



Simulação numérica de fluxo e transporte de cromo na Floresta Estadual Edmundo Navarro de Andrade, município de Rio Claro – SP.

Numerical simulation of chromium flow and transport in the Edmundo Navarro de Andrade State Forest, Rio Claro – SP.

Caroline Favoreto da Cunha*
Elias Hideo Teramoto
Chang Hung Kiang

Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” – UNESP.
Instituto de Geociências e Ciências Exatas de Rio Claro
Departamento de Geologia Aplicada.
Av. 24 A, 1515
Bela Vista
Rio Claro, SP - Brasil
CEP 13506-900

*Autora correspondente
caroline.favoreto@unesp.br

Copyright

This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License.



DOI:10.21715/GB2358-2812.202438004

RESUMO

A área de estudo, localiza-se sobre terrenos da Floresta Estadual Dr. Edmundo Navarro de Andrade, uma importante reserva ecológica para o município de Rio Claro/SP, e encontra-se sobre sedimentos das formações Corumbataí, Serra Geral, Rio Claro e Depósitos Cenozoicos. Foram constatadas concentrações anômalas de cromo, que excedem o limite de potabilidade definido pelo CONAMA n°396 (0,01 mg/L) na área de estudo. Para o entendimento do fluxo, bem como o entendimento do comportamento geoquímicos deste metal, e os fatores que controlam o desenvolvimento desta pluma, realizou-se o modelo de fluxo e a simulação de transporte de cromo. As simulações foram feitas a partir do método dos elementos finitos, utilizando-se do software FEFLOW. A pluma resultante da simulação demonstrou forte controle da sorção e da dispersividade transversal em seu comportamento.

Palavras Chaves: Simulação Numérica, Transporte de contaminante, Elementos Finitos, FEFLOW, água subterrânea.

ABSTRACT

The study area is located within the Dr. Edmundo Navarro de Andrade State Forest, a crucial ecological reserve for the municipality of Rio Claro/SP. The sediments in the area are from the Corumbataí, Serra Geral, Rio Claro, and Cenozoic Deposits formations. Unfortunately, anomalous levels of chromium were detected, exceeding the potability limit set by CONAMA n°396 (0.01 mg/L). In order to obtain information on the groundwater flow and geochemical behavior of this metal, as well as the factors governing the plume's development, numerical simulations were conducted using the finite element method and FEFLOW software. The simulation showed that sorption and transverse dispersivity exert significant control on the plume's behavior.

Keywords: Numerical Simulation, Contaminant transport, Finite Elements, FEFLOW, groundwater.

1. INTRODUÇÃO

Dentre toda a água disponível no planeta Terra, a água doce corresponde a apenas 2,5% da água total, onde desse montante, a água subterrânea representa 31,07% (GLEICK, 1993; MORRIS *et al.*, 2003), tornando-se uma das principais fontes de água potável no mundo (FETTER; BOVING; KRAEMER, 2017). No entanto, a qualidade e a quantidade das águas subterrâneas são frequentemente afetadas por atividades antrópicas, tais como o vazamento de efluentes industriais, o lançamento de esgoto no solo, a lixiviação de elementos químicos usados em produtos agrícolas, a lixiviação de metais pesados em minerações e o vazamento de derivados de petróleo em postos de combustíveis (FETTER; BOVING; KRAEMER, 2017). Portanto, a qualidade das águas subterrâneas é de grande importância e

requer monitoramento constante (FETTER; BOVING; KRAEMER, 2017).

No ano de 2022, a companhia Ambiental do Estado de São Paulo – CETESB, constatou que existem 6.660 áreas contaminadas no estado, sendo que 33 delas estão localizadas no município de Rio Claro. Entre as localidades contaminadas do município de Rio Claro, encontra-se a área de estudo, denominada PREMA – Tecnologia e Comércio Ltda, situada no interior da Floresta Estadual Dr. Edmundo Navarro de Andrade – FEENA. A empresa produz madeira de reflorestamento a partir de processos de autoclave, que injetam componentes químicos para promover a proteção da madeira contra a degradação, estes preservantes apresentam concentrações elevadas de cromo em sua composição. Eventos

pretéritos de vazamento ocasionaram a contaminação do solo e água subterrânea do local. A área localiza-se sobre terrenos das formações Corumbataí, Serra Geral e Rio Claro, e sobre Depósitos Cenozoicos, compondo o aquífero local, raso e livre, denominado Aquífero Passa Dois.

Dentre as diversas ferramentas utilizadas no estudo de áreas contaminadas, destaca-se as simulações de transporte, pois permitem prever

o comportamento dos poluentes (TERAMOTO, 2017). Além disso, modelos matemáticos representam de forma simplificada situações reais e complexas por natureza a partir de equações matemáticas (GONÇALVES, 2016). Desta forma, o presente estudo visa contribuir para o entendimento do comportamento geoquímico do cromo, bem como compreender a dinâmica de fluxo local.

2. CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO

A área de estudo localiza-se na Floresta Estadual Dr. Edmundo Navarro de Andrade, no município de Rio Claro – SP (Figura 1). Historicamente a área havia sido designada a

plantações de eucalipto, posteriormente, em 1936, foi fundada a PREMA Tecnologia e Comércio Ltda, que produz madeiras de reflorestamento.

