, a predominância de material detrítico resultante constituinte do manto de intemperismo, e que irá formar os sedimentos clásticos, geralmente associa-se às características de resistência física, estabilidade química e abundância (FELIX; HORN FILHO, 2020).

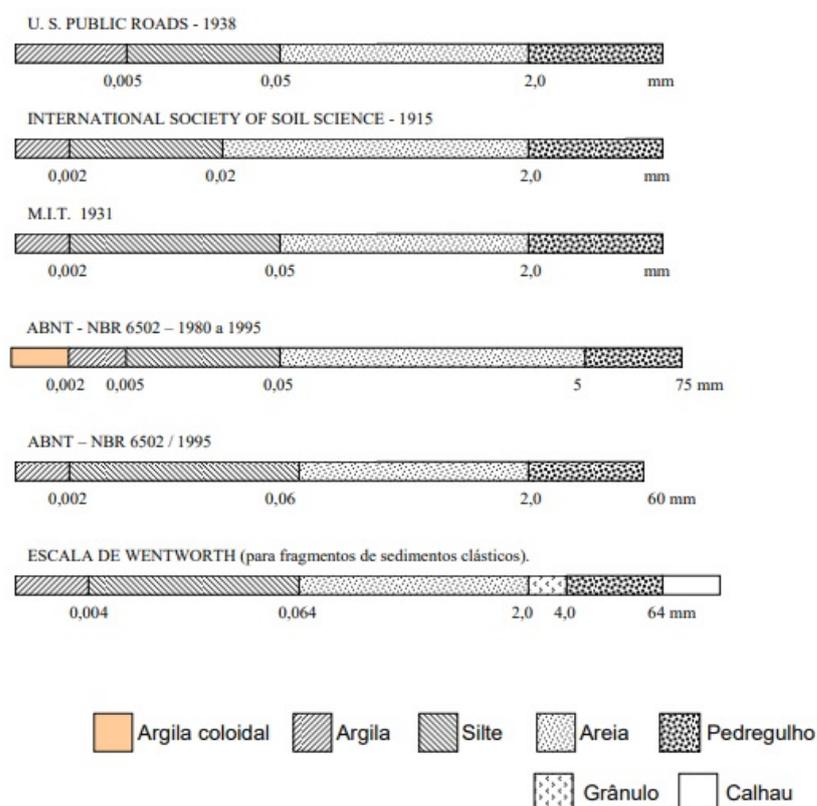
Dessa forma, o quartzo e o feldspato predominam nos sedimentos terrestres, por serem minerais estáveis e abundantes nas rochas fontes da crosta continental. Devido às suas características, minerais de quartzo (entre os mais resistentes ao intemperismo) e alguns argilominerais tendem a formar depósitos sedimentares em continentes e em seus contornos (margens), enquanto que o resto dos argilominerais e outros íons dissolvidos tendem a ser erodidos e transportados até os oceanos e formar camadas de sedimentos no fundo marinho (EARLE, 2019).

2.1.2.2 Tamanho, forma e orientação

O tamanho, a forma, e a orientação dos componentes mineralógicos de um depósito sedimentar constituem algumas das propriedades texturais mais importantes dos sedimentos, que definem a sua micro-geometria (SUGUIO, 2003).

A principal propriedade da matriz sólida de um meio sedimentar é o tamanho dos seus grãos. O tamanho das partículas em sedimentos clásticos, expresso pelo seu diâmetro, constitui uma propriedade textural fundamental (NICHOLS, 2009). O tamanho dos grãos é definido a partir de uma escala granulométrica. Diversas escalas são utilizadas ao redor do mundo, e a Figura 1 apresenta algumas. Neste trabalho, a escala de referência é a ABNT NBR 6502/1995.

Figura 1 – Comparação de escalas granulométricas diversas.



Fonte: CPRM (2022).

A avaliação quantitativa de porcentagem de diferentes tamanhos de grãos em sedimentos clásticos é chamada análise granulométrica. Essa permite caracterizar o diâmetro dos grãos e as proporções relativas em que estes se encontram distribuídos nos sedimentos.

Para sedimentos maiores que o silte essa análise é realizada através do peneiramento, em que submete-se uma amostra de sedimentos a um conjunto de peneiras com malhas de diferentes diâmetros, e o material retido em cada faixa de diâmetros de-

fine o diâmetro do sedimento (NICHOLS, 2009). Sedimentos menores que silte grosso necessitam de outro processo de caracterização, o que geralmente é realizado através de ensaios de sedimentação. Nesses ensaios o diâmetro das partículas é aferido através da relação que diferentes tamanhos têm na velocidade de sedimentação das partículas em um tubo de água (NICHOLS, 2009).

O resultado dessas análises granulométricas são porcentagens que refletem a proporção, geralmente em peso, de cada classe definida na escala granulométrica. Essa informação é mostrada visualmente em um gráfico cumulativo, conforme a Figura 2. O décimo percentil desse gráfico cumulativo define o diâmetro em que 10% dos grãos são menores que esse valor, conhecido como diâmetro efetivo (d_{10}). O diâmetro mediano (d_{50}) define o diâmetro em que 50% dos grãos são menores ou maiores que esse valor.

Segundo Suguio (2003), o estudo detalhado da distribuição dos grãos de sedimentos, denominado granulometria, é importante por quatro razões principais:

1. fornece as bases para uma descrição mais precisa dos sedimentos;
2. a distribuição granulométrica pode ser característica de sedimentos de determinados ambientes deposicionais;
3. pode fornecer informação sobre os processos físicos, por exemplo hidrodinâmicos, atuantes durante a deposição; e
4. a distribuição granulométrica está relacionada a outras propriedades, como a porosidade e a permeabilidade, cujas modificações podem ser estimadas com base nas características granulométricas.

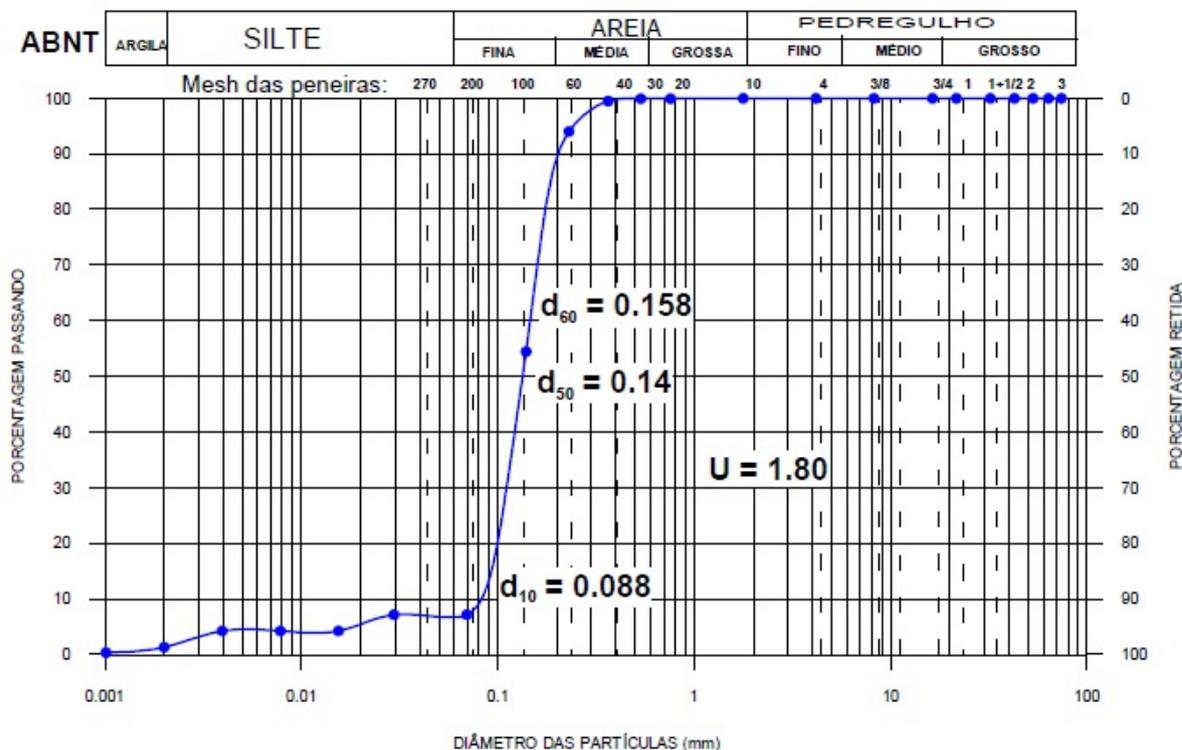
A morfometria dos grãos está relacionada à forma desses, que pode variar entre angular, esférica e arredondada; enquanto que a orientação está associada à disposição espacial dos sedimentos em relação a planos de referência verticais ou horizontais (SUGUIO, 2003). Por exemplo, se os elementos componentes de uma amostra exibirem um certo paralelismo, pode-se dizer que apresenta orientação preferencial.

2.1.2.3 Grau de seleção

O grau de seleção descreve a uniformidade do tamanho dos sedimentos de um depósito particular. O coeficiente de uniformidade (U) é utilizado para definir este grau, e pode ser calculado a partir da relação entre o diâmetro em que 60% dos grãos são menores em peso (d_{60}) e o diâmetro efetivo (d_{10}).

$$U = \frac{d_{60}}{d_{10}} \quad (1)$$

Figura 2 – Exemplo de uma curva granulométrica, com os valores de d_{10} , d_{50} , d_{60} e U.



Fonte: Lage (2005).

Uma amostra com coeficiente U menor que 4 é considerada como bem selecionada, e se este for maior que 6 é considerada mal selecionada (FETTER, 2001)

2.1.2.4 Densidade de partículas (real)

A densidade de partículas (D_p) de um volume ou amostra de sedimento é definida como a relação entre a massa de sedimentos e seu volume. Essa é medida secando-se uma amostra de sedimentos investigada em um forno para retirar toda a umidade, posteriormente medindo-se a sua massa, e finalmente calculando-se o volume de partículas sólidas através do volume de água que é deslocado quando esta amostra é inserida em um recipiente com água (FETTER, 2001).

A densidade de partículas é portanto a relação entre a massa dos sedimentos (após secagem) e o volume ocupado pelas partículas. Quando essa densidade é normalizada pelo peso específico da água pura a 20°C, que equivale a 1 g.cm^{-3} temos a densidade real da amostra (D_{20}).

Os minerais mais comuns, como feldspato e quartzo, apresentam densidade de 2.56 e 2.65 g.cm^{-3} , respectivamente (WOESSNER; POETER, 2020).

2.1.3 Ambientes e sistemas deposicionais

A litologia, estratigrafia e estrutura constituem os controles estruturais mais importantes de depósitos de sedimentos. A **litologia** envolve a diferenciação de materiais presentes em função da composição mineral, da distribuição de tamanho dos grãos e do grau de compactação dos sedimentos ou rochas constituintes do arcabouço geológico.

O estudo da **estratigrafia** está relacionado à descrição das relações geométricas e cronológicas entre os vários elementos constituintes de um sistema geológico, tais como lentes, camadas e formações de origem sedimentar. Já a **estrutura** diz respeito às características geométricas produzidas no sistema geológico por deformação, após deposição ou cristalização, como é o caso das juntas, fraturas, falhas e dobras.

A geomorfologia terrestre condiciona a dinâmica de intemperismo, erosão, transporte e deposição de sedimentos. Ambientes de deposição são regiões da superfície terrestre que apresentam características físicas, químicas e biológicas bem definidas que diferem de áreas adjacentes (SUGUIO, 2003). Caracterizam-se como o âmbito geográfico onde ocorre a deposição.

Sedimentos depositam-se em uma variedade de ambientes, como planícies, depressões, rios, lagos e lagunas, praias, baías e mares. A acumulação de sedimentos em uma localidade é amplamente influenciada por características fisiográficas e condições químicas, de temperatura, e biológicas (NICHOLS, 2009).

Ao estudar depósitos sedimentares em termos de ambientes deposicionais, é comum utilizar o termo fácies. Fácies sedimentares são definidas como corpos de rocha ou sedimentos, tri-dimensionais e com fronteiras definidas, que podem ser distinguidos de outros corpos devido à sua litologia, cor, estrutura sedimentar, geometria, conteúdo fóssil, e outros atributos que ajudem a determinar o seu processo de formação (MALIVA, 2016).

As fácies podem ser subdivididas em sub-fácies secundárias ou agrupadas em associações de fácies. Ao reconhecer associações entre fácies é possível estabelecer combinações dos processos dominantes, pois as características de ambientes deposicionais são determinadas pelos processos presentes na formação, e portanto existe uma associação entre fácies e os ambientes deposicionais (NICHOLS, 2009)

Por exemplo, os sedimentos de superfície do fundo de ambientes subaquáticos refletem a interação entre a energia hidrodinâmica do ambiente, o aporte sedimentar e a natureza do substrato. Sendo assim, constituem informação importante para a compreensão dos processos de sedimentação e identificação de fácies sedimentares.

Independente a localização geográfica, localidades com ambientes deposicionais similares apresentam uma distribuição característica de unidades litológicas (USEPA, 2017).

Sistemas deposicionais podem ser entendidos como um conjunto tridimensional

de litofácies¹ constituído por associações específicas originadas de acordo com os fatores deposicionais atuantes nos ambientes de sedimentação de uma mesma província fisiográfica ou geomorfológica (FELIX; HORN FILHO, 2020). Podem ser divididos de forma geral em continentais, transicionais ou marinhos.

2.2 FUNDAMENTOS HIDROGEOLÓGICOS

2.2.1 Propriedades hidrogeológicas

2.2.1.1 Porosidade

Os materiais geológicos que compõem a crosta terrestre não são estruturas inteiramente sólidas, mas possuem espaços vazios entre os materiais sólidos (cristais, grãos e sedimentos) que os compõem, permitindo a infiltração e movimentação de gases e líquidos. São portanto meios multifásicos, i.e., apresentam mais de uma fase em sua estrutura. Essa propriedade é conhecida como porosidade, e materiais geológicos, portanto, são meios porosos.

Os meios porosos mais importantes na crosta terrestre são os ambientes sedimentares. Sedimentos inconsolidados e rochas sedimentares correspondem a uma pequena parcela da espessura da crosta terrestre, mas cobrem mais de 80% da superfície terrestre, e armazenam em seus poros as maiores reservas de fluidos que a sociedade moderna depende, como as águas subterrâneas, o petróleo e o gás natural (KLEIN; PHILPOTTS, 2012).

A **porosidade total** (n) de um meio ou material, é definida como a relação entre o volume de espaços vazios (V_V) pelo volume total (V_t), conforme a Equação (2) (FREEZE; CHERRY, 1979). O volume total do meio é representado pela soma do volume de sólidos (V_S) como o volume de vazios, de maneira que $V_S + V_V = V_t$. Na Figura 3 estão representados os tipos diferentes de porosidade, assim como uma ilustração dos conceitos de volume total (V_t) e de vazios (V_V).

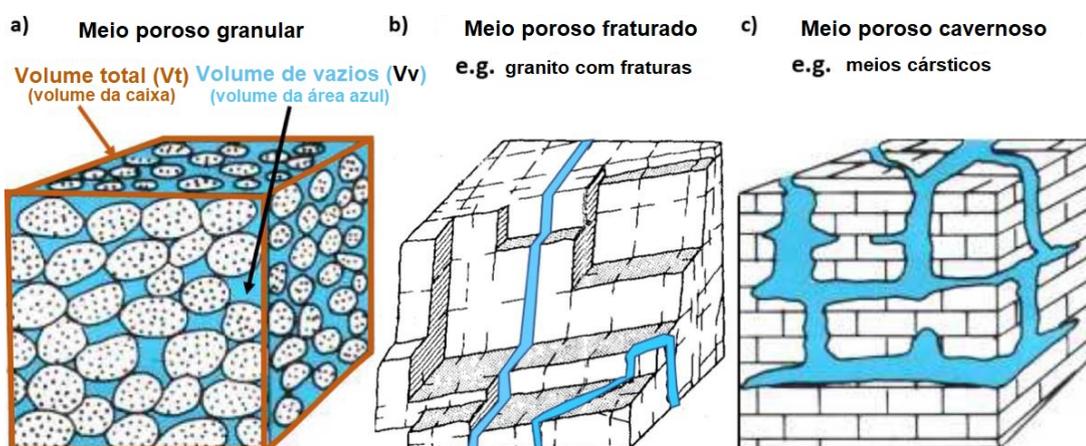
$$n = \frac{V_V}{V_t} \quad (2)$$

A porosidade é uma propriedade natural que apresenta origens diferentes. Rochas formadas pela cristalização do magma, ou materiais inconsolidados ou consolidados formados por deposição de sedimentos em rios, lagos e oceanos, contém assim que são formados uma porosidade entre os grãos, cristais e partículas que os formam, conhecida como **porosidade primária**. Representa tanto o espaço intergranular formado entre grãos, partículas e sedimentos, como também planos de estratificação² (WOESSNER; POETER, 2020).

¹ Fácies definidas com base apenas na litologia

² Superfície de descontinuidade física ou de passagem textural, estrutural ou química, separando estratos ou camadas geológicas

Figura 3 – Água ocupando os espaços vazios de materiais terrestres em: a) espaço intergranular de partículas de sedimentos; b) fraturas de rochas; c) cavernas e cavidades de rochas carbonáticas.



Fonte: Freeze e Cherry (1979).

Por sua natureza, sedimentos inconsolidados apresentam considerável porosidade primária. Rochas cristalinas, as ígneas e metamórficas que formam o embasamento, sob certo ponto de vista, também apresentam porosidade primária. Mas devido às propriedades de seus grãos e cristais, e extrema coesão entre esses, reduzem ao mínimo o volume vazio intergranular.

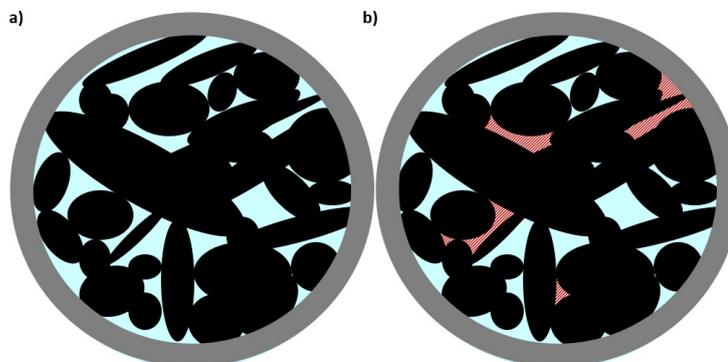
A porosidade primária no entanto pode ser alterada por processos que ocorrem após a formação de materiais consolidados ou inconsolidados. Outros processos físicos e químicos alteram a distribuição de espaços vazios em um material geológico, como: deformação a partir de processos mecânicos podem formar fraturas e falhas em rochas; processos diagenéticos e intempéricos, como compactação de camadas de sedimentos em função do peso adicional de novas camadas depositadas acima, e cimentação e dissolução de sedimento e minerais. Esses processos são responsáveis pela formação da **porosidade secundária**

Os poros de um meio geológico podem estar conectados ou desconectados, apresentarem uma regularidade na distribuição espacial ou serem totalmente aleatórios, a apresentar características geométricas (planar, celular, fraturas expandidas, etc...) que dependem totalmente da textura e da estrutura da rocha, solo ou pacote de sedimentos (DASSARGUES, 2018).

A porosidade intergranular é determinada principalmente por propriedades físicas das partículas que compõem o meio, como sua uniformidade (grau de seleção), formato e o empacotamento dos grãos. O empacotamento refere-se à maneira em que os grãos estão acomodados. Quanto mais soltos e mais uniformes os grãos, maiores os valores de porosidade (WOESSNER; POETER, 2020)

Em geral, as rochas têm porosidades mais baixas do que os solos; cascalhos, areias e siltes, que são constituídos por partículas angulares e arredondadas, têm

Figura 4 – Relação entre porosidade total e efetiva, em que o volume total da amostra, V_T , é representado pela área dentro do círculo cinza. a) A água ocupa todos os espaços porosos (espaços azuis, V_V); b) alguns poros estão desconectados dos outros poros (espaços em vermelho) e as águas subterrâneas acessam apenas os espaços porosos conectados (espaços azuis, V_i).



Fonte: Woessner e Poeter (2020).

porosidades mais baixas do que solos ricos em minerais plácóides de argila; (FREEZE; CHERRY, 1979). Depósitos de argila em geral apresentam grande porosidade, pois o formato dos argilominerais em conjunto com sua carga negativa resultam em muitos poros de pequeno tamanho, mas que na forma agregada resultam em um grande volume poroso total. Como consequência, a porosidade total de argilas pode variar de 40% a 70% (WOESSNER; POETER, 2020)

2.2.1.2 Porosidade efetiva

Um poro individual intergranular é formado pelo espaço vazio entre três ou mais grãos minerais. Quando poros adjacentes estão interconectados, o termo canal, ou garganta, dos poros é utilizado para descrever o caminho que os conecta para formar uma rede tridimensional que permite o fluxo de fluidos pelo meio poroso (PAYNE; QUINNAN; POTTER, 2008). A garganta dos poros é tipicamente menor do que os poros individuais (FETTER, 2001).

Caracteriza-se a porosidade efetiva (n_e) de um meio como a parcela do volume total desse que está disponível para o movimento de fluidos, ou seja, que é drenável, ou que possui volume poroso interconectado (V_i) (FETTER, 2001).

$$n_e = \frac{V_i}{V_t} \quad (3)$$

A porosidade efetiva exclui os poros isolados e os espaços nos poros ocupados por água adsorvida em argilominerais e outros grãos (MALIVA, 2016)

A porosidade efetiva pode ser igual, ou menor, que a porosidade total de uma amostra. Na maioria dos casos, valores de porosidade total reportados para materiais granulares ainda não cimentados e rochas com poros e fraturas bem conectados (e.g.

arenitos) podem ser utilizados para representar a porosidade efetiva (WOESSNER; POETER, 2020).

2.2.1.3 Permeabilidade

As propriedades dos materiais terrestres presentes controlam o armazenamento e o movimentos de fluidos em subsuperfície. A capacidade de armazenamento está relacionada à porosidade. Já a capacidade de transmissão está associada à permeabilidade intrínseca do material, entendida como a facilidade com que a água consegue se movimentar pelos poros desses materiais, sem perder energia.

A permeabilidade de um meio é controlada pelas características de sua porosidade, que inclui a porosidade total, a porosidade efetiva, a distribuição do tamanho dos poros, e a distribuição do tamanho das gargantas do meio poroso (MALIVA, 2016).

Representa a magnitude da variação dos diâmetros dos poros interconectados, assim como o grau de ramificações e reconexões dos canais porosos considerando-se um trecho linear de fluxo, i.e. o grau de tortuosidade (WOESSNER; POETER, 2020). A tortuosidade é uma medida da distância real percorrida por um fluido dividida pela menor distância entre dois pontos do meio poroso.

Existe alguma relação entre porosidade e permeabilidade, de forma que muitas vezes quanto maior a porosidade total maior a permeabilidade. Apesar desta associação, a permeabilidade está mais associada ao tamanho das gargantas do meio poroso, assim como a tortuosidade dos caminhos de fluxo intergranulares, do que pelo tamanho dos poros em si (WOESSNER; POETER, 2020)

Em geral, quanto maior o diâmetro dos poros e quanto mais eficientemente estão conectados, menor a tortuosidade e maior a permeabilidade. Em contraste, para um material poroso com poros de pequeno diâmetro e muitos poros interconectados de maneira sinuosa, maior a tortuosidade e menor a permeabilidade intrínseca. (WOESSNER; POETER, 2020)

Por exemplo, poros pequenos são abundantes nos materiais argilosos, e devido à sua configuração, apresentam alta porosidade. Entretanto, argilominerais possuem carga oposta à da água, uma molécula polar, e a força de atração molecular causa a adsorção de moléculas de água nos pequenos e numerosos poros desses materiais (DASSARGUES, 2018).

Além disso, a tortuosidade dos caminhos nos poros de materiais argilosos significa mais fricção na circulação da água, o que resulta em permeabilidade menor do que um material arenoso com a mesma porosidade mas canais menos tortuosos e poros maiores. Dessa forma, apresentam baixa permeabilidade, i.e. a água se movimenta com bastante resistência nesses materiais.

De fato, a relação entre porosidade e permeabilidade varia muito de unidade geológica para outra, pois os poros podem apresentar diversos tamanhos, graus de

interconexão, e origens (MALIVA, 2016). Uma relação geral é que o tamanho dos poros é proporcional ao tamanho dos grãos, e portanto, a permeabilidade seria maior para faixas granulométricas maiores. Dessa forma, frequentemente a distribuição granulométrica é utilizada para estimar permeabilidade (DASSARGUES, 2018).

2.2.2 Águas subterrâneas, aquíferos e quantificação de fluxo e transporte

A água proveniente das precipitações atmosféricas infiltra os materiais porosos da superfície terrestre e descende em função da força gravitacional. A infiltração é favorecida pela presença de materiais porosos permeáveis, como solos, sedimentos arenosos, ou então rochas expostas muito fraturadas ou porosas, que também permitem a infiltração de águas superficiais; materiais argilosos e rochas cristalinas pouco fraturadas, como rochas ígneas intrusivas (formadas abaixo da superfície) e rochas metamórficas como granitos e gnaisses, são desfavoráveis à infiltração (TEIXEIRA *et al.*, 2003)

Quando há água fluindo por um meio poroso natural, parcela da água fica retida na superfície das partículas sólidas, devido a forças de atração molecular, assim como nos poros, em função do fenômeno de tensão superficial. A tensão superficial produz efeito aprisionando a água nas menores gargantas dos poros, em um fenômeno conhecido como capilaridade. A água portanto pode estar móvel ou imóvel em subsuperfície, de acordo com a interação dessas diferentes forças. A água adsorvida fica praticamente imobilizada, enquanto que a água capilar apresenta baixa mobilidade.

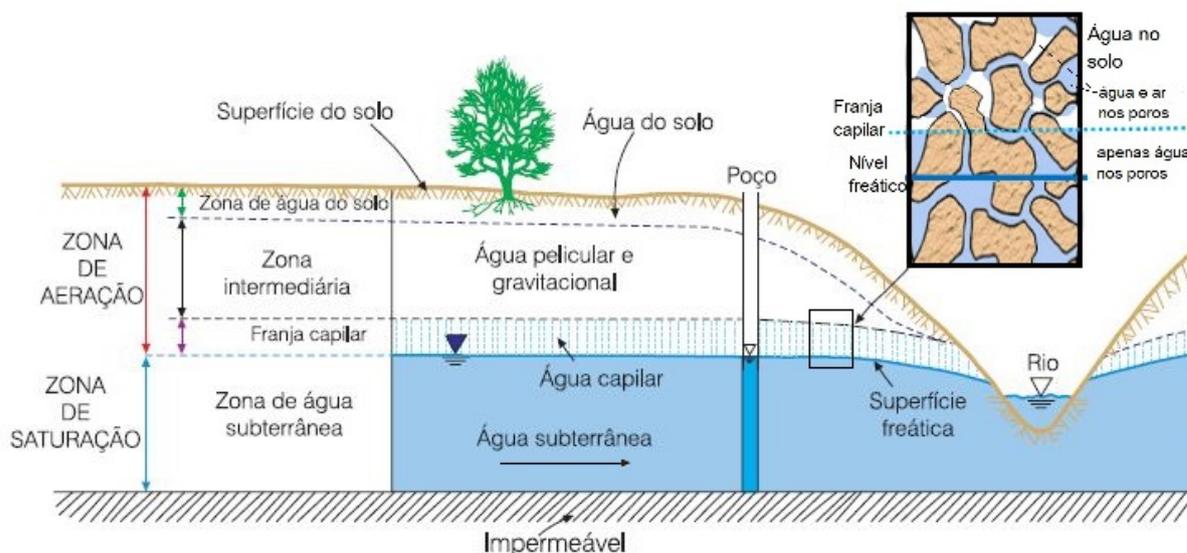
Parte da água que infiltra fica retida, portanto, mas outra parcela permanece móvel. A água móvel descende até atingir profundidades em que as rochas não admitem mais poros devido à pressão da pilha de rochas e sedimentos sobrejacentes, podendo atingir um máximo de 10.000m, dependendo da situação topográfica e do tipo de rocha (TEIXEIRA *et al.*, 2003). Essa profundidade determina o limite inferior da zona em subsuperfície em que todos os poros dos materiais geológicos encontram-se ocupados por água, conhecida como **zona saturada**.

A parte superior da zona saturada compreende o nível freático. A água subterrânea é a água subsuperficial que encontra-se abaixo do nível freático em solos e formações geológicas que estão totalmente saturados (FREEZE; CHERRY, 1979). O nível freático é definido como o lugar geométrico dos pontos em que a água se encontra submetida à pressão atmosférica (MANOEL FILHO, 2008).

A parte do meio poroso pela qual a água infiltrou, e que parte ficou aprisionada pelas forças adesivas e capilares, é conhecida como zona de aeração.

Entre a superfície freática e a zona não saturada encontra-se ainda a franja capilar, em que a água da zona saturada ascende devido ao fenômeno da capilaridade das partículas nos poros do solo. Dessa forma esta zona apresenta um limite superior irregular, com maior ascensão da água onde os poros são menores. O limite inferior

Figura 5 – Perfil vertical da distribuição da água em subsuperfície



Fonte: Adaptado de Manoel Filho (2008) e Woessner e Poeter (2020)

pode ser determinado onde a saturação dos poros é de no mínimo 75% de água (MANOEL FILHO, 2008).

As unidades geológicas que armazenam e transmitem águas subterrâneas, através de seus poros ou fraturas, são denominadas aquíferos. Esses podem ser classificados de acordo com sua localização geográfica (aquíferos costeiros ou continentais/interiores); com a pressão sobre a água (livres/freáticos ou confinados/artesianos); ou também com a geologia do material saturado (porosos, fraturados e cársticos) (FREEZE; CHERRY, 1979).

2.2.2.1 Fluxo de águas em subsuperfície

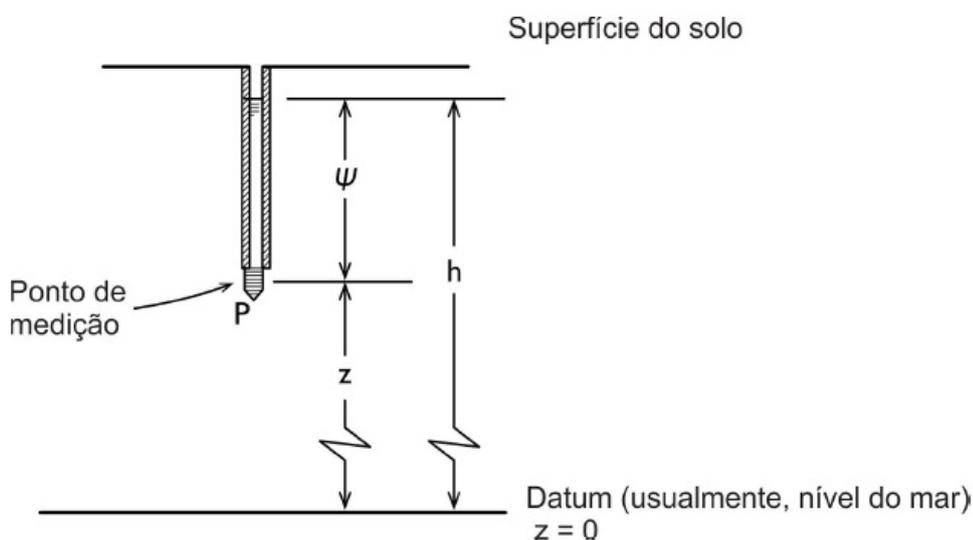
O fluxo de fluidos através de meios porosos é um processo mecânico, de forma que as forças que impulsionam o fluido adiante devem superar as forças de atrito criadas entre o fluido em movimento e os grãos do meio poroso (FREEZE; CHERRY, 1979).

As águas subterrâneas movem-se nos meios geológicos guiadas pela força gravitacional. Além dessa força, no entanto, esse movimento é também realizado devido à diferença de pressão entre pontos, exercida pela coluna de água sobrejacente aos pontos e também pelas rochas adjacentes (TEIXEIRA *et al.*, 2003).

Essa diferença de pressão é denominada gradiente de potencial hidráulico, que promove o movimento das águas a partir de pontos com alto potencial, como nas cristas do nível freático, para zonas de baixo potencial, como nos fundos de vales.

Um potencial de fluido foi definido por Hubbert (1940) como uma quantidade física capaz de medir cada ponto de um sistema de fluxo, cujas propriedades são tais

Figura 6 – Carga hidráulica h , carga de pressão ψ e carga de elevação z para um piezômetro.



Fonte: Freeze e Cherry (1979).

que o fluxo sempre ocorre a partir de regiões em que a quantidade tem valores maiores para aquelas em que tem valores menores, independentemente da direção no espaço. Em um determinado ponto do fluido, representa a energia mecânica por unidade de massa.

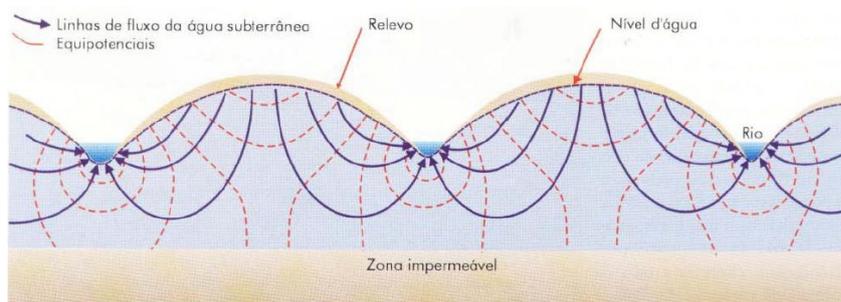
O potencial representa o nível de energia em que a água se encontra em um determinado ponto, e é uma soma das energias potencial de elevação (em relação a um datum de referência), da carga de pressão exercida pela água nos entornos e da carga cinética de velocidade (MANOEL FILHO, 2008). Como águas subterrâneas em geral se movem lentamente, a carga cinética é ignorada na quantificação.

O potencial é geralmente representado através de sua grandeza equivalente carga hidráulica, que é a energia por unidade de peso, e inclui a somatória da componente da carga de elevação (z), medida em relação a um datum de referência, com a carga de pressão da coluna d'água (ψ). A carga hidráulica pode ser medida em qualquer parte do aquífero, e portanto, dependente das três dimensões. Sua medição é realizada a partir de piezômetros.

A Figura 6 mostra os conceitos apresentados em relação à medição da carga hidráulica. A altura do nível da água no piezômetro corresponde portanto ao nível potenciométrico da água no ponto considerado; em três dimensões, o conjunto de vários níveis potenciométricos define uma superfície potenciométrica da água.

Em um sistema de fluxo de um aquífero, devido à perda de carga hidráulica ao longo do fluxo, há um rebaixamento do nível d'água no poço em relação ao nível d'água da zona de recarga. Este desnível cresce conforme aumenta a distância da

Figura 7 – Sistema de fluxo de águas subterrâneas com linhas de fluxo e linhas equipotenciais.



Fonte: Teixeira *et al.* (2003).

área de recarga. Na Figura 7, as linhas equipotenciais representam todos os pontos do sistema de fluxo em que a carga hidráulica (ou potencial) são iguais.

2.2.2.2 Lei de Darcy e condutividade hidráulica

O fluxo de fluidos em meios porosos saturados é quantificado através de uma equação empírica denominada Lei de Darcy. Essa é resultado dos trabalhos do engenheiro francês Henry Darcy, que realizou experimentos de laboratório para observar o fluxo de água através de meios arenosos (DARCY, 1856). A Figura 8 apresenta um esquema representando aproximadamente o experimento. Darcy pode observar que a vazão escoada por uma amostra de areia (volume por unidade de tempo) era proporcional à seção transversal (A) do filtro; à diferença de cargas hidráulicas ($h_1 - h_2 = dh$) entre os piezômetros 1 e 2; e inversamente proporcional à distância (L) entre os piezômetros 1 e 2 (FREEZE; CHERRY, 1979).

Segue a Lei de Darcy para uma dimensão, apresentada na forma de equação diferencial:

$$Q = -KA \frac{dh}{dL} \quad (4)$$

na qual:

Q : vazão ($L^3 T^{-1}$);

K : condutividade hidráulica (LT^{-1});

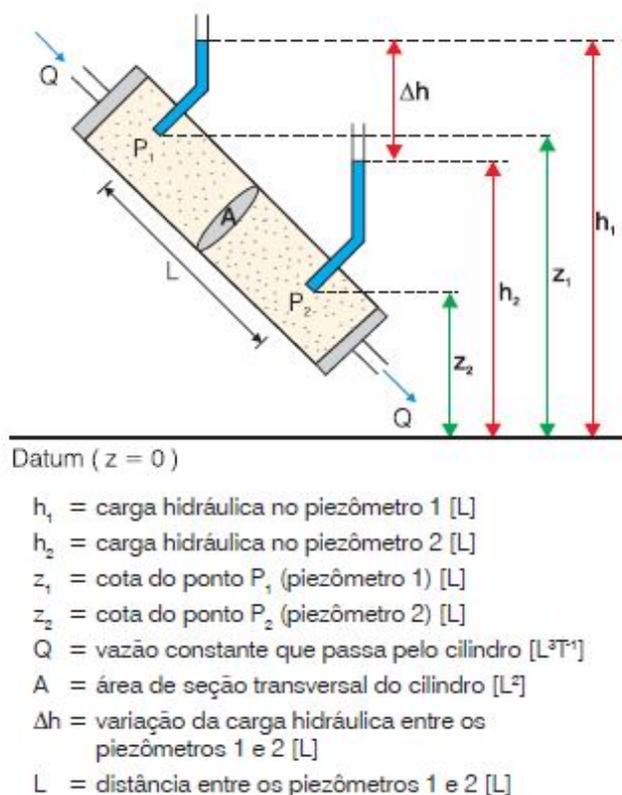
$\frac{dh}{dL}$: gradiente hidráulico (LL^{-1});

A : área da seção transversal ao escoamento (L^2).

Essa equação também pode ser expressa em termos da vazão específica (q), também denominada velocidade de Darcy, que é a vazão (Q) dividida pela área da seção do fluxo (A):

$$q = -K \frac{dh}{dL} \quad (5)$$

Figura 8 – Esquema do experimento de Darcy



Fonte: Cabral (2008)

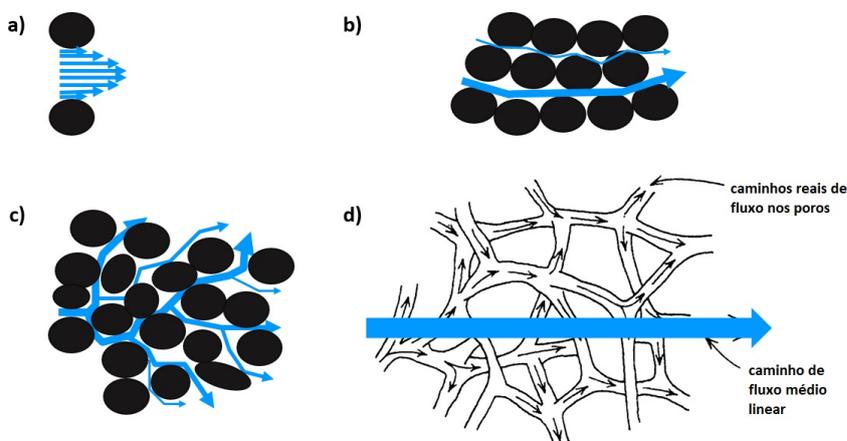
A velocidade de Darcy é uma velocidade fictícia, pois representa de fato o volume de água que passa por uma seção transversal unitária. A velocidade linear média da água nos poros (v), para uma determinada seção transversal, pode ser calculada a partir da Lei de Darcy, e é uma relação entre a vazão específica (q) e a porosidade efetiva do meio (n_e), representada pela seguinte equação:

$$v = \frac{q}{n_e} \quad (6)$$

A velocidade linear média da água é uma grandeza vetorial, mas que não representa a velocidade média das partículas de água que viajam através dos espaços porosos. As verdadeiras velocidades microscópicas são geralmente maiores que v , porque as partículas de água devem viajar pelos caminhos tortuosos que são mais longos do que o caminho linearizado representado por essa medida (WOESSNER; POETER, 2020).

Essa velocidade representa de fato uma aproximação da média da verdadeira velocidade na seção transversal identificada (MOLZ, 2015). Como a porosidade efetiva geralmente varia entre 0.1 e 0.4, a velocidade linear média é em geral uma ordem de magnitude maior que a vazão específica. A Figura 9 mostra um modelo conceitual das verdadeiras velocidades microscópicas nos canais porosos, assim como representa

Figura 9 – Modelo conceitual das micro-velocidades na escala dos poros (a, b, c), e a representação da velocidade linear média (d)



Fonte: Woessner e Poeter (2020)

o conceito de velocidade linear média. As velocidades microscópicas são na prática impossíveis de serem determinadas (DEVLIN, 2020).

A constante empírica condutividade hidráulica (K) está relacionada ao conceito de permeabilidade, e é função da permeabilidade intrínseca, caracterizada como intrínseca às características do meio poroso e independente do fluido; enquanto que a condutividade leva em consideração também as propriedades do fluido considerado, nesse caso a água (FREEZE; CHERRY, 1979). A condutividade hidráulica pode ser obtida ao se considerar a permeabilidade do meio e as características do fluido a partir da seguinte equação:

$$K = \frac{k \cdot \rho \cdot g}{\mu} \quad (7)$$

na qual

k : permeabilidade intrínseca do meio (L^2);

ρ : densidade do fluido (ML^{-3});

g : aceleração da gravidade (LT^{-2});

μ : viscosidade dinâmica do fluido ($MT^{-1}L^{-1}$).

A condutividade hidráulica de um meio poroso natural pode ser medida a partir de diversas abordagens. Essas abordagens podem ser agrupadas em duas categorias gerais, baseado na maneira em que K é obtido (BUTLER, 2005):

- Métodos hidráulicos:** envolvem injeção ou extração de água ou outros fluidos com a consequente medição da resposta do diferencial de pressão, e;
- Métodos indiretos:** baseiam-se em relações empíricas, muitas vezes específicas a um local, entre K e outras propriedades da formação mais facilmente

obtidas (e.g. resistência a corrente elétrica)

Os primeiros podem ser diretamente relacionados à definição matemática de K , através da Lei de Darcy, e por isso as estimativas de K obtidas por esse método são geralmente consideradas mais confiáveis do que as obtidas por métodos indiretos (BUTLER, 2005). Métodos hidráulicos incluem testes de bombeamento, *slug tests*, e permeâmetros. Entre os indiretos inclui-se os métodos empíricos que relacionam propriedades dos sedimentos com valores de K .

Podemos classificar os métodos de caracterização de K de outras maneiras também. Por exemplo, podemos dividi-los entre os que se baseiam em dados de campo (testes de bombeamento e *slug tests*) e os baseados em medições de amostras em laboratório (permeâmetros). Os últimos geralmente incluem volumes menores, como testemunhos de sondagens e amostras de solo, e apresentam mais incerteza considerando quão representativa a amostra é das condições atuais de campo (TODD; MAYS, 2004).

Permeâmetros são equipamentos que se assemelham ao experimento de Darcy, enquanto que um teste de *slug* envolve a aplicação de uma variação repentina do nível d'água de um poço. Isso pode ser realizado através da adição ou remoção de um objeto sólido ou de um volume conhecido de água, que tem como consequência uma variação brusca no nível d'água. Mede-se ao longo do tempo a variação do nível d'água até o retorno das condições estáticas iniciais.

2.2.2.3 Transporte de solutos e equação de advecção-dispersão

Um contaminante em meio subterrâneo, ao se dissolver no aquífero, passa a se submeter a diferentes processos que causam seu transporte e sua transformação. Seu espalhamento é governado por processos hidrodinâmicos, que são resultado do movimento das águas subterrâneas, os quais não causam redução da massa do contaminante. Para solutos sujeitos a processos reativos, como o benzeno, outros fenômenos de transformação afetam o transporte e espalhamento desse no meio poroso. Incluem processos abióticos e bióticos, os quais são responsáveis por reduzir a massa dissolvida do contaminante.

Processos hidrodinâmicos incluem a advecção e a dispersão hidrodinâmica, e essa última inclui os processos de difusão e dispersão mecânica. Os fenômenos abióticos incluem as reações químicas, o decaimento radiativo, hidrólise e dissolução, sorção e volatilização. Os fenômenos biológicos referem-se ao processo de degradação e transformação dos contaminantes mediado por microrganismos e/ou plantas, ou melhor, a biodegradação. Nesta seção serão discutidos apenas os processos hidrodinâmicos, e derivação da equação de advecção-dispersão a partir desses.

O mecanismo mais importante no transporte de solutos em aquíferos é a advecção. Essa representa o transporte realizado devido ao fluxo das águas subterrâneas

nos poros da matriz do solo. O fluxo de massa de um soluto devido à advecção é proporcional à velocidade linear média da água (Equação (6)) e à concentração do soluto. A Equação (8) representa então a variação da concentração de um soluto (C) em função do tempo, considerando-se um transporte puramente advectivo em uma dimensão.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (8)$$

Considera-se que na advecção não há alteração na concentração do soluto ao longo da pluma contaminante. Há uma tendência, no entanto, para os solutos se espalharem para fora do caminho que seria esperado seguir de acordo com a hidráulica advectiva do sistema de fluxo (FREEZE; CHERRY, 1979). Esse fenômeno foi nomeado como dispersão hidrodinâmica, que causa a diluição do soluto e portanto a redução de concentração ao longo da pluma.

A dispersão hidrodinâmica diz respeito a todos os processos responsáveis pelo espalhamento dos contaminantes ao redor do centro de massa da pluma, causando uma mistura irreversível com a água subterrânea não contaminada, ocorrendo diluição dos contaminantes e expansão da pluma para zona além das que seriam impactadas somente pela advecção. Inclui os processos de dispersão mecânica e a difusão molecular.

A difusão molecular refere-se ao processo em que o soluto move-se, em função de um gradiente de concentração, de uma zona de alta concentração para uma de baixa, e é um resultado da alta energia das moléculas concentradas que passam a se repelir. Este processo acontece mesmo em um fluido imóvel. A difusão de um soluto pela água é descrita pelas leis de Fick, que descreve o fluxo de massa de um soluto em estado estacionário, e unidirecionalmente para meios porosos é descrita pela seguinte equação:

$$F = -D^* \frac{dC}{dx} \quad (9)$$

na qual

F : fluxo de massa do soluto por unidade de área e de tempo ($ML^{-2}T^{-1}$);

D^* : coeficiente de difusão molecular efetivo (L^2T^{-1});

C : concentração de soluto (ML^{-3});

dC/dx : gradiente de concentração (ML^{-4}).

A dispersão mecânica é entendida como a mistura causada no fluido devido a variações a nível dos poros na distribuição de velocidades do fluido. Essas variações incluem: diferenças de velocidade devido a fricção da superfície dos grãos no fluido (Figura 9a); diferenças de velocidade em função do tamanho dos poros, canais e

gargantas do meio poroso (Figura 9b); variações transversais das velocidades relativo à direção principal de fluxo devido a tortuosidade dos canais dos poros (Figura 9c).

A dispersão mecânica é dependente do campo de velocidades a nível de escala microscópica dos poros do meio, e portanto difícil de ser caracterizada. É normalmente aproximada como proporcional à velocidade média linear da água nos poros (v_x), e os fatores de proporcionalidade são denominados dispersividade longitudinal (α_L) e transversal (α_T). A dispersão mecânica predominante nos processos de transporte é a longitudinal (FREEZE; CHERRY, 1979). A dispersão mecânica é expressa de forma similar à difusão molecular.

Os processos de difusão e dispersão são completamente inter-relacionados, de maneira que as diferentes velocidades e trajetos percorridos pela fase dissolvida através da dispersão mecânica gera gradientes de concentração que induzem a difusão molecular. O único caso em que apenas um dos processos ocorre é quando o fluido está parado, no caso a difusão. Em baixas velocidades de fluxo subterrâneo o transporte difusivo é dominante, enquanto que a partir de certa faixa de transição, em velocidades maiores a dispersão mecânica, conjuntamente com o transporte advectivo, é predominante (SETHI; DI MOLFETTA, 2019). Devido à inter-relação entre os processos os dois são comumente associados a um coeficiente único para cada direção, os coeficientes de dispersão hidrodinâmica longitudinal (D_L) e transversal (D_T), representados nas seguintes equações, ao considerar-se i os eixos coordenados y e z :

$$D_L = \alpha_L v_x + D^* \quad (10)$$

$$D_T = \alpha_T v_i + D^* \quad (11)$$

Os coeficientes de dispersão são substituídos no coeficiente de difusão da segunda Lei de Fick para encontrar o fluxo de massa do soluto, e a dispersão como um todo é tratada, dessa forma, em uma analogia ao processo difusivo. As equações a seguir representa a dispersão hidrodinâmica para as três dimensões:

$$F_x = -n_e D_L \frac{\partial C}{\partial x} \quad (12)$$

$$F_y = -n_e D_T \frac{\partial C}{\partial y} \quad (13)$$

$$F_z = -n_e D_T \frac{\partial C}{\partial z} \quad (14)$$

A natureza da dispersão hidrodinâmica apresenta, no entanto, variações em função da escala da distância e tempo do transporte. Diversos estudos observaram que quanto maior a escala de distância percorrida pela pluma de solutos, maior o valor

Figura 10 – Modelo conceitual da migração de plumas de contaminação e dos processos hidrodinâmicos a partir de uma fonte tipo pulso, instantânea (a) e de uma fonte contínua (b). Maior densidade de pontos representa maior concentração na fase dissolvida, e o formato da pluma presume meio homogêneo.



Fonte: Adaptado de Fetter, Boving e Kreamer (2017).

do coeficiente de dispersividade longitudinal (α_L) que permite uma interpretação de dados experimentais (FETTER; BOVING; KREAMER, 2017). Dessa forma, coeficientes medidos em laboratório na escala de bancada não se aplicam à escala de campo da maioria dos problemas reais. Esse comportamento dependente das escalas espacial e temporal é comumente denominado não-Fickiano, ou pré-assintótico, pois a dispersão não pode ser entendida através da analogia à Lei de Fick, que corresponde à abordagem tradicional, conforme visualizado na Figura 10 (SUDICKY; ILLMAN, 2011). Fundamentalmente, em qualquer fluxo e transporte, só existe a advecção e a difusão molecular (MOLZ, 2015). Se fosse possível reproduzir o verdadeiro campo de velocidades de meios poroso, seria necessário apenas a consideração da difusão para quantificar o transporte de solutos.

A equação de advecção-dispersão, que governa o transporte de solutos em meios porosos, é apresentada na Equação (15):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (15)$$

2.2.2.4 Volume elementar representativo

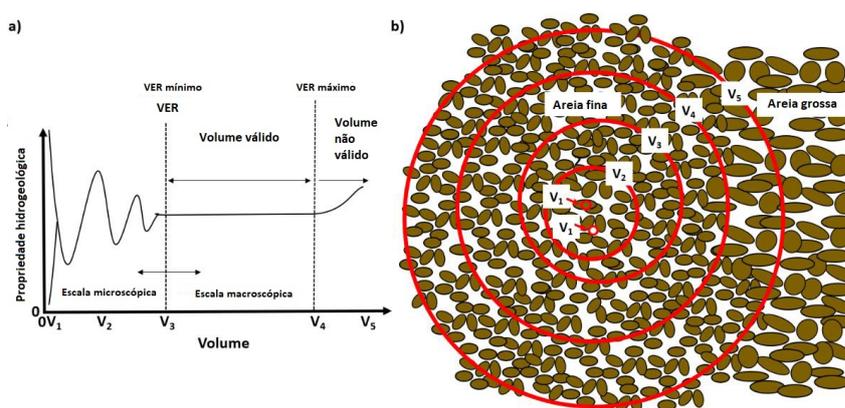
As propriedades dos materiais terrestres podem ser caracterizadas em escala microscópica, em que o comportamento dos fluidos poderia ser determinado baseado em medições do tamanho e número de diâmetros de poros individuais, rugosidade da superfície dos sólidos, formato dos canais porosos e grau de interconexão entre eles. Entretanto, essas medições em pequena escala não seriam práticas de serem realizadas e nem úteis, pois a maioria das investigações hidrogeológicas foca em condições que encobrem volumes de material terrestre que são muito maiores que poros.

A lei de Darcy e a equação de advecção-dispersão assumem que os processos são válidos para um volume definido. Tanto a lei de Darcy, que fundamenta o cálculo da advecção de um soluto, e como a lei de Fick, que baseia a formulação clássica da

dispersão de solutos em meios porosos, são originadas dos trabalhos de Fourier em relação ao transporte de calor em meios homogêneos (SANCHEZ-VILA; GUADAGNINI; CARRERA, 2006). Dessa forma, assumem como premissa um meio homogêneo para as propriedades e parâmetros que integram essas equações.

A elaboração de modelos matemáticos requer a substituição do conjunto real de grãos que constituem um meio poroso por um meio contínuo representativo em escala macroscópica, em vez de escala microscópica. Isso significa que os processos hidrodinâmicos e as propriedades hidrogeológicas são definidos para um volume elementar representativo (VER), o qual representa a porção do espaço em que se combina a Lei de Darcy com a equação da continuidade para elaboração das equações governantes do fluxo, considerando-se a conservação de massa da água (PINDER; CELIA, 2006). O VER é definido como um volume em que propriedades geométricas médias macroscópicas podem ser associadas a todos os pontos nesse domínio; é pequeno em relação às dimensões da área considerada no problema, mas grande relativo à média do volume a nível microscópico dos poros (BEAR; CHENG, 2010). Esse volume deve ser grande o suficiente para não refletir variações em microescala, mas pequeno o suficiente para refletir a variabilidade local macroscópica. A Figura 11 apresenta uma representação gráfica para a média de uma propriedade hidrogeológica, como a porosidade ou a condutividade hidráulica, em função do volume em um meio poroso genérico, destacando a região em que se atribui o VER de acordo com a definição fornecida. O VER mínimo corresponde à definição de Bear e Cheng (2010), enquanto que o máximo delimita a transição de volume a partir do qual heterogeneidades do meio acabam afetando o valor.

Figura 11 – Esquema de um volume representativo de um meio poroso.



Fonte: Woessner e Poeter (2020).

O VER portanto começa a não ser válido a partir do volume máximo mostrado na Figura 11, devido às heterogeneidades do meio. Em teoria, entretanto, se um volume é grande o suficiente para incorporar todas as heterogeneidades presentes em um domínio, não seria necessário definir geometrias dessas heterogeneidades

para quantificar os processos nesse domínio, e poderia-se considerar um volume macroscópico homogêneo em seu lugar (DASSARGUES, 2018).

2.2.3 Heterogeneidades de aquíferos

Heterogeneidade é variação espacial de propriedades hidráulicas de transporte e geoquímicas em um sistema aquífero. Segundo Maliva (2016), a heterogeneidade de aquíferos pode ser causada por:

- variações na composição dos sedimentos e da textura, como tamanho dos grãos, formato, e grau de seleção;
- composição dos sedimentos;
- ambiente deposicional (nível de fácies e sub-fácies);
- diagênese;
- processos geológicos estruturais;

A maioria dos depósitos sedimentares são heterogêneos, com variações nas distribuições e concentrações de tamanhos dos sedimentos e de sua composição que ocorrem em múltiplas escalas (NEUMAN; DI FEDERICO, 2003). Depósitos sedimentares apresentam heterogeneidades desde microscópicas até megascópicas, as quais resultam da variabilidade temporal e espacial dos processos que controlam desde a geração, transporte e deposição de sedimentos, nas escalas de grão e de fácies, até o preenchimento de bacias sedimentares, na escala da arquitetura deposicional (SAWAKUCHI; GIANNINI, 2006). Estes processos podem ser variáveis e descontínuos no espaço e no tempo.

Com exceção de ambientes eólicos, sistemas deposicionais clásticos depositam grãos com tamanhos que incluem argila, silte, areia, e pedregulhos na mesma formação (FOGG; ZHANG, 2016). O arranjo espacial e a geometria dessas unidades texturais depende do sistema deposicional particular (fluvial, deltaico, costa, marinho, lagunar, etc) em que as partículas de sedimentos são erodidas, transportadas e depositadas.

A faixa de texturas origina-se do fato de que a velocidade da água em ambientes deposicionais variam de muito devagar, como em planícies de inundação ($10^0 - 10^1$ cm/s), a muito alta, com em canais de rios ($10^1 - 10^3$ cm/s) (FOGG; ZHANG, 2016). Devido a essa variação de velocidades da água durante a deposição de sedimentos em ambiente geológicos, na maior parte dos sistemas aquíferos sedimentares é esperado frações significantes de sedimentos finos.

De fato, embora proporções texturais de grossos versus finos variem consideravelmente, muito frequentemente, sistemas aquíferos contem mais camadas de silte

e argila do que de areia e pedregulho; por exemplo, é típico para facies geológicas dominadas por finos formarem de 50 a 80% de sistemas aquíferos (FOGG; ZHANG, 2016).

Essas heterogeneidades no corpo de sedimentos significam que os processos que causam a cimentação dos sedimentos não ocorrem uniformemente distribuídos, e portanto algumas partes se tornam cimentadas mais rápidas que outras (NICHOLS, 2009).

A heterogeneidade de um meio geológico é uma das grandes fontes de complexidade no processo de quantificação de fluxo e transporte (DASSARGUES, 2018). Todos esses fatores contribuem e causam variações na condutividade hidráulica, no armazenamento, nas cargas hidráulicas, na porosidade, e nos parâmetros geoquímicos, e assim exerce grande controle no fluxo e transporte pelos materiais (EATON, 2006). De fato, variações nas cargas hidráulicas são pequenas em relação a variações no campo de velocidades e no tempo de residência de partículas de fluidos e solutos, em função da heterogeneidade das propriedades hidrogeológicas (FOGG, 1986; DE MARSILY *et al.*, 2005; MALIVA, 2016)

2.2.3.1 Heterogeneidade da condutividade hidráulica

A propriedade mais afetada pelas heterogeneidades de aquíferos é a condutividade hidráulica. De fato, esse parâmetro é um dos mais variáveis em todas as ciências da terra, de maneira que mesmo meios considerados homogêneos apresentam variação desse parâmetro em algumas ordens de magnitudes (SANCHEZ-VILA; GUADAGNINI; CARRERA, 2006)

Faixas típicas de K para argila e silte são 10^{-11} - 10^{-5} cm/s e para areia e seixos são de 10^{-7} - 10^{-2} (DOMENICO; SCHWARTZ, 1990). Considerando que a maior parte dos sistemas deposicionais clásticos sedimentares contem tanto sedimentos de textura fina e grossa, não é surpresa que K no mesmo depósito varie em diversas ordens de magnitude. Por exemplo, a presença de argila com areia ou pedregulhos no mesmo depósito facilmente leva a uma variação de valores de K de 4-7 ordens de magnitude.

Outra característica de K é a anisotropia. Esse conceito está relacionado à variação do parâmetro em função da direção em que é medido. A causa primária da anisotropia em pequena escala em sedimentos é a orientação dos argilominerais, e na maioria dos meios hidrogeológicos, distribuições heterogêneas e anisotrópicas da condutividade hidráulica são a norma (WOESSNER; POETER, 2020)

A variabilidade de K está de fato associado ao volume de meio poroso testado no processo de medição. Diversos estudos demonstraram que seu valor cresce com a porção de volume testado (SÁNCHEZ-VILA; CARRERA; GIRARDI, 1996; ZLOTNIK *et al.*, 2000). E essa dependência de escala não depende de qualquer método específico de medição (SCHULZE-MAKUCH; CHERKAUER, 1998). Esse efeito foi atribuído às

heterogeneidades do meio poroso, pois um maior volume testado aumenta a probabilidade de que caminhos conectados de alta condutividade sejam amostrados (NEUMAN, 1994; SÁNCHEZ-VILA; CARRERA; GIRARDI, 1996; ROVEY; CHERKAUER, 1995; NEUMAN; DI FEDERICO, 2003).

A distribuição de densidade de probabilidade de K é geralmente considerada como log-normal, e sua variabilidade é caracterizada pela variância de $\ln K$ ($\sigma_{\ln K}^2$) (FREZE; CHERRY, 1979; DE MARSILY *et al.*, 2005; FOGG; ZHANG, 2016). O aumento de K com a escala de medição está relacionado à variância desse parâmetro. Em geral, assume-se que maiores volumes amostrados implicam maior homogeneização espacial das propriedades, pois variações em menor escala dos materiais afetam menos suas magnitudes, e portanto a variância diminuiria com o aumento do suporte das medições (DAGAN, 1989). Outros autores, no entanto, ressaltam que a variância de $\ln K$ não apresenta dependência sistemática com a escala (GELHAR, 1993), ou então que a variância aumenta em função da escala a partir de uma lei de potência (NEUMAN, 1994).

2.2.3.2 Representação da estrutura espacial da condutividade hidráulica

A questão fundamental é como lidar com essa realidade da heterogeneidade ao desenvolver descrições quantitativas do fluxo e transporte em aquíferos. Hidrogeólogos tradicionalmente resolveram o problema de definir parâmetros para sedimentos heterogêneos aplicando o conceito de meio poroso equivalente homogêneo. É assumido que é possível medir ou calcular um valor de K que em alguma escala compreende uma média dos efeitos de heterogeneidades de escalas menores (ANDERSON; AIKEN *et al.*, 1999; DE MARSILY *et al.*, 2005; KITANIDIS, 2015; DAS-SARGUES, 2018). Na engenharia, esse paradigma foi suficiente para problemas em que o campo de velocidades de um aquífero não afeta significativamente os processos analisados, como previsões do rebaixamento de poços de captação de água, ou problemas em que a escala de heterogeneidade é muito menor que a escala do problema investigado, como avaliação do fluxo de águas subterrâneas em escala regional ou avaliação da contaminação de aquíferos em prazo muito longo (PAYNE; QUINNAN; POTTER, 2008).

Experimentos em larga-escala em meios naturais extensivamente caracterizados, no entanto, mostraram que as heterogeneidades dos meios geológicos, e seus efeitos na principalmente na condutividade hidráulica, estão entre os mecanismo principais que governam o transporte de solutos em meios porosos (ANDERSON; SIEGEL, 2013; BIANCHI *et al.*, 2011; SALAMON; FERNÁNDEZ-GARCIA; GÓMEZ-HERNÁNDEZ, 2007; SUDICKY; ILLMAN, 2011; ZHENG; BIANCHI; GORELICK, 2011). A variação de K em diversas escalas tem sido considerada como um dos principais responsáveis pelo fenômeno de dispersão (REN *et al.*, 2022).

A caracterização de uma estrutura para as variações da condutividade hidráulica tem sido historicamente realizada a partir da geoestatística e de simulações estocásticas, que possibilitam incorporar incertezas na definição dos parâmetros. As primeiras formulações envolvem técnicas baseadas em variogramas que se baseiam em correlações entre valores de variáveis a partir de dois pontos (SUDICKY, 1986; REHFELDT; BOGGS; GELHAR, 1992). A partir dessas correlações e do variograma, geram-se modelos de simulação da estrutura espacial da propriedade a partir de funções aleatórias multi-gaussianas que geram campos contínuos. O método mais comum utilizado é o da simulação gaussiana sequencial, o qual foi aplicado em diversas aplicações práticas e mostra-se muito eficiente em representar a distribuição heterogênea de propriedades em meios estatisticamente estacionários (GELHAR, 1993; KOLTERMANN; GORELICK, 1996).

Esses métodos baseavam-se na premissa de uma variação aleatória de K , sem muita atenção para a arquitetura sedimentar que promove variabilidade natural intrínseca dessa propriedade (RITZI; SOLTANIAN, 2015). Ainda consideravam que o fluxo e transporte poderiam ser representados a partir de volumes macroscópicos representativos de um aquífero (KITANIDIS, 2015). A validade desses métodos começou a ser questionada quando verificou-se que era possível obter diversos comportamentos diferentes para o fluxo e o transporte a partir de estruturas formadas a partir de distribuições de $\ln K$ e funções de correlação espacial idênticas (ZINN; HARVEY, 2003).

Diversos estudos já demonstraram que a conectividade é mais importante que a aleatoriedade para propriedades hidrogeológicas em aquíferos heterogêneos para quantificar, principalmente, o transporte de solutos (ANDERSON, 1989; SÁNCHEZ-VILA; CARRERA; GIRARDI, 1996; KOLTERMANN; GORELICK, 1996; FOGG; CARLE; GREEN, 2000). Isso demonstrou que em muitos casos o modelo conceitual de um volume macroscópico representativo a partir do qual tradicionalmente se realizou as quantificações com a lei de Darcy e a equação de advecção-dispersão não captura o movimento real de plumas de solutos em meios heterogêneos, mesmo considerando uma variabilidade espacial estacionária e aleatória para a propriedade (DE MARSILY *et al.*, 2005; KONIKOW, 2011; GUO *et al.*, 2021).

A conectividade dessas estruturas de alta ou baixa condutividade é essencial para compreender o transporte de solutos, a qual é melhor caracterizada através de incorporação de informações geológicas nos modelos (EATON, 2006). Hidrofácies podem ser entendidas como litofácies de ambientes sedimentares com propriedades hidrogeológicas relativamente homogêneas, e a geometria dessas hidrofácies, portanto, é importante em qualquer tipo de investigação de aquíferos (ANDERSON, 1989). Dessa forma, na atualidade a caracterização e representação da variabilidade natural da condutividade hidráulica tem sido frequentemente realizada a partir de caracterizações geoestatísticas que incorporam informações geológicas (KOLTERMANN; GO-

RELICK, 1996; ANDERSON; AIKEN *et al.*, 1999; DE MARSILY *et al.*, 2005; BIANCHI *et al.*, 2011; FOGG; ZHANG, 2016; TERAMOTO; CHANG, 2018; REN *et al.*, 2022).

A definição das geometrias das hidrofácies é mais influente no transporte de solutos do que o valor de K definido para cada hidrofície (SAVOY *et al.*, 2017). Assim, um modelo conceitual de um aquífero deve incluir consideração para o tipo, extensão e distribuição de heterogeneidades do aquífero, o que pode envolver consideração da história deposicional do aquífero e de estratos confinantes (MALIVA, 2016). A escala de heterogeneidade deve estar conectada com a escala dos processos de medição, que deve estar associada ao volume representativo escolhido para quantificar o fluxo e transporte em subsuperfície.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 DESCRIÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO

A Fazenda Experimental da Ressacada, da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), está localizada dentro da Ilha de Santa Catarina (ISC). A ISC está localizada a leste do estado de Santa Catarina na porção central do seu litoral. Possui uma área de aproximadamente 400 km², onde se situa a maior parte da cidade de Florianópolis (SC). A ISC e o continente são separados pela Baía de Florianópolis, compartimentada nas baías Norte e Sul, mas interligados através de um estreito de cerca de 500 m de largura, sobre o qual estendem-se as três pontes de acesso ao continente. A fazenda está localizada no Bairro da Tapera no sudoeste da Ilha, e ocupa uma área de 1.7 km². É propriedade da UFSC e administrada pelo Centro de Ciências Agrárias (CCA), que utiliza a maior parte de sua área para práticas de campos com culturas diversas e criação de alguns animais, como também pelo Núcleo Ressacada de Pesquisas em Meio Ambiente (REMA), ligado ao Centro Tecnológico da UFSC (CTC).

Desde 1998, uma parceria entre o REMA e o Centro de Pesquisas da Petrobrás (CENPES) é responsável por conduzir, na parte leste da Fazenda, experimentos controlados de longo prazo, que envolvem a infiltração de combustíveis (e biocombustíveis) na subsuperfície para estudos de remediação de contaminantes ambientais (CORSEUIL; MONIER *et al.*, 2011). Já foram realizados estudos de remediação passiva, como a atenuação natural monitorada, e de remediação ativa, como a oxidação química e a biorremediação. Os experimentos replicam em escala de campo vazamentos acidentais de combustíveis, com a liberação desses diretamente sobre a zona saturada e o monitoramento da fase livre e da pluma dissolvida resultante. Isso foi realizado com o auxílio de uma bateria de poços multiníveis de monitoramento instalados, através dos quais foram feitas a delimitação da fase livre e a amostragem de água subterrânea para análises químicas. O traçador íon brometo de potássio (KBr^-) foi introduzido em cada experimento no momento da liberação dos combustíveis, permitindo indicar a direção principal do fluxo da água subterrânea como também evidenciar a imobilização e degradação dos contaminantes em cada área de estudo.

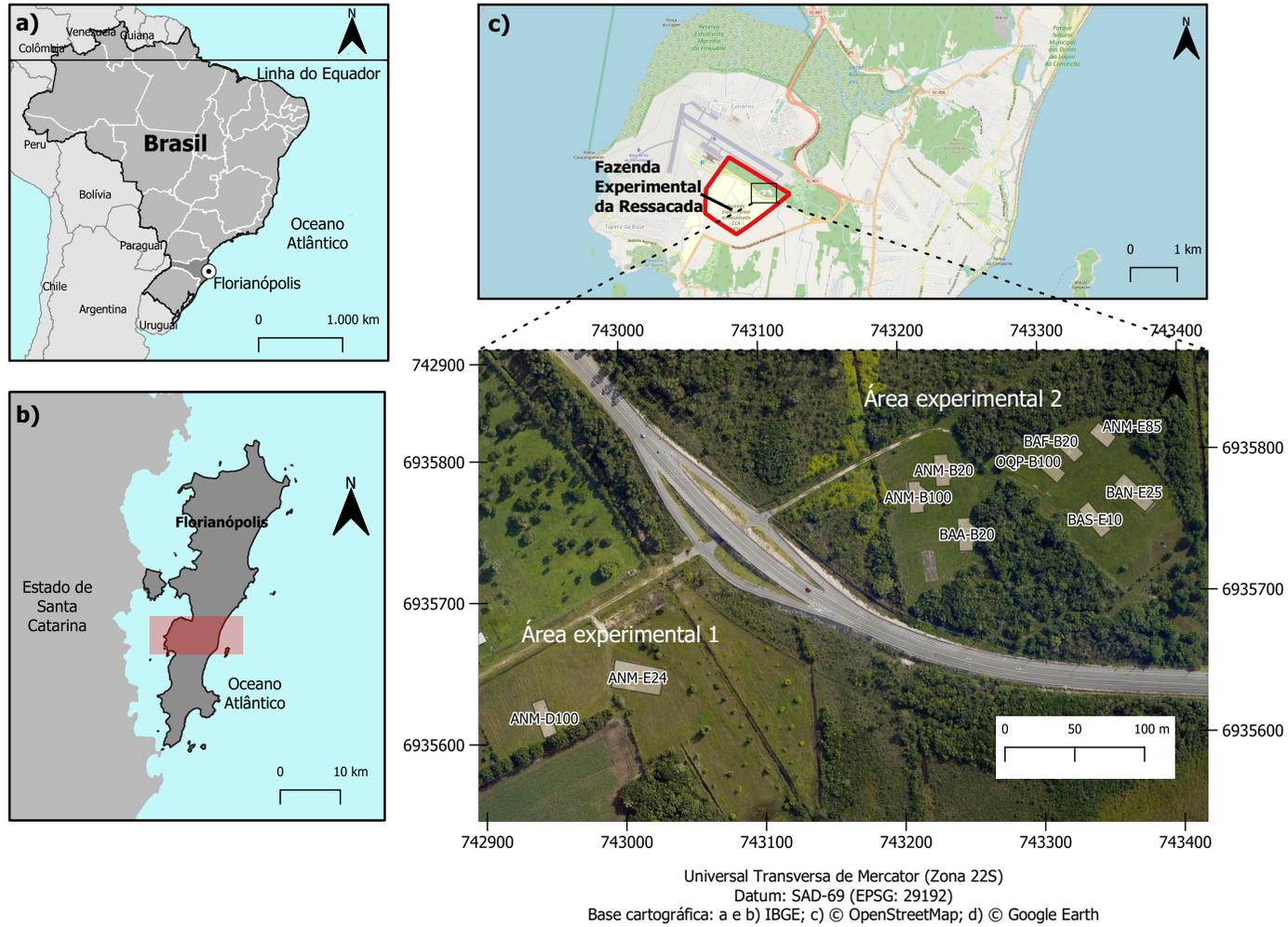
A região dos experimentos é dividida em duas áreas experimentais, 1 e 3, onde 11 experimentos foram conduzidos até hoje. A Figura 12 mostra a localização da fazenda e das diferentes áreas experimentais, e a Tabela 3.1 contém informações sobre os diversos experimentos conduzidos nas duas áreas.

Tabela 1 – Tabela com informações sobre os experimentos realizados na fazenda.

Nome	Processo estudado	Combustível (mistura %v/%v)	Volume liberado (L)	Área exp.	Nº de poços instalados	Área superficial coberta (m^2)	Data de liberação	Trabalhos de referência
ANM-E24	Atenuação natural monitorada	Etanol/gasolina (24/76)	100	1	51	460	dez/98	Schneider (2001) Fernandes (2002) Schneider (2005) Corseuil, Monier <i>et al.</i> (2011) Rama (2019)
ANM-D50	Atenuação natural monitorada	Diesel/etanol (50/50)	40	1	32	72	dez/00	Kaipper (2003) Kulkamp (2003)
ANM-D100	Atenuação natural monitorada	Diesel (100%)	20	1	33	72	dez/00	Kaipper (2003) Mazzuco (2004)
BAN-E25	Bioestimulação ativa com nitrato	Etanol/gasolina (25/75)	100	2	65	390	dez/04	Chiaranda (2006) Costa (2008)
ANM-B20	Atenuação natural monitorada	Biodiesel/diesel (20/80)	100	2	47	310	jun/08	Chiaranda (2011) Vanzella (2017)
ANM-B100	Atenuação natural monitorada	Biodiesel (100%)	100	2	47	310	jun/08	Chiaranda (2011)
BAS-E10	Bioestimulação ativa com sulfato	Etanol/gasolina (10/90)	100	2	58	585	mai/09	S. M. Ramos (2010) Serbent (2012)
BAA-B20	Bioestimulação ativa com acetato de amônio	Biodiesel/diesel (20/80)	100	2	42	310	jul/10	D. T. Ramos (2013)
ANM-E85	Atenuação natural	Etanol/gasolina	200	2	50	365	set/10	Farias (2011) Fonseca (2015) Rama (2019) Müller (2017)
BAF-B20	Bioestimulação ativa com óxido de ferro e sulfato	Biodiesel/diesel (20/80)	100	2	30	180	fev/14	Müller (2017)
OQP-B100	Oxidação química parcial com peróxido de magnésio e óxido de ferro	Biodiesel (100%)	100	2	30	180	fev/14	Fedrizzi (2016)

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 12 – Localização da Fazenda Experimental da Ressacada e das áreas experimentais do REMA.



Fonte: Elaborado pelo autor.

3.1.1 Aspectos geológicos e geomorfológicos

Do ponto de vista geológico-geomorfológico, a ilha de Santa Catarina pode ser dividida em dois domínios fundamentais. O primeiro consiste no domínio dos maciços rochosos (embasamento cristalino), com morros, montanhas e elevações, constituído por migmatitos do Complexo Águas Mornas (Meso/Paleoproterozoico), pelos granitos Ilha e Itacorubi e por rochas vulcânicas ácidas da Suíte Cambirela (Neoproterozoico), todos cortados por diques do Enxame Florianópolis (Cretáceo) (TOMAZZOLI; PELLERIN; HORN FILHO, 2018). Esse embasamento caracteriza o arcabouço geológico-estrutural das regiões central e centro-oriental da Plataforma Sul-Americana (SOUZA *et al.*, 2018).

O segundo domínio é o das planícies costeiras, compostas por depósitos sedimentares quaternários inconsolidados dispostos por entre os maciços, depositados em diversos ambientes de sedimentação. A formação dessas planícies costeiras está relacionada às oscilações do nível do mar durante o período Quaternário, resultante principalmente da alternância entre períodos glaciais e interglaciais, o que alterou o volume das águas oceânicas e também a dinâmica deposicional (LIVI, 2009). Os depósitos que constituem o domínio das planícies costeiras são agrupados, do mais antigo para o mais recente, em depósitos do sistema deposicional continental, do sistema deposicional transicional e do sistema deposicional antropogênico (TOMAZZOLI; PELLERIN; HORN FILHO, 2018).

O sistema deposicional continental é basicamente formado de sedimentos provenientes das rochas do embasamento, exibindo feições geomorfológicas como rampas, leques e planícies de inundação, e os depósitos são datados do Quaternário indiferenciado. O sistema deposicional transicional está associado a dois sistemas laguna-barreira, datados do Pleistoceno superior e Holoceno, respectivamente. Nestes sistemas, originaram-se sedimentos compostos por areias e lamas, constituindo uma sucessão de terraços marinho e lagunar, podendo também apresentar campos de dunas, cordões regressivos litorâneos e planícies de maré que caracterizam a paisagem costeira da ISC (TOMAZZOLI; PELLERIN; HORN FILHO, 2018).

A Fazenda da Ressacada está localizada na planície 'Entremares', a qual segundo Almeida (2004) limita a descontinuidade dos maciços do setor sul e centro-norte da ilha de Santa Catarina, junto à baía Sul, possível conexão entre o oceano Atlântico e a baía Sul durante o máximo transgressivo do Pleistoceno superior, quando o nível do mar atingiu níveis cerca de 8 m acima do atual. Na área da Fazenda foi observada a predominância de depósitos transicionais de baía. Tomazzoli e Pellerin (2014) denominaram-nos Depósitos de Fundo de Baía/Bancos de Areia, referindo-se a sedimentos arenosos finos, bem selecionados, de cor esbranquiçada, formando terraços baixos que se destacam nas planícies de maré atuais e que representam sedimentação de fundo de baías.