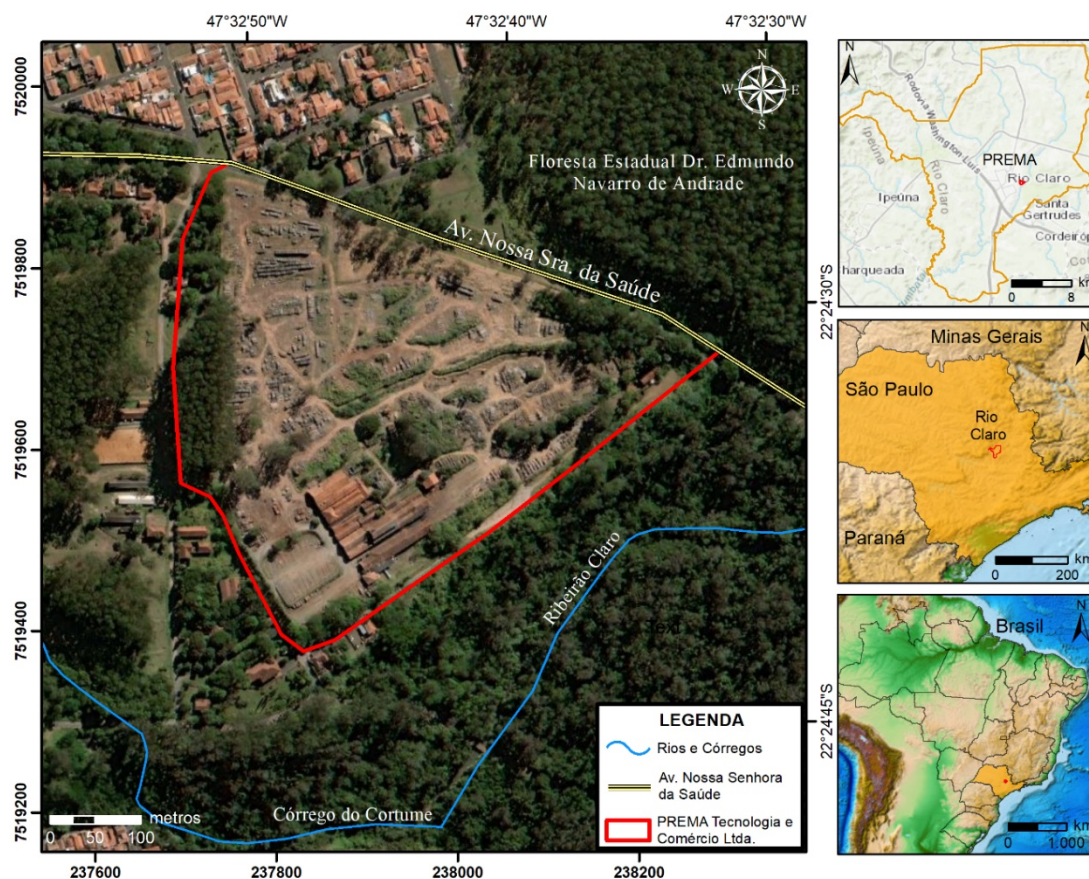


Figura 1 - Mapa de localização da área de estudo.

A empresa utiliza processos de autoclave para a preservação da madeira. Nesse processo a madeira é inserida em uma câmara de vácuo e alta pressão, que abrem os poros da madeira, permitindo a injeção dos preservantes hidrossolúveis responsáveis pela proteção. No entanto, a solução química utilizada nesses

preservantes é composta por elevadas concentrações de cromo. Ao longo dos anos de funcionamento da empresa, ocorreram vazamentos que possibilitaram a contaminação do solo e água subterrânea por este metal. De acordo com a CETESB (2022), a empresa já se encontra em processo de remediação.

2.1 CONTEXTO GEOLÓGICO

A região de estudo situa-se na Bacia Sedimentar do Paraná, esta representa uma bacia intracratônica do tipo sinéclise, localizada na porção centro-leste da América do Sul, abrangendo os territórios do Brasil meridional, nordeste da Argentina, norte do Uruguai e Paraguai oriental (MILANI, 2004). Na região afloram rochas de idade paleozoicas, representadas pelo Grupo Itararé e formações Tatuí, Irati e Corumbataí, afloram também rochas mesozoicas (formações Pirambóia, Botucatu e Serra Geral) e depósitos cenozoicos da Formação Rio Claro. Localmente, afloram litotipos das formações Corumbataí, Serra Geral e Rio Claro, além de depósitos aluvionares do córrego do Cortume e ribeirão Claro.

2.2 CONTEXTO HIDROGEOLÓGICO

O município de Rio Claro apresenta dois sistemas principais de água subterrânea, o Aquífero Tubarão e o Aquífero Rio Claro (DAEE, 1981). O Aquífero Tubarão é composto por litotipos do Grupo Itararé e Formação Tatuí, apresenta-se confinado, com espessura aproximada de 200 metros, possui vazões que variam entre 20 a 37 m³, transmissividade entre 0,3 e 40m²/dia, permeabilidade menor que 0,7 m/dia e capacidade específica de 0,03 a 6m³/h/m (OLIVIA, 2016).