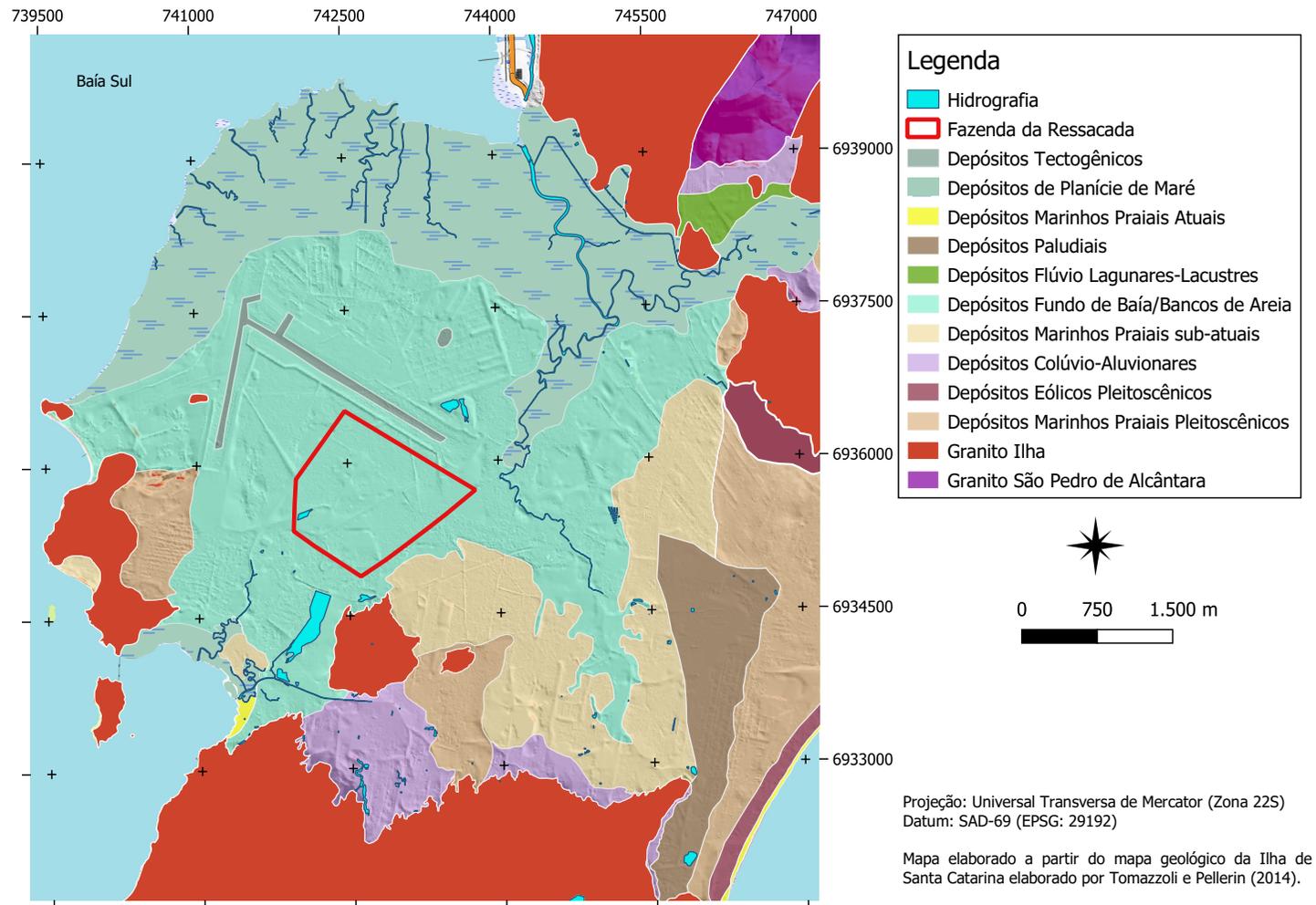
Esses depósitos são resultantes de um processo de inundação e erosão em função de uma oscilação positiva do nível relativo do mar, que propiciou a entrada de águas provenientes da Baía Sul, erodindo parcialmente o depósito marinho praial. O maior aporte de águas deu-se em regiões situadas em cotas mais baixas.

O posterior ressecamento, que provocou o rebaixamento do lençol freático em função de uma oscilação negativa do nível marinho, resultou em uma sedimentação areno-siltosa originando os atuais depósitos que são a mistura dos antigos sedimentos marinhos arenosos, capeados pela sedimentação mais fina oriunda do estágio lagunar, além de ter propiciado o desenvolvimento de manguezais na periferia desta região.

O depósito de baía é constituído por corpos arenosos e areno-síltico-argilosos, ora compostos por areias predominantemente quartzosas com concentrações variadas de carbonato biodetrítico, ora por areias, siltes, argilas e concentrações variadas de carbonato biodetrítico e matéria orgânica, de baixa maturidade textural e com estruturas sedimentares, quando não maciças, compostas por laminações e marcas de ondas (FELIX, 2020).

O relevo é característico da unidade geomorfológica da planície costeira, e dentro da fazenda o relevo é plano com declividades que variam de 0 a 3% (SCHNEIDER, 2005). Os solos da Fazenda Ressacada são caracterizados como areias quartzosas hidromórficas distróficas (solo pouco desenvolvido), e são pouco espessos (LAGE, 2005).

Figura 13 – Mapa geológico da região da Fazenda Experimental da Ressacada.

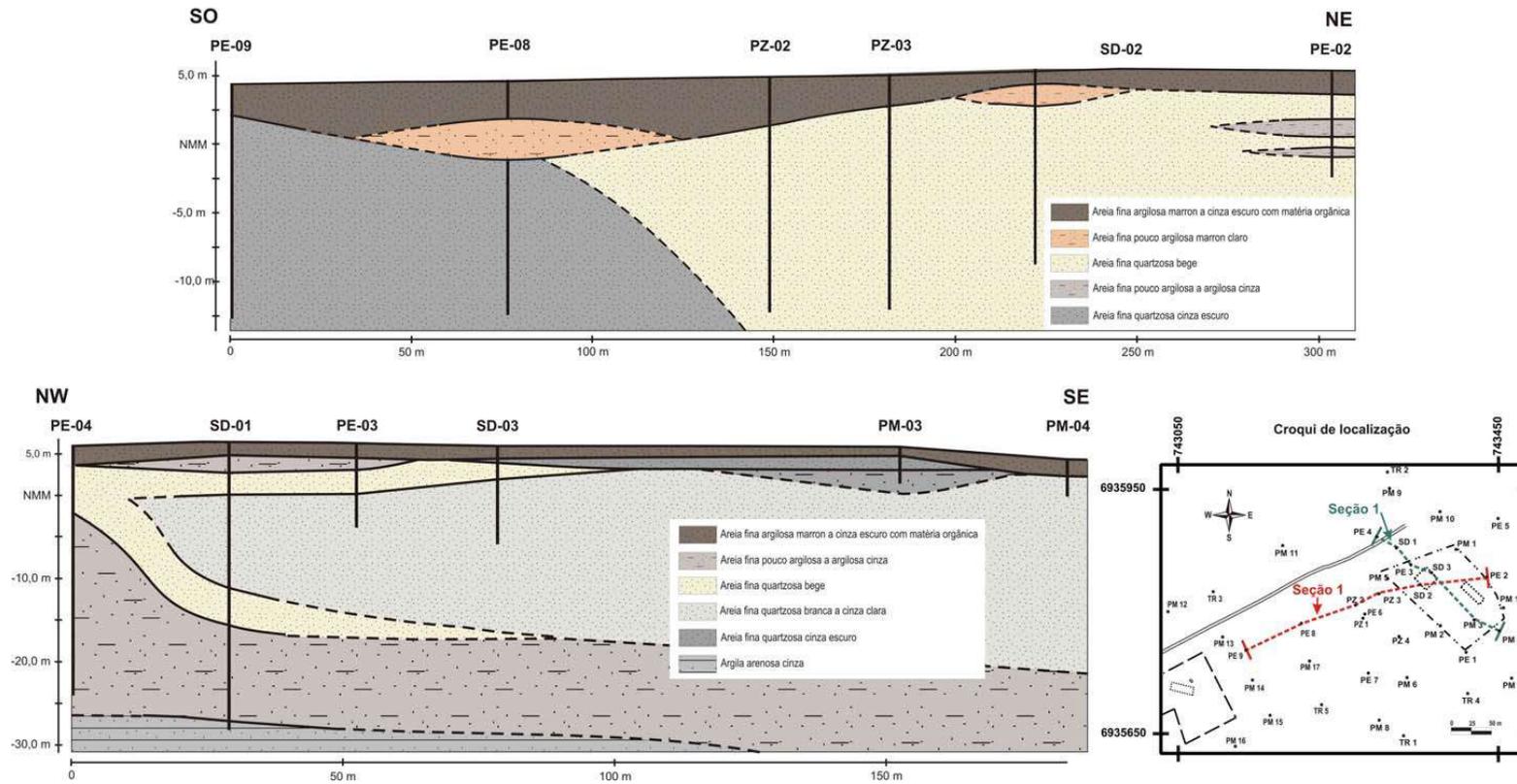


Fonte: Elaborado pelo autor.

Na caracterização da geologia do aquífero na área experimental da Ressaçada, Lage (2005) relatou a presença de sedimentos inconsolidados essencialmente arenosos, com predominância de areia fina em sua granulometria, e materiais bem selecionados. O coeficiente de uniformidade ($U = d_{60}/d_{10}$) calculado para amostras coletadas variou entre 1,69 e 2,19.

Parte das amostras analisadas, no entanto, devido a teores relativamente altos de finos (percentual de argilas de até 18%) indicaram presença de lentes e camadas com comportamento argiloso intercaladas no pacote arenoso, denotando certa heterogeneidade do material. Lage (2005) indicou a necessidade de investigação geológica detalhada apoiada em ensaios de granulometria, pois as heterogeneidades encontradas não seriam fáceis de serem reconhecidas com simples descrição de campo. A Figura 14 apresenta um perfil litológico da área experimental com seções geológicas interpretadas por Lage (2005) a partir dos perfis descritivos.

Figura 14 – Perfil litológico da área experimental na Fazenda da Ressacada.



Fonte: Lage (2005).

3.1.2 Clima

Do ponto de vista meteorológico, a região está localizada na zona climática subtropical úmida, em relação à classificação Köppen-Geiger. Os sistemas atmosféricos atuam durante todo o ano, representados pelas massas de ar Tropical Atlântica (MTA) e Polar Atlântica (MPA). A primeira age predominantemente no decorrer do ano (80%) e atinge a região elevando a temperatura local, enquanto que a MPA tem menor atuação (20%), e costuma atingir a ilha principalmente no inverno, precedida pela Frente Polar Atlântica, com grande influência térmica na região (MENDONÇA, 2002).

Uma intensa dinâmica entre massas de ar tropicais e polares é responsável por frentes frias que causam mudanças bruscas de temperatura. As temperaturas na ilha têm elevada influência marinha, conferindo baixa amplitude térmica anual. A temperatura no inverno oscila entre 15°C e 18°C e entre 24°C e 26°C no verão. O mês mais quente é fevereiro, com média de 24,5°C e o mais frio, julho, com média de 16,4°C.

As precipitações são bem distribuídas no ano, não existindo estação seca bem definida, mas apresentando-se mais abundantes nos meses de verão. Na região da fazenda da Ressacada, entre 2007 e 2017, a precipitação anual variou entre 1.100 mm e 2.700 mm (RAMA, 2019).

3.1.3 Hidrogeologia

O aquífero localizado sob a Fazenda Experimental da Ressacada faz parte do Sistema Aquífero Sedimentos Inconsolidados, agrupando todos os depósitos sedimentares capazes de transmitir águas subterrâneas na ISC (GUEDES JÚNIOR, 1999). Na área da fazenda, é caracterizado como um aquífero costeiro livre, com profundidade entre 30-40 m, raso, com nível freático que varia entre o nível da superfície e 2 m de profundidade (RAMA, 2019).

Com uma área de 20 km^2 , o aquífero da região da Ressacada, em seus contornos, apresenta ao sul um complexo granítico do Granito Ilha, ao norte e a oeste a Baía Sul, um canal do Oceano Atlântico, e ao leste o sistema estuário do Rio Tavares, com presença de manguezais. Ao centro da região existem diversos canais de drenagem que mantêm o nível freático abaixo da superfície. O fluxo das águas subterrâneas é resultado de um gradiente natural baixo, condicionado pela recarga de precipitações, e diverge radialmente a partir do centro da planície (área do Aeroporto Internacional) para seus contornos (Rio Tavares e Baía Sul).

É hidráulicamente conectado à bacia do Rio Tavares (a segunda mais importante da ilha) e exposto a intensas flutuações periódicas dos níveis d'água em função dos eventos de precipitação periódicos intensos que ocorrem na região (RAMA, 2019). Na área experimental do REMA (Figura 12), o fluxo de águas subterrâneas ocorre

principalmente na direção NO-SE.

O fluxo do aquífero na área de Ressacada também é afetado pela presença de uma densa rede de canais de drenagem que constituem uma forma preferencial e transitória de fluxo. Rama (2019) analisou a taxa de drenagem de diversos piezômetros instalados na área, que apresentaram comportamento variável em função da posição do poço no campo de fluxo geral do aquífero, dependente da distância total entre os piezômetros e os corpos receptores superficiais, em que os piezômetros mais afastados da condição de contorno superficial como os que apresentam taxas de drenagem mais flutuantes no domínio após períodos de intensas precipitações. O gradiente hidráulico médio na área dos experimentos é de 1,1% (ANM-E24) e de 0,67% (ANM-E85). A porosidade efetiva média dos sedimentos é de 20% (LAGE, 2005; COSTA, 2008; RAMA, 2019).

3.2 METODOLOGIA

A metodologia geral deste trabalho encontra-se na Figura 15, e os detalhamentos de cada etapa nas seções a seguir.

Figura 15 – Fluxograma da metodologia geral deste trabalho.



Fonte: Elaborado pelo autor.

3.2.1 Pesquisa bibliográfica e compilação dos dados

A primeira etapa deste trabalho incluiu uma pesquisa bibliográfica de teses, artigos, dissertações e relatórios relacionados à região da Fazenda da Ressacada e às áreas experimentais do REMA. As buscas incluíram termos como '*aquífero*', '*fluxo*', '*transporte*', '*geologia*', '*hidrogeologia*', '*subsuperfície*', '*contaminação*', '*remediação*', '*atenuação*', '*águas subterrâneas*' e '*Fazenda da Ressacada*', realizadas no Repositório Oficial da UFSC de teses e dissertações, assim como no Google Scholar. Muitos dos trabalhos utilizados foram encontrados disponibilizados no próprio website do REMA.

3.2.2 Avaliação, preparação e processamento dos dados

Os dados compilados na etapa anterior foram avaliados em relação à sua qualidade e consistência, assim como à sua utilidade para os objetivos deste trabalho. Esses dados foram produzidos a partir de dois tipos de investigações:

1. **Caracterizações litoestratigráficas:** sondagens mecânicas realizadas objetivando a caracterização litoestratigráfica da região das áreas experimentais assim

como na zona de influência dos experimentos em si. No mesmo ponto de parte dessas sondagens foram instalados poços de monitoramento e piezômetros.

2. Caracterizações de propriedades sedimentológicas e hidrogeológicas dos sedimentos: incluem medições realizadas em amostras coletadas a partir das sondagens e testes e ensaios *in situ* e em laboratório.

Os dados compilados relativos a caracterizações litoestratigráficas a partir de sondagens geológicas conduzidas nas áreas experimentais da Ressacada envolveram dois grupos, distintos em relação à fonte de obtenção. O primeiro grupo corresponde às investigações disponibilizadas no trabalho de Lage (2005), que buscou dar suporte ao projeto Ressacada através da caracterização geológica da área e da determinação dos parâmetros do aquífero necessários ao planejamento dos novos experimentos que posteriormente seriam construídos na área experimental 2. Constitui a maioria das investigações geológicas locais, realizadas entre 2004 e 2005, e maiores informações em relação à condução das investigações estão disponíveis em Lage (2005). Os dados sobre essas sondagens encontram-se na Tabela 2, e a área investigada e suas localizações na Figura 16.

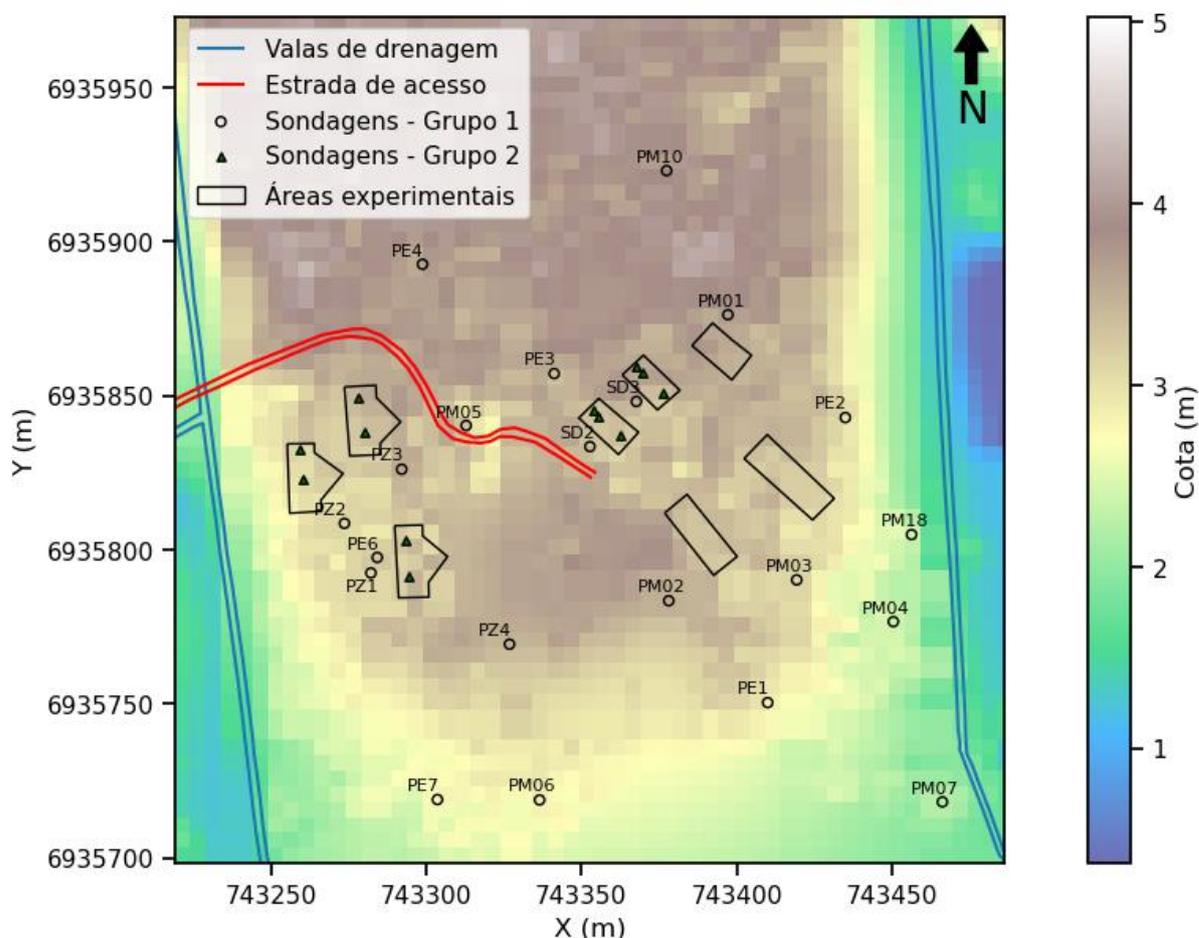
Tabela 2 – Informações de localização, profundidade e cota do terreno sobre as sondagens investigativas e os poços de monitoramento do Grupo 1.

Identificação	x (m)	y (m)	Profundidade (m)
SD2	743352.76	6935833.49	14.70
SD3	743367.73	6935848.14	12.00
PE1	743410.02	6935750.37	4.50
PE2	743435.04	6935842.92	4.50
PE3	743341.24	6935857.20	4.50
PE4	743298.83	6935892.69	15.00
PE6	743284.26	6935797.51	31.00
PE7	743303.65	6935718.90	16.00
PM01	743397.22	6935876.31	4.50
PM02	743378.17	6935783.44	4.50
PM03	743419.38	6935790.21	4.50
PM04	743450.50	6935776.66	4.50
PM05	743312.88	6935840.34	4.50
PM06	743336.54	6935718.78	4.00
PM07	743466.30	6935718.14	3.00
PM10	743377.47	6935923.08	3.00
PM18	743456.38	6935804.92	3.00
PZ1	743282.21	6935792.47	16.00
PZ2	743273.68	6935808.56	15.00
PZ3	743292.13	6935826.13	15.00
PZ4	743326.85	6935769.32	18.00

Fonte: Lage (2005).

O segundo grupo de sondagens engloba as realizadas no local de instalação dos poços de monitoramento dos experimentos, como forma de investigação litológica nos pontos de injeção de combustíveis assim como, no mínimo, em mais um ponto a jusante. As fontes de dados desse segundo grupo são os trabalhos publicados sobre cada experimento. Para essas sondagens, informações relativas à localização e cota

Figura 16 – Localização das sondagens na área investigada com modelo digital de terreno (MDT) da área com resolução de 5 m.



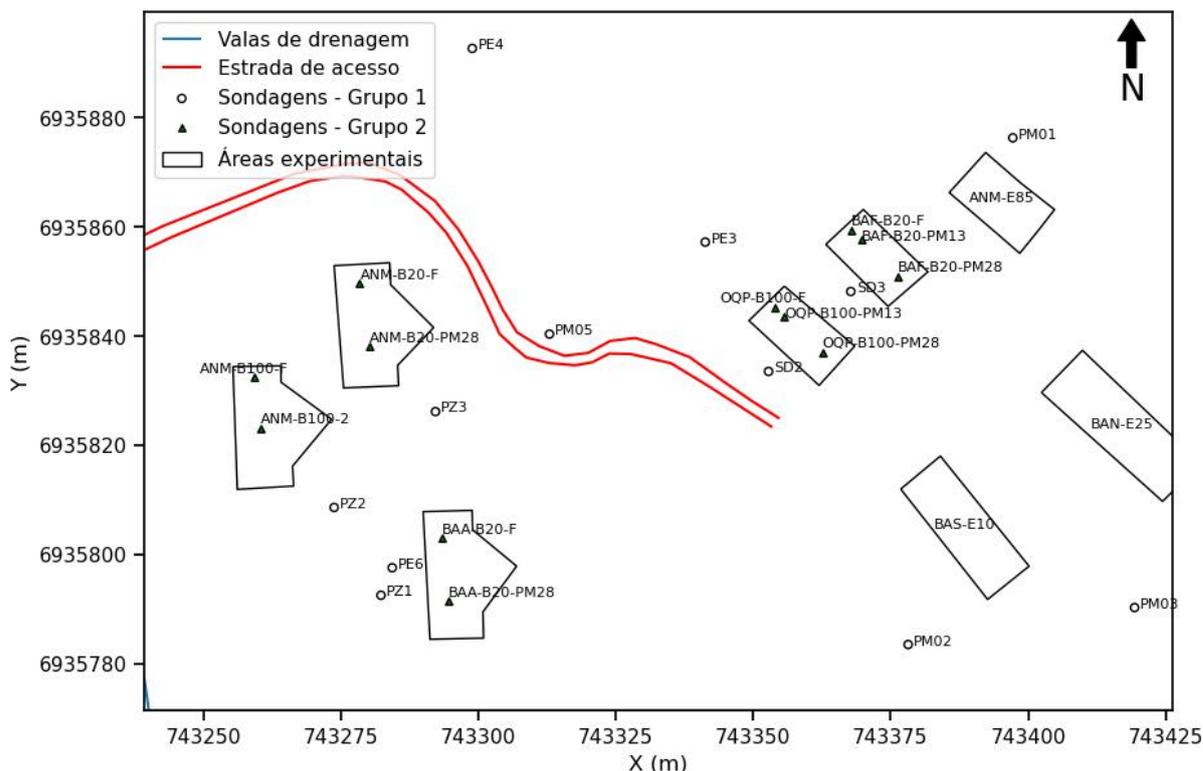
Fonte: Elaborado pelo autor. MDT - IPUF (2012).

topográfica dessas não estavam disponíveis. A localização foi determinada a partir de análises de mapas, imagens de satélite, e das informações fornecidas pelos trabalhos de referência.

Os dados compilados referentes a caracterizações de propriedades sedimentológicas e hidrogeológicas dos sedimentos incluem caracterizações conduzidas nos mesmos pontos das sondagens (ou com amostras provenientes dessas) como também fora desses pontos. Informações do número de medições associadas às propriedades sedimentológicas e hidrogeológicas analisadas e aos pontos em que foram retiradas, assim como dos trabalhos de referências dos dados encontram-se na Tabela 4.

Para as sondagens PE1, PE2 e PE3 também foram coletadas amostras em profundidade para determinação de propriedades dos sedimentos como D20, granulometria e porosidade total e efetiva, com dados disponibilizados por Lage (2005) e Chiaranda (2006). Para as sondagens do grupo 2 (Figura 17), também foram realizadas caracterizações granulométricas de amostras retiradas dessas sondagens. Dados

Figura 17 – Localização das sondagens das áreas experimentais.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 3 – Informações sobre as sondagens realizadas na rede de monitoramento de cada experimento.

Identificação	x (m)	y (m)	Profundidade (m)	Referência
ANM-B100-F	743259.11	6935832.42	6.00	Chiaranda (2011)
ANM-B100-2	743260.37	6935823.03	6.00	Chiaranda (2011)
ANM-B20-F	743278.34	6935849.57	6.00	Chiaranda (2011)
ANM-B20-PM28	743280.06	6935838.06	6.00	Chiaranda (2011)
BAA-B20-F	743293.27	6935802.87	6.00	D. T. Ramos (2013)
BAA-B20-PM28	743294.44	6935791.34	6.00	D. T. Ramos (2013)
OQP-B100-F	743353.93	6935845.28	6.00	Fedrizzi (2016)
OQP-B100-PM13	743355.62	6935843.42	6.00	Fedrizzi (2016)
OQP-B100-PM28	743362.54	6935836.97	6.00	Fedrizzi (2016)
BAF-B20-F	743367.86	6935859.33	6.00	Müller (2017)
BAF-B20-PM13	743369.77	6935857.68	6.00	Müller (2017)
BAF-B20-PM28	743376.31	6935850.87	6.00	Müller (2017)

Fonte: Elaborado pelo autor.

das sondagens realizadas nas áreas dos experimentos BAF-B20 e OQP-B100 foram fornecidos por Müller (2017) e Fedrizzi (2016), respectivamente. Já para as áreas ANM-B100 e ANM-B20 por Chiaranda (2011), e para a área BAA-B20 por D. T. Ramos (2013). Outros dados de porosidade efetiva foram obtidos de Costa (2008) e Fedrizzi (2016).

Duas das sondagens profundas realizadas nessa região, SD2 e SD3, possibilitaram coletar 31 amostras em intervalos contínuos que foram encapsuladas e sub-

Tabela 4 – Tabela com o número de medições associados a cada sondagem para as propriedades densidade real, massa específica, porosidade total, porosidade efetiva, granulometria (porcentagem de areia média-grossa e fina, de silte, argila, assim como de finos).

Sondagem	Referência	D20	M. esp.	n	ne	Amg	Af	Sil	Arg	Fin
ANM-B100-2	Chiaranda (2011)					5	5	5	5	5
ANM-B100-F					2	7	7	7	7	7
ANM-B20-F					1	4	4	4	4	4
ANM-B20-PM28						3	3	3	3	3
BAA-B20-F	D. T. Ramos (2013)					6	6	6	6	6
BAA-B20-PM28						8	8	8	8	8
BAF-B20-F	Müller (2017)				1	9	9	9	9	9
BAF-B20-PM13						8	8	8	8	8
BAF-B20-PM28						8	8	8	8	8
OQP-B100-F	Fedrizzi (2016)	5	5		1	5	5	5	5	5
OQP-B100-PM13						5	5	5	5	5
OQP-B100-PM28						5	5	5	5	5
PE1	Costa (2008)			1	1					
	Lage (2005)	7		7		7	7	7	7	7
PE2	Chiaranda (2006)			6		6	6	6	6	6
	Costa (2008)			1	1					
	Lage (2005)	4		4		4	4	4	4	4
PE3	Chiaranda (2006)			3		3	3	3	3	3
	Lage (2005)	2		2		2	2	2	2	2
PM04	Costa (2008)			2	2					
PM05				1	1					
SD2	Lage (2005) e Cupertino (2005)	17	17	17	17					17
SD3		14	14	14	14					14

Amg: areia média-grossa, Amg:areia média-grossa, Af: areia fina, Sil: silte, Arg: argila, Fin: finos, D20: densidade real, M.esp.: massa específica (densidade aparente), n: Porosidade, n_e : Porosidade efetiva

Fonte: Elaborado pelo autor.

metidas aos ensaios para determinação da porosidade e da permeabilidade em um permo-porosímetro a gás. As medidas de permeabilidade absoluta e de porosidade efetiva foram obtidas através de métodos de variação de pressão em câmara confinante, utilizando amostras deformadas. Os valores de permeabilidade em miliDarcy (mD) foram convertidos para condutividade hidráulica em relação à água, em que $1mD \approx 980cm/s$. Mais detalhes sobre os experimentos estão disponíveis em Lage (2005) e Cupertino (2005). Essas amostras também foram utilizadas para análise de alguns parâmetros físicos em profundidade: massa específica, teor de argila e silte (finos), grau de saturação, umidade, porosidade e densidade real dos grãos.

Esses dados compilados foram retirados do trabalho de Rama (2019), e a validação dos intervalos das seções filtrantes foi feita a partir dos dados fornecidos por Lage (2005) e Bielschowsky (2005). Incluem uma campanha com dados interpretados através de método que não foi identificado nas referências, e mais três campanhas com dados dados interpretados a partir de dois métodos, o de Bouwer e Rice (1976) e o de Hvorslev (1951). Mais informações em relação a esses métodos e para a condução da

segunda campanha de investigação em Lage (2005).

Os principais dados compilados relativos a caracterizações da condutividade hidráulica (K) no aquífero na área experimental do REMA na Ressacada foram obtidos a partir de quatro campanhas de testes 'slug' em 19 poços, construídos no mesmo local de parte das sondagens do Grupo 1. A Tabela 5 apresenta os poços da área em que os ensaios foram realizados em conjunto com as profundidades de suas seções filtrantes e seus respectivos comprimentos. A localização desses poços é possível ser visualizada na Figura 16.

Tabela 5 – Poços em que os testes 'slug' foram realizados, profundidades do início e fim das seções filtrantes e seus respectivos comprimentos.

Poço	De (m)	Até (m)	L (m)
PE1	2.50	4.50	2.00
PE2	2.50	4.50	2.00
PE3	2.50	4.50	2.00
PE4	12.00	14.00	2.00
PE6	21.00	31.00	10.00
PE7	11.00	13.00	2.00
PM01	2.50	4.50	2.00
PM02	2.50	4.50	2.00
PM03	2.50	4.50	2.00
PM04	2.50	4.50	2.00
PM05	2.50	4.50	2.00
PM06	2.00	4.00	2.00
PM07	1.00	3.00	2.00
PM10	1.00	3.00	2.00
PM18	1.00	3.00	2.00
PZ1	10.00	15.00	5.00
PZ2	5.00	10.00	5.00
PZ3	5.00	10.00	5.00
PZ4	10.00	15.00	5.00

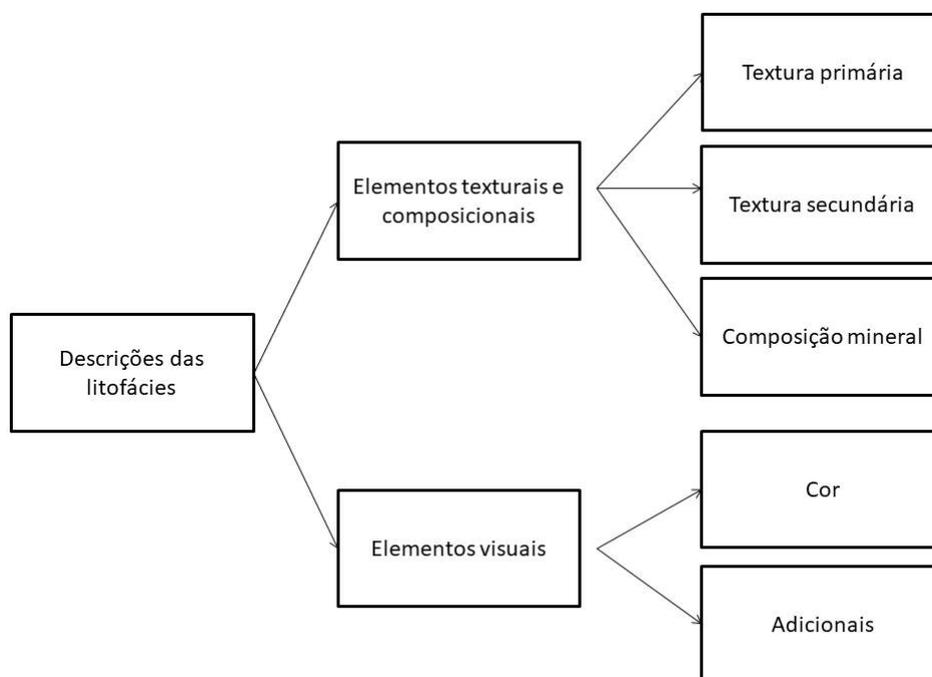
Fonte: Elaborado pelo autor a partir dos dados de Lage (2005), Bielschowsky (2005) e Rama (2019).

As campanhas foram realizadas entre os anos de 2004 e 2017, e diferentes métodos foram utilizados para interpretar os dados produzidos pelos testes. Os resultados de todas as campanhas retirados de forma compilada de Rama (2019). Para as campanhas 2 até 4, dois métodos foram utilizados para interpretação dos ensaios, o de Hvorslev (1951) e o de Bouwer e Rice (1976). A 2ª campanha foi realizada em novembro de 2005 (BIELSCHOWSKY, 2005), a 3ª em dezembro de 2016 e a 4ª em abril de 2017 (RAMA, 2019). A primeira campanha foi conduzida em 2004, e não foram encontradas informações do método utilizado para interpretação dos dados de teste, assim como da época do ano de sua realização.

Para todas as sondagens foram disponibilizadas as descrições das litofácies identificadas, fornecidas pelos técnicos responsáveis pelas investigações. Com o objetivo de analisar essas descrições fornecidas assim como possibilitar analisar relações entre elementos destas descrições com propriedades do meio poroso, foram realizados uma avaliação das descrições com relação a identificar estruturas no texto, e

posteriormente o processamento desses textos descritivos para padronizar termos semelhantes. A estrutura identificada está apresentada na Figura 18.

Figura 18 – Diagrama da estrutura identificada nas descrições de litofácies das sondagens



Elementos texturais e composicionais referem-se à descrição da textura e composição dos sedimentos para as litofácies identificadas nas sondagens em campo. Essa primeira componente foi dividida em descrição de textura primária, secundária e de composição mineral. A textura primária envolve a principal descrição textural dos sedimentos, como areia, podendo ser fina ou muito fina, ou argila. A secundária envolve a outra classe textural identificada nos sedimentos, por exemplo, para uma textura primária de areia fina pode estar associada à textura secundária argilosa ou pouco argilosa.

A descrição de composição mineral identificada refere-se a litofácies descritas como quartzosas. Já elementos visuais referem-se a características de cor, incluindo tanto a matiz (e.g. rosa, marrom, cinza, ...) como tonalidade (claro, escuro) ou presença de outros materiais (ou características) nos sedimentos, como matéria orgânica, raízes, ou traços alaranjados nos sedimentos.

Uma das principais oportunidades de análise desses dados envolve investigar a correlação negativa entre granulometria fina e condutividade hidráulica identificada por Lage (2005) em amostras no perfil vertical das sondagens SD2 e SD3. Através de uma avaliação da base de dados reunida foi constatado, no entanto, que muitos dos dados não foram produzidos nos mesmos pontos de forma a possibilitar análises de correlação baseadas no pareamento de medições, e a base de dados apresenta uma

natureza fragmentada.

Foi constatado, no entanto, que boa parte dos dados extraídos foram obtidos a partir de amostras retiradas das sondagens realizadas e identificadas anteriormente, ou de poços instalados nos pontos em que estas foram feitas. A partir disto, identificou-se as descrições das litofácies como o elemento em comum entre dados diversos produzidos na área. Dessa forma, a profundidade ou intervalo de profundidade de cada medição/amostra foi associada às litofácies descritas nas sondagens para a mesma profundidade. No caso de intervalos de filtros de poços utilizados para testes de campos de condutividade hidráulica (slug tests), identificou-se para dois poços (PE2, PE6) que o filtro atravessa duas camadas identificadas diferentes, e optou-se por associar a medição à litofÁCIE com maior comprimento de interseção.

3.2.3 Análise descritiva e exploratória

A análise descritiva envolve a descrição de frequências e estatísticas dos dados coletados. As estatísticas analisadas para dados numéricos incluíram medidas de:

- Tamanho amostral;
- Posição (média aritmética, mediana, quartis);
- Dispersão (desvio padrão, variância e coeficiente de variação)
- Assimetria e curtose.

A análise exploratória de dados é uma abordagem de análise de dados focada em utilizar uma variedade de técnicas, a maior parte gráficas, com os seguintes objetivos (KANEVSKI; MAIGNAN, 2004):

- maximizar o entendimento em relação a uma base de dados;
- descobrir uma estrutura subjacente nessa base;
- extrair variáveis relevantes;
- detectar *outliers* e anomalias;
- testar premissas subjacentes;
- desenvolver modelos simplificados;
- determinar conjuntos ótimos de fatores/parâmetros de modelos.

Os dados de propriedades dos sedimentos e hidrogeológicas foram explorados e analisados através de ferramentas gráficas como histogramas, gráficos quantil-quantil, box-plots, e gráficos de perfil vertical das propriedades. Testes estatísticos

foram realizados para verificar a normalidade da distribuição dos dados, e o escolhido foi o teste de Shapiro-Wilk, pois é considerado um dos mais poderosos testes estatísticos de normalidade de amostras (RAZALI; YAP, 2011). O nível de significância adotado previamente aos testes foi $\alpha = 0.05$.

Todas essas propriedades foram analisadas, por fim, em relação às descrições das litofácies, em função dos diferentes elementos dessas de acordo com a Figura 18. O objetivo envolveu encontrar alguma estrutura que indique padrões para essas propriedades de acordo com as descrições fornecidas, visto que, de acordo com o que foi mencionado na seção anterior, a fragmentação da base de dados dificultou análises entre variáveis.

3.2.4 Definição das hidrofácies

A partir dos padrões observados nas análises exploratórias, procurou-se desenvolver um método para associar as informações obtidas de caracterizações da condutividade hidráulica e da granulometria fina às litofácies, com o objetivo de agrupá-las em grupos de hidrofácies, discriminando entre as mais e menos permeáveis e condicionadas pelos pontos amostrados. Com esse objetivo em vista, o primeiro passo envolveu transformar as variáveis de interesse. Isso possibilitou associar medições feitas por métodos diferentes em uma mesma escala de variação. Essa transformação envolveu a padronização dos dados a partir do valor-Z, que consiste na diferença entre cada valor de uma amostra (x) e a média amostral (\bar{x}), dividida pelo desvio padrão da amostra (σ), conforme a Equação (16):

$$Z = \frac{x - \bar{x}}{\sigma} \quad (16)$$

Como essa padronização necessita que os dados amostrais sejam distribuídos normalmente, a transformação foi realizada para os valores de K e finos transformados para o logaritmo natural. O espaço amostral do teor de finos incluiu todas as amostras de todas as sondagens. Para a condutividade hidráulica, a padronização foi realizada em função de cada método, ou seja, um espaço amostral com os dados de medições com o permo-porosímetro, e outro espaço amostral incluindo as campanhas (2, 3 e 4) de testes *slug* interpretadas pelo método de Bouwer e Rice (1976). Dessa forma os valores representam a variação, em função do desvio padrão, de cada método a partir de sua própria média, o que permite comparação entre métodos.

A partir dos dados padronizados, foram selecionados os dados das amostras retiradas das sondagens SD2 e SD3, que apresentam uma relação empírica entre K e o teor de finos para a área estudada, para implementação de uma regressão linear. Como variável independente temos os teores de finos padronizados (em relação ao espaço amostral total e não apenas desse conjunto de amostras), e como variável dependente

as medições de K realizadas pelo permo-porosímetro, também padronizadas (em relação ao espaço amostral do próprio método).

O próximo passo envolveu estimar valores de K a partir dos teores de finos segundo a regressão linear realizada. Os valores padronizados do logaritmo natural do teor de finos ($Z_{\ln(\text{Finos})}$) são relativos a diferentes amostras, e julgou-se necessário associar um valor único representativo para litofácies com mais de uma amostra associada para o mesmo local. Essa associação foi realizada através de uma média ponderada de $Z_{\ln(\text{Finos})}$, com o intervalo de profundidade que foi associada à amostra como peso. A partir desses valores atribuídos a cada fácies e localidade amostrados, utilizou-se a equação da regressão para inferência de valores de $\ln K$ padronizados ($Z_{\ln K}$).

Isso permitiu extrapolar a relação entre K e finos das amostras das sondagens SD2 e SD3 para todas as outras amostras do depósito devido à utilização da mesma escala. A premissa dessa extrapolação baseia-se no fato de que a distribuição de probabilidades do teor de finos para as amostras das sondagens SD2 e SD3 foi considerada representativa do conjunto total de amostras analisadas na área, a partir das análises exploratórias anteriores. Dessa forma, assumiu-se que a relação fornecida pela regressão é válida para todo o conjunto de dados, independente do volume amostrado. Essa relação provavelmente não seria representativa se a condutividade hidráulica vertical fosse muito diferente da horizontal, mas como as amostras de sedimentos do depósito local em geral são bem selecionadas, foi assumido que o meio é isotrópico.

Os valores relativos às campanhas de testes *slug* foram também associados às fácies amostradas a partir de um valor único representativo. Para isso, foram tiradas as médias aritméticas de todas as campanhas realizadas para cada poço, e atribuídas à litofácies e ao local associados à seção filtrante. No caso do poço PE2, a seção filtrante atravessa duas litofácies, e portanto o valor médio foi associado às duas. Com os dados processados, que incluem os obtidos através da regressão mais os obtidos a partir da média das campanhas *slug*, todos associados às litofácies e locais, prosseguiu-se para a análise de agrupamentos com algoritmos de mineração de dados do tipo *clustering*.

Para encontrar os grupos de litofácies (associadas a sondagens) em função de valores de K, para definir as hidrofácies, foi utilizado o algoritmo de agrupamento hierárquico. Esse algoritmo iterativo inicia o processo de agrupamento considerando cada ponto em uma distribuição (n-dimensional) como um único grupo, e no próximo passo procura o outro grupo que é mais próximo a partir da definição de uma medida de distância, até que todas os pontos estejam incluídos em um único grupo (WITTEN *et al.*, 2016). O registro dos agrupamentos encontrados a partir de cada passo forma uma estrutura hierárquica de agrupamentos denominada dendrograma. A medida de distância utilizada foi a distância euclidiana e o método de agrupamento adotado foi o

'Ward', que calcula o aumento na soma dos quadrados das distâncias das instâncias a partir do centroide antes e depois da junção dos grupos. Esse algoritmo foi utilizado para verificar o número ideal de grupos.

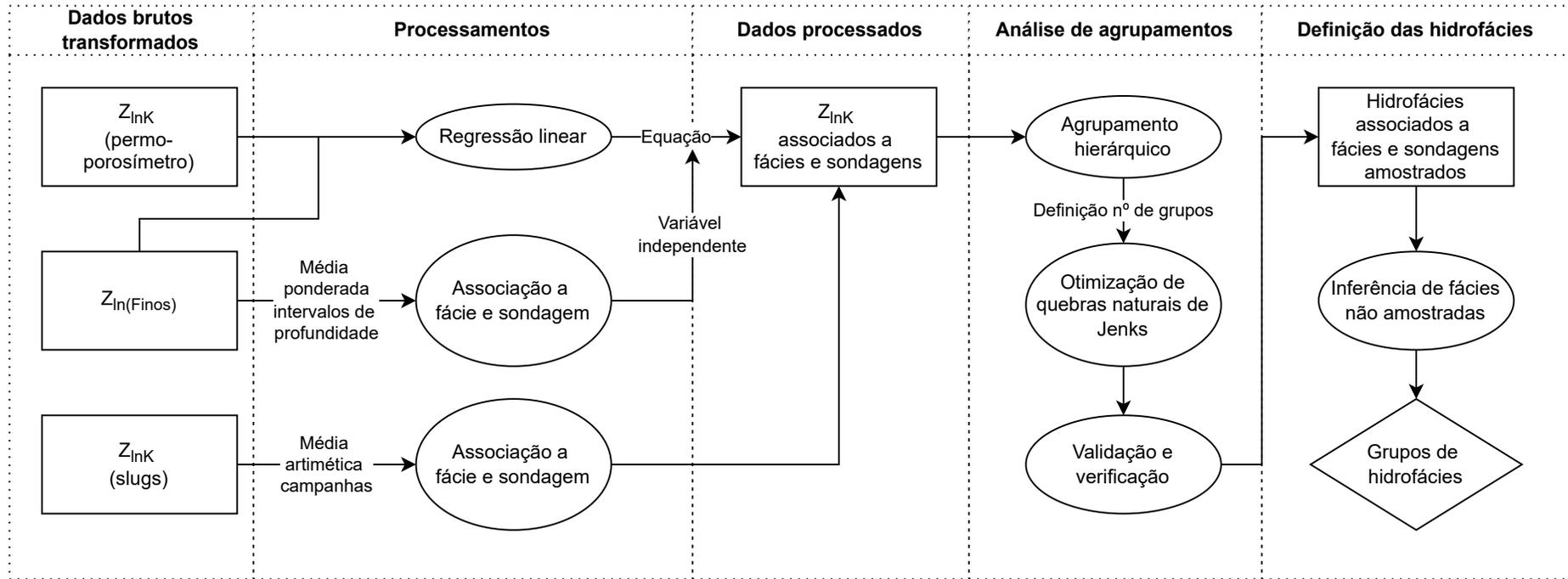
A partir das hipóteses verificadas no agrupamento hierárquico consolidou-se os grupos através do método de otimização de Jenks, também chamado de método de classificação de quebras naturais de Jenks, tradicionalmente utilizado no processamento estatístico de mapas (JENKS, 1967). Esse método de agrupamento de dados foi desenvolvido para determinar a melhor maneira de arranjar valores em diferentes grupos, buscando a minimização da variância dentro dos grupos e a maximização da variância entre grupos.

As descrições de fácies com valor de $\ln K$ associado corresponderam a 86% de todas as litofácies identificadas nas sondagens em que foram realizadas caracterizações granulométricas ou ensaios de campo para medição da condutividade hidráulica. A partir dessas, inferiu-se o grupo a que litofácies não amostradas pertencem a partir dos elementos que compunham sua descrição e a correlação com outras fácies amostradas como cor, textura secundária e elementos adicionais. Os grupos identificados foram então analisados com relação à sua distribuição espacial e seus efeitos para a hidrodinâmica das plumas de contaminação dos experimentos. O fluxograma geral da metodologia desenvolvida encontra-se na Figura 19.

3.2.5 Ferramentas

Os processamentos e análises de dados deste trabalho foram realizados através da linguagem de programação *Python*, e mapas foram elaborados tanto em *Python* como através do software QGIS. Toda a base de dados reunida e processada, assim como os códigos e mapas utilizados e produzidos, serão disponibilizados publicamente na página pessoal do *GitHub* do autor.

Figura 19 – Fluxograma com a metodologia desenvolvida para definição de grupos de hidrofácies nas sondagens analisadas



Fonte: Elaborado pelo autor

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 ANÁLISES DESCRITIVAS E EXPLORATÓRIAS

4.1.1 Propriedades gerais dos sedimentos

Os valores para as principais propriedades sedimentológicas e hidrogeológicas dos sedimentos da área experimental da Ressacada foram analisados e descritos estatisticamente. A Tabela 6 apresenta as estatísticas descritivas para os principais índices físicos identificados, relativos à granulometria como porcentagens em peso de areia média-grossa, areia fina, silte, argila e finos, assim como relativos à densidade, com a densidade de partículas (D20) e a densidade aparente (massa específica). Propriedades hidrogeológicas como a porosidade total e efetiva também foram incluídos.

As medições relativas à densidade das partículas (D20), realizadas em 47 amostras, indicam valor médio de $2,64 \text{ g.cm}^{-3}$, magnitude associada à densidade do quartzo (2,65) como também de argilominerais (2,60) (WOESSNER; POETER, 2020). Já a massa específica apresenta valor médio de 1,52. Os valores de densidade das partículas (densidade real) e massa específica (densidade aparente) apresentam pouca variação para o depósito, com variância de 0,01.

Tabela 6 – Estatística descritiva para as frações granulométricas dos sedimentos, densidade real, massa específica, porosidade total e porosidade efetiva.

	N	\bar{x}	Q1	M	Q3	σ	σ^2	CV	Mín	Máx	Ass	Curt
Amg (%)	40	7,60	1,78	7,54	13,09	6,18	38,23	0,81	0,09	21,31	86,70	2623,46
Af (%)	40	82,34	76,46	81,98	89,02	7,74	59,98	0,09	68,97	95,00	17,63	6425,75
Sil (%)	40	3,50	2,15	3,03	4,67	1,99	3,97	0,57	0,00	7,36	3,20	32,57
Arg (%)	40	6,48	2,70	5,18	9,55	5,27	27,77	0,81	0,00	18,90	113,36	2041,74
Fin (%)	71	9,26	5,45	7,30	11,65	5,10	26,02	0,55	2,37	24,82	150,85	2463,29
D20 (g.cm^{-3})	47	2,63	2,61	2,64	2,65	0,11	0,01	0,04	2,23	2,90	-0,00	0,00
M. esp. (g.cm^{-3})	36	1,52	1,45	1,53	1,58	0,10	0,01	0,06	1,34	1,67	-0,00	0,00
n	52	39,81	34,40	40,26	45,66	9,31	86,67	0,23	18,64	58,44	-251,49	20359,25
n_e	10	21,31	18,56	19,24	23,80	4,07	16,60	0,19	17,17	28,30	45,90	459,51

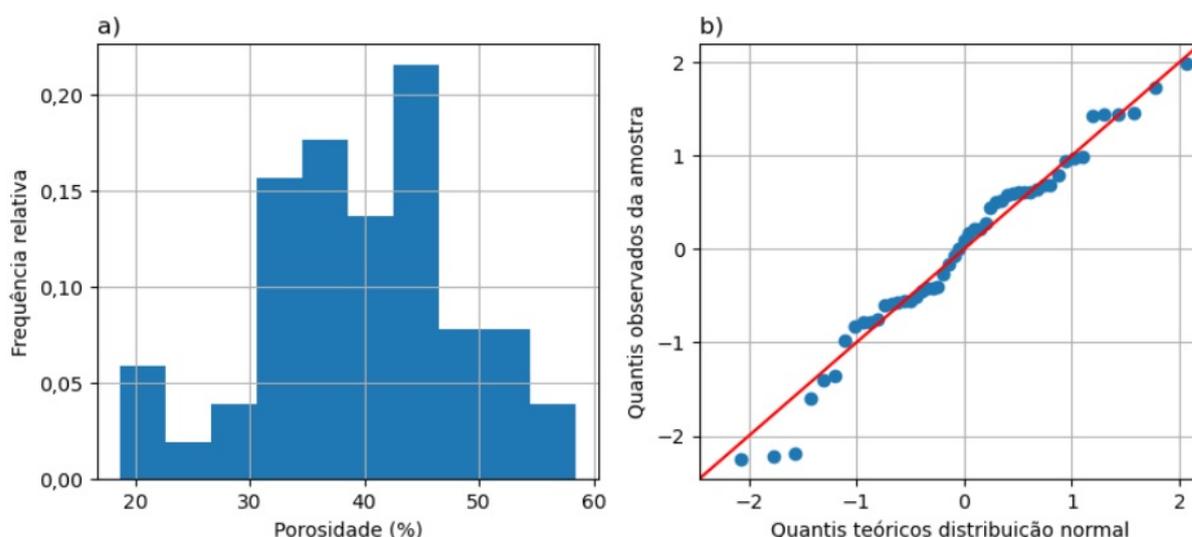
N: nº de observações, \bar{x} : média, Q1: 1º quartil, M: mediana, Q3: 3º quartil, σ : desvio padrão, σ^2 : variância, CV: coeficiente de variação, Mín: mínimo, Máx: máximo, Ass: assimetria, Curt: curtose Amg: areia média-grossa, Af: areia fina, Sil: silte, Arg: argila, Fin: finos, D20: densidade real, M.esp.: massa específica (densidade aparente), n: Porosidade, n_e : Porosidade efetiva

Fonte: Elaborado pelo autor.

Os valores de porosidade total para as amostras compiladas do depósito apresentam grande variação, com valor mínimo de 18,6% e máximo de 58,4%, variância de 86,67, e a média aritmética de 39,8%. A Figura 20 apresenta o histograma e o gráfico QQ para a porosidade total dos sedimentos, e podemos observar uma distribuição normal. O teste Shapiro-Wilk não indicou diferença significativa entre esta distribuição e a hipótese de normalidade, com p-valor de 0,30 (para um nível de significância de 0,05). Em relação à porosidade efetiva, essa apresenta uma média aritmética de 21,3%, com variação entre 17,2 e 28,3%, e variância de 16,60. A Figura 20 apresenta o histograma

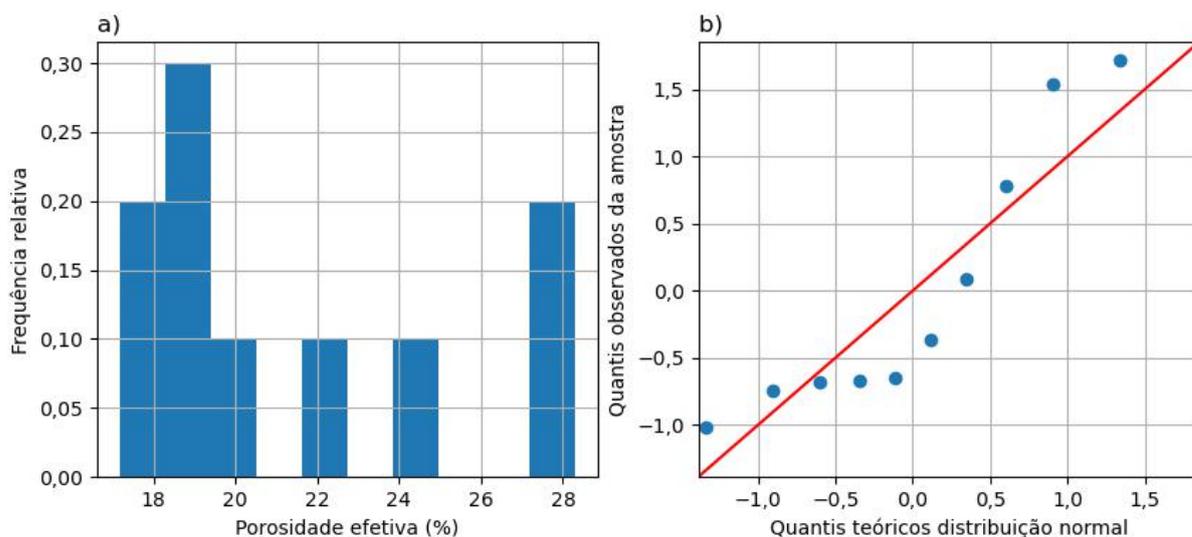
e o gráfico QQ para a porosidade efetiva dos sedimentos, e podemos observar uma distribuição bimodal. O teste Shapiro-Wilk indica probabilidade baixa de que esta distribuição seja normal, com p-valor de 0,03 ($\alpha = 0,05$). No entanto, é importante ressaltar que o número de medições é muito baixo (10) para tirar uma conclusão definitiva.

Figura 20 – Histograma (a) e gráfico quantil-quantil (b) para a porosidade total dos sedimentos



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 21 – Histograma (a) e gráfico quantil-quantil (b) para porosidade efetiva dos sedimentos

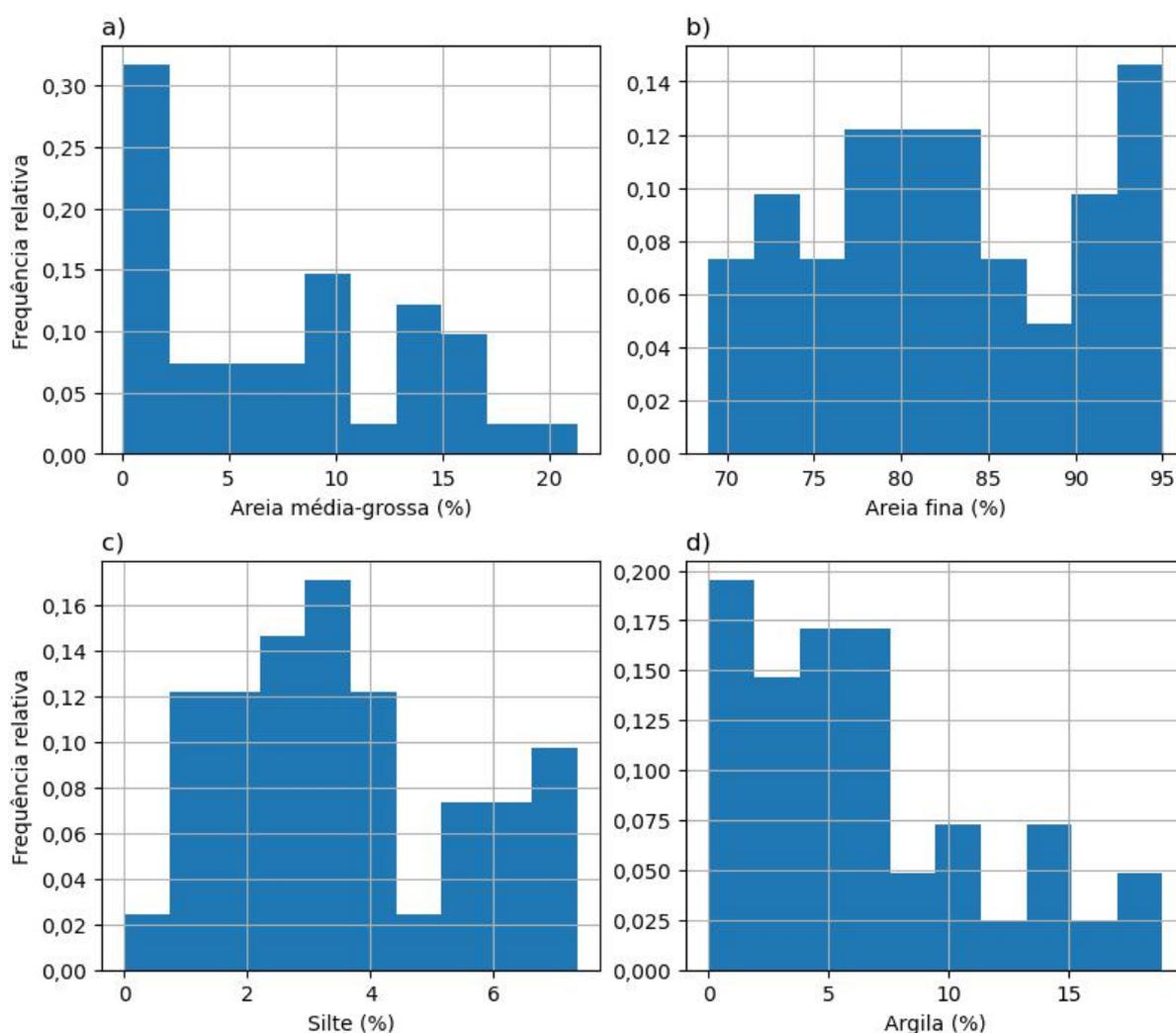


Fonte: Elaborado pelo autor.

Para a granulometria, observa-se a predominância de areia fina nas amostras da área investigada, com porcentagens entre 69% e 95% e média de 82%. Areias

médias e grossas também apresentam uma variação de em torno de 20%, variando de 0 a 21% com média de 7,6%. O teor de finos das amostras (silte + argila) atinge valor máximo perto de 25%, com valor médio de 9% e desvio padrão de 5%. A maior contribuição para os teores de finos vem de partículas de argila, que representam entre 0 e 19% das amostras, com valor médio de 6,5% e desvio padrão de 5,7% , enquanto que silte apresenta teores máximos de 7% com média de 3,5%.

Figura 22 – Histograma para as frações de areia média-grossa (a), areia fina (b), silte (c) e argila (d).

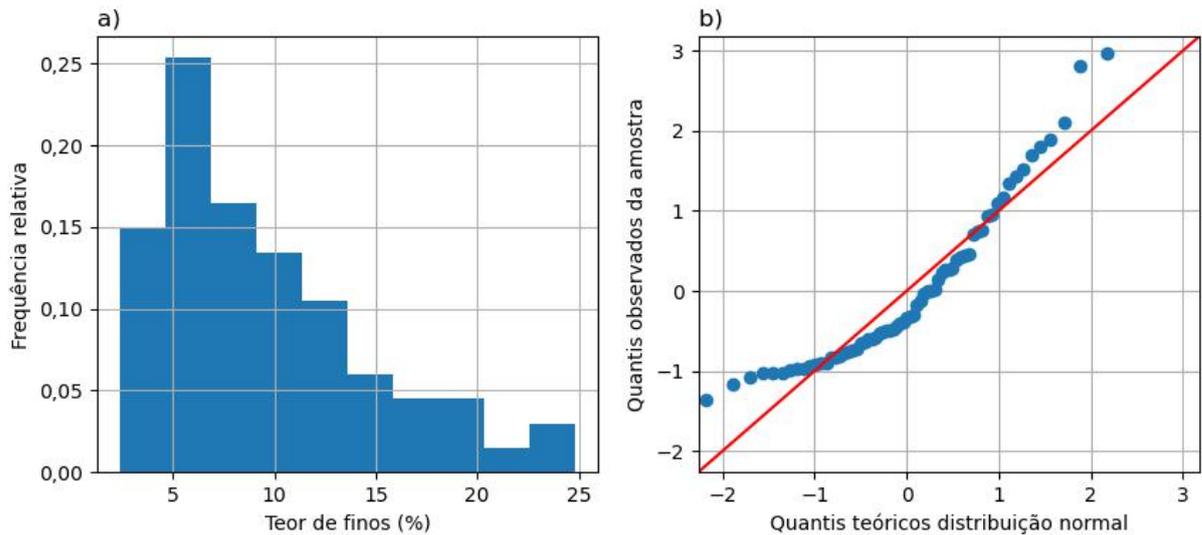


Fonte: Elaborado pelo autor.

Pelas métricas de assimetria e curtose da distribuição das frações granulométricas dos sedimentos evidencia-se que as distribuições não são normais. A Figura 22 apresenta essas distribuições através de histogramas. Observa-se que as porcentagens de areia média e grossa das amostras encontram-se mais concentrados para valores menores. Os teores de areia fina apresentam distribuição quase uniforme, com pico de concentração para os teores máximos. A distribuição dos teores de silte é a

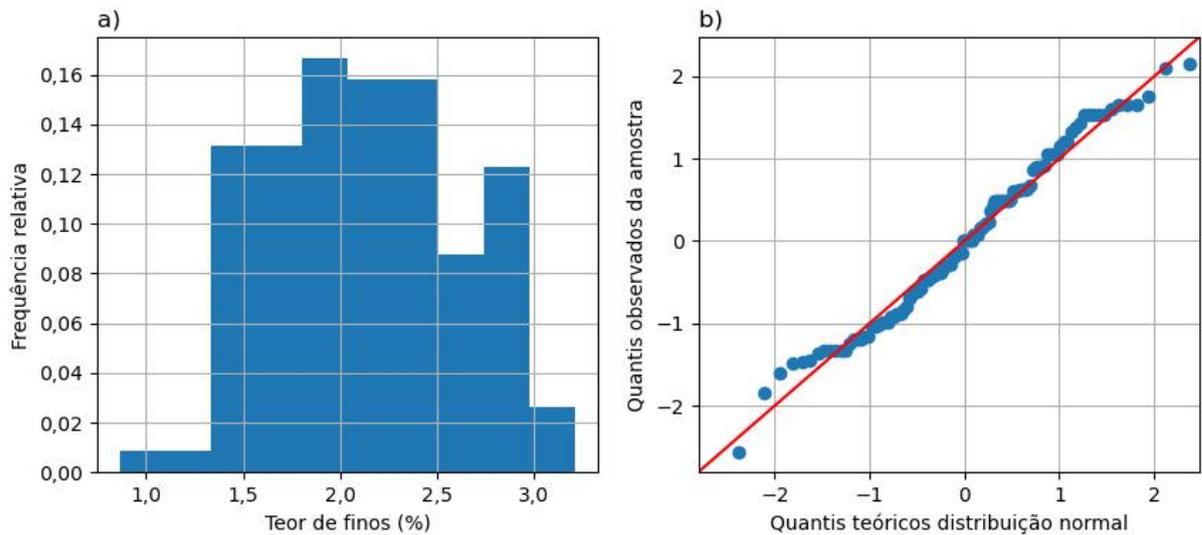
que mais se aproxima da normal, e os de argila estão mais concentrados entre 0 e 7%, apresentando distribuição assimétrica para valores maiores.

Figura 23 – Histograma (a) e gráfico quantil-quantil (b) para os valores de teores de finos das amostras retiradas da área experimental da Ressacada



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 24 – Histograma (a) e gráfico quantil-quantil (b) para os valores de teores de finos transformados para o logaritmo natural (ln)



O teor de finos dos sedimentos é relevante para esse estudo devido à sua correlação significativa com a condutividade hidráulica medida em laboratório por um permo-porosímetro, identificada para amostras em profundidade retiradas das sondagens SD2 e SD3 (LAGE, 2005; CUPERTINO, 2005). A Figura 23 apresenta tanto o histograma como o gráfico quantil-quantil (QQ) da distribuição de teor de finos para as amostras avaliadas do depósito de sedimentos da Ressacada. Observa-se que,

como os teores de argila, o teor de finos apresenta-se distribuído com concentração em valores baixos e assimetria para valores maiores. A média é 9,26% e a mediana 7,30%, com valor mínimo de 2,37%, máximo de 24,82% e desvio padrão de 5,1%.

O gráfico QQ evidencia que a distribuição desses valores não é normal, e o teste de normalidade Shapiro-Wilk, adotando-se nível de significância (α) de 5%, indicou uma diferença significativa entre essa distribuição de probabilidades e o modelo normal (p-valor < 0,001). Os valores foram transformados para o logaritmo natural (ln), e o histograma e gráfico QQ para os valores transformados estão apresentados na Figura 24, indicando uma distribuição próxima da normal. O teste Shapiro-Wilk para os dados transformados confirmou essa hipótese com p-valor = 0,27 ($\alpha = 0,05$).

4.1.2 Condutividade hidráulica

4.1.2.1 Ensaios de campo - testes *slug*

As estatísticas descritivas para todos as campanhas de testes *slug*, assim como divididas por método de interpretação de testes, encontram-se na Tabela 7. Observa-se que a maior média ($3,7 \times 10^{-3} \text{ cm/s}$) assim como a maior variância deu-se para as campanhas e dados interpretados pelo método de Bouwer e Rice (1976). Os valores mínimos e máximos também foram os interpretados a partir desse método, com mínimo de $7 \times 10^{-5} \text{ cm/s}$ e máximo de $3,3 \times 10^{-2} \text{ cm/s}$, uma variação considerável de até 3 ordens de magnitude.

Tabela 7 – Estatística descritiva dos valores de K ($\times 10^{-3} \text{ cm/s}$) para os todos os poços em que os testes '*slug*' foram realizados, divididas também por método de interpretação dos dados dos ensaios.

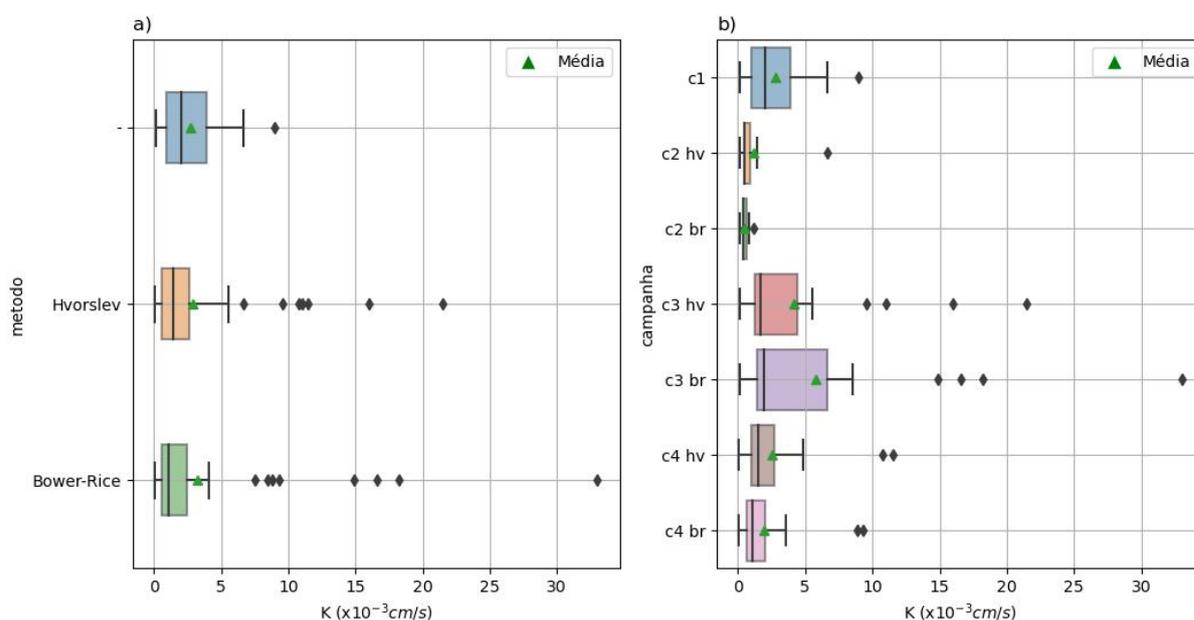
	N	\bar{x}	Q1	M	Q3	σ	σ^2	CV	Mín	Máx	Ass	Curt
Método												
-	14	2,50	0,88	1,81	2,94	2,52	6,35	1,01	0,13	8,98	21,92	152,63
Bower-Rice	44	3,70	0,65	1,25	3,26	6,30	39,73	1,70	0,07	33,00	714,76	18839,34
Hvorslev	44	3,28	0,66	1,34	3,60	4,61	21,21	1,40	0,07	21,50	213,49	3420,21
Todos												
K	102	3,36	0,68	1,42	3,28	5,19	26,92	1,55	0,07	33,00	416,70	10028,85

N: nº de observações, \bar{x} : média, Q1: 1º quartil, M: mediana, Q3: 3º quartil, σ : desvio padrão, σ^2 : variância, CV: coeficiente de variação, Mín: mínimo, Máx: máximo, Ass: assimetria, Curt: curtose K: condutividade hidráulica, br: Bower-Rice, hv: Hvorslev

Fonte: Elaborado pelo autor

As variações dos valores por método de interpretação, assim como por campanha realizada, podem ser visualizadas na Figura 25. É possível observar a maior variação dos valores obtidos a partir do método de Bouwer e Rice (1976). Pela Figura 25b, observa-se que não existe muita variação temporal na caracterização de K a partir dos testes *slug*. A terceira campanha, realizada em dezembro de 2016, época mais úmida, apresentou maior variação nos valores fornecidos.

Figura 25 – Boxplot dos valores de K ($\times 10^{-3} \text{ cm/s}$) para os diferentes métodos de interpretação de testes '*slug*' (a), e para as diferentes campanhas realizadas e respectivos métodos.

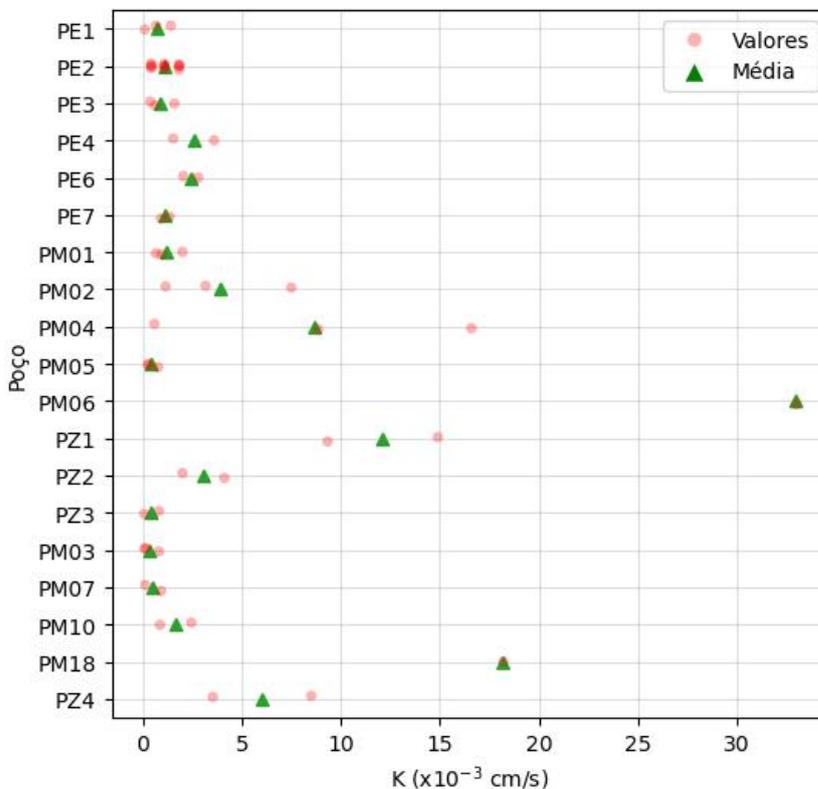


Fonte: Elaborado pelo autor.

Os valores obtidos pelo método de Bouwer e Rice (1976) foram escolhidos como representativos dos ensaios de campo para as posteriores análises, pois é um dos mais indicados para interpretação de testes *slug* realizados em aquíferos livres, assim como também foi o utilizado por Rama (2019) em suas análises. A Figura 26 apresenta um gráfico de dispersão para os valores de K encontrados a partir desse método de interpretação de testes, em relação a cada poço em que foram realizados os ensaios. Conforme este gráfico demonstra, houve variações consideráveis entre poços.

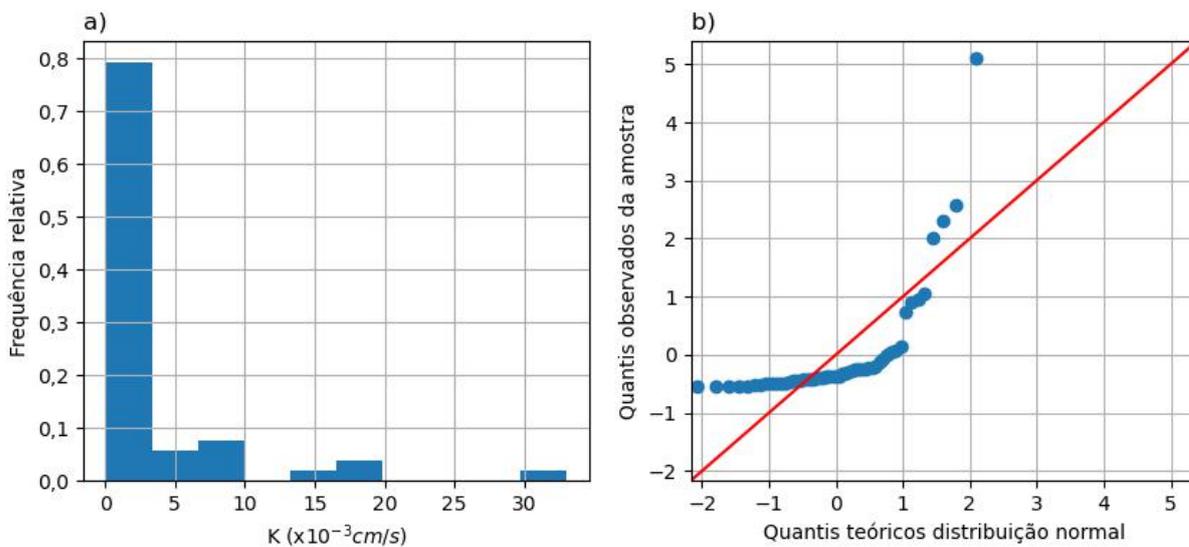
A Figura 27 mostra o histograma e o gráfico QQ para os valores de K para as campanhas com método de interpretação de Bouwer e Rice (1976). Verificamos visualmente que a distribuição frequências de K apresenta valores altos de assimetria e curtose, e portanto os dados desviam significativamente da distribuição normal, o que é confirmado pelo gráfico QQ. Na literatura, a condutividade hidráulica e sua variabilidade são frequentemente caracterizadas a partir da transformação de seus valores para o logaritmo natural (ln).

Figura 26 – Gráfico com as medições de K interpretadas com o método de Bouwer e Rice (1976) em relação aos diferentes poços que foram testados.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 27 – (a) Histograma com valores de K para as campanhas com método de interpretação Bouwer-Rice; (b) Gráfico QQ desses valores.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A Tabela 8 apresenta os valores de K transformados (lnK), e a Figura 28 mostra o histograma e o gráfico QQ para esses valores. A média é -6,61 e a variância de 2,20, com valor mínimo de -9,58 e máximo de 3,41. Observa-se que a distribuição dos valores aproxima-se bastante da normal, e o teste de Shapiro-Wilk não apontou diferença estatística significativa entre essa distribuição e a distribuição normal ($\alpha = 0,05$ e p-valor = 0,65).