O segundo aquífero, Aquífero Rio Claro, é composto por sedimentos não consolidados da sua formação homônima, e consiste em um aquífero raso, livre, com cerca de 30 metros de espessura (Sistema Integrado de Gerenciamento de Recursos Hídricos do Estado de São Paulo - SIGRH, 2015), com vazões que variam entre 5m³/h e 25m³/h, transmissividade de 2 a 50m²/dia, permeabilidade menor que 2m/dia e capacidade específica entre 0,1 a 5m³/h/m (OLIVA, 2016).

Além desses dois sistemas aquíferos ocorrem também aquíferos rasos e locais, formados pela alteração das rochas do substrato. Na área de estudo, observou-se a partir de dados litológicos obtidos por sondagens SPT, dos resultados de condutividade elétrica, e dos dados de condutividade hidráulica, que o fluxo

Na área, a Formação Corumbataí é predominantemente, e apresenta um solo argiloso, de coloração arroxeada com espessura aproximada de 10 metros de profundidade, onde encontra siltito maciço, arroxeado, com baixo grau de intemperismo. A Formação Serra Geral, por sua vez, encontra-se bastante alterada, apresentando-se como um solo argiloso. A Formação Rio Claro aflora sobreposta a Formação Corumbataí, com espessuras de até 2 metros, ocorrendo na área como um sedimento arenoso não consolidado, de granulometria fina e presença de seixos e matéria orgânica. Ao longo do ribeirão Claro e córrego do Cortume, ocorrem os Depósitos Aluvionares, caracterizados por um sedimento arenoso, fino, com matéria orgânica e presença de seixos.

de água subterrânea local se encontra ao longo dos solos argilo-siltosos da Formação Corumbataí (Tabela 1), pertencentes ao Aquífero Passa Dois. Estes dados foram adquiridos através de vistas ao processo na CETESB.

Regionalmente o Grupo Passa Dois, composto pelas formações Irati, Serra Alta e Corumbataí, é descrito como Aquitardo Passa Dois, entretanto, apesar de suas baixas características hidráulicas, pode apresentar-se como aquífero em locais com lentes arenosas e calcáreas, bem como zonas fissuradas e de solos espessos, denominado, portanto, de Aquífero Passa Dois (PAULA; SILVA, 2017).

Na região de estudo, a Formação Corumbataí é recoberta com um espesso capeamento de solo, produto de sua própria alteração, com profundidades que variam de 2 a 7 metros (PAULA; SILVA, 2017), sendo que no local de estudo este solo chega a atingir 10 metros de espessura. Apesar de ser um solo desprovido de boas características hidráulicas, ele constitui um aquífero local, raso, de natureza livre, abastecido pela precipitação direta e alimentando os corpos superficiais (PAULA; SILVA, 2017), como o córrego do Cortume e o ribeirão Claro, caracterizando o aquífero de estudo.

Tabela 1 - Dados de condutividade hidráulica, litologia e condutividade elétrica dos poços de referência, situados na PREMA. Fonte: CETESB, 2005.

Poço	N.A.	Carga Hidráulica	Condutividade Elétrica (mS/cm)	Litologia	Formação do N.A.	Teste Slug (m/s)
PM-01	3,73	576,19	5,391	Solo argilo arenoso, pouco plástico	Corumbataí	
PM-02	0,59	579,27	0,425	Solo argilo arenoso, extra plástico	Corumbataí	
PM-03	3,26	575,40	0,84075	Solo argilo arenoso, extra plástico	Corumbataí	
PM-04	4,25	587,91	2,831	Solo argilo arenoso, extra plástico	Corumbataí	4,53 X 10 ⁻⁶
PM-05	3,55	575,02	0,839	Solo argilo arenoso, extra plástico	Corumbataí	
PM-07	0,52	573,23	1,1365	Solo argilo arenoso, extra plástico	Corumbataí	
PM-08	8,49	574,57	0,257	Solo argilo arenoso, extra plástico	Corumbataí	8,60 X 10 ⁻⁸
PM-09	1,28	570,81	0,265	Solo argiloso	Corumbataí	
PM-10	2,92	569,51	0,144	Solo argiloso	Corumbataí	
PM-11	0,68	570,51	1,048	Solo argiloso	Corumbataí	4,57 X 10 ⁻⁶
PM-12	1,22	568,90	0,738	Solo arenoso, fino a médio	Aluvião	
PM-13	1,01	569,60	0,804	Solo argiloso	Corumbataí	
PM-14	0,67	571,07	0,108	Solo arenoso com seixos	Aluvião	
PM-15	3,85	576,82	0,179	Solo pouco alterado	Corumbataí	
PM-16	3,54	579,04	0,227	Solo pouco alterado	Corumbataí	
PM-17	5,75	583,50	0,266	Solo pouco alterado	Corumbataí	4,22 X 10 ⁻⁸
PM-18	8,85	587,26	0,205	Solo pouco alterado	Corumbataí	
PM-19	5,75	573,62	0,215	Solo pouco alterado	Corumbataí	
PMN-01	5,30	574,82	3,569	Solo pouco alterado	Corumbataí	
PMN-02	4,79	575,27	9,983	Solo pouco alterado	Corumbataí	
PMN-03	4,78	574,32	0,644	Solo pouco alterado	Corumbataí	
PMN-04	4,26	574,76	2,830	Solo pouco alterado	Corumbataí	

3. COMPORTAMENTO GEOQUÍMICO DO CROMO

O cromo ocorre naturalmente em baixas concentrações no solo, águas e em toda a matéria biológica (BERTOLO; MARCOLAN; BOUROTTE, 2009), contudo, em altas concentrações ele se torna prejudicial à saúde (CETESB, 2012).

O cromo é encontrado em dois estados de oxidação na natureza: trivalente e hexavalente. Enquanto o cromo trivalente é pouco móvel em água subterrânea e apresenta baixa toxicidade, o cromo hexavalente possui alta mobilidade, tornando-se altamente prejudicial à saúde, mesmo quando em baixas concentrações (CALDER, 1988). A concentração, mobilidade e o estado de oxidação do cromo são controlados pelas características físicas e químicas do meio. Em soluções onde o pH é predominantemente ácido e o Eh baixo, predominam espécies de cromo trivalente, enquanto que em meios com pH alcalino e Eh alto o cromo trivalente prevalece (RICHARD; BOURG, 1991; BERTOLO; MARCOLAN; BOUROTTE, 2009; RAMOS, 2015). De

maneira geral, o cromo move-se com a água, com exceção em meios de baixo pH, onde o cromo é adsorvido (RICHARD; BOURG, 1991). A distribuição entre cromo trivalente e hexavalente é regulada por reações de oxirredução, observadas no diagrama de *Pourbaix*, apresentado na seção de resultados.

A mudança de cromo trivalente para cromo hexavalente ocorre apenas a partir de uma reação redox, onde aumenta-se a solubilidade do cromo. Essa reação é muito comum na presença de H_2O/O_2 aquoso, Mn^{2+}/Mn^{4+} e Fe^{2+}/Fe^{3+} (RICHARD; BOURG, 1991). A transformação de cromo trivalente para hexavalente apesar de comum, não ocorre de forma rápida, isso por que há comumente a precipitação de óxidos e hidróxidos de cromo antes de formar o cromo hexavalente, principalmente em pH alcalinos e neutros (RICHARD; BOURG, 1991). Em contrapartida, em pH ácidos o cromo trivalente é facilmente dissolvido e transformado em sua forma hexavalente.

4. MATERIAIS E MÉTODOS

Este trabalho seguiu as etapas metodológicas sugeridas pelo fluxograma “Protocolos para Aplicação de Modelos Matemáticos”, proposto

por Anderson *et al.*, (2015), apresentado na figura abaixo.

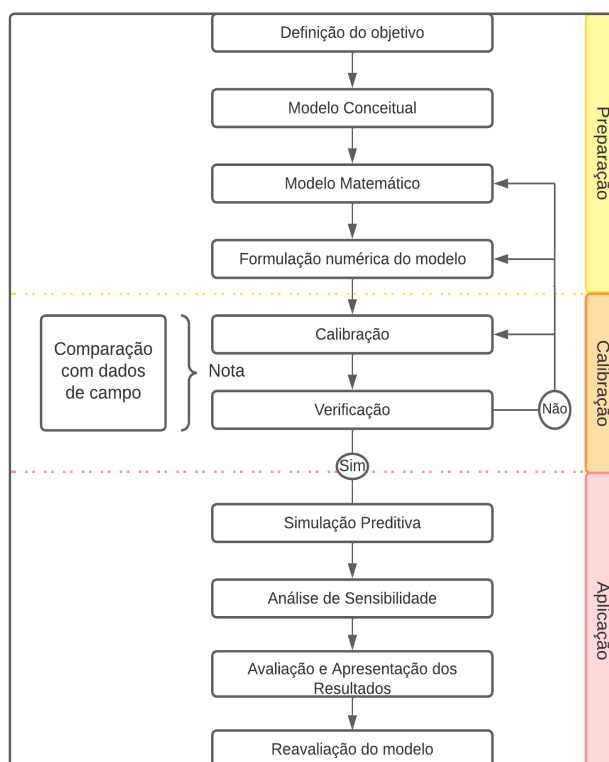


Figura 2 - Fluxograma metodológico. Fonte: Adaptado de Anderson *et al.*, 2015.

4.1 AQUISIÇÃO DE DADOS

Os dados utilizados foram adquiridos de relatórios técnicos elaborados nos processos de investigação ambiental executados na área, obtidos a partir da autorização de vistas emitida pela CETESB. Os parâmetros utilizados foram:

- a) Perfis geológicos descritivos de sondagens;
- b) Medições de nível d'água;
- c) Ensaio de permeabilidade;
- d) Concentrações de Cr na água subterrânea.

4.2 MODELO CONCEITUAL

A construção de um modelo matemático inicia-se com a construção do modelo conceitual, que busca descrever de forma simplificada a condição atual do aquífero de forma a compreender a síntese do conhecimento hidrogeológico da área de estudo (KRESIC; MIKSZEWSKI, 2013).

Através da complicação e interpretação dos dados obtidos nas consultas dos relatórios técnicos, elaborou-se o modelo hidrogeológico conceitual contemplando as unidades hidrofaciológicas que compõem o aquífero raso local, suas propriedades hidráulicas, associadas às condicionantes de fluxo, e as condições de contorno locais.