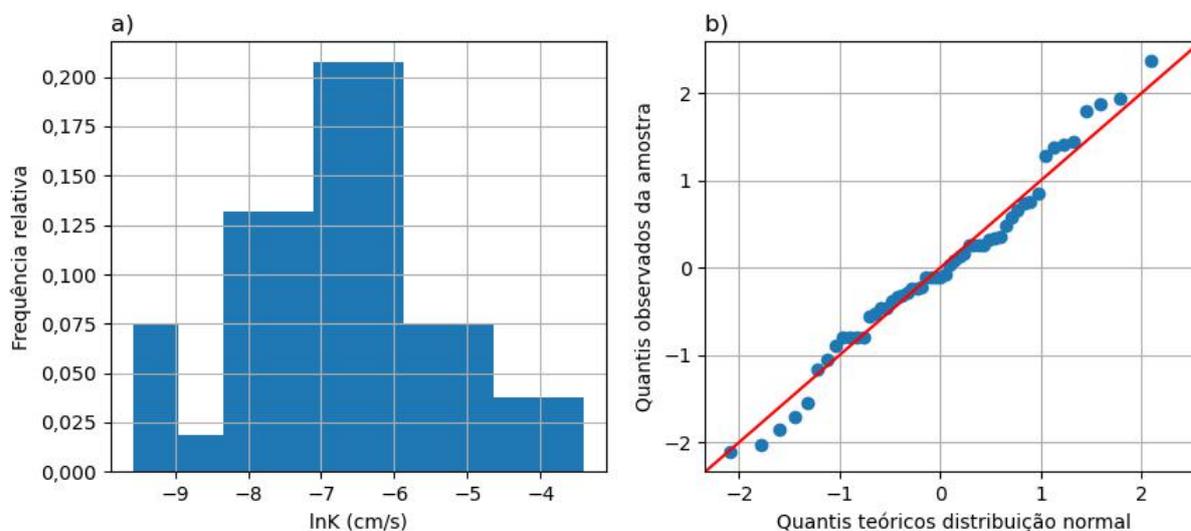
Tabela 8 – Estatística descritiva dos valores de lnK para os poços em que os testes 'slug' foram realizados e para as campanhas com método de interpretação Bouwer-Rice.

	N	\bar{x}	Q1	M	Q3	σ	σ^2	CV	Mín	Máx	Ass	Curt
lnK	44	-6,61	-7,33	-6,69	-5,73	1,48	2,20	-0,22	-9,58	-3,41	0,09	12,31

N: n° de observações, \bar{x} : média, Q1: 1º quartil, M: mediana, Q3: 3º quartil, σ : desvio padrão, σ^2 : variância, CV: coeficiente de variação, Mín: mínimo, Máx: máximo, Ass: assimetria, Curt: curtose

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 28 – (a) Histograma com valores de lnK para as campanhas com método de interpretação Bower-Rice; (b) Gráfico QQ desses valores.



Fonte: Elaborado pelo autor

Segundo a literatura, para valores de $\sigma_{lnK}^2 \approx 2$ um aquífero já é considerado de baixa a média heterogeneidade, e o modelo conceitual de um volume macroscópico homogêneo equivalente já começa a divergir do comportamento real do espalhamento de solutos (BOHLING *et al.*, 2012; FIORI; CVETKOVIC *et al.*, 2016). A variância de lnK encontrada para os testes de slug na área experimental da Ressacada ($\sigma_{lnK}^2 = 2.2$) é semelhante à encontrada com testes slug para o aquífero de Cape Cod (2.25), um aquífero arenoso que também apresentou plumas de traçadores com variações espaciais complexas e que é geralmente classificado como de heterogeneidade baixa (LEBLANC *et al.*, 1991; SPRINGER; GELHAR, 1991).

Essa variância também é próxima da encontrada para o aquífero de Columbus (experimento MADE), tradicionalmente considerado um aquífero bem heterogêneo, com dados de testes *slug* com $\sigma_{\ln K}^2 = 1.8$ (REHFELDT; BOGGS; GELHAR, 1992). Rehfeldt, Boggs e Gelhar (1992) apontaram no entanto que, em comparação com outros testes realizados na área em que desenvolveram o estudo, essa variância é uma anomalia provavelmente causada pelo curto período de duração dos testes (menos de 5 minutos), amostrando apenas a região próxima ao piezômetro que pode ter sofrido deformações nos sedimentos na instalação dos piezômetros, e promovendo uma maior homogeneização no perfil amostrado.

4.1.2.2 Ensaios de laboratório - Permo-porosímetro a gás

As medições a partir de ensaios de campo do tipo *slug* avaliam mais a condutividade hidráulica na direção horizontal do que na vertical (BUTLER, 2005). Nessa seção será analisada a condutividade medida na direção vertical de amostras dos sedimentos. Duas das sondagens profundas realizadas na área experimental 3, SD2 e SD3, possibilitaram coletar 31 amostras deformadas em intervalos contínuos, até 5m de profundidade, que foram encapsuladas e submetidas a ensaios de laboratório para determinação da porosidade e da permeabilidade em um permo-porosímetro a gás. Nesses equipamentos a permeabilidade é medida através do fluxo de um gás na direção vertical das amostras, e os valores são convertidos para a condutividade hidráulica da água a partir de uma fórmula. Mais detalhes sobre as amostras, o equipamento e o procedimento experimental encontram-se em Lage (2005) e Cupertino (2005).

A Tabela 9 apresenta as estatísticas descritivas para os valores de K assim como os valores transformados para lnK medidos no permo-porosímetro. O valor médio de K é de $5,3 \times 10^{-3} \text{ cm/s}$ e a variância encontrada é de 2,42. O valor máximo de K ($8,3 \times 10^{-3} \text{ cm/s}$) é quase quatro vezes o valor mínimo ($2,2 \times 10^{-3} \text{ cm/s}$). Observa-se que a assimetria e a curtose são baixas, e a distribuição dos valores sem transformação é bem próxima da normal. Para os valores de K transformados (lnK), a média é de -5,28 e variância de 0,09, e as estatísticas de assimetria e curtose indicam que é uma distribuição bem próxima da normal também.

Tabela 9 – Estatística descritiva para os valores de K medidos pelo permo-porosímetro a gás para as amostras de SD2 e SD3

	N	\bar{x}	Q1	M	Q3	σ	σ^2	CV	Mín	Máx	Ass	Curt
K ($10^{-3} \cdot \text{cm/s}$)	31,00	5,30	4,22	4,84	6,63	1,56	2,42	0,29	2,20	8,33	1,04	12,30
lnK	31,00	-5,28	-5,47	-5,33	-5,02	0,31	0,09	-0,06	-6,12	-4,79	-0,01	0,03

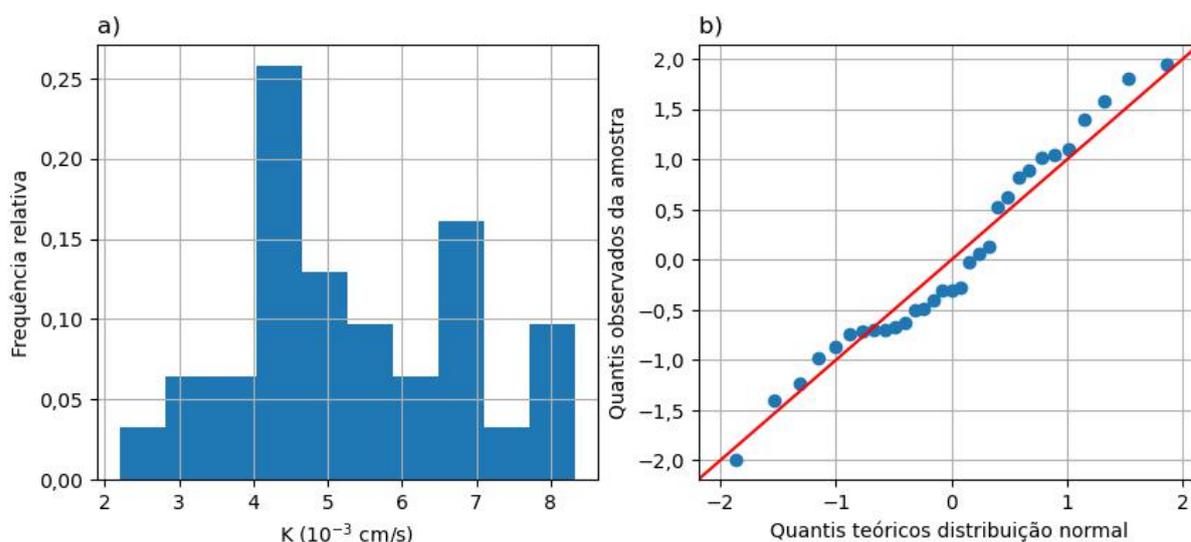
N: nº de observações, \bar{x} : média, Q1: 1º quartil, M: mediana, Q3: 3º quartil, σ : desvio padrão, σ^2 : variância, CV: coeficiente de variação, Mín: mínimo, Máx: máximo, Ass: assimetria, Curt: curtose K: condutividade hidráulica

As figuras 29 e 30 apresentam os histogramas (a) e os gráficos quantil-quantil (b) para os valores de K assim como os valores transformados de lnK. Para as duas dis-

tribuições temos uma proximidade com a distribuição normal, e o teste de Shapiro-Wilk não acusou diferença estatística significativa em relação à hipótese de normalidade para as duas ditribuições, K (p-valor = 0,25) e $\ln K$ (p-valor = 0,28), para uma significância $\alpha = 0,05$.

Nota-se que, para as caracterizações de K a partir do permo-porosímetro, foi encontrada uma média maior que nos dados de testes *slug*, além de uma menor variância. Em geral é esperado que amostras em escala menor tenham em média valores menores que em escalas maiores, como no caso dessas amostras analisadas em comparação com os ensaios de campo, pois existe menor probabilidade de parcelas mais permeáveis dos sedimentos serem amostradas (ROVEY; CHERKAUER, 1995; ZLOTNIK *et al.*, 2000). No entanto, é importante ressaltar que, considerando que as medições foram obtidas a partir de amostras deformadas, essas tendem a fornecer valores médios de K maiores que os obtidos em amostras intactas, devido à perda de estrutura da amostra (BUTLER, 2005).

Figura 29 – (a) Histograma dos valores de K nas amostras das sondagens SD2 e SD3; (b) Gráfico quantil-quantil em relação à distribuição normal.

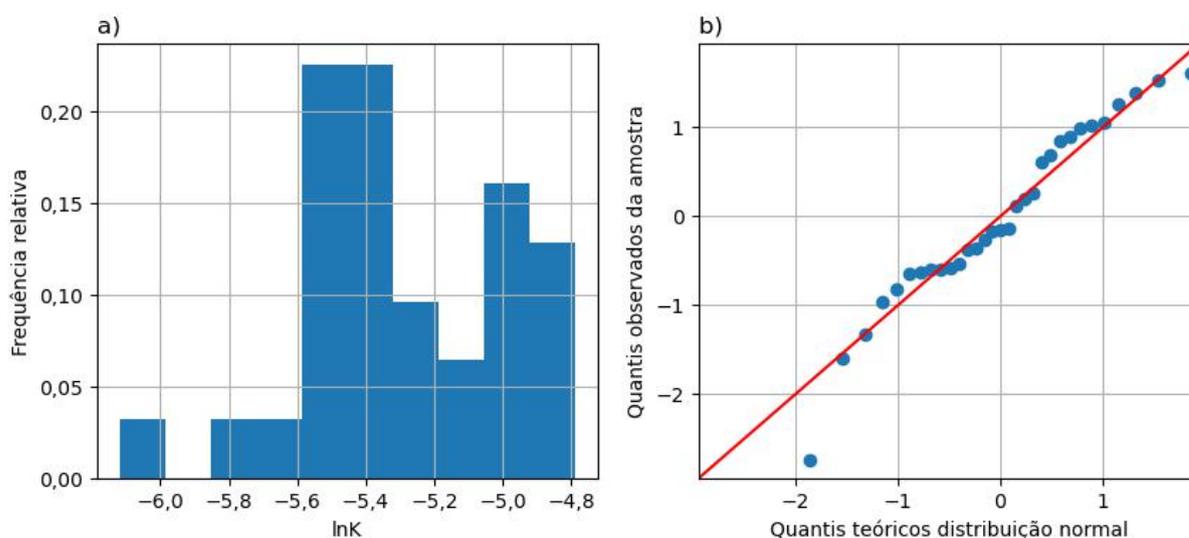


Fonte: Elaborado pelo autor.

É importante comparar esses dados com os encontrados em outros aquíferos melhor caracterizados. Para o aquífero de Borden, um depósito arenoso considerado na literatura como de baixa heterogeneidade, medições com permeâmetro (que têm suporte de medição semelhante ao permo-porosímetro) indicaram $\sigma_{\ln K}^2 = 0,29$, e a variância aumentou com a escala de medição em uma faixa investigada de 10m, enquanto que a média não aumentou com o suporte (SUDICKY, 1986; ROVEY; CHERKAUER, 1995).

Para o aquífero de Cape Cod foi encontrada uma variância mais próxima (0,14) para medições também realizadas com permeâmetro, e os dados indicam também

Figura 30 – (a) Histograma dos valores de $\ln K$ nas amostras das sondagens SD2 e SD3; (b) Gráfico quantil-quantil em relação à distribuição normal.



Fonte: Elaborado pelo autor.

um aumento da variância com a escala de medição (para testes *slug* $\sigma_{\ln K}^2 = 2,25$) (HESS; WOLF; CELIA, 1992; SPRINGER; GELHAR, 1991). Neste caso, entretanto, as medições em menor escala foram obtidas em um transecto de 45m, enquanto que as medições com testes *slug* em uma área de 30km^2 . Isso significa que uma amostragem espacial muito maior para os testes *slug* resultou em uma variância maior do que para as medições em menor escala.

No caso das caracterizações analisadas nesse trabalho, esta diferença de escala de amostragem também provavelmente é o caso, pois os dados do permo-porosímetro foram obtidos a partir de amostras em apenas duas sondagens em uma profundidade de no máximo 5m, com distância entre as duas de 21 m, o que aumenta a probabilidade de correlação entre os valores e portanto redução da variância. Os testes *slug* cobriram uma região maior tanto na horizontal, com uma área de até 30000m^2 , como na vertical, com seções filtrantes englobando quase toda a profundidade do aquífero. Em Columbus, as heterogeneidades do aquífero local resultaram em valores de K obtidos através de medições com permeâmetro com $\sigma_{\ln K}^2 = 5,5$, e uma variância diminuindo com o aumento da escala de medição (ZECH *et al.*, 2021).

4.1.3 Relações entre condutividade, granulometria e litofácies

As amostras retiradas das sondagens SD2 e SD3 foram também utilizadas para análise de alguns parâmetros físicos dos sedimentos em profundidade, como: massa específica, granulometria, grau de saturação, umidade, porosidade e densidade real (D20) dos grãos. Como todas as medições foram realizadas a partir das mesmas amostras, os valores encontrados puderam ser correlacionados.

Figura 31 – Matriz de correlação com mapa de calor para os coeficientes de correlação de Spearman (diagonal inferior) e de Pearson (diagonal superior) entre as propriedades medidas nas amostras das sondagens SD2 e SD3.



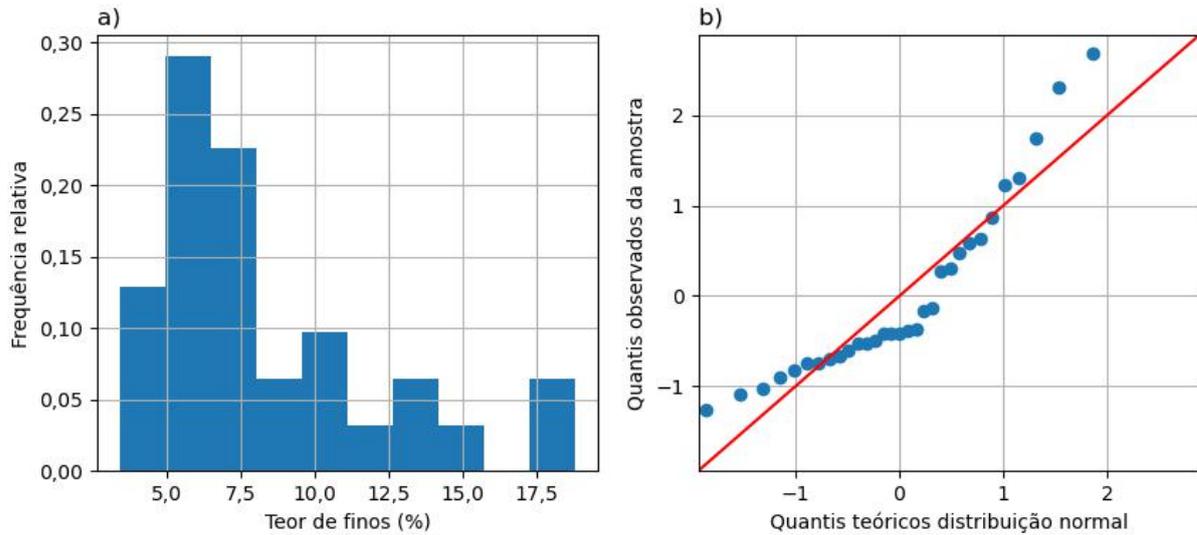
Fonte: Elaborado pelo autor.

A Figura 31 apresenta uma matriz de correlação com mapa de calor para os coeficientes de correlação de Spearman e de Pearson para essas propriedades medidas. Observa-se que a correlação mais significativa é entre K e o teor de finos das amostras, conforme analisado por Lage (2005) e Cupertino (2005). As outras correlações maiores que 0.5 que (em módulo) representam propriedades em que umas foram utilizadas no cálculo de outras, como massa específica, umidade e porosidade total, e portanto isso explica suas correlações. A correlação entre K e teor de finos é independente dos métodos de estimativa.

Os valores de K já foram analisados na seção anterior. A Figura 32 apresenta a distribuição dos teores de finos para as 31 amostras analisadas. Observa-se que a distribuição é representativa da distribuição do total das amostras analisadas nesse trabalho (Seção 4.1.1), com média de 8.32, desvio padrão de 3.9, teor mínimo de 3.4% máximo de 18.8%. O teste Shapiro-Wilk indica um p-valor de 0,002, e portanto podemos descartar a hipótese de normalidade para essa distribuição com nível de

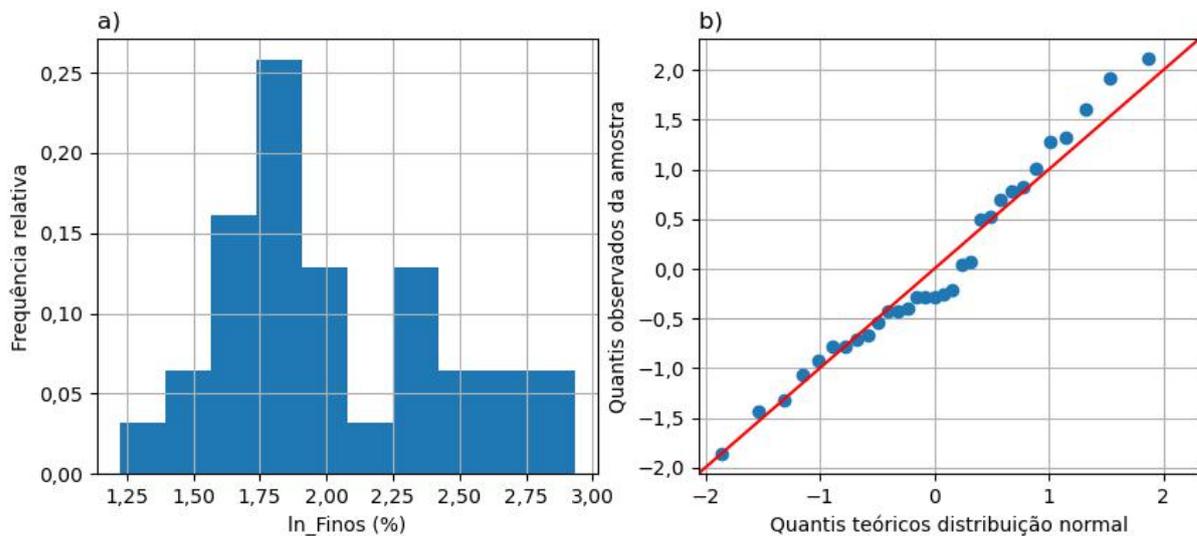
significância de 5%. Ao transformar os valores da fração de finos para o logaritmo natural, obtemos a distribuição apresentada na figura Figura 33. Os valores transformados podem ser considerados como provenientes de uma distribuição normal (p -valor = 0,39 e $\alpha = 0,05$), a partir do teste Shapiro-Wilk.

Figura 32 – (a) Histograma dos teores de finos nas amostras das sondagens SD2 e SD3; (b) Gráfico quantil-quantil em relação à distribuição normal.



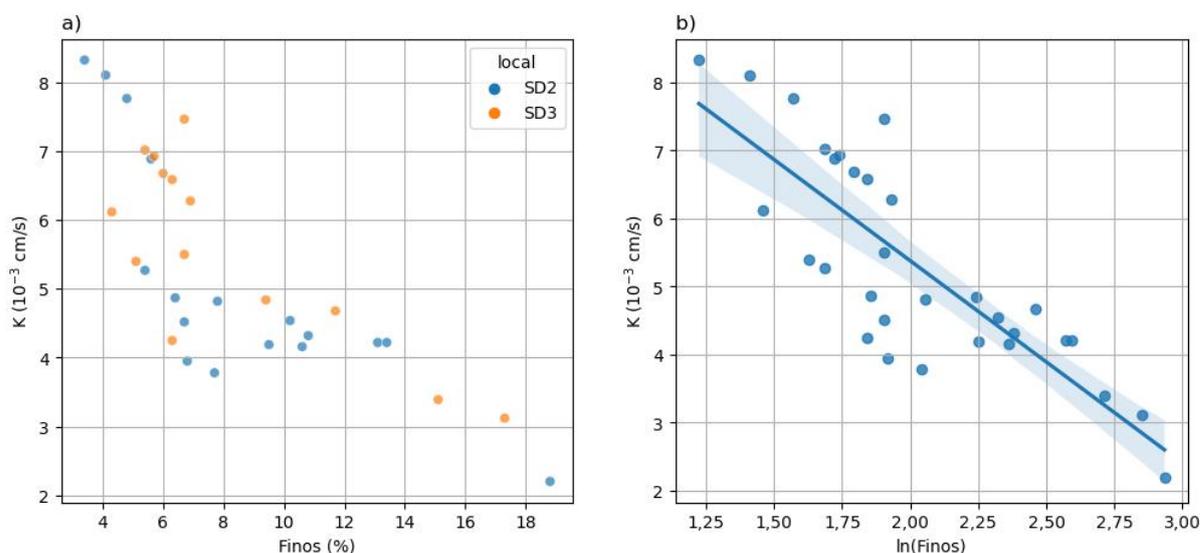
Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 33 – (a) Histograma dos teores de finos nas amostras das sondagens SD2 e SD3 transformados para o logaritmo natural (ln); (b) Gráfico quantil-quantil em relação à distribuição normal.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 34 – Gráfico de dispersão da relação entre o teor de finos e K para as amostras retiradas das sondagens SD2 e SD3.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A Figura 34 (a) mostra o gráfico de dispersão entre o teor de finos e K. Nota-se que a associação significativa entre essas duas propriedades é não linear. Isso explica porque o coeficiente de correlação de Spearman (-0,82) ser maior que o de Pearson (-0,78) para as duas variáveis, pois o último indica relações lineares. A Figura 34 (b) indica que, ao transformar a fração de finos para o logaritmo natural, a relação entre as variáveis torna-se linear. Foi realizada uma regressão linear entre esses valores, e a equação encontrada para a relação está apresentada na Equação (17).

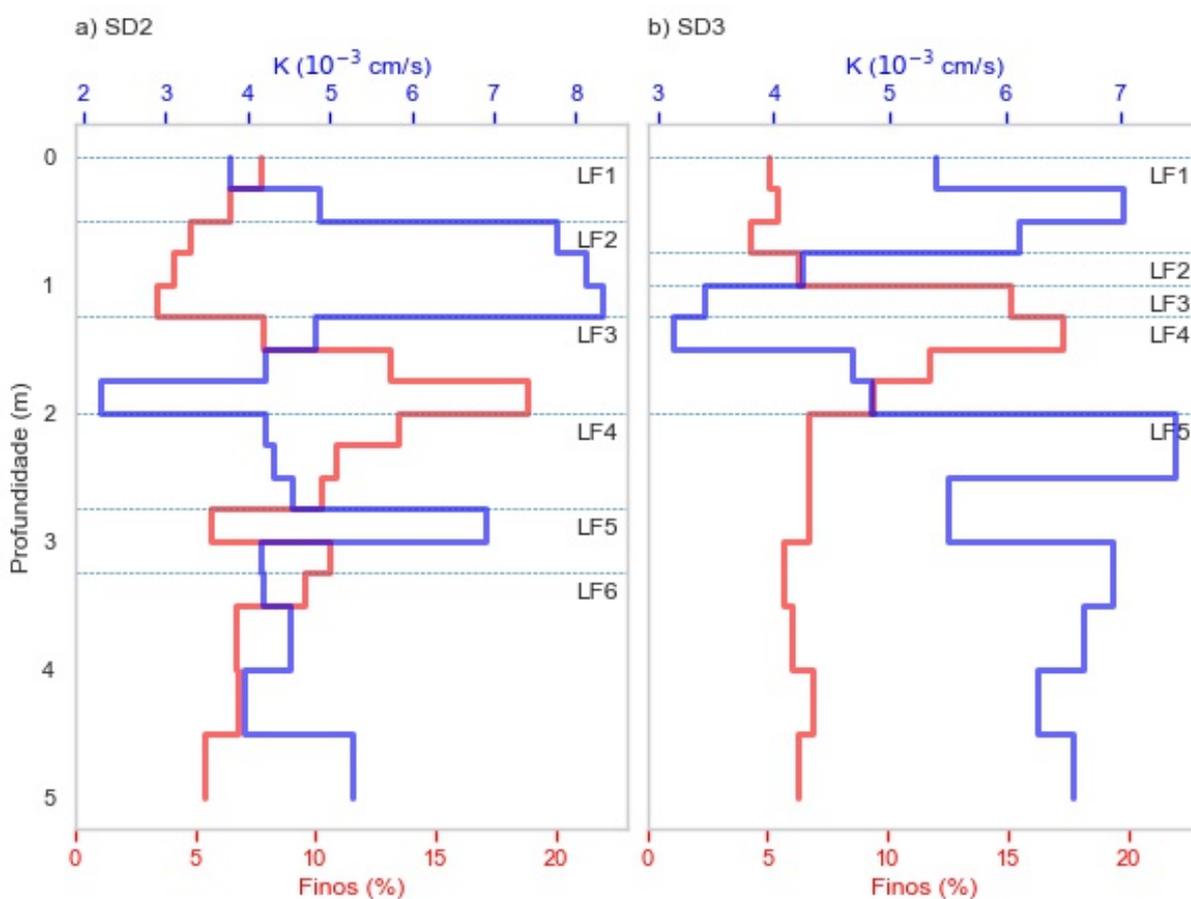
$$K = 1,1 \times 10^{-2} - 3 \times 10^{-3} \times \ln(\text{Finos}) \quad (17)$$

O coeficiente de determinação (R^2) encontrado para essa relação é de 0,70, o que indica um bom ajuste, pois 70% da variância de K é explicada pelo modelo. O intervalo de confiança de 95% para os coeficientes da Equação (17) é entre 1×10^{-2} e $1,3 \times 10^{-2}$ para o intercepto, e entre -4×10^{-3} e -2×10^{-3} para a inclinação da reta.

Na Figura 35 podemos visualizar o perfil vertical para K e a fração de finos. Nota-se como a variação da granulometria fina afeta inversamente a condutividade. Os limites entre as litofácies identificadas nas sondagens, em função da profundidade, também foram incluídos nos gráficos. Os perfis de profundidade para as duas propriedades na Figura 35 indicam que grandes variações dessas propriedades ocorrem principalmente na transição entre fácies. Dessa forma, caracterizar a heterogeneidade local a partir do conceito de hidrofácies torna-se plausível. Allen-King *et al.* (1998) também observou uma variação semelhante utilizando amostras de K em escala menor que a espessura das fácies para o aquífero de Borden, e concluiu que a representação

das heterogeneidades locais pelo conceito de hidrofácies seria viável tanto para K como para o coeficiente de sorção.

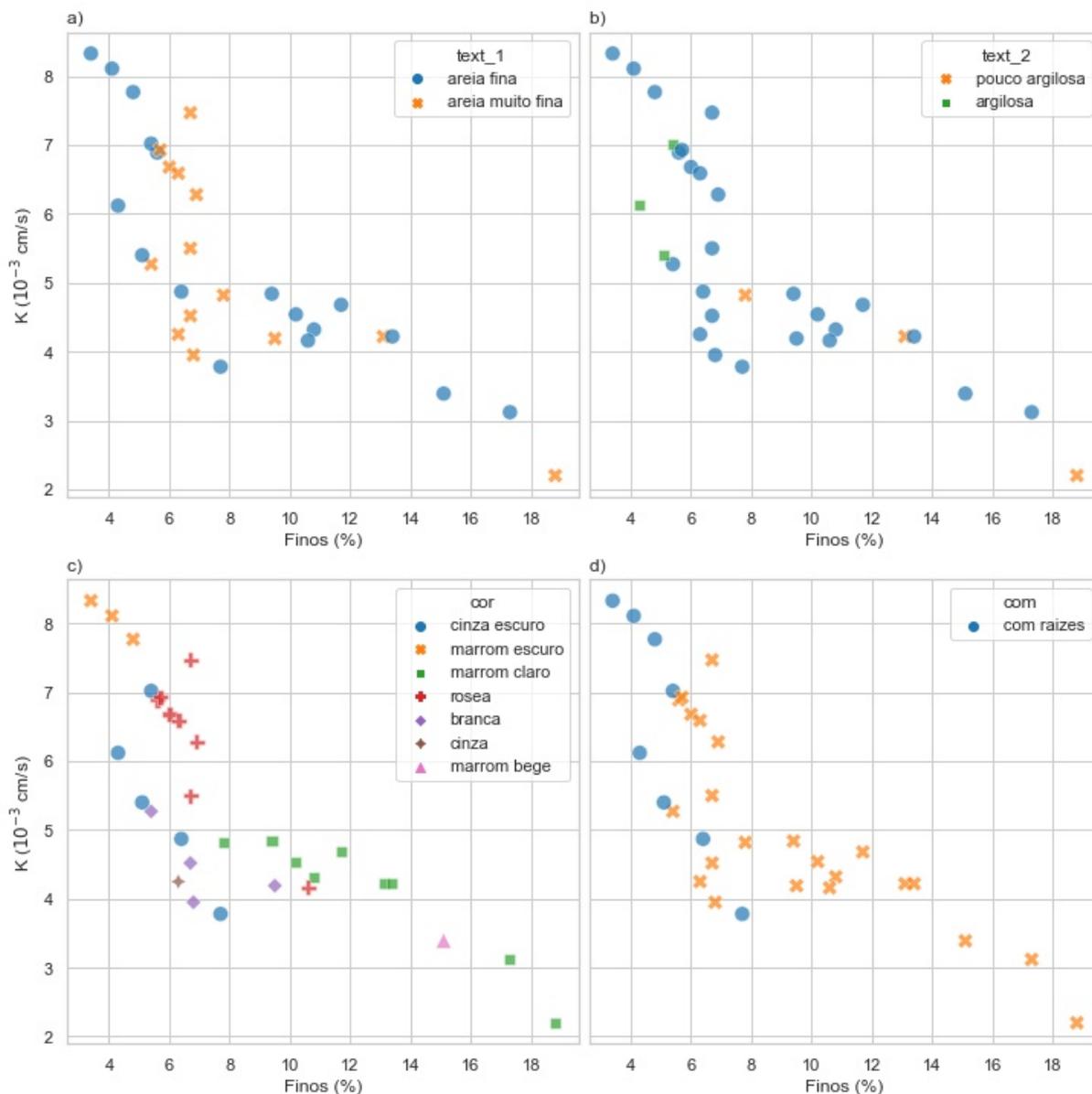
Figura 35 – Perfil de profundidade para o teor de finos (%) e K para as amostras das sondagens SD2 (a) e SD3 (b).



Fonte: Elaborado pelo autor.

A Figura 36 apresenta a dispersão da relação entre K e finos, mais a dimensão de cada elemento descritivo identificado para as litofácies. Observa-se que amostras em fácies descritas como areia muito fina têm uma pequena tendência a terem maiores valores de finos e menores valores de K. Em relação à textura secundária, amostras em fácies descritas como argilosa não apresentam teor alto de finos, mas sim o contrário, enquanto que as em fácies descritas como pouco argilosas apresentam tendência a teor maior de finos e magnitudes menores de K.

Figura 36 – Relação entre teor de finos, condutividade hidráulica, e elementos descritivos das litofácies associadas às amostras retiradas das sondagens SD2 e SD3: (a) textura primária; (b) textura secundária; (c) cor; (d) elementos adicionais.

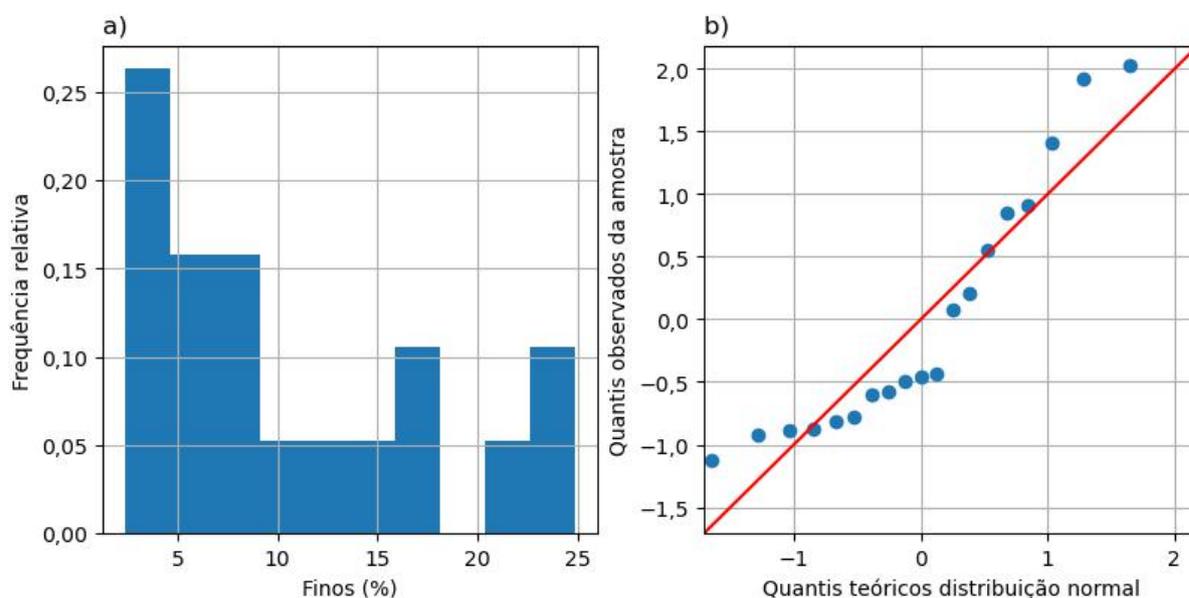


Fonte: Elaborado pelo autor.

Para as cores descritas, observa-se associações entre as diferentes cores e a relação entre as propriedades. A cor marrom escuro está associada às amostras com baixo teor de finos e alta condutividade. Fácies de cor cinza escuro estão associadas a amostras com baixo teor de finos, mas com uma variação considerável em K, semelhante à existente para amostras de sedimentos de cor rósea, que em geral têm uma leve tendência a maior teor de finos. Fácies descritas como marrom claro e marrom bege estão associadas às amostras com maiores teores de finos e menores magnitudes de K. Em relação aos elementos adicionais presentes nas litofácies, as que incluíram presença de raízes estão associadas às que foram descritas como cinza escuro ou marrom escuro, e portanto apresentam amostras com baixo teor de finos (até 8%). No entanto, a diferença entre o valor mínimo e máximo de K para essas amostras é de até duas vezes.

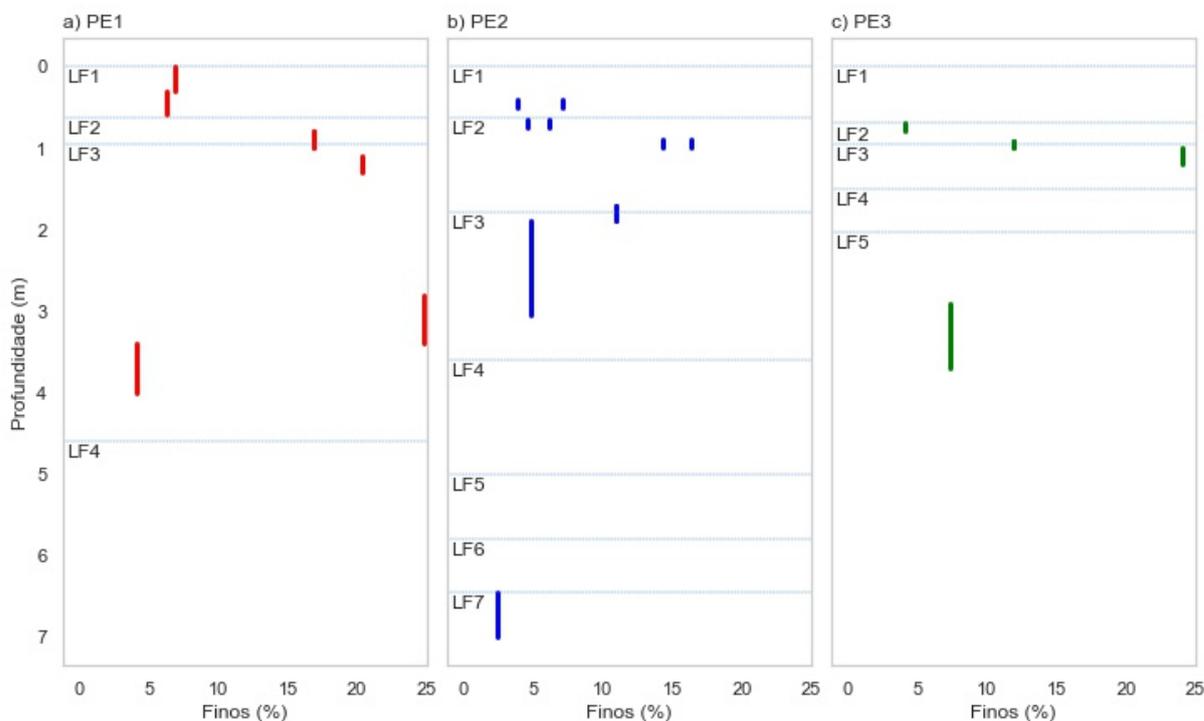
As sondagens PE1, PE2 e PE3 tiveram amostras coletadas em profundidade para ensaios físicos em laboratório. Os dados dos resultados dessas caracterizações foram retirados de Lage (2005) (amostras em perfil vertical para as 3 sondagens) e Chiaranda (2006) (amostras até 1m de profundidade). A Figura 37 mostra a distribuição de probabilidades do teor de finos para as amostras coletadas. O histograma e o gráfico QQ indicam que para essas amostras o teor de finos também não segue distribuição normal, e a distribuição também é semelhante à distribuição do total de amostras analisadas na Seção 4.1.1. A aplicação do teste de Shapiro-Wilk encontrou diferença significativa entre essa distribuição e a hipótese de normalidade (p -valor = 0,038).

Figura 37 – Histograma dos valores de teores de finos (a) para as amostras das sondagens PE1, PE2 e PE3; e gráfico quantil-quantil em relação à distribuição normal (b).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 38 – Perfil vertical dos valores de teores de finos (%) nas amostras das sondagens (a) PE1, (b) PE2 e (c) PE3.

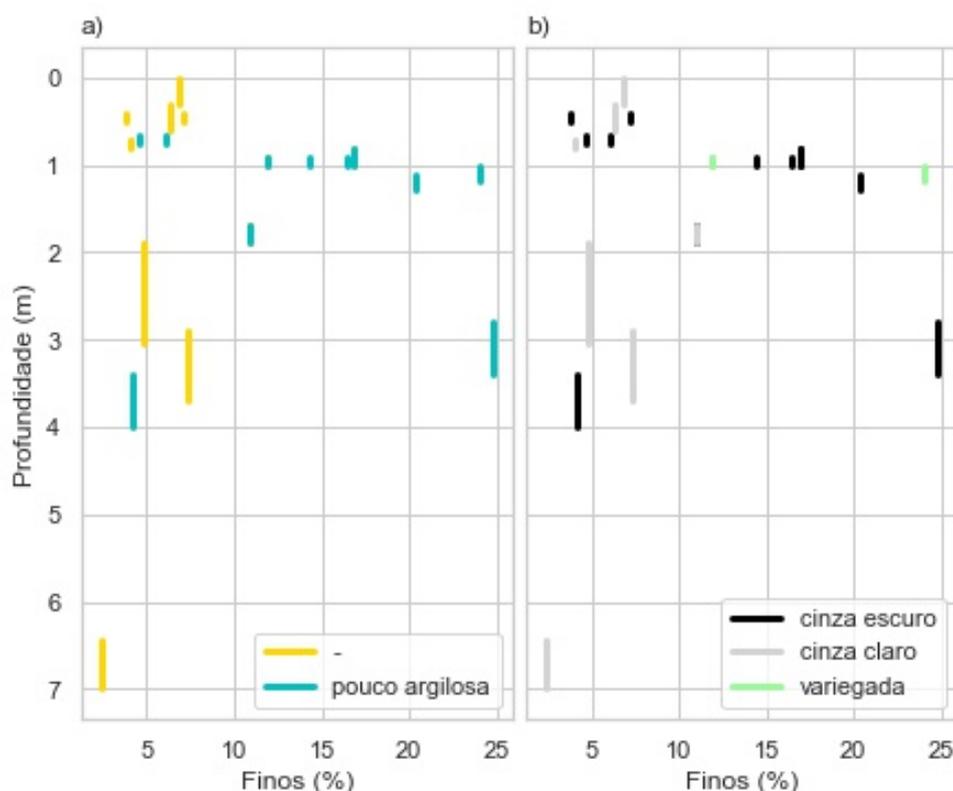


Fonte: Elaborado pelo autor.

A Figura 38 apresenta o perfil vertical para essas amostras, e os limites entre as litofácies identificadas nessas sondagens foram incluídos nos gráficos. Assim como para as amostras das sondagens SD2 e SD3, também pode-se observar variações mais significativas em pontos próximos aos limites entre-fácies, em geral na segunda ou terceira litofácia a partir da superfície. Para PE1 observamos que temos o valor máximo de teor de finos para todas as amostras analisadas nesse trabalho, que encontra-se em amostra na terceira fácies identificada na sondagem PE1, com grande espessura. Para as outras (PE2 e PE3) encontramos altos teores por volta de 1m de profundidade.

Em relação às descrições das litofácies associadas, e seus elementos descritivos, todas as amostras pertencem a fácies descritas como areia fina, apenas uma com matéria orgânica (PE3), e nenhuma com designação de quartzosa em relação à composição mineral. A Figura 39 apresenta o perfil em profundidade do teor de finos para todas as amostras, divididas em relação à textura secundária e à cor. Amostras com maiores teores de finos estão todas associadas a fácies descritas como pouco argilosas, assim como as descritas com cores cinza escuro ou variegada.

Figura 39 – Perfil vertical dos valores de teores de finos (%) para todas as amostras das sondagens PE1, PE2 e PE3, com diferenciação por textura secundária (a) e cor (b) da fácies associada à amostra.

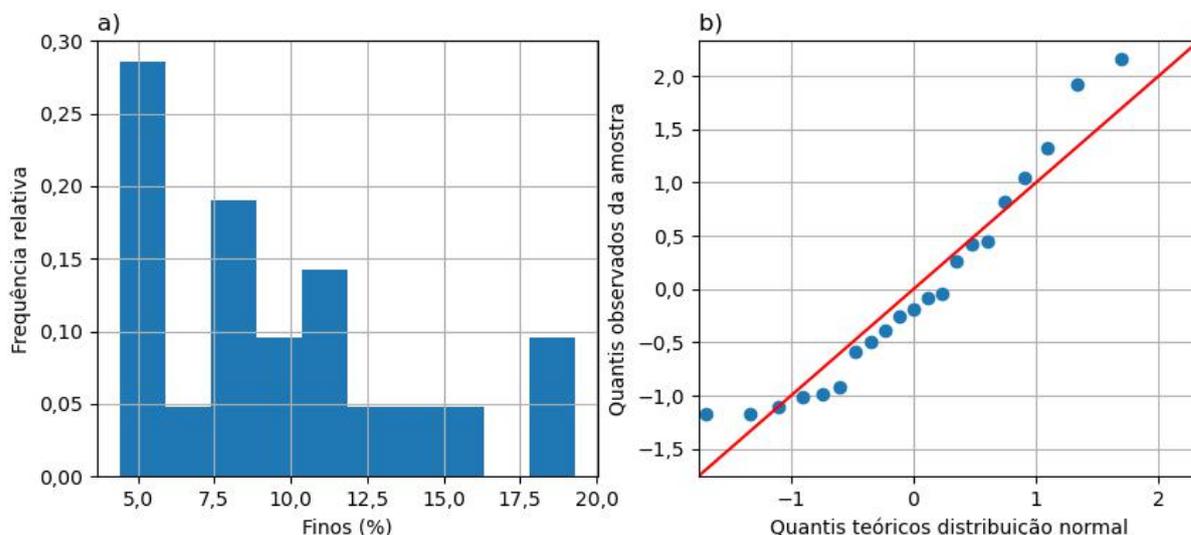


Fonte: Elaborado pelo autor.

Os trabalhos que analisaram os resultados de alguns dos experimentos realizados na área experimental da Ressacada também forneceram informações sobre sondagens realizadas nos pontos em que foram instalados poços de monitoramento, assim como de análises granulométricas conduzidas e que foram associadas às litofácies identificadas. Na Figura 40 apresenta-se a distribuição dos teores de finos em todas as amostras retiradas de sondagens nas áreas desses experimentos. Novamente foi observada uma distribuição assimétrica para valores maiores, semelhante à das outras amostragens avaliadas.

As análises granulométricas disponibilizadas nesses trabalhos foram associadas pelos autores diretamente às litofácies, sem informações mais específicas em relação à profundidade e ao intervalo amostrado. A Figura 41 apresenta o perfil vertical dos intervalos em profundidade das litofácies identificadas associadas ao teor de finos, caracterizados para as sondagens na área dos experimentos OQP-B100 e BAF-B20. Esses experimentos são bem próximos às sondagens SD2 e SD3. Para as sondagens do experimento OQP-B100, o teor de finos é médio a alto, de quase 15%, por volta de 1 m de profundidade, e a partir de 3 m apresenta os maiores teores. Já nas amostras das sondagens do experimento BAF-B20, foi encontrado um teor de finos alto (quase

Figura 40 – Histograma dos valores de teores de finos (a) para as amostras das sondagens nas áreas experimentais; e gráfico quantil-quantil em relação à distribuição normal (b).

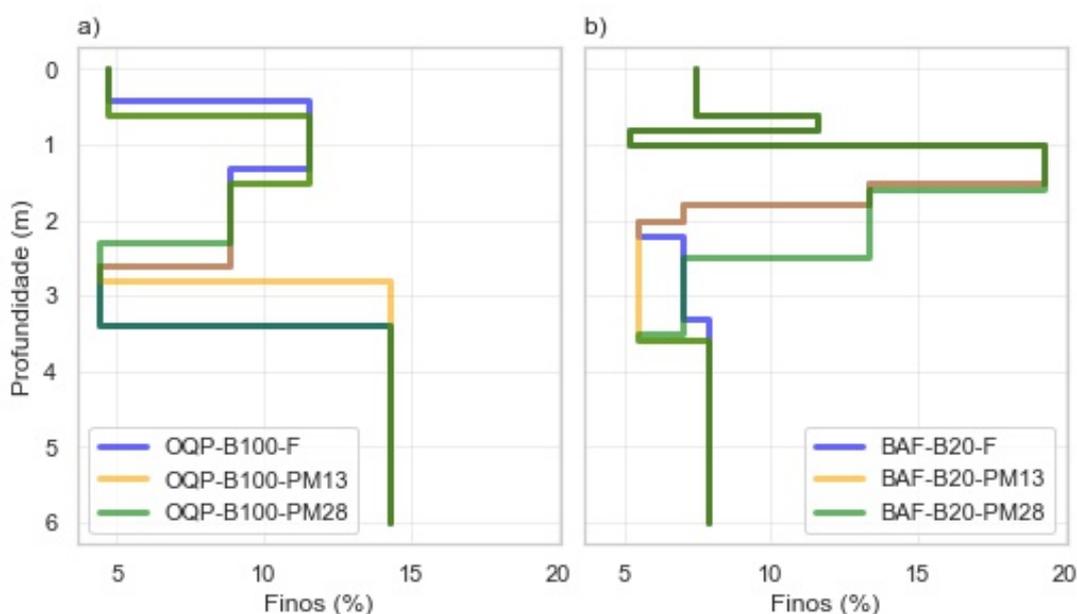


Fonte: Elaborado pelo autor.

20%) entre 1 e 2 m de profundidade, com diminuição para profundidades maiores, semelhante ao perfil em profundidade das sondagens SD2 e SD3.

Na Figura 42 é apresentado o perfil vertical das litofácies e do teor de finos para as sondagens dos experimentos ANM-B100, ANM-B20 e BAA-B20. Os dados para

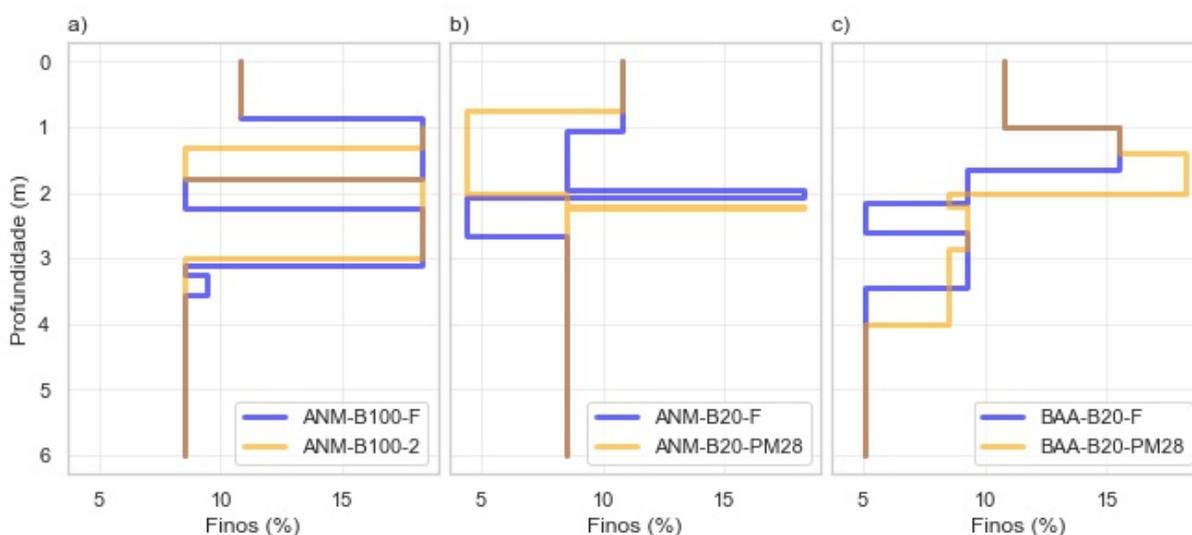
Figura 41 – Perfil vertical dos valores de teores de finos (%) para todas as amostras das sondagens realizadas nos experimentos OQP-B100 e BAF-B20.



Fonte: Elaborado pelo autor.

as sondagens das áreas ANM-B100 e B20 foram fornecidos por Chiaranda (2011), enquanto que da área BAA-B20 foram obtidos do trabalho de D. T. Ramos (2013). Conforme apontado pela última autora, as análises granulométricas associadas às fácies identificadas nas sondagens da área BAA-B20 foram as realizadas por Chiaranda (2011). Isso explica muitas terem a mesma porcentagem de finos associada, e aumenta a incerteza sobre a partir de qual sondagem e de qual fácies que a amostra foi retirada. Observa-se que em geral as fácies com maiores teores de finos encontram-se também entre 1 e 2 metros de profundidade. A área experimental ANM-B100, entretanto, apresentou duas camadas mais argilosas em profundidades entre 1 m e 1,5 m e entre 2 e 3 m. A partir de 3 m em geral os teores de finos atingem um valor médio, em torno de 8%.

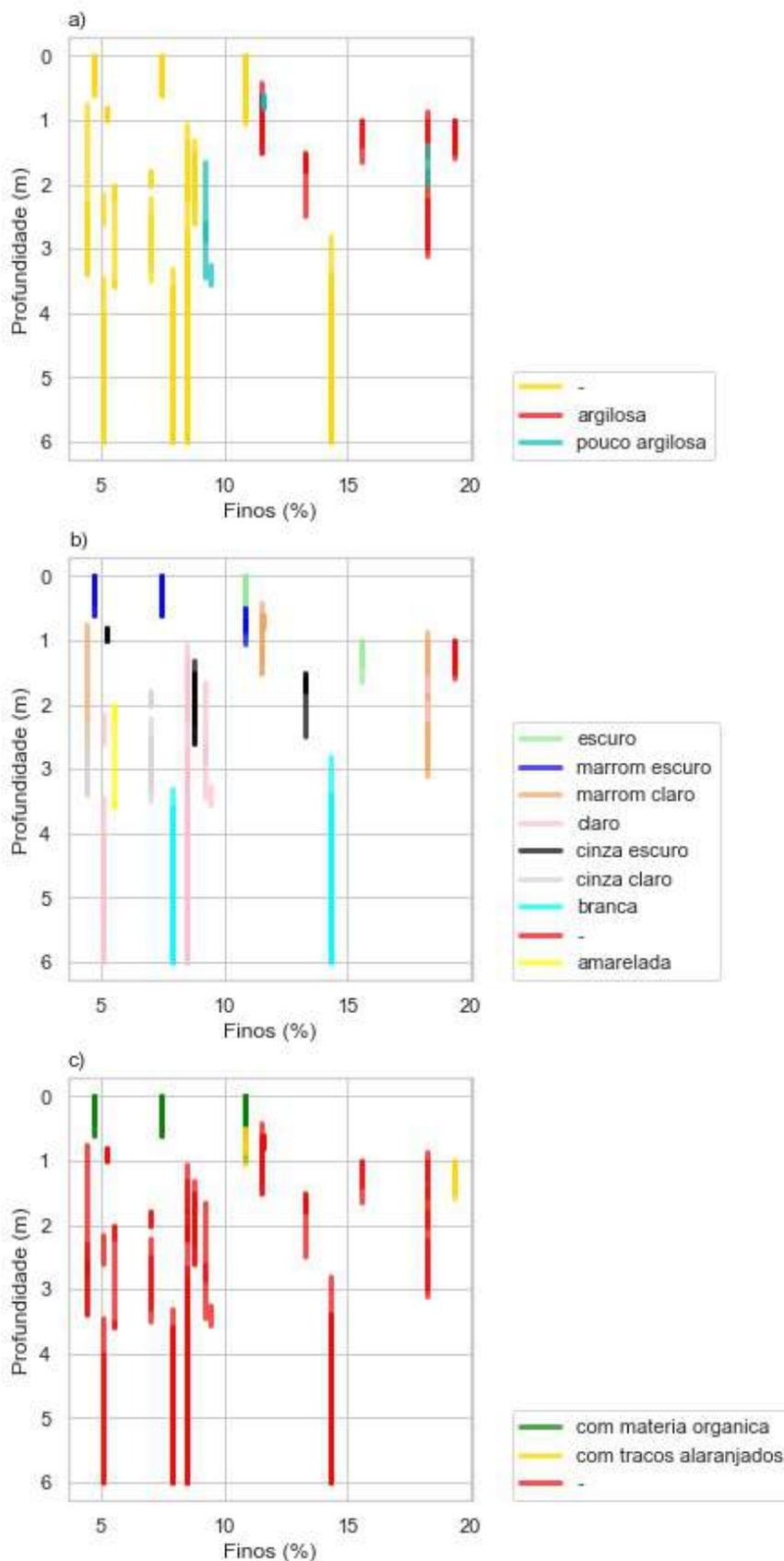
Figura 42 – Perfil vertical dos valores de teores de finos (%) para todas as amostras das sondagens realizadas nos experimentos ANM-B100, ANM-B20 e BAA-B20.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A Figura 43 apresenta os intervalos de cada litofácies, associados ao teor de finos, relativos a todas as sondagens das áreas experimentais. Esses intervalos também estão associados à descrição de textura secundária, cor e elementos adicionais. Em relação à textura secundária, nota-se que as fácies descritas como argilosas estão associadas aos maiores teores de finos, enquanto que as pouco argilosas também apresentam teores médios a altos. Fácies de cores marrom claro, cinza escuro, ou apenas descritas como escura, quando associadas às descrições de argilosa (ou pouco argilosas) tendem a apresentar maior teor de finos, assim como quando foi observada a presença de traços alaranjados nos sedimentos.

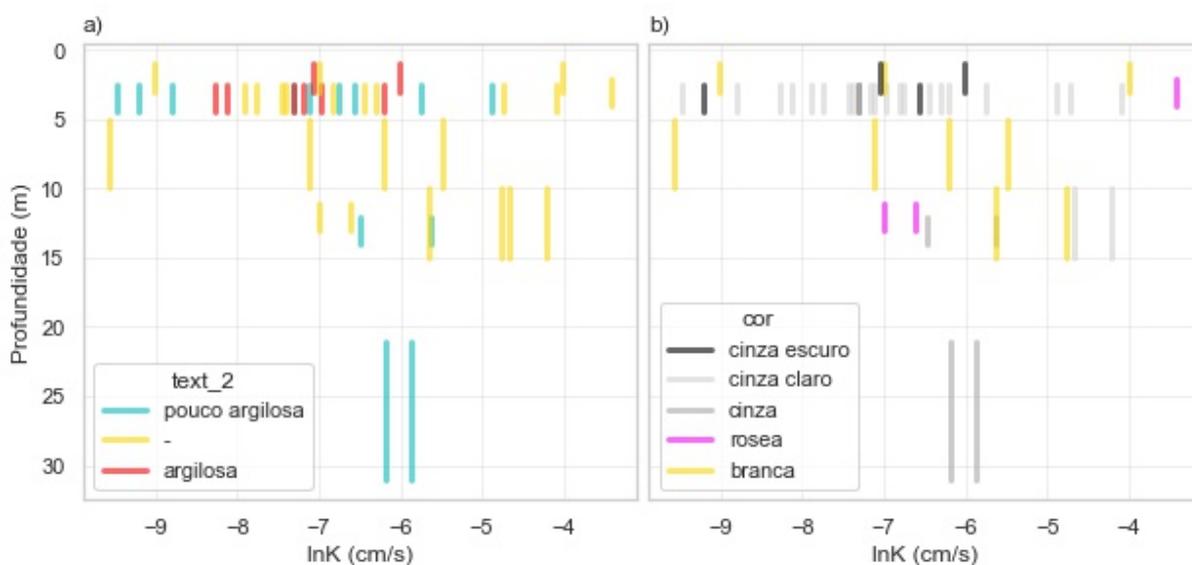
Figura 43 – Perfil vertical dos valores de teores de finos (%), para todas as amostras das sondagens realizadas nas áreas dos experimentos, discriminados pelos elementos descritivos identificados.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Os ensaios de campo (*slug tests*), analisados na Seção 4.1.2.1, também tiveram os intervalos de profundidade amostrados (seção dos filtros) associados às litofácies e a seus elementos descritivos. A Figura 44 apresenta o perfil vertical em profundidade dos valores de $\ln K$ para todos os testes interpretados pelo método de Bouwer e Rice (1976), e categorizados em função da textura secundária e da cor. Verifica-se novamente que fácies descritas como argilosas ou pouco argilosas tendem a menores valores de condutividade hidráulica, e estão muitas vezes associadas a fácies de cor cinza, podendo ser claro ou escuro. Observa-se alguns valores muito baixos de K para fácies descritas como da cor branca, mesmo não descritas como argilosas (ou pouco argilosas). A cor rósea está associada a valores acima da mediana de $\ln K$.

Figura 44 – Perfil vertical em profundidade dos valores de $\ln K$ para todos os testes *slug* interpretados pelo método de Bower-Rice realizados nas áreas dos experimentos discriminados pelos elementos descritivos identificados.



Fonte: Elaborado pelo autor.

4.2 DEFINIÇÃO DE HIDROFÁCIES

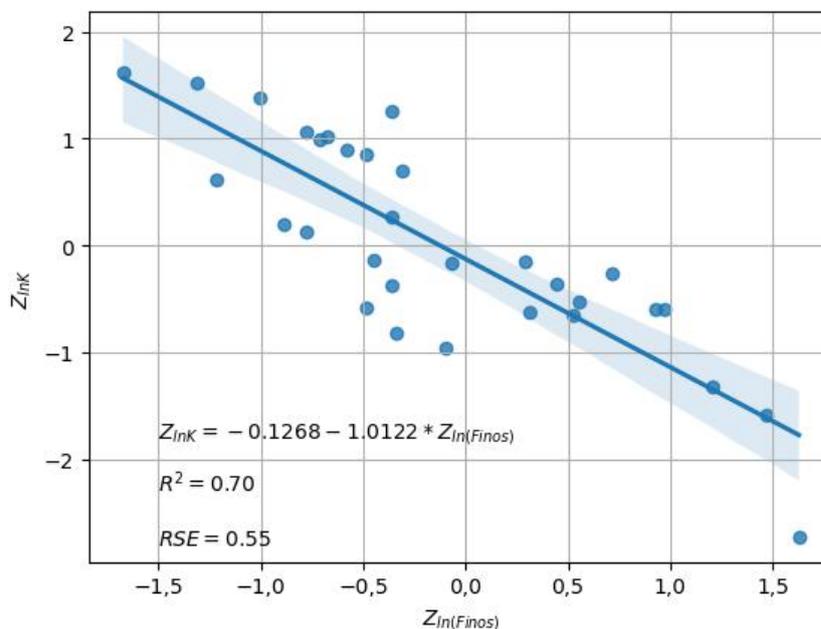
A partir das relações observadas nas análises anteriores, foi desenvolvido um método para associar as informações obtidas de distribuição da condutividade hidráulica e da granulometria fina dos sedimentos às litofácies identificadas nas sondagens, com o objetivo de agrupá-las em grupos de hidrofácies, discriminando entre as mais e menos permeáveis. O primeiro passo envolveu transformar as variáveis de interesse, para possibilitar a associação de medições feitas por métodos diferentes em uma mesma escala de variação. Essa transformação envolveu a padronização dos dados a partir do valor-Z, calculado conforme a fórmula descrita na Seção 3.2.4. Para isso, foram utilizadas as transformações logarítmicas de K e do teor de finos, que apresentam distribuição normalizada.

Para os dados de $\ln K$ a padronização foi realizada em função de cada método, as medições com o permo-porosímetro e as medições dos testes *slug*, cada qual um espaço amostral diferente. Para os teores de finos a padronização foi realizada em função de todas as amostras de todas as sondagens. A partir das amostras retiradas das sondagens SD2 e SD3, foi realizada uma regressão linear, com o objetivo de obter uma equação empírica para a relação entre teor de finos de K específica para a localidade investigada. O gráfico com a equação derivada e as métricas de regressão, como coeficiente de determinação (R^2) e erro padrão residual (RSE), encontram-se na Figura 45. A regressão apresenta um R^2 de 0,70, e portanto a variação de $Z_{\ln(\text{Finos})}$ explica 70% da variação de $Z_{\ln K}$, para as amostras investigadas. O erro padrão é de 0,55. O intercepto da regressão encontra-se em -0,12 e a inclinação da reta da relação é de 1,01.

Para que fosse possível utilizar a equação obtida pela regressão linear para obter valores de K para litofácies caracterizadas a partir de sua granulometria, antes foi preciso obter um valor único representativo para a granulometria fina de fácies com mais de uma amostra associada. Os intervalos de profundidade de cada amostra, para as que foram retiradas da mesma litofÁCIE, foram utilizados como peso em uma média ponderada do teor de finos. A Figura 46 mostra a relação entre os teores médios de finos ponderados para as litofácies associadas às amostras e os teores de cada amostra. Pontos em que o valor de $Z_{\ln(\text{Finos})}$ das amostras divergem muito dos atribuídos à fácies associada representam amostras próximas às transições de fácies, em que, conforme analisado anteriormente, ocorrem as maiores variações de propriedades (e.g. Figuras 35 e 38). A distribuição de probabilidades desses valores também segue o modelo normal, conforme observado pelo histograma e pelo gráfico QQ na Figura 47, e o teste Shapiro-Wilk confirmou a hipótese nula de normalidade, com p-valor = 0,53.

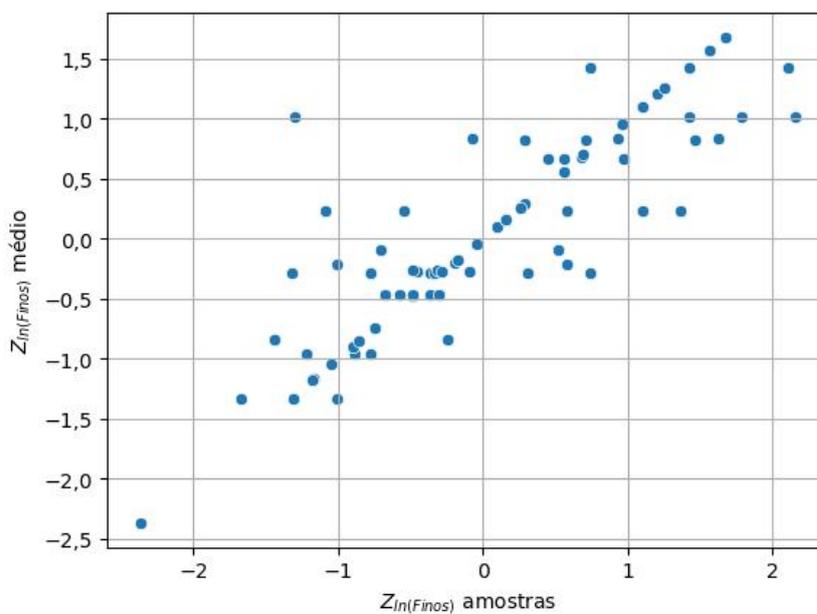
Os valores médios de teor de finos obtidos para as litofácies foram utilizados como variável independente para a equação encontrada pela regressão, de forma a

Figura 45 – Regressão linear realizada com os valores padronizados ($Z_{InK} \times Z_{In(Finos)}$) das amostras das sondagens SD2 e SD3, em que R^2 é o coeficiente de determinação da regressão e RSE é o erro padrão residual.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 46 – Gráfico de dispersão para os valores da média ponderada de $Z_{In(Finos)}$ representativos das litofácies versus os valores de $Z_{In(Finos)}$ das amostras.

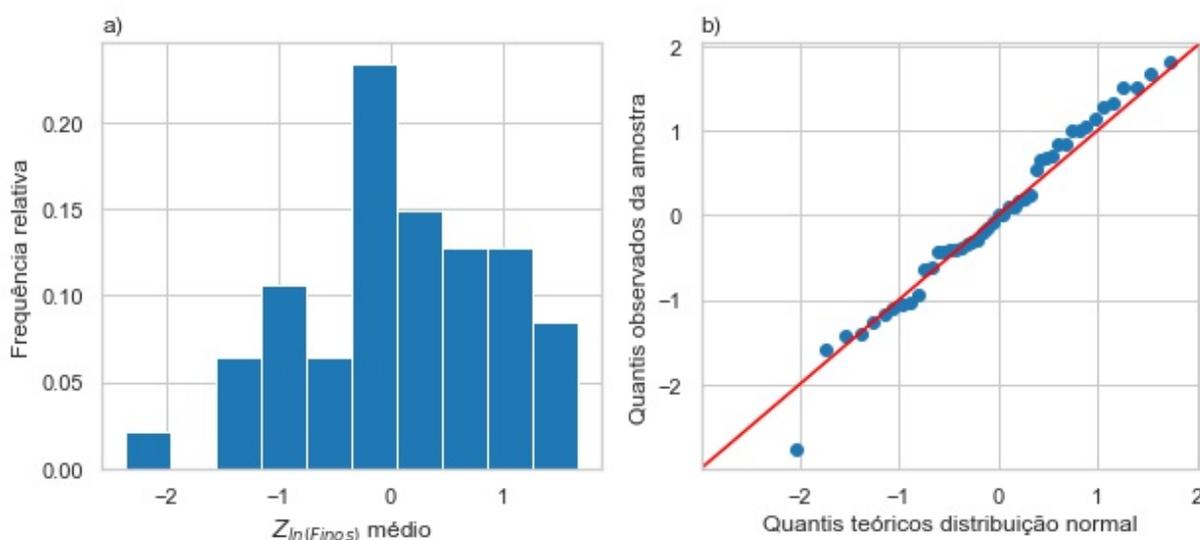


Fonte: Elaborado pelo autor.

obter valores de Z_{InK} representativos para as fácies que não tiveram medições em campo de condutividade hidráulica associada. Esses valores foram agrupados aos

obtidos pelos testes *slug*, a partir da média aritmética dos valores de $\ln K$ (média geométrica dos valores de K) das campanhas realizadas e interpretadas pelo método de Bouwer e Rice (1976), cada qual associado a uma litofácia e à identificação da sondagem/poço em que a fácies foi identificada. O histograma e gráfico QQ para esses valores de $Z_{\ln K}$ associados às litofácies estão apresentados na Figura 48. Observa-se que a distribuição também apresenta normalidade, confirmado pelo teste de Shapiro-Wilk (p -valor = 0,42), embora com maior peso para os valores menores de $Z_{\ln K}$.

Figura 47 – Histograma (a) e gráfico QQ (b) para a distribuição dos valores da média ponderada de $Z_{\ln(Finos)}$ representativos das litofácies.

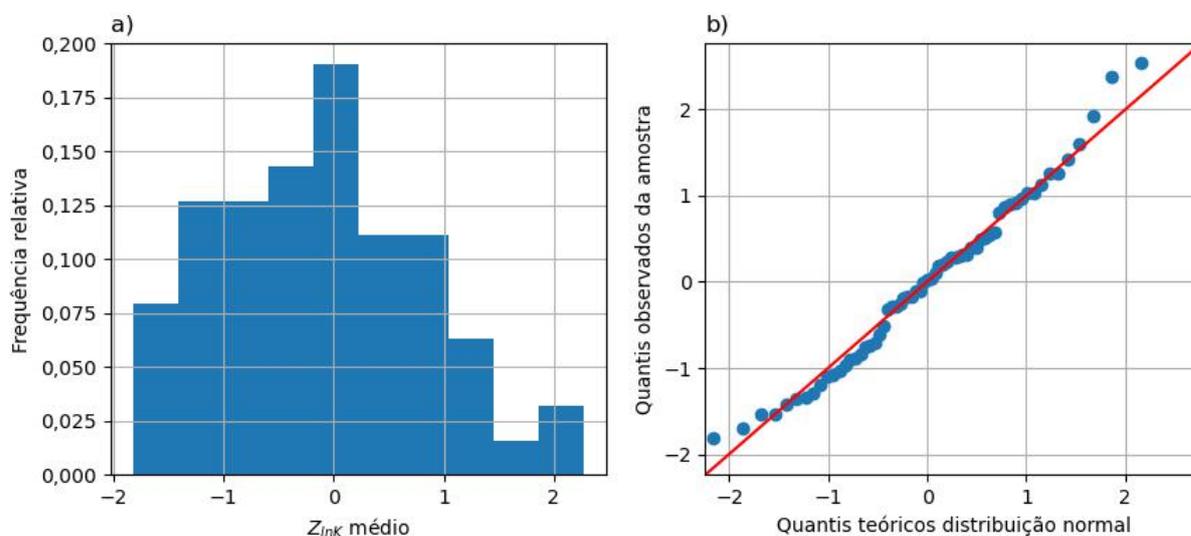


Fonte: Elaborado pelo autor.

O algoritmo de agrupamento hierárquico foi aplicado para o conjunto de dados de $Z_{\ln K}$, para que fosse possível visualizar os grupos de associação litofácia-sondagem, formados em função da distância euclidiana desses valores. O critério de agrupamento escolhido foi o de 'Ward'. O resultado, apresentado na forma de um dendrograma, encontra-se no Apêndice A. Para definir grupos de litofácies com propriedades médias semelhantes para a condutividade hidráulica, é importante que esses grupos tenham médias distantes e variâncias semelhantes. A partir dessa consideração, e através da análise do dendrograma e das distâncias associadas entre grupos, optou-se por discriminar entre três grupos diferentes para os valores de $Z_{\ln K}$, que apresentam distâncias euclidianas ao quadrado entre grupos de 6 (Apêndice A). A partir desse número de grupos escolhidos, validou-se a hipótese a partir do algoritmo de otimização de quebras naturais de Jenks, que busca otimizar a divisão dos agrupamentos a partir de um número pré-definido, maximizando a distância da média entre grupos e minimizando a variância intra grupos.

O histograma dos grupos identificados e suas estatísticas estão apresentados na Figura 49. A média dos grupos é de -1,15, para o de baixa condutividade (grupo

Figura 48 – Histograma (a) e gráfico QQ (b) para a distribuição dos valores médios de Z_{lnK} representativos das litofácies.



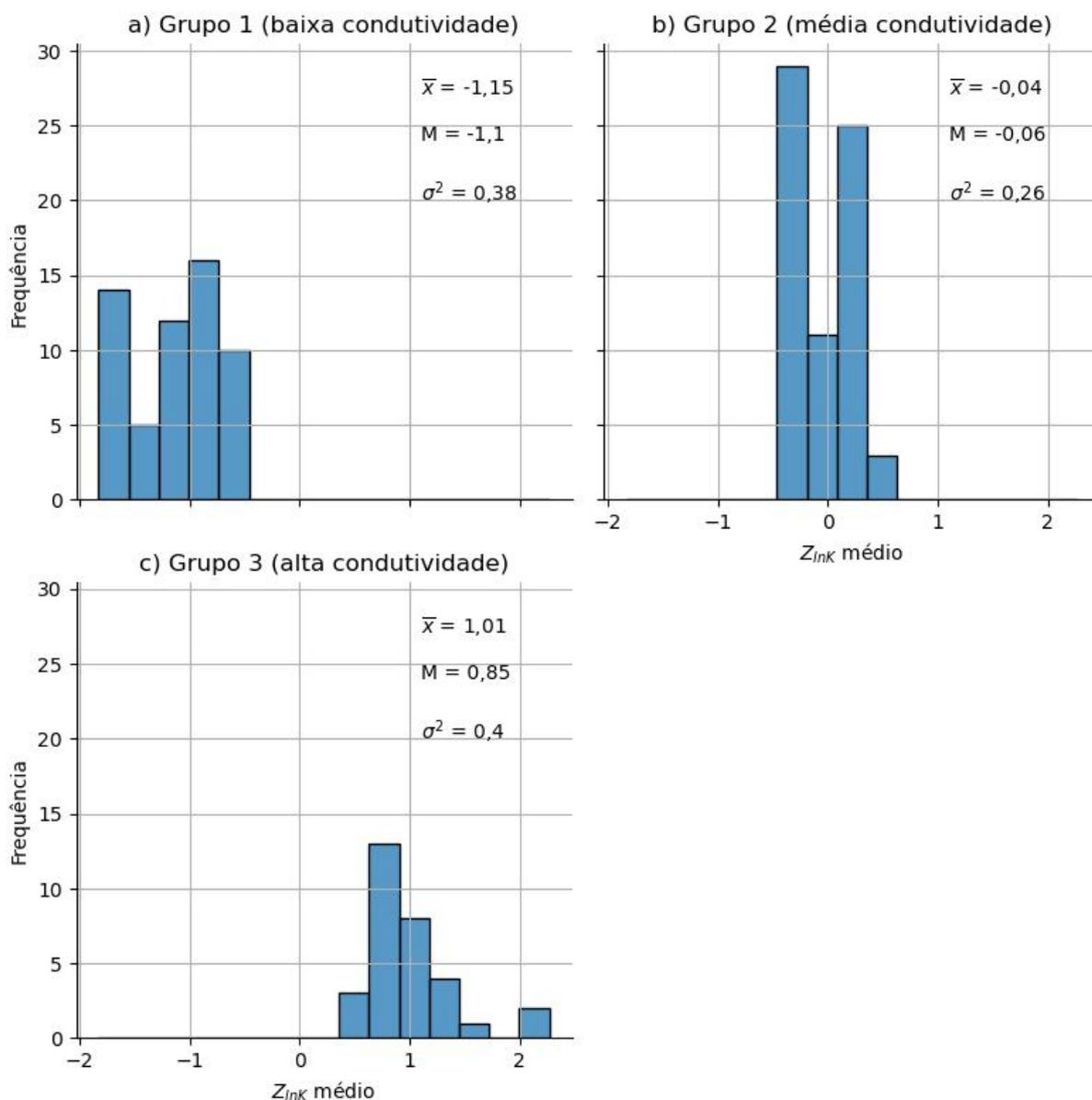
Fonte: Elaborado pelo autor.

1), 0 para o de média condutividade (grupo 2), e de 1 para o de alta condutividade (grupo 3), suas medianas são próximas à média, e suas variâncias são relativamente uniformes. Julgou-se portanto que foi possível encontrar grupos distintos que podem ser caracterizados através de suas médias. Esses resultados significam que existe uma diferença média de 1 desvio padrão do total de observações de $\ln K$ entre a média dos grupos identificados.