4.3 MODELAGEM NUMÉRICA DE FLUXO

O modelo hidrogeológico conceitual será reproduzido em modelos numéricos de fluxo, empregando o Método dos Elementos Finitos,

utilizando a interface gráfica *FEFLOW* v.5 (DIERSCH, 2013).

4.3.1 CALIBRAÇÃO DO MODELO

Nesta etapa equipara-se as cargas hidráulicas geradas pela simulação com aquelas observadas em campo, realizando ajustes dos dados de entrada até que os mesmos correspondam aos

valores vistos em campo (ANDERSON; WOESSNER; HUNT, 1992), ou satisfaçam o critério Normalized Root Mean Square Error - NRMSE inferior a 10%, conforme a equação 1.

$$\frac{RMS}{V_{max}-V_{min}} \times 100 \quad (1)$$

Onde o RMS é o valor de erro obtido pelo software, e V_{max} e V_{min} são os valores máximo

e mínimo de carga hidráulica observada.

4.3.2 SIMULAÇÃO DE FLUXO

Após realizar a calibração do modelo, é feita a simulação numérica de fluxo. Nas simulações de fluxo, as soluções são obtidas através da resolução da derivada da equação de Darcy, bem como a resolução de equações matriciais.

A equação de Darcy (equação 2), estabelece que a água flui de um ponto de maior energia potencial para outro de menor energia potencial, sem que nenhuma água seja criada ou perdida neste processo.

$$Q = -KA \frac{dh}{dl} \quad (2)$$

Q representa a vazão, K a condutividade hidráulica, A é a área da seção transversal e dh/dl representa o gradiente hidráulico. Dessa

forma, a derivada da equação de Darcy representa o fluxo tridimensional de água subterrânea é dada pela equação estacionária (3).

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) - W = 0 \quad (3)$$

Onde K_x , K_y e K_z representam os valores de condutividade hidráulica ao longo dos eixos x , y e z respectivamente, $\frac{\partial}{\partial x,y,z}$ os valores de carga hidráulica nos eixos x , y e z , respectivamente, e W fluxo por unidade de volume, que representa fontes e/ou sumidouros de água.

4.3.3 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

A partir do modelo calibrado realiza-se a análise de sensibilidade, que tem por objetivo comprovar a confiabilidade da calibração e o grau de dependência da solução do modelo

$$X_K = \frac{\partial S}{\partial a_K} \approx \frac{S(a_K + \Delta a_K) - S(a_K)}{\Delta a_K / a_K} \quad (4)$$

Onde ΔS são as mudanças na função de erro da soma dos quadrados (NRMS) no valor de

4.4 SIMULAÇÃO DE TRANSPORTE

A partir do simulador de transporte de solutos *FEFLOW* (*Finite Element Subsurface Flow & Transport Simulations System*), foram conduzidas simulações a fim de reproduzir a evolução da pluma de cromo a partir do ano de 2008, com vistas à obtenção de parâmetros referentes ao processo de sorção.

A sorção constitui-se em um importante mecanismo natural que contribui para a remoção dos contaminantes da água subterrânea, reduzindo a sua mobilidade e promovendo a retenção e retardamento destes. Neste processo ocorre a transferência de massa entre os metais dissolvidos na água subterrânea (fase aquosa) e os contaminantes adsorvidos no

Além da equação de fluxo, as simulações são dadas a partir da resolução de equações matriciais. No caso do método dos Elementos Finitos as aproximações são feitas a partir da resolução das soluções de bases, que consistem em funções de interpolação (ANDERSON; WANG, 1982).

frente aos diversos parâmetros de entrada. O coeficiente de sensibilidade pode ser calculado pela seguinte equação (4):

base Sa_K , para o novo valor $S(a_K + \Delta a_K)$, devido a mudança no valor de a_K .

meio poroso (fase sólida), sendo considerada um dos principais mecanismos naturais que controlam a remoção de contaminantes na água subterrânea, restringindo sua mobilidade.

Este parâmetro apresenta forte dependência do pH do meio (APELLO; ANTHONY; POSTMA, 2004). Na figura 3 é possível observar a fração de metais adsorvidos no óxido de ferro amorfo em diferentes valores de pH. É importante destacar que, embora haja um aumento na porção adsorvida à medida que o pH aumenta, o intervalo em que esses metais são eficientemente adsorvidos varia para cada metal.

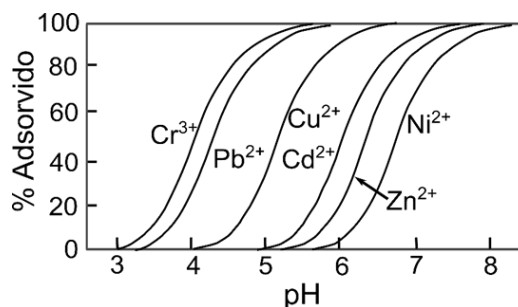


Figura 3 - Isotermas de adsorção. Fonte: APPELO; ANTHONY; POSTMA, 2004.