A partir da consideração dos valores de K fornecidos pelos testes *slug*, interpretados pelo método de Bouwer e Rice (1976), como representativos do depósito em relação a suas magnitudes, temos que a distribuição desses apresenta um desvio padrão de 1,48 para $\ln K$ (Tabela 8). A porosidade efetiva média dos sedimentos na porção investigada da área experimental da Ressacada é de 21% (Tabela 6), e o gradiente hidráulico médio (na área do experimento ANM-E85) é de 0,0067 m/m (RAMA, 2019).

Esses dados foram utilizados para calcular os valores de K associados a cada grupo de hidrofácies, e também para calcular aproximadamente as velocidades lineares médias de fluxo desses grupos, a partir dos dados médios mencionados de porosidade efetiva a partir da Equação (6). Os valores médios de $\ln K$, de K e das velocidades estão apresentados na Tabela 10. O grupo de maior condutividade hidráulica apresenta velocidade linear média das águas subterrâneas 4,4 vezes a do grupo de K média, e 24 vezes a velocidade do grupo de menor K . A relação entre o grupo de menor K e de K média é de 5,5 vezes. Dependendo da forma em que as litofácies de diferentes grupos estão distribuídas no espaço, em relação à conectividade dessas, essas variações podem produzir diferenças muito significativas no campo de fluxo do aquífero e,

Figura 49 – Histogramas dos grupos identificados pelo algoritmo de quebras naturais de Jenks, com respectivas médias (\bar{x}), medianas (M) e variâncias (σ^2).



Fonte: Elaborado pelo autor.

consequentemente, na dispersão de plumas de solutos.

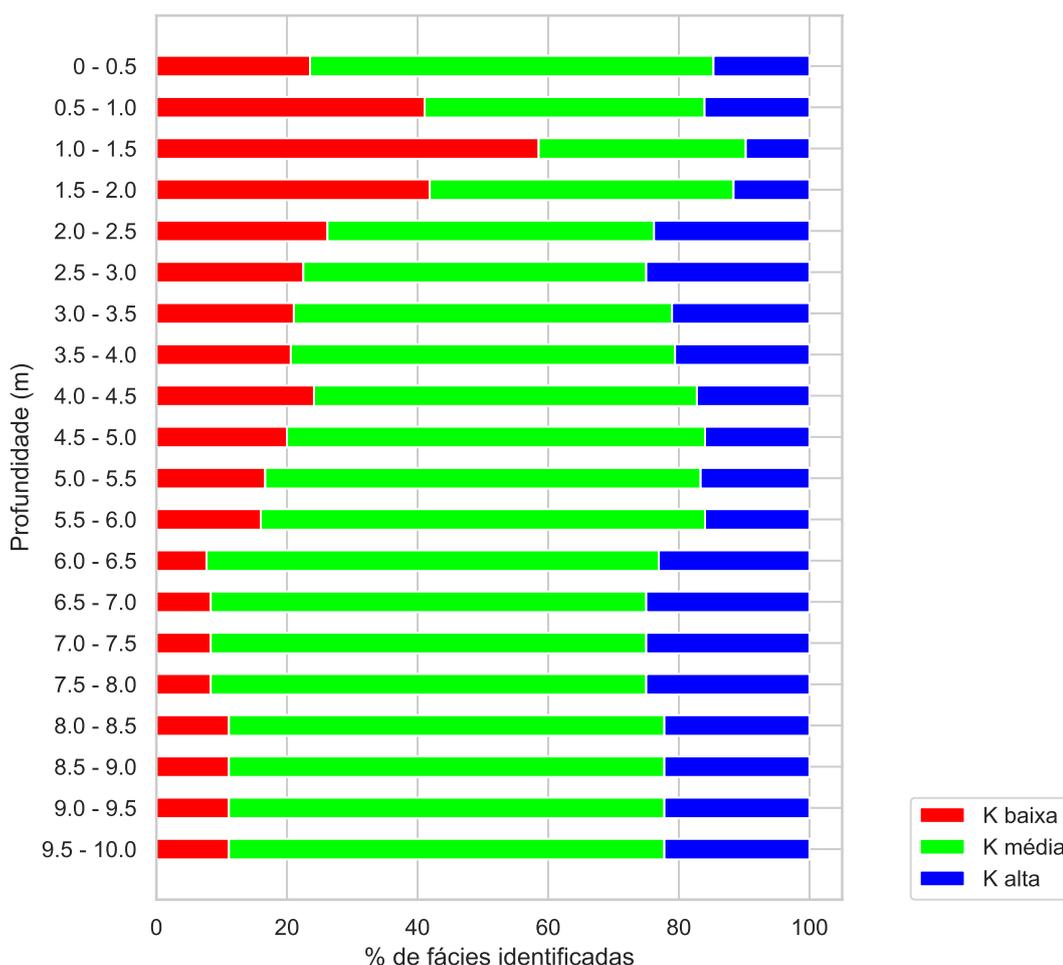
Considerando todo o grupo de sondagens que tiveram caracterizações associadas, litofácies de baixa condutividade representam 21% em espessura das fácies dessas sondagens, as de média condutividade, 60%, e as de alta condutividade, 19%. A Figura 50 apresenta as porcentagens de litofácies associadas aos diferentes grupos de hidrofácies em função da profundidade para todas as sondagens consideradas. Observa-se que fácies de menor K encontram-se mais concentradas em até 2 m de profundidade, com a maior parcela entre 1 m e 1.5 m, em que quase 60% das fácies identificadas nessa profundidade são de baixa condutividade. Fácies de condutividade

Tabela 10 – Grupos de hidrofácies identificados e valores médios.

Hidrofácies	Média lnK	Média K (cm/s)	Velocidade linear média (m/ano)
Grupo 1 - K baixa	-8,3	$2,46 \times 10^{-4}$	2,47
Grupo 2 - K média	-6,6	$1,35 \times 10^{-3}$	13,55
Grupo 3 - K alta	-5,1	$5,92 \times 10^{-3}$	59,53

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 50 – Porcentagem de litofácies associadas aos diferentes grupos de hidrofácies em função da profundidade



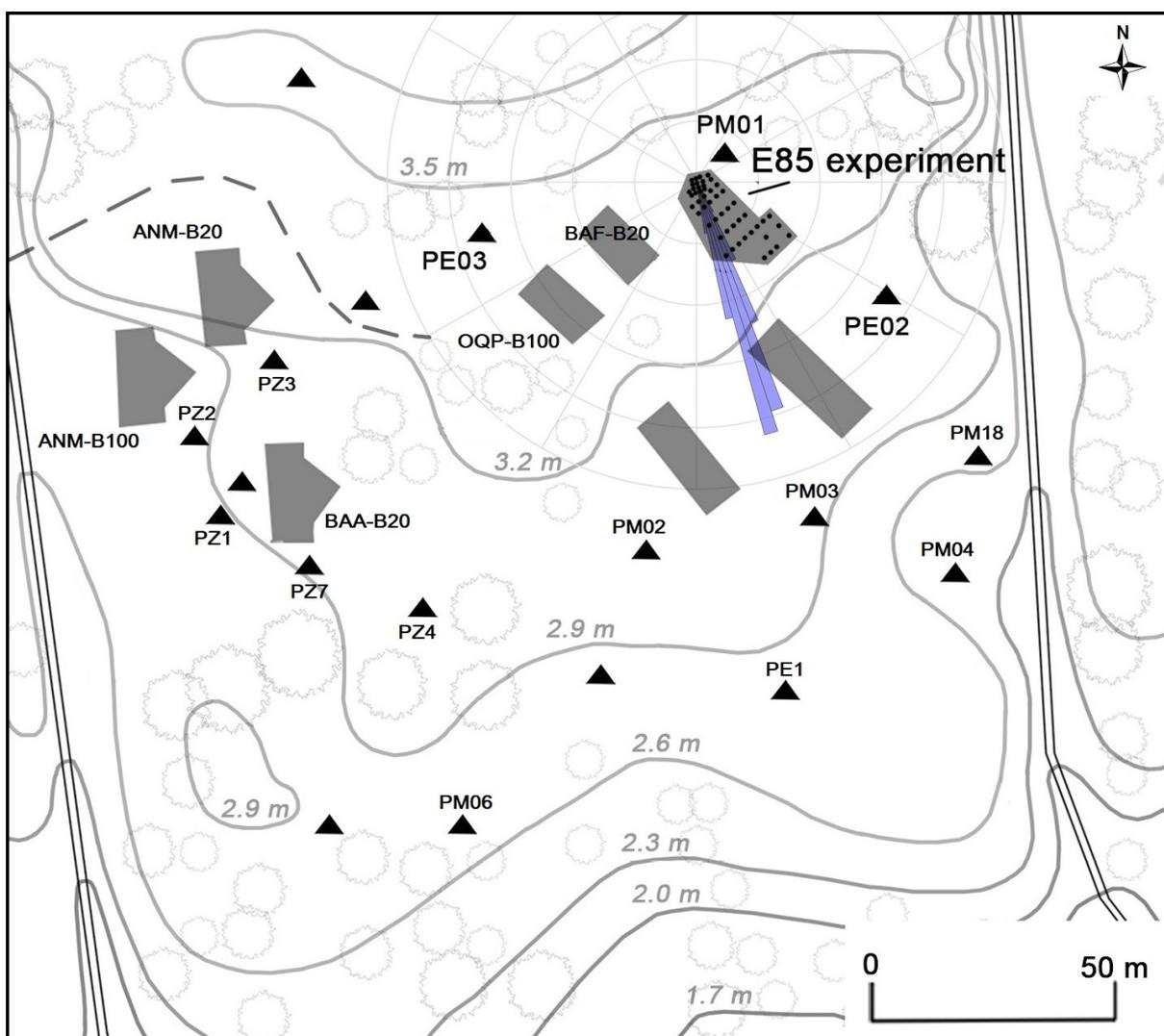
Fonte: Elaborado pelo autor

média e alta encontram-se relativamente bem distribuídas ao longo de 10m de profundidade. As fácies sedimentares menos permeáveis em profundidades menores estão associadas ao ambiente de sedimentação lagunar/de baía, devido à maior presença de sedimentos finos, enquanto que a presença de fácies mais permeáveis em profundidade reflete o período anterior de deposição marinha, com maior presença de granulometria arenosa.

4.3 RELAÇÕES ENTRE HIDROFÁCIES E PLUMAS DAS ÁREAS EXPERIMENTAIS

Esta seção inclui a análise da relação entre os grupos de hidrofacies associados à área em que os diversos experimentos foram conduzidos na Ressacada e o comportamento das plumas, tanto de contaminantes como de subprodutos dos processos de biorremediação, que demonstram de que maneira as substâncias dissolvidas foram transportadas no aquífero. A localização desses experimentos e das sondagens e poços pode ser visualizada nas figuras ??, com maiores detalhes, e na Figura 51, abaixo.

Figura 51 – Localização dos experimentos analisados e de alguns dos poços em seus entornos.

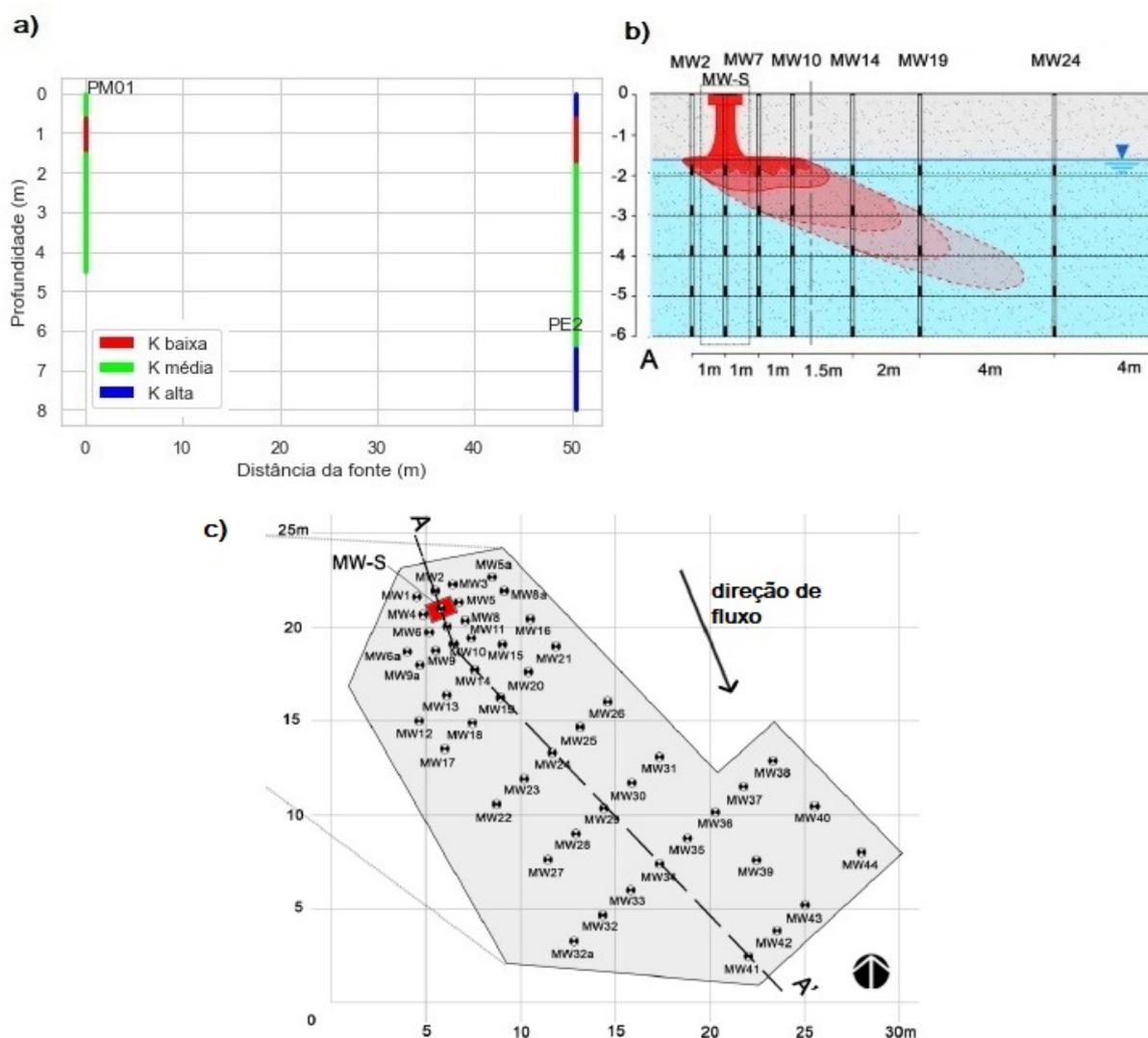


Fonte: Rama *et al.* (2019).

Estudando o comportamento da pluma de contaminação do experimento AMN-E85, e a relação entre a direção de fluxo e níveis de água do aquífero, Rama *et al.* (2019) inferiram a existência de uma camada de baixa condutividade com mergulho

para o leste na camada superior do aquífero. Esta área encontra-se entre o experimento BAF-B20 e os poços PM01 e PE2, e não apresentou sondagens realizadas na região de influência do experimento.

Figura 52 – Distribuição vertical de hidrofácies para os poços PM01 e PE2 (a); seção transversal de pluma de gasolina com etanol para o experimento ANM-E85 (b); e localização dos poços de monitoramento do experimento (c)

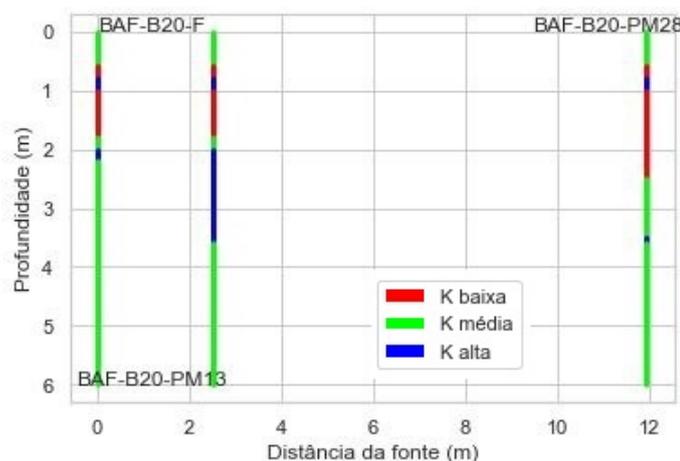


Fonte: Adaptado de Rama *et al.* (2019)

A Figura 52a apresenta a distribuição de hidrofácies para os poços próximos, em que o primeiro (PM01) está localizado próximo à fonte de injeção da área ANM-E85 e o último (PE2) está localizado a sudeste, distante 50 m. Observa-se a presença de uma camada de baixa condutividade em torno de 1 m de profundidade próximo à fonte, e que essa camada tem mergulho e aumenta em espessura na direção do poço PE2, confirmando a constatação de Rama *et al.* (2019). Essa camada de baixa condutividade e seu mergulho pode ter agido como barreira para o transporte advectivo da pluma do experimento.

Além disso, para a profundidade em torno de 6 m do poço PE2, observa-se a presença de camada de maior condutividade. Se esta camada está presente desde a área do experimento, e também apresenta mergulho na direção sul-sudeste, um caminho preferencial pode explicar o movimento vertical que ocorreu para a pluma de BTEX neste experimento, conforme observado na Figura 52b.

Figura 53 – Distribuição vertical de hidrofácies para o experimento BAF-B20

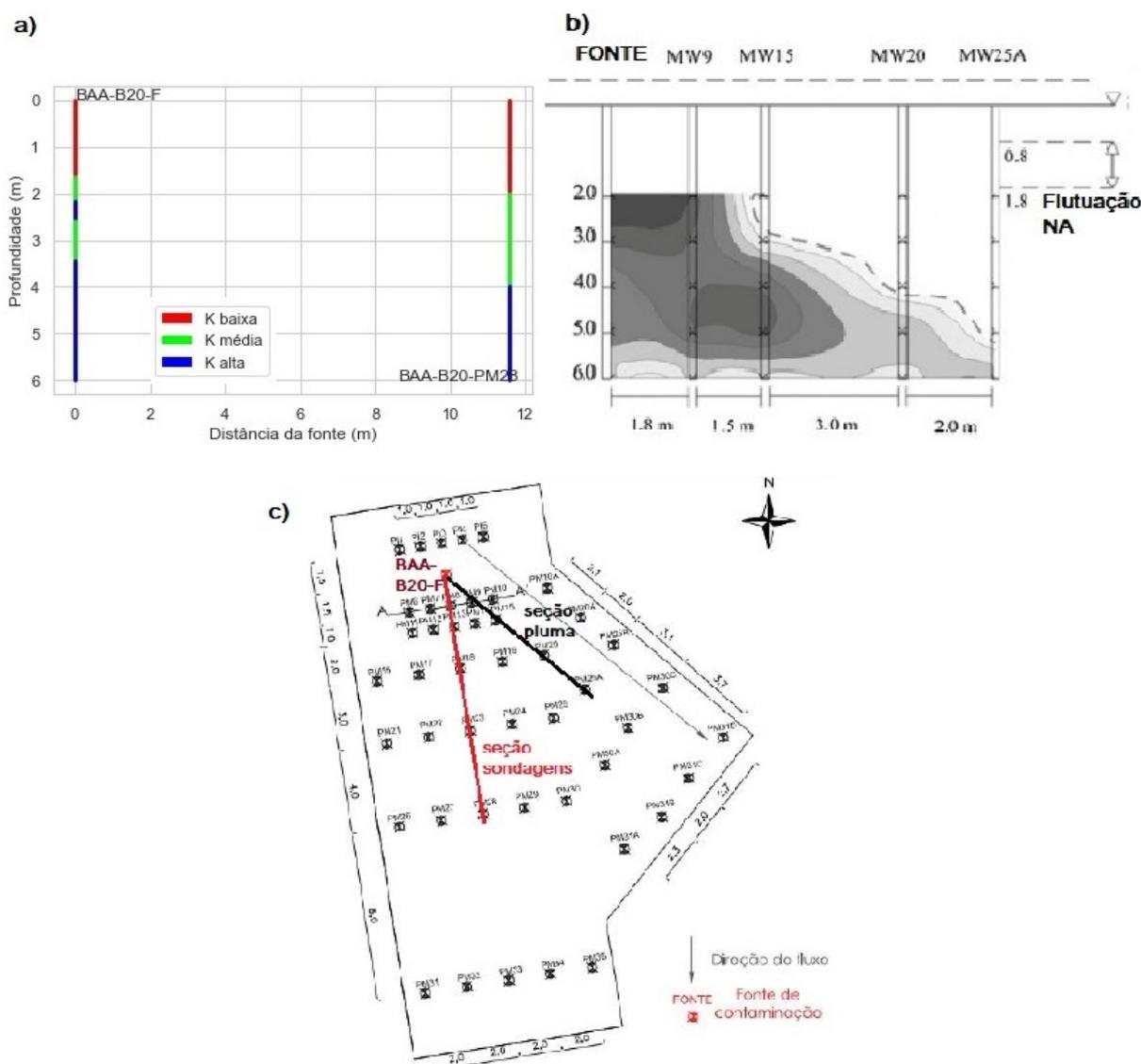


Fonte: Elaborado pelo autor

O experimento BAF-B20 está localizado ao lado leste-sudoeste do ANM-E85 (Figura 51), com distância de 20 m, e a Figura 53 apresenta a distribuição vertical das hidrofácies para os poços do experimento. Verifica-se a presença da camada de baixa condutividade na profundidade entre 1 e 2 m, assim como o seu mergulho e aumento de espessura em direção sudeste, assim como entre os poços PM01 e PE2. Ademais, há presença de camada mais permeável abaixo de 2 m e com mergulho acompanhando a camada de baixa condutividade superior, atingindo quase 4 m de profundidade em uma distância de menos de 3 m. Se existe continuidade entre as camadas entre os dois experimentos, torna-se mais plausível a hipótese que considera que as camadas menos condutivas representam barreiras de fluxo advectivo da pluma, e que a camada mais condutiva representa um caminho preferencial, os quais condicionaram o movimento vertical da pluma de BTEX para o experimento ANM-E85. A explicação desse movimento não se daria portanto considerando apenas como influência da flutuação do nível freático, como proposto por Rama *et al.* (2019), embora isso também deve ter influência nessa dinâmica da migração.

Na Figura 54a, verifica-se que para a área do experimento BAA-B20 a parcela superior dos sedimentos também apresenta menor condutividade, a qual aumenta com a profundidade em função de fácies mais condutivas. A hidrofácies menos permeável atinge cerca de 1.5 m de profundidade na fonte e aumenta sua espessura na direção sul para até 2 m de profundidade. As hidrofácies mais permeáveis apresentam-se em

Figura 54 – Distribuição vertical de hidrofácies para os poços do experimento BAA-B20 (a), seção transversal de pluma de BTEX após período de 1.6 anos (b), e localização dos poços e sondagens da área BAA-B20 (c)

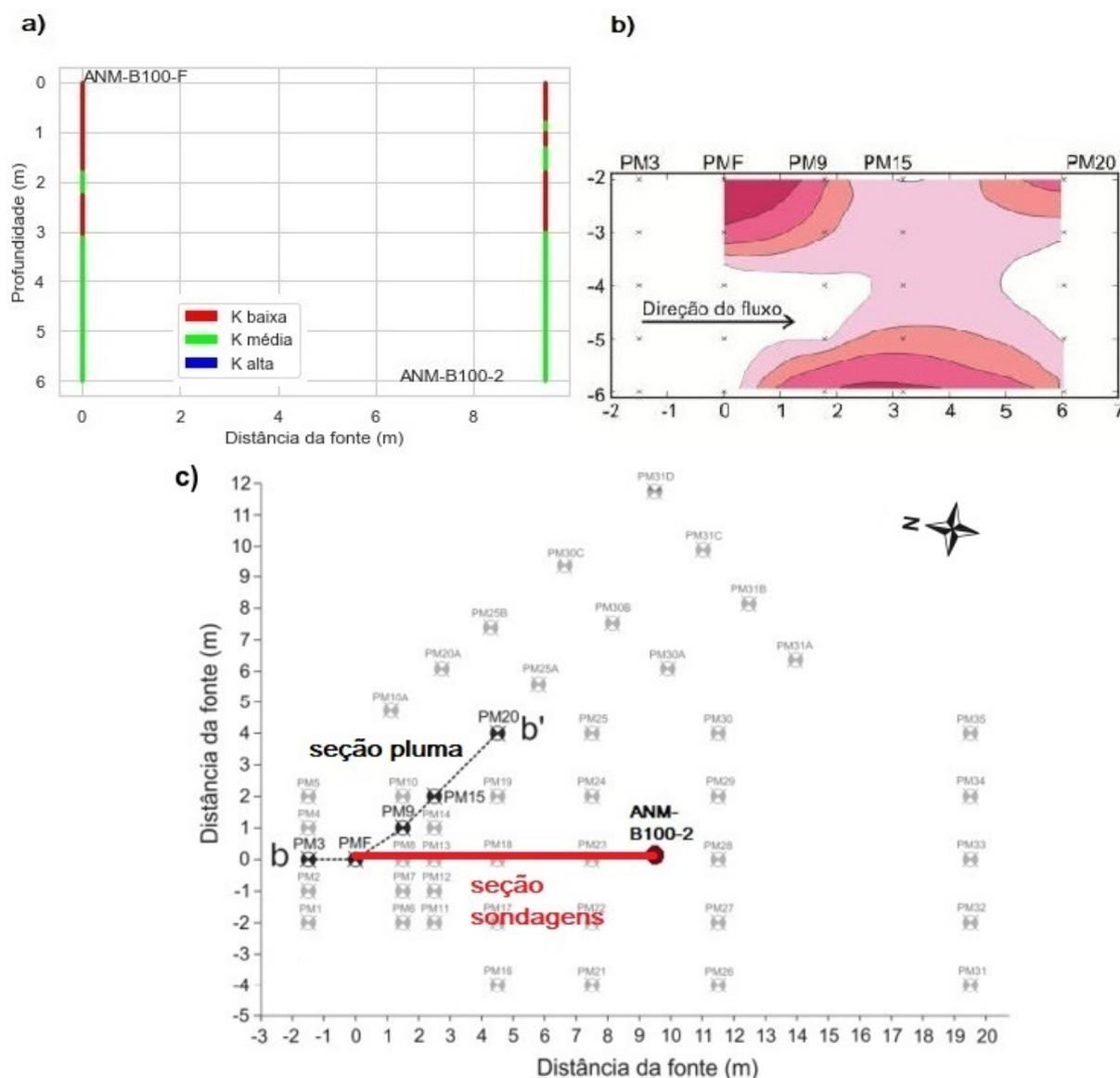


Fonte: (a) Elaborado pelo autor; (b) Ramos *et al.* (2013); (c) D. T. Ramos (2013)

geral abaixo de 3 m de profundidade, com mergulho na mesma direção. É possível observar na Figura 54c que a pluma de BTEX nesse experimento não seguiu a direção esperada do fluxo (sul), mas migrou mais em direção sudeste. Se o perfil estratigráfico nessa direção apresenta continuidade ao observado nas sondagens, pode-se considerar que a pluma também acompanhou o mergulho da hidrofície mais permeável da seção transversal das sondagens (Figura 54a), entre 4 a 6 m de profundidade, o que mais uma vez sugere transporte de solutos através de um caminho preferencial em função da heterogeneidade geológica. Observa-se ao longo da direção de migração que a pluma de BTEX passou a ser movimentar preferencialmente em profundidades maiores que 4 m, mesma profundidade da fácies mais permeável, que tem mergulho

provavelmente em direção sudeste.

Figura 55 – Distribuição vertical de hidrofácies para os poços do experimento ANM-B100 (a) e seção transversal de pluma de acetato após período de 19.9 meses (b)



Fonte: (a) Elaborado pelo autor; (b) e (c) Fedrizzi (2016)

Para o experimento ANM-B100, distante 40 m a noroeste do BAA-B20, foi observada uma distribuição diferente das hidrofácies, com mais de uma camada de baixa condutividade e camadas de média condutividade entre as primeiras (Figura 55a). A Figura 55b apresenta a pluma de acetato presente na área experimental, o qual é um subproduto do processo de biodegradação do combustível, e portanto indica presença do contaminante. Observa-se um comportamento diferente da pluma em relação aos outros dois experimentos analisados. A Figura 55c apresenta a localização dos poços e sondagens dessa área experimental com as respectivas distâncias.

Observa-se que neste experimento, assim como no BAA-B20, a pluma também não acompanhou o movimento esperado na direção sul (onde foi realizada a sondagem ANM-B100-2), mas também migrou em direção sudeste. Na região da fonte, a maior concentração de acetato encontra-se na profundidade de 2 m, onde uma hidrofície de média condutividade encontra-se 'espremida' entre duas camadas de baixa condutividade. Na sondagem ANM-B110-2, observa-se que essa camada de média condutividade apresenta-se em menor profundidade. Na direção do transporte do centro de massa da pluma, observa-se que essa massa ascende no aquífero. Possivelmente o centro de massa acompanhou essa camada mais permeável na direção do poço PM20, assumindo-se continuidade da conformação das fácies observada no ponto ANM-B100-2, representando possivelmente mais uma vez caminho preferencial como determinante no transporte da pluma.

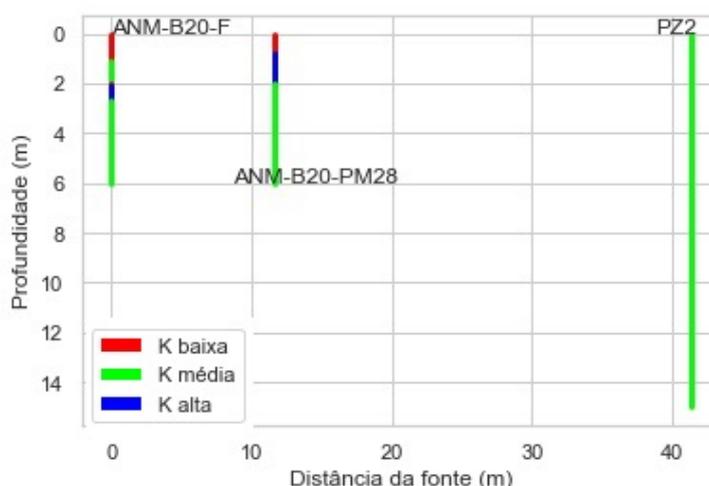
Na fonte, a difusão domina o transporte para a camada menos condutiva na profundidade entre 2 e 3 m. Se essa camada de baixa condutividade, encontrada tanto na fonte como na sondagem ANM-B100-2, existe na direção do poço PM20 (Figura 55c), seria difícil observar a concentração de acetato em níveis semelhantes à fonte de contaminação na profundidade abaixo de 6 m, como indica a Figura 55. Uma hipótese é que essa segunda camada menos permeável, que representa uma camada mais argilosa, tem distribuição horizontal limitada, não apresentando continuidade na direção dos poços PM9, PM15 e PM20.

A fase livre de combustível pode ter descendido pelos limites laterais dessa camada nos entornos da fonte, e variações do nível freático podem ter contribuído para aprisionar uma parcela de fase livre abaixo da camada mais argilosa, que passou a ser diluída formando outra pluma. A concentração baixa de acetato na altura do poço PM15, conectando os dois centros de massa, indicaria fase residual desse movimento. O transporte advectivo passou a governar essa nova pluma a partir de um caminho preferencial em profundidades maiores de 6 m, como ocorreu no experimento BAA-B20, que como mencionado está localizado bem próximo do experimento analisado.

O monitoramento das flutuações do lençol freático na área indicou que este variou, em média, de 1 a 2 m de profundidade em relação ao nível do terreno (CHI-ARANDA, 2011). Os efeitos da variação do regime hidrológico podem ter contribuído para essa dinâmica que produziu a pluma mais profunda. A área ANM-B100 está localizada próxima a uma vala de drenagem a oeste, que afeta a dinâmica hidrológica principalmente em suas proximidades (RAMA, 2019).

A nordeste da área ANM-B100, e distante aproximadamente 20 m, temos o experimento ANM-B20. Analisando na Figura 56 a distribuição vertical de hidrofácies para os poços desse experimento, assim como do piezômetro PZ2, que encontra-se a sudeste do experimento ANM-B100 e também distante cerca de 20 m, verificamos que para esses pontos próximos a segunda camada de baixa condutividade entre 2 e

Figura 56 – Distribuição vertical de hidrofácies para os poços do experimento ANM-B20 e para o piezômetro PZ2



Fonte: Elaborado pelo autor

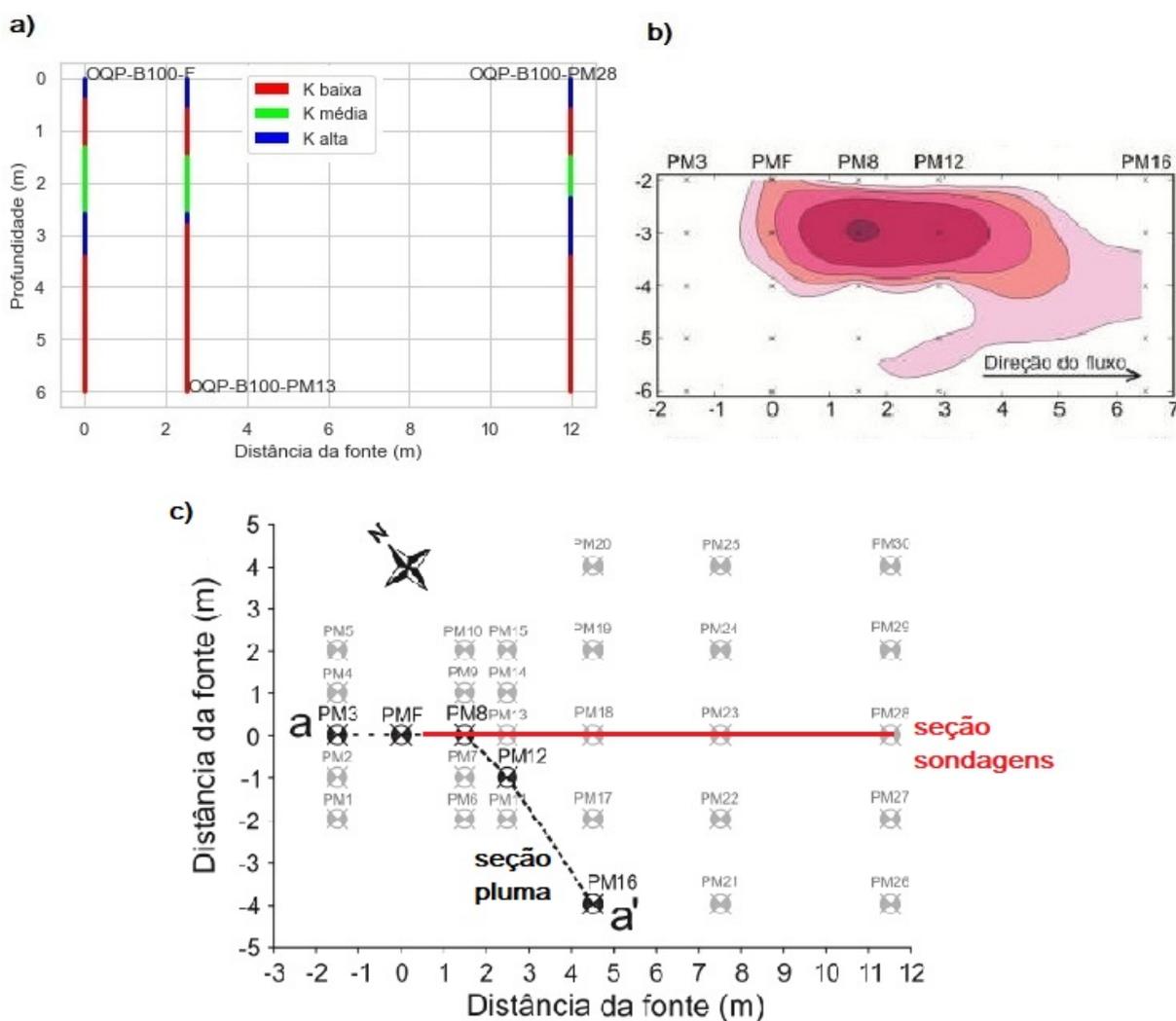
3 m de profundidade existente na área ANM-B100 não existe, o que torna a hipótese levantada de continuidade lateral limitada para essa camada na área mais plausível. Além disso, observa-se também que em torno de 2 m de profundidade uma camada de maior condutividade também atinge menores profundidades na direção do fluxo, assim como na área ANM-B100, que condicionou a ascensão da pluma em profundidades mais rasas.

O piezômetro PZ2 não acusa a presença um caminho preferencial abaixo dos 6 m. É importante notar que nesse ponto uma litofácia de 12 m de espessura foi descrita como presente entre 3 e 15 m de profundidade, e que os valores de K foram medidos para essa fácies a partir dos testes *slug* com seção filtrante de 5 m. Dessa forma, não é possível afirmar a existência ou não de um caminho preferencial em escala menor que a de observação dessas caracterizações.

A Figura 57 apresenta as hidrofácies identificadas para área experimental OQP-B100 e a pluma de acetato derivada do experimento. Mais uma vez é possível observar que a pluma não migrou na direção esperada (sudeste), que corresponde à seção onde foram realizadas as sondagens (Figura 57c), mas em direção sul. Ainda assim, a análise da pluma de acetato permite visualizar que as maiores concentrações de acetato movimentam-se em função das fácies mais permeáveis identificadas nas sondagens, e que as fácies menos permeáveis atuam como barreira do transporte advectivo, onde aparentemente a difusão é mais atuante.

Próximo à fonte, o centro de massa da pluma está concentrado em torno de 3 m de profundidade, entre as camadas de baixa condutividade e acompanhando a continuidade da hidrofácia mais condutiva ali presente. Observa-se que aparentemente a difusão é maior para a camada de média condutividade acima, e menor para camada

Figura 57 – Distribuição vertical de hidrofácies para os poços do experimento OQP-B100 (a) e seção transversal de pluma de acetato após período de 12.3 meses (b)



Fonte: (a) Elaborado pelo autor; (b) Fedrizzi (2016)

de baixa condutividade abaixo. A partir de 4 m de distância da fonte a pluma descende um pouco. Se na direção do poço de monitoramento PM16 a hidrofácies mais permeável acompanha o mergulho que existe entre os poços PM13 e PM28, pode-se concluir que essa descensão da frente da pluma está associada à geometria da camada mais permeável, que atua como caminho preferencial, como é possível observar sua maior espessura para o poço OQP-B100-PM28.

As figuras 58 e 59 apresentam a distribuição vertical de hidrofácies identificadas para todas as sondagens em que caracterizações de K ou de granulometria foram realizadas. Podemos verificar que a camada de baixa condutividade associada às áreas ANM-E85, BAF-B20 e aos poços PE2 e PM01 aumenta a sua espessura principalmente na direção sul, conforme apontado anteriormente. Observa-se que, de maneira geral,

as camadas de menor condutividade são encontradas nas profundidades menores, e estão associadas a menores espessuras.

No piezômetro PZ3, uma camada de grande espessura está associada a baixa condutividade. Essa representa uma litofÁCie descrita como areia fina quartzosa branca, que também é a descrição de última camada identificada nas sondagens do experimento OQP-B100, também associada a baixas condutividades, assim como do poço PM07. Em outros pontos, no entanto, essa mesma litofÁCie foi associada a condutividades média (SD2, PZ2 e PE6) e alta (PZ1 e PZ4). É possível que existam variações texturais e de estrutura que definem uma grande variação interna para essa mesma litofÁCie.

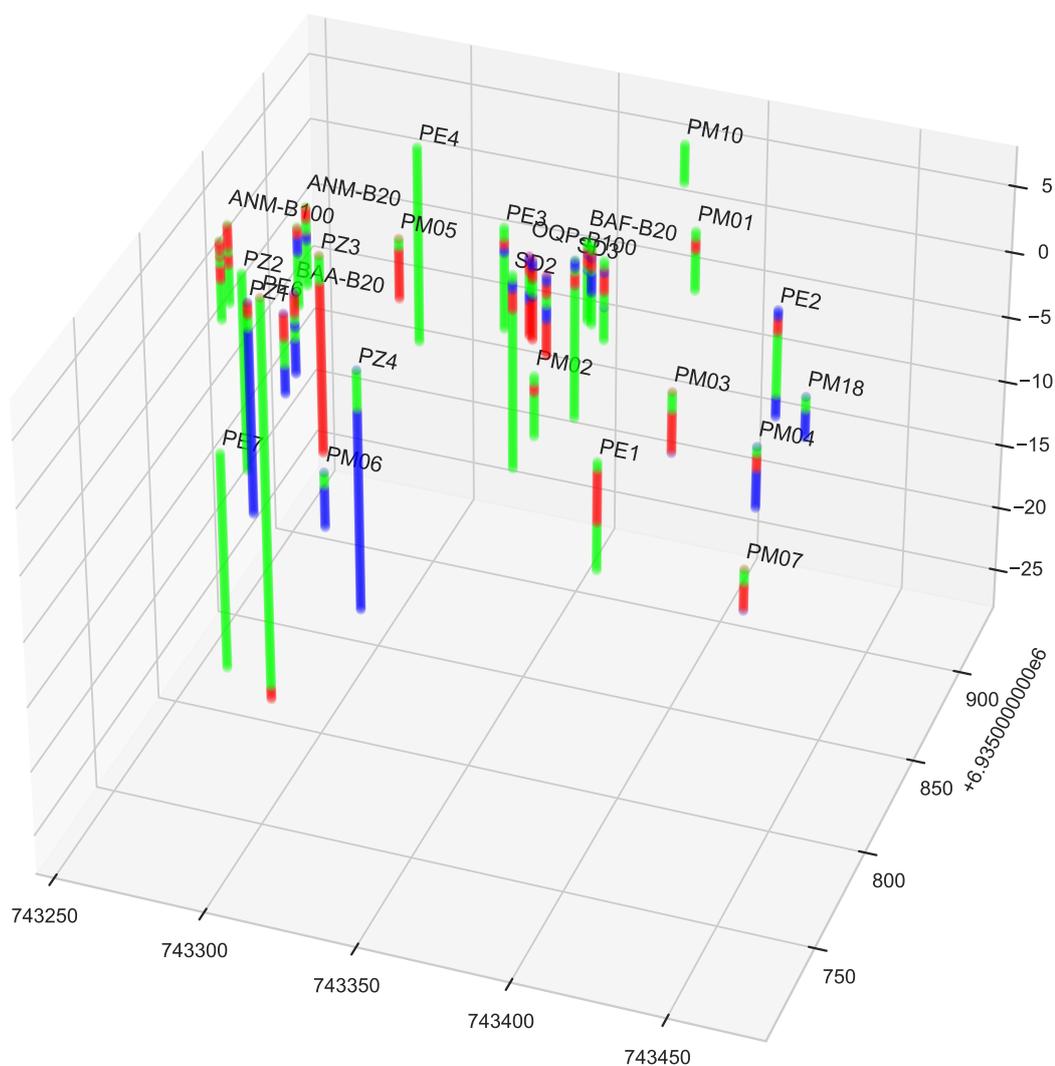
Outras fÁCies, como as definidas como areia fina cinza clara e escura, também foram incluídas nos três grupos identificados, apresentando grande variação interna. De maneira geral, as que foram descritas como argilosas (ou pouco argilosas) apresentam menores condutividades, associadas às camadas de baixa condutividade dos poços PM03, PM04, PM05, PE1, PE2, e do experimento BAF-B20. FÁCies associadas a traços alaranjados, argilosas ou pouco argilosas, e de cor marrom claro estão associadas às menores condutividades e maiores teores de argila e finos (ANM-B100, ANM-B20, BAA-B20, OQP-B100, BAF-B20, SD2, SD3), assim como descritas com cor variegada (PE3).

Para as áreas BAA-B20 e ANM-B20, a camada superficial de solo foi associada a baixas condutividades, devido ao alto teor de finos. No poço PZ1, próximo a esses experimentos, a camada superficial foi descrita como areia muito argilosa cinza, e portanto também associada a baixa condutividade. Nenhuma das fÁCies que foram associadas ao grupo de K alta apresentou a descrição de argilosa ou pouco argilosa, e estão associadas a todas as cores encontradas (branca, cinza claro, rósea, marrom claro, cinza escuro e amarelada).

As figuras 58 e 59 apresentam a distribuição espacial das sondagens e poços com os grupos de hidrofÁCies associados. Através da interpretação visual dessas figuras, observa-se que a maior continuidade das hidrofÁCies, tanto de maior como menor condutividade, apresenta-se na direção noroeste-sudeste, de acordo com a direção média de fluxo das águas subterrâneas associada à área, e menor continuidade na direção nordeste-sudoeste. Isso pode ser confirmado através das seções geológicas interpretadas a partir dos perfis descritivos das sondagens realizada por Lage (2005) (Figura 14). Foi observado também que a jusante dos experimentos ANM-B100 e BAA-B20, os piezômetros e poços presentes apresentam fÁCies de alta condutividade em maiores profundidades (BAA-B20-PM28, PZ1, PZ4 e PM06), com mergulho para a direção sudeste. É possível exista convergência do fluxo do aquífero nessa área para essa hidrofÁCie mais permeável, formando um caminho preferencial, o que explicaria o movimento da pluma desses experimentos ter apresentado desvio mais a sudeste

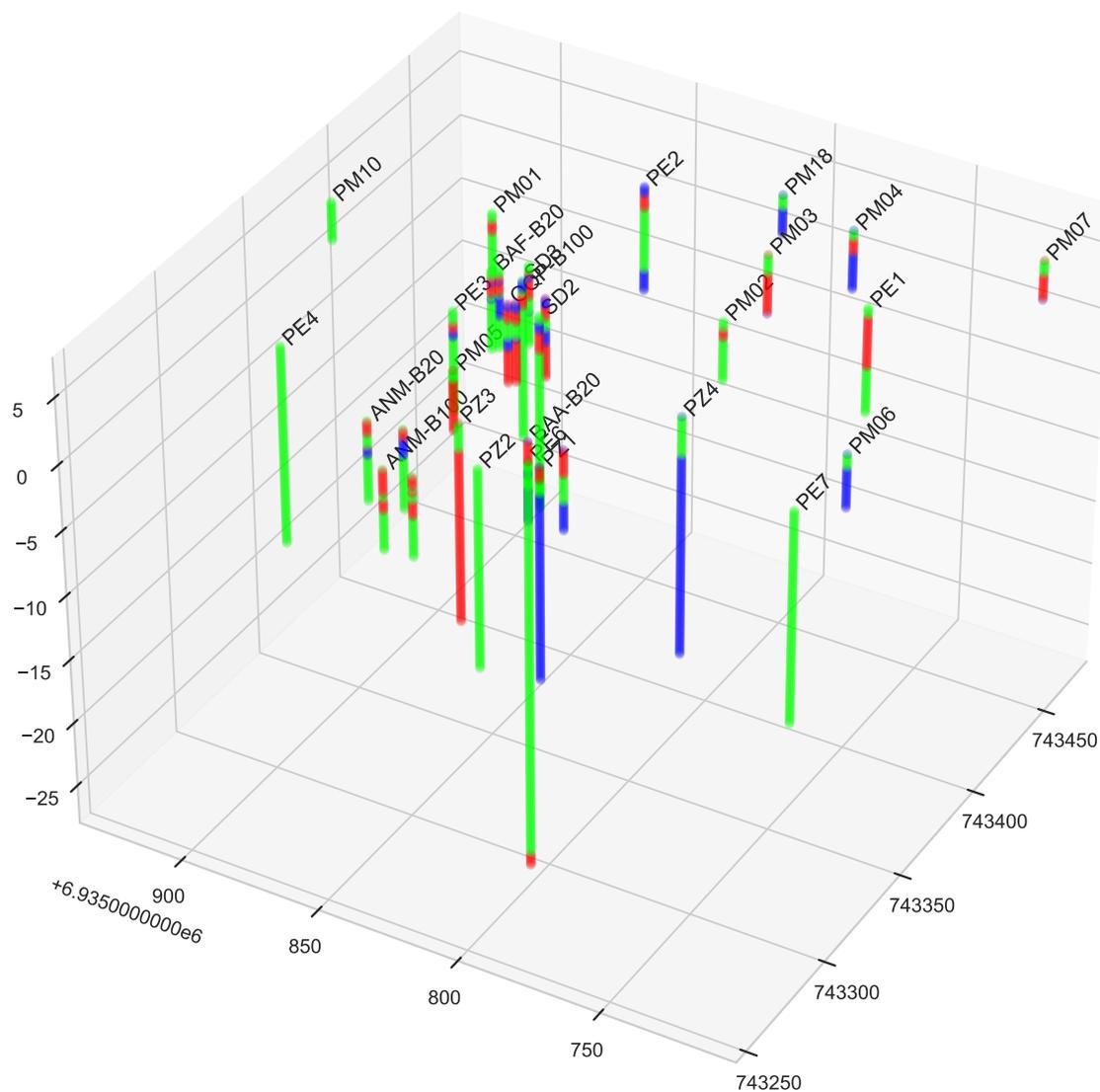
do que o que era esperado, conforme analisado anteriormente.

Figura 58 – Perfil vertical das hidrofácies em três dimensões com vista sudoeste-noroeste da área investigada



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 59 – Perfil vertical das hidrofácies em três dimensões com vista a partir do sudoeste-nordeste da área investigada



Fonte: Elaborado pelo autor

5 CONCLUSÕES

A pesquisa conduzida neste trabalho permitiu avaliar as caracterizações de propriedades geológicas e hidrogeológicas, principalmente da condutividade hidráulica, de um aquífero sedimentar arenoso, costeiro e raso, na Fazenda da Ressacada da UFSC, e comparar com caracterizações de outros aquíferos bem estabelecidos na literatura com relação às variabilidades encontradas. As análises conduzidas permitiram concluir que existem indícios, ao menos em escala local da área investigada, de uma heterogeneidade baixa em relação à condutividade hidráulica.

Foi desenvolvida uma metodologia para associar essas caracterizações a fácies sedimentares identificadas em sondagens da área, a partir da adoção do conceito de hidrofácies para representação da heterogeneidade da condutividade hidráulica. Isso possibilitou quantificar valores representativos para cada grupo, em relação à magnitude dessa propriedade, assim como das velocidades lineares médias de fluxo e transporte associadas a essas fácies. Não foi possível quantificar a correlação espacial e a continuidade dessas estruturas encontradas, apenas uma caracterização qualitativa e visual, e recomenda-se essa quantificação em futuros trabalhos para possibilitar a criação de um modelo da heterogeneidade local. Isso poderia ser realizado a partir do conceito de probabilidades de transição de fácies, que permitiria a construção de um modelo através de cadeias de Markov (CARLE; FOGG, 1996)

Existem diversas incertezas quanto à caracterização realizada, em função da qualidade dos dados, assim como da natureza heterogênea da própria base de dados, que limitou as possibilidades de análises. Há espaço para compreender melhor a variação da condutividade não apenas entre as fácies identificadas nas sondagens em si, mas também caracterizar a variação interna dessas fácies, pois algumas apresentaram variabilidade em todo o espectro de variância da propriedade K para o depósito. De qualquer modo, julga-se que foi possível através desses resultados compreender com algum grau de confiança a relação entre variação de K e heterogeneidades do meio geológico, assim como indícios dos efeitos dessas para a migração das plumas de contaminação dos experimentos.

Uma hipótese a partir das análises deste trabalho é que o transporte dos contaminantes dissolvidos no aquífero na área experimental do REMA é realizado principalmente através das fácies mais permeáveis que estão presentes na direção do fluxo das águas subterrâneas a partir da fonte de contaminação. Essas atuam como caminho preferencial, através dos mecanismos de advecção e dispersão, e as fácies menos permeáveis atuam como barreira para o fluxo advectivo, onde o transporte difusivo é dominante. Essas conclusões estão de acordo com o novo paradigma que vem sendo reforçado na literatura nos últimos 20 anos para a compreensão e a modelagem do transporte de solutos em meios porosos naturais (FEEHLEY; ZHENG; MOLZ,

2000; DE MARSILY *et al.*, 2005; PAYNE; QUINNAN; POTTER, 2008; FIORI; DAGAN *et al.*, 2013; HADLEY; NEWELL, 2014; MOLZ, 2015; LANGE, 2020; GUO *et al.*, 2021). Essas hipóteses podem ser validadas em futuros estudos a partir de modelos mais elaborados e investigações mais detalhadas do aquífero local.

É difícil, no entanto, separar os efeitos da variação espacial das várias propriedades que afetam o fluxo e o transporte, assim como a variação temporal associada aos processos hidrológicos na área investigada. Há espaço para entender melhor a interação entre as heterogeneidades do aquífero e as variações do regime hidrológico e do nível freático do aquífero na localidade.

REFERÊNCIAS

- ALLEN-KING, R. M. *et al.* Characterizing the heterogeneity and correlation of perchloroethene sorption and hydraulic conductivity using a facies-based approach. **Water Resources Research**, v. 34, n. 3, p. 385–396, 1998.
- ALMEIDA, E. S. Geologia da ilha de Santa Catarina - SC. *In*: ATLAS do município de Florianópolis. Florianópolis: Instituto de Planejamento Urbano de Florianópolis, 2004. P. 18–23.
- ANDERSON, M. P. Hydrogeologic facies models to delineate large-scale spatial trends in glacial and glaciofluvial sediments. **GSA Bulletin**, v. 101, n. 4, p. 501–511, abr. 1989.
- ANDERSON, M. P.; AIKEN, J. S. *et al.* Sedimentology and hydrogeology of two braided stream deposits. **Sedimentary Geology**, v. 129, n. 3, p. 187–199, 1999.
- ANDERSON, M. P.; SIEGEL, D. I. Seminal advances in hydrogeology, 1963 to 2013: The O.E. Meinzer Award legacy. *In*: THE WEB OF GEOLOGICAL SCIENCES: ADVANCES, IMPACTS, AND INTERACTIONS. [S.l.]: Geological Society of America, set. 2013.
- BEAR, J.; CHENG, A. H. D. **Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport**. 2. ed. New York: Springer, 2010. 834 p.
- BIANCHI, M. *et al.* Spatial connectivity in a highly heterogeneous aquifer: From cores to preferential flow paths. **Water Resources Research**, v. 47, n. 5, 2011.
- BIELSCHOWSKY, C. **Aplicação e comparação de métodos de campo para estimativa da condutividade hidráulica do solo**. Rio de Janeiro: [s.n.], 2005.
- BOHLING, G. C. *et al.* Geostatistical analysis of centimeter-scale hydraulic conductivity variations at the MADE site. **Water Resources Research**, v. 48, n. 2, 2012.
- BOUWER, H.; RICE, R. C. A slug test for determining hydraulic conductivity of unconfined aquifers with completely or partially penetrating wells. **Water Resources Research**, v. 12, n. 3, p. 423–428, 1976.
- BUTLER, James J. Hydrogeological Methods for Estimation of Spatial Variations in Hydraulic Conductivity. *In*: HYDROGEOPHYSICS. Dordrecht: Springer Netherlands, 2005. P. 23–58.
- CABRAL, J.J.S.P. Movimento das águas subterrâneas. *In*: FEITOSA, F. A. C. *et al.* (Ed.). **Hidrogeologia: Conceitos e Aplicações**. 3. ed. Rio de Janeiro: CPRM:LABHID, 2008. cap. 2.2, p. 77–91.

CARLE, S. F.; FOGG, G. E. Transition probability-based indicator geostatistics. **Mathematical Geology**, v. 28, n. 4, p. 453–476, 1996.

CHIARANDA, H. S. **Alterações biogeoquímicas em águas subterrâneas impactadas por biodiesel de soja e misturas de diesel/biodiesel (B20)**. 2011. Doutorado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

CHIARANDA, H. S. **Volatilização dos compostos BTEX em ambientes subsuperficiais contaminados com gasolina e etanol: comparação entre concentrações medidas e simuladas**. 2006. Mestrado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

COMISSÃO BRASILEIRA DE SÍTIOS GEOLÓGICOS E PALEOBIOLÓGICOS - COMPANHIA DE PESQUISA DE RECURSOS MINERAIS. **SEDIMENTOS CLÁSTICOS: COMPARAÇÃO DE ESCALAS GRANULOMÉTRICAS DIVERSAS**. [S.l.: s.n.], 2022. Disponível em: http://sigep.cprm.gov.br/glossario/fig/Escalas_Granulometria_Comparadas.pdf. Acesso em: 2 fev. 2022.

CORSEUIL, H. X.; MONIER, A. L. *et al.* BTEX Plume Dynamics Following an Ethanol Blend Release: Geochemical Footprint and Thermodynamic Constraints on Natural Attenuation. **Environmental Science & Technology**, v. 45, n. 8, p. 3422–3429, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/es104055q>.

CORSEUIL, H. X.; SCHNEIDER, M. R. *et al.* Solução Corretiva baseada no Risco (SCBR): Modelo Matemático de Tomada de Decisão para o Gerenciamento Ambiental de Águas Subterrâneas Contaminadas. **Águas Subterrâneas**, jul. 2006.

COSTA, A. H. R. **Bioestimulação com injeção de nitrato em águas subterrâneas impactadas por derramamento de gasolina com etanol**. 2008. Doutorado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

CUPERTINO, D. F. **Caracterização de propriedades do meio poroso em solo arenoso através do permo-porosímetro a gás**. Rio de Janeiro: [s.n.], 2005.

DAGAN, G. **Flow and Transport in Porous Formations**. [S.l.]: Springer-Verlag, 1989.

DARCY, H. Les fontaines publiques de la ville de Dijon. Dalmont, Paris, 1856.

DASSARGUES, A. **Hydrogeology**: Groundwater Science and Engineering. [S.l.]: CRC Press, Taylor & Francis Group, 2018.

DE MARSILY, G. *et al.* Dealing with spatial heterogeneity. **Hydrogeology Journal**, v. 13, n. 1, p. 161–183, 2005.

DEVLIN, J. F. **Groundwater Velocity**. Guelph, Ontario: The Groundwater Project, 2020. 64 p.

DOHERTY, J.; MOORE, C. Decision Support Modeling: Data Assimilation, Uncertainty Quantification, and Strategic Abstraction. **Groundwater**, v. 58, n. 3, p. 327–337, 2020.

DOMENICO, P. A.; SCHWARTZ, F. W. **Physical and Chemical Hydrogeology**. New York: Wiley, 1990. 824 p.

EARLE, S. **Physical Geology**. 2. ed. Victoria, B.C.: BCcampus, 2019. 828 p.
Disponível em: <https://opentextbc.ca/physicalgeology>.

EATON, T. T. On the importance of geological heterogeneity for flow simulation. **Sedimentary Geology**, v. 184, n. 3, p. 187–201, 2006.

FARIAS, M. M. F. **Transporte de etanol e compostos monoaromáticos do solo para a água subterrânea em experimento de campo**. 2011. Mestrado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

FEDRIZZI, F. **Oxidação química parcial (com peróxido de magnésio e óxido de ferro) associada à biodegradação para remoção acelerada de LNAPLs em sistemas subsuperficiais contaminados com biodiesel (B100)**. 2016. Doutorado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

FEEHLEY, C. E.; ZHENG, C.; MOLZ, F. J. A dual-domain mass transfer approach for modeling solute transport in heterogeneous aquifers: Application to the Macrodispersion Experiment (MADE) site. **Water Resources Research**, v. 36, n. 9, p. 2501–2515, 2000.

FELIX, A. **Ambientes de sedimentação e sistemas deposicionais do Holoceno costeiro na ilha de Santa Catarina - SC/Brasil**. 2020. Doutorado em Geografia – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Filosofia e Ciências Humanas, Florianópolis.

FELIX, A.; HORN FILHO, N. O. **Apostila Sedimentologia**. Florianópolis: Edições do Bosque, 2020. 177 p.

FERNANDES, M. **Atenuação natural da contaminação de aquífero submetido a derramamento de gasolina**. 2002. Doutorado em Química – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas, Florianópolis.

FETTER, C. W. **Applied Hydrogeology**. 4. ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2001. 624 p.

FETTER, C.W.; BOVING, T.; KREAMER, D. **Contaminant Hydrogeology**. [S.l.]: Waveland Press, 2017.

FIORI, A.; CVETKOVIC, V. *et al.* Debates—Stochastic subsurface hydrology from theory to practice: The relevance of stochastic subsurface hydrology to practical problems of contaminant transport and remediation. What is characterization and stochastic theory good for? **Water Resources Research**, v. 52, n. 12, p. 9228–9234, 2016.

FIORI, A.; DAGAN, G. *et al.* The plume spreading in the MADE transport experiment: Could it be predicted by stochastic models? **Water Resources Research**, v. 49, n. 5, p. 2497–2507, 2013.

FOGG, G. E. Groundwater Flow and Sand Body Interconnectedness in a Thick, Multiple-Aquifer System. **Water Resources Research**, v. 22, n. 5, p. 679–694, 1986.

FOGG, G. E.; CARLE, S. F.; GREEN, C. Connected-network paradigm for the alluvial aquifer system. *In*: THEORY, modeling, and field investigation in hydrogeology: a special volume in honor of Shlomo P. Neumans 60th birthday. [S.l.]: Geological Society of America, jan. 2000.

FOGG, G. E.; ZHANG, Y. Debates—Stochastic subsurface hydrology from theory to practice: A geologic perspective. **Water Resources Research**, v. 52, n. 12, p. 9235–9245, 2016.

FONSECA, W. C. **Impacto de derramamentos de etanol em águas subterrâneas: experimento de campo**. 2015. Mestrado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

FREEZE, R. A.; CHERRY, J. A. **Groundwater**. [S.l.]: Prentice-Hall, 1979.

GELHAR, L. W. **Stochastic Subsurface Hydrology**. [S.l.]: Prentice-Hall, 1993.

GUEDES JÚNIOR, A. **Mapeamento hidrogeológico da Ilha de Santa Catarina utilizando geoprocessamento**. 1999. Mestrado em Engenharia Civil – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

GUO, Z. *et al.* Contaminant transport in heterogeneous aquifers: A critical review of mechanisms and numerical methods of non-Fickian dispersion. **Science China Earth Sciences**, n. 64, p. 1224–1241, 2021.

HADLEY, P. W.; NEWELL, C. The New Potential for Understanding Groundwater Contaminant Transport. **Groundwater**, v. 52, n. 2, p. 174–186, 2014.

HESS, K. M.; WOLF, S. H.; CELIA, M. A. Large-scale natural gradient tracer test in sand and gravel, Cape Cod, Massachusetts: 3. Hydraulic conductivity variability and

calculated macrodispersivities. **Water Resources Research**, v. 28, n. 8, p. 2011–2027, 1992.

HIRATA, R. *et al.* **As águas subterrâneas e sua importância ambiental e socioeconômica para o Brasil**. São Paulo: Universidade de São Paulo - Instituto de Geociências, 2019. 66 p.

HUBBERT, M. K. The theory of ground-water motion. **American Geophysical Union**, v. 21, n. 2, p. 648–648, 1940.

HVORSLEV, M.J. **Time Lag and Soil Permeability in Ground-water Observations**. [S.l.]: Waterways Experiment Station, Corps of Engineers, U.S. Army, 1951. (Bulletin (Waterways Experiment Station U.S.)).

IPIUF - INSTITUTO DE PLANEJAMENTO URBANO DE FLORIANÓPOLIS. **Modelo Digital de Terreno 5m**. [S.l.: s.n.], 2012. Disponível em: <http://www.pmf.sc.gov.br/entidades/geo/index.php?cms=mapas+para+download&menu=0>. Acesso em: 21 nov. 2021.

JENKS, G. F. The Data Model Concept in Statistical Mapping. *In*: INTERNATIONAL Yearbook of Cartography. [S.l.: s.n.], 1967. P. 186–190.

KAIPPER, B. I. A. **Influência do etanol na solubilidade de hidrocarbonetos aromáticos em aquíferos contaminados por óleo diesel**. 2003. Doutorado em Química Analítica – Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis.

KANEVSKI, M.; MAIGNAN, M. **Analysis and modelling of spatial environmental data**. [S.l.]: EPFL Press, 2004. 288 p.

KITANIDIS, P. K. Persistent questions of heterogeneity, uncertainty, and scale in subsurface flow and transport. **Water Resources Research**, v. 51, n. 8, p. 5888–5904, 2015.

KITANIDIS, P. K. Teaching and communicating dispersion in Hydrogeology, with emphasis on on the applicability of the Fickian model. **Advances in Water Resources**, v. 106, jan. 2017.

KLEIN, C.; PHILPOTTS, A. R. **Earth Materials**: Introduction to Mineralogy and Petrology. Cambridge: Cambridge University Press, 2012. 533 p.

KOLTERMANN, C. E.; GORELICK, S. M. Heterogeneity in Sedimentary Deposits: A Review of Structure-Imitating, Process-Imitating, and Descriptive Approaches. **Water Resources Research**, v. 32, n. 9, p. 2617–2658, 1996.

KONIKOW, L. F. The Secret to Successful Solute-Transport Modeling. **Groundwater**, v. 49, n. 2, p. 144–159, 2011.

- KULKAMP, M. S. **Atenuação natural de hidrocarbonetos de petróleo em um aquífero contaminado com derramamento simultâneo de óleo diesel e etanol**. 2003. Doutorado em Química Analítica – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas, Florianópolis.
- LABOLLE, E. M.; FOGG, G. E. Role of Molecular Diffusion in Contaminant Migration and Recovery in an Alluvial Aquifer System. **Transport in Porous Media**, v. 42, n. 1, p. 155–179, 2001.
- LAGE, I. C. **Determinação da permeabilidade em diagnósticos geoambientais: a área experimental da Fazenda Ressacada, SC**. 2005. Mestrado em Geologia – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
- LANGE, W. J. de. Advective Transport Phenomena to Better Understand Dispersion in Field and Modeling Practice. **Groundwater**, v. 58, n. 1, p. 46–55, 2020.
- LEBLANC, D. R. *et al.* Large-scale natural gradient tracer test in sand and gravel, Cape Cod, Massachusetts: 1. Experimental design and observed tracer movement. **Water Resources Research**, v. 27, n. 5, p. 895–910, 1991.
- LIVI, N. S. **Geologia, geomorfologia e evolução paleogeográfica da planície costeira da Ilha de Santa Catarina, litoral central do Estado de Santa Catarina, Brasil, em base ao estudo dos depósitos quaternários**. 2009. Bacharelado em Geografia – Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Geociências, Centro de Filosofia e Ciências Humanas, Florianópolis.
- MALIVA, R. **Aquifer Characterization Techniques**. [S.l.]: Springer Nature, jan. 2016. (Springer Hydrogeology). 617 p.
- MANOEL FILHO, J. Ocorrência das águas subterrâneas. *In*: FEITOSA, F. A. C. *et al.* (Ed.). **Hidrogeologia: Conceitos e Aplicações**. 3. ed. Rio de Janeiro: CPRM:LABHID, 2008. cap. 2.1, p. 53–75.
- MATHERON, G.; DE MARSILY, G. Is transport in porous media always diffusive? A counterexample. **Water Resources Research**, v. 16, n. 5, p. 901–917, 1980.
- MAXWELL, R.; CARLE, S.; TOMPSON, A. Contamination, risk, and heterogeneity: On the effectiveness of aquifer remediation. **Environmental Geology**, v. 54, p. 1771–1786, jun. 2008.
- MAZZUCO, L. M. **Atenuação natural de hidrocarbonetos aromáticos em aquíferos contaminados com óleo diesel**. 2004. Mestrado em Química – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas, Florianópolis.

MENDONÇA, M. **A dinâmica têmporo-espacial do clima subtropical na região conurbada de Florianópolis/SC**. 2002. Doutorado – Faculdade de Filosofia, Letras e Ciências Humanas, Universidade Estadual de São Paulo, São Paulo.

MOLZ, F. Advection, Dispersion, and Confusion. **Groundwater**, v. 53, n. 3, p. 348–353, 2015.

MÜLLER, J. B. **Bioestimulação combinada de ferro e sulfatorredução utilizando óxidos de ferro recuperados do tratamento da drenagem ácida de mina e acetato de amônio em águas subterrâneas impactadas com diesel B20**. 2017. Doutorado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

NEUMAN, S. P. Generalized scaling of permeabilities: Validation and effect of support scale. **Geophysical Research Letters**, v. 21, n. 5, p. 349–352, 1994.

NEUMAN, S. P.; DI FEDERICO, V. Multifaceted nature of hydrogeologic scaling and its interpretation. **Reviews of Geophysics**, v. 41, n. 3, 2003.

NICHOLS, G. **Sedimentology and Stratigraphy**. [S.l.]: Wiley, 2009. 419 p.

PAYNE, F.C.; QUINNAN, J.A.; POTTER, S.T. **Remediation Hydraulics**. [S.l.]: CRC Press, 2008.

PINDER, G. F.; CELIA, M. A. **Subsurface Hydrology**. [S.l.]: Wiley, 2006. 488 p.

PTAK, T.; PIEPENBRINK, M.; MARTAC, E. Tracer tests for the investigation of heterogeneous porous media and stochastic modelling of flow and transport—a review of some recent developments. **Journal of Hydrology**, v. 294, n. 1, p. 122–163, 2004.

RAMA, F. **Modelo conceitual da hidrodinâmica do transporte de gasolina e etanol em um aquífero costeiro raso**. 2019. Doutorado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

RAMA, F. *et al.* Flow field dynamics and high ethanol content in gasohol blends enhance BTEX migration and biodegradation in groundwater. **Journal of Contaminant Hydrology**, v. 222, p. 17–30, 2019.

RAMOS, D. T. **Bioestimulação de processos metanogênicos com acetato de amônio para degradação acelerada de hidrocarbonetos de petróleo em águas subterrâneas contaminadas com diesel B20**. 2013. Doutorado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

RAMOS, D. T. *et al.* Biostimulation of anaerobic BTEX biodegradation under fermentative methanogenic conditions at source-zone groundwater contaminated with a biodiesel blend (B20). **Biodegradation**, v. 24, p. 333–341, 2013.

RAMOS, S. M. **Análise comparativa da influência do etanol em diferentes processos de remediação de águas subterrâneas impactadas por gasolina**. 2010. Mestrado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

RAZALI, M. N.; YAP, B. Power Comparisons of Shapiro-Wilk, Kolmogorov-Smirnov, Lilliefors and Anderson-Darling Tests. **Journal of Statistical Modeling and Analytics**, v. 2, jan. 2011.

REHFELDT, K. R.; BOGGS, J. M.; GELHAR, L. W. Field study of dispersion in a heterogeneous aquifer: 3. Geostatistical analysis of hydraulic conductivity. **Water Resources Research**, v. 28, n. 12, p. 3309–3324, 1992.

REN, W. *et al.* Evaluating the Effects of Multiscale Heterogeneous Sediments on Solute Mixing and Effective Dispersion. **Water Resources Research**, v. 58, n. 9, 2022.

RITZI, R. W.; SOLTANIAN, M. R. What have we learned from deterministic geostatistics at highly resolved field sites, as relevant to mass transport processes in sedimentary aquifers? **Journal of Hydrology**, v. 531, p. 31–39, 2015.

RIVA, M. *et al.* Relative importance of geostatistical and transport models in describing heavily tailed breakthrough curves at the Lauswiesen site. **Journal of Contaminant Hydrology**, v. 101, n. 1, p. 1–13, 2008.

ROVEY, C. W.; CHERKAUER, D. S. Scale Dependency of Hydraulic Conductivity Measurements. **Groundwater**, v. 33, n. 5, p. 769–780, 1995.

SALAMON, P.; FERNÁNDEZ-GARCIA, D.; GÓMEZ-HERNÁNDEZ, J. J. Modeling tracer transport at the MADE site: The importance of heterogeneity. **Water Resources Research**, v. 43, n. 8, 2007.

SANCHEZ-VILA, X.; GUADAGNINI, A.; CARRERA, J. Representative hydraulic conductivities in saturated groundwater flow. **Reviews of Geophysics**, v. 44, n. 3, 2006.

SÁNCHEZ-VILA, X.; CARRERA, J.; GIRARDI, J. P. Scale effects in transmissivity. **Journal of Hydrology**, v. 183, n. 1, p. 1–22, 1996.

SAVOY, H. *et al.* Geological heterogeneity: Goal-oriented simplification of structure and characterization needs. **Advances in Water Resources**, v. 109, p. 1–13, 2017.

SAWAKUCHI, A.; GIANNINI, P. Complexidade em sistemas deposicionais. **Revista Brasileira de Geociências**, v. 36, p. 347–358, jun. 2006.

SCHNEIDER, M. R. **Avaliação dos métodos para determinação da taxa de biodegradação de hidrocarbonetos monoaromáticos e etanol em ambientes subsuperficiais**. 2001. Mestrado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

SCHNEIDER, M. R. **Intemperismo de fontes de contaminação em aquíferos impactados por derramamentos de gasolina e álcool e a influência sobre o risco à saúde humana**. 2005. Doutorado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

SCHULZE-MAKUCH, D.; CHERKAUER, D. S. Variations in hydraulic conductivity with scale of measurement during aquifer tests in heterogeneous, porous carbonate rocks. **Hydrogeology Journal**, v. 6, p. 204–215, 1998.

SERBENT, M. P. **Influência do etanol e do sulfato na biodegradação de compostos aromáticos em águas subterrâneas contaminadas com misturas de combustíveis**. 2012. Mestrado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Florianópolis.

SETHI, R.; DI MOLFETTA, A. **Groundwater Engineering**. [S.l.]: Springer Nature Switzerland, 2019. (Springer Tracts in Civil Engineering). 445 p.

SHULTZ, M. R. *et al.* **Best Practices for Environmental Site Management: A Practical Guide for Applying Environmental Sequence Stratigraphy to Improve Conceptual Site Models**. Washington, DC: [s.n.], 2017. (Risk Assessment Guidance for Superfund, EPA/600/R-17/293).

SOUZA, C. *et al.* **Quaternário do Brasil**. [S.l.]: Holos, 2018. 382 p.

SPRINGER, R. K.; GELHAR, L. W. Characterization of large-scale aquifer heterogeneity in glacial outwash by analysis of slug tests with oscillatory responses, Cape Cod, Massachusetts. *In*: **U.S. Geological Survey Toxic Substances Hydrology Program**. Edição: Gail E. Mallard e David A. Aronson. [S.l.]: U.S. Geological Survey, 1991.

SUDICKY, E. A. A natural gradient experiment on solute transport in a sand aquifer: Spatial variability of hydraulic conductivity and its role in the dispersion process. **Water Resources Research**, v. 22, n. 13, p. 2069–2082, 1986.

SUDICKY, E. A.; ILLMAN, W. A. Lessons Learned from a Suite of CFB Borden Experiments. **Groundwater**, v. 49, n. 5, p. 630–648, 2011.

- SUDICKY, E. A.; ILLMAN, W. A. *et al.* Heterogeneity in hydraulic conductivity and its role on the macroscale transport of a solute plume: From measurements to a practical application of stochastic flow and transport theory. **Water Resources Research**, v. 46, n. 1, p. 1–16, 2010.
- SUGUIO, K. **Geologia sedimentar**. [S.l.]: Blucher, 2003. 416 p.
- TEIXEIRA, W. *et al.* **Decifrando a Terra**. [S.l.]: Oficina de Textos, 2003. 557 p.
- TERAMOTO, E.; CHANG, H. Emprego de krigagem ordinária para estimar a distribuição espacial de litofácies permeáveis: exemplo do Aquífero Rio Claro em Paulínia/SP. v. 18, p. 283–296, dez. 2018.
- TODD, D. K.; MAYS, L. W. **Groundwater Hydrology**. [S.l.]: Wiley, 2004.
- TOMAZZOLI, E. R.; PELLERIN, J. R. G. M. **Mapa geológico da Ilha de Santa Catarina**. [S.l.: s.n.], 2014. Disponível em: <https://lmo.ufsc.br/mapa-geologico-da-ilha-de-santa-catarina/>. Acesso em: 28 mar. 2022.
- TOMAZZOLI, E. R.; PELLERIN, J. R. G. M.; HORN FILHO, N. O. Geologia da Ilha de Santa Catarina, Santa Catarina, Brasil. **Geociências**, v. 37, n. 4, p. 715–731, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.5016/geociencias.v37i4.11656>.
- VANZELLA, P. K. G. **Modelagem matemática aplicada a derramamentos da mistura de biodiesel e diesel em águas subterrâneas**. Florianópolis: [s.n.], 2017.
- WITTEN, I. H. *et al.* **Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques**. [S.l.]: Elsevier Science, 2016.
- WOESSNER, W. W.; POETER, E. P. **Hydrogeologic Properties of Earth Materials and Principles of Groundwater Flow**. Guelph, Ontario: The Groundwater Project, 2020. 205 p.
- ZECH, A. *et al.* A field evidence model: how to predict transport in heterogeneous aquifers at low investigation level. **Hydrology and Earth System Sciences**, v. 25, n. 1, p. 1–15, 2021.
- ZHENG, C.; BIANCHI, M.; GORELICK, S. M. Lessons Learned from 25 Years of Research at the MADE Site. **Groundwater**, v. 49, n. 5, p. 649–662, 2011.
- ZINN, B.; HARVEY, C. F. When good statistical models of aquifer heterogeneity go bad: A comparison of flow, dispersion, and mass transfer in connected and multivariate Gaussian hydraulic conductivity fields. **Water Resources Research**, v. 39, n. 3, 2003.

ZLOTNIK, V. *et al.* Support volume and scale effect in hydraulic conductivity: Experimental aspects. *In*: THEORY, modeling, and field investigation in hydrogeology. [S.l.]: Geologic Society of America, jan. 2000. v. 348, p. 215–231.

Apêndices

**APÊNDICE A – DENDROGRAMA DO AGRUPAMENTO HIERÁRQUICO
REALIZADO COM OS VALORES DE Z_{lnK} A PARTIR DE DISTÂNCIAS
EUCLIDIANAS AO QUADRADO PELO MÉTODO DE WARD**

Nomes no eixo y representam a nomação da sondagem seguido da ordem a partir da superfície da litofície associada. No eixo x, a distância euclidiana ao quadrado para os centros dos grupos definidos, conforme adotado pelo método de 'Ward'.