Usualmente, assume-se uma condição de equilíbrio entre as concentrações da fase aquosa e da fase sólida. A relação funcional entre as concentrações dissolvidas e as sorvidas sob uma temperatura constante é chamada de isoterma de sorção, que são controladas por equilíbrio, e são

incorporadas ao modelo de transporte a partir do uso de um fator de retardamento. A isoterma de sorção linear assume que a concentração adsorvida (\bar{C}) é diretamente proporcional à concentração dissolvida (C), conforme a equação 5:

$$\bar{C} = K_d C \quad (5)$$

Onde K_d é o coeficiente de distribuição, L^3M^{-1} . O coeficiente de distribuição controla a sorção e é obtido graficamente a partir da comparação entre as concentrações na fase

líquida e as adsorvidas pela fase sólida. Para isotermas lineares, o fator de retardamento (R) é dado pela constante de Henry (Equação 6).

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\phi} K_d \quad (6)$$

Onde ρ_b diz respeito a densidade da massa seca, ou seja $\frac{Massa\ seca}{Volume\ Total}$, ϕ é a porosidade do

meio e K_d representa o coeficiente de distribuição

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 MODELO CONCEITUAL

A partir dos dados hidroestratigráficos fornecidos pelas sondagens, *slug test* e medições de nível da água, obtidos junto aos relatórios técnicos, pode-se definir as seguintes premissas para o modelo conceitual:

- O aquífero local apresenta-se livre em toda sua extensão;
- A unidade que abriga a zona saturada corresponde a Formação Corumbataí muito alterada e os depósitos aluvionares, sendo os siltitos maciços desta unidade a base impermeável do modelo;

• Os limites do aquífero são definidos pela condição de contorno de fluxo nulo (Tipo 2) a norte; e a leste e oeste por condições de contorno do tipo 1, onde encontram-se as drenagens;

- A recarga do aquífero ocorre por toda a extensão do modelo, exceto pelas zonas de drenagens;
- A descarga da água subterrânea ocorre exclusivamente nas drenagens que cortam o aquífero local.

5.1.1 DEFINIÇÃO DA POTENCIOMETRIA

A potenciometria inicial (Figura 4) foi gerada a partir dos dados de carga hidráulica dos 22 poços de monitoramento, apresentados no

relatório técnico. Esta servirá como parâmetro de calibração do modelo de fluxo.

5.1.2 CARACTERIZAÇÃO HIDROFACIOLÓGICA

A caracterização hidrofaciológica foi realizada com base nos boletins de sondagens também apresentados nos relatórios técnicos. Associou-se os valores típicos de condutividade hidráulica, obtidos através de ensaios de permeabilidade na zona saturada, com os perfis litológicos dos 22 poços de monitoramento. Dessa forma, foram individualizados e caracterizados os litotipos que compõem o aquífero local:

- Unidade A: Solo argilo arenoso, de granulometria fina a muito fina, representa a Formação Rio Claro. Apresenta espessura máxima de 1,2 metros, mas não abriga a zona saturada do modelo;
- Unidade B: Solo arenoso fino, com muita matéria orgânica. Espessuras que variam entre 0,5 a 1,8 metros, representam os depósitos

aluvionares e abriga a zona saturada do modelo;

- Unidade C: Siltito muito alterado, com espessura entre 0,5 a 8 metros. Representam a Formação Corumbataí muito alterada que abrigam a zona saturada do modelo;
- Unidade D: Siltito pouco alterado, com espessura média de 3 metros. Formação Corumbataí pouco alterada;
- Unidade E: Siltito maciço arroxeadado, característico da Formação Corumbataí.

Dos 22 poços de monitoramento, os poços PM 04, PM 08, PM 11 e PM 17 foram determinados os valores de condutividade hidráulica na zona saturada a partir do ensaio de permeabilidade. A Tabela 2 demonstra os valores de condutividade hidráulica obtidos nos 4 poços onde foi realizado o ensaio, bem como sua associação com os litotipos presentes.

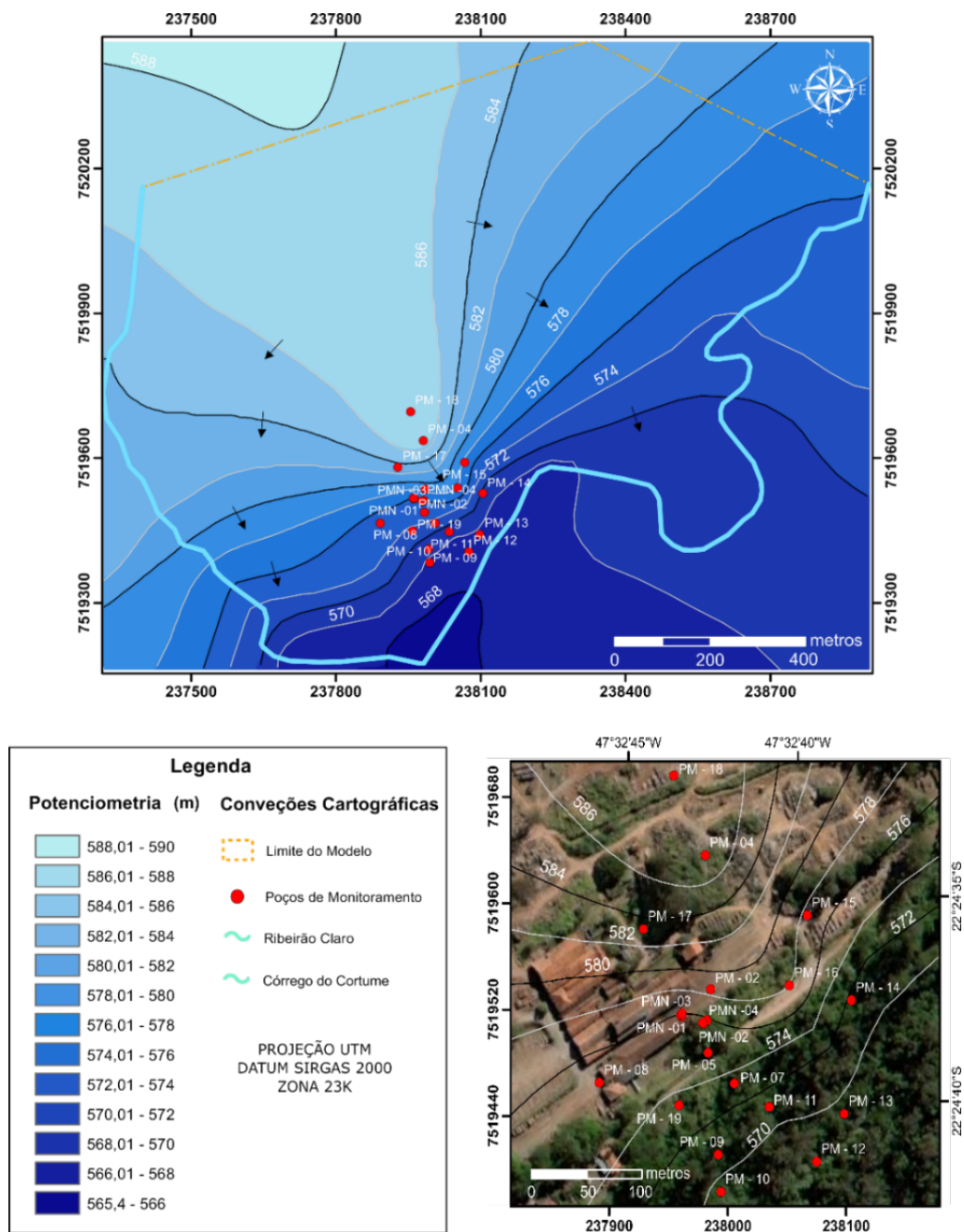


Figura 4 - Mapa potenciométrico obtidos a partir das medições iniciais de nível d'água, e distribuição dos poços de monitoramento.

Tabela 2 - Condutividade hidráulica dos 4 poços representativos da área, obtidos a partir do teste de slug.

Poço de	Condutividade	Litologia da seção
PM 04	$4,53 \times 10^{-8}$	Siltito pouco alterado
PM 08	$8,60 \times 10^{-8}$	Siltito pouco alterado
PM 11	$4,57 \times 10^{-6}$	Solo argilo arenoso
PM 17	$4,22 \times 10^{-8}$	Siltito pouco alterado

Os valores de condutividade hidráulica adotados no modelo seguem os apresentados na Tabela 2. Deste modo, na região em que o nível d'água encontra-se na Formação Corumbataí,

utilizou-se os valores entre os obtidos nos poços PM 04, PM 08 e PM 17, enquanto que na região dos depósitos aluvionares, os valores adotados foram referentes ao poço PM 11.

5.1.3 CONDIÇÕES DE CONTORNO

As condições de contorno representam formulações matemáticas que especificam parâmetros hidrogeológicos conhecidos na fronteira do domínio do modelo computacional, conduzindo o modelo a uma única e coerente solução. Dessa forma, foram definidas duas condições de contorno para área de estudo

(Figura 5). Nos limites definidos pela drenagem foi imposta a condição de Carga Hidráulica Especificada (Tipo I). A norte do modelo adotou-se condição de Fluxo Nulo, visto que a região se encontra em um alto topográfico, que atua como um divisor de águas.

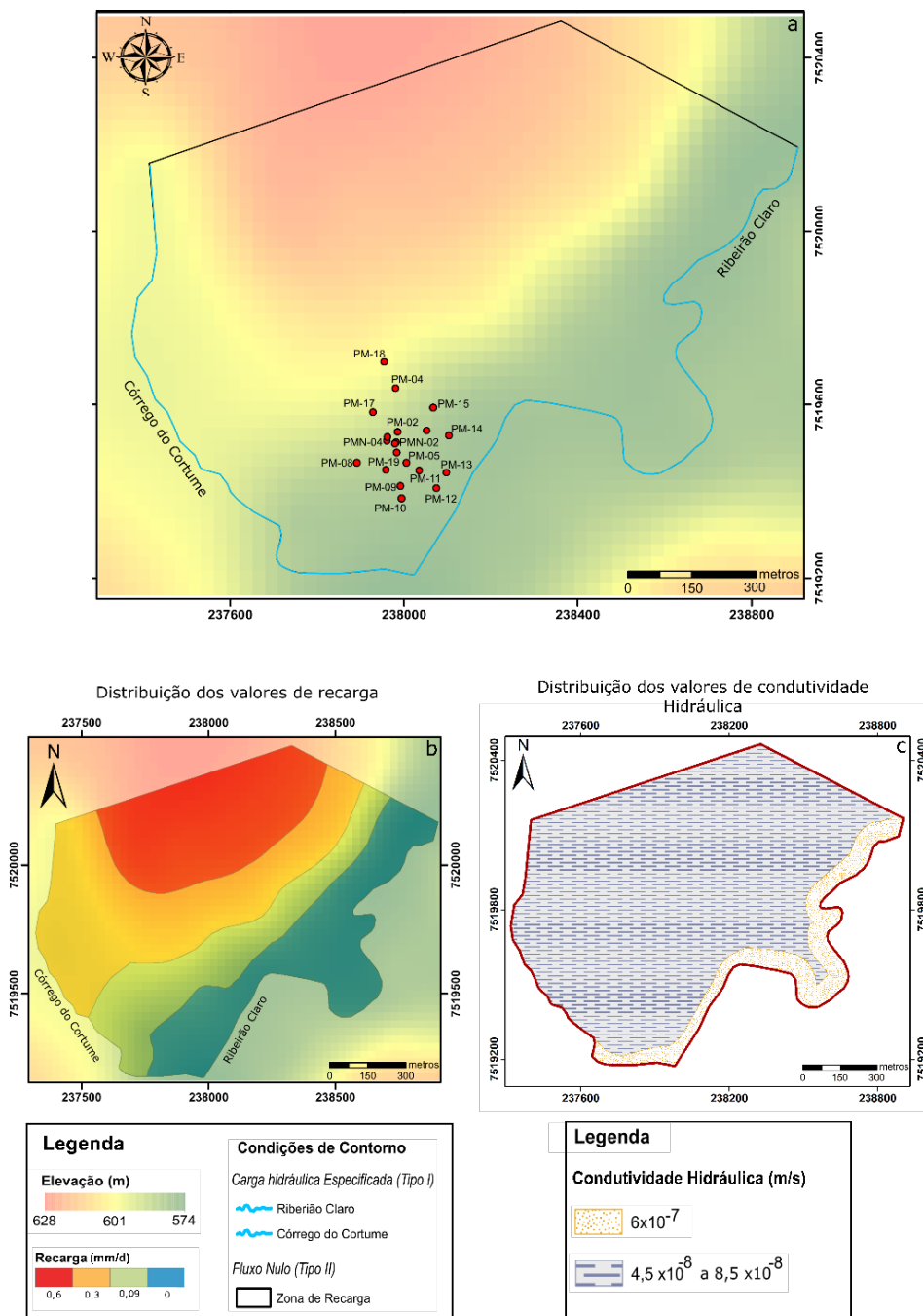


Figura 5 - Mapa de condições de contorno impostas ao modelo conceitual.

A distribuição de recarga é influenciada pela conformação topográfica da área, conforme discutido por Toth (1963). De maneira geral, em regiões topograficamente mais altas e

aplainadas, ocorre um maior volume de recarga, enquanto que em locais mais inclinados a tendência é que o escoamento superficial domine, e em regiões de vales e drenagens o

que, geralmente, predomina é a descarga (TOTH, 1963; SCANLON *et al.*, 2002; MONDIN, 2005). Com base nessa perspectiva, no modelo aqui apresentado, o maior valor de recarga encontra-se na zona topograficamente mais alta e aplainada (região em vermelho na figura 5.b). Esse valor diminui progressivamente até o vale do Ribeirão Claro,

5.2 SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE FLUXO

5.2.1 DISCRETIZAÇÃO DO MODELO

A malha do modelo foi gerada a partir do método dos Elementos Finitos, sendo discretizada em uma malha com 29.008 elementos triangulares e 22.164 nós, apresentando

5.2.2 SIMULAÇÃO EM REGIME PERMANENTE

A simulação realizada em regime permanente resultou em valores de recarga, condutividade hidráulica e carga hidráulica que satisfazem o modelo, onde distribuição desses valores seguiu a proposta prevista no modelo conceitual. O resultado da simulação demonstra que a taxa de recarga em áreas topograficamente mais altas e planas é de 255,67 mm/ano, enquanto que nas zonas de encosta, a recarga diminuiu para 127,83 mm/ano. Já nas zonas de descarga, onde há o rio, a recarga é zero.

A distribuição de condutividade hidráulica seguiu as premissas e valores impostos pelo modelo conceitual, sendo a Formação Corumbataí e os Depósitos aluvionares unidades que abrigam a zona saturada. Dessa maneira, o modelo foi dividido em duas

5.2.3 POTENCIOMETRIA SIMULADA

A potenciometria obtida pela simulação (Figura 7.a) apresenta distribuição semelhante a configuração topográfica da área, e possui similaridade com a potenciometria observada, apresentando direção de fluxo predominante para sudeste.

Os valores de carga hidráulica obtidos pela simulação demonstram boa correlação com os valores observados, e apresentam r^2 igual a 0,9507, ou seja, 95,07% de correlação (Figura 7.c). Além disso, o modelo atende ao critério NRMSE < 10%, obtendo erro normalizado (NRMSE) de 5,60193 %.

A análise de sensibilidade foi realizada mediante a alteração dos parâmetros que controlam o fluxo. Dessa forma, foram

onde a descarga, e o valor de recarga é nulo.

A partir dos valores de condutividade hidráulica apresentados na Tabela 2, a área do modelo foi dividida em duas diferentes zonas de condutividade hidráulica, de forma a representar a Formação Corumbataí e os Depósitos Aluvionares, como demonstra a figura 5c.

maior refinamento na área onde se encontra os poços de monitoramento, totalizando 1,27 km² e $2,1 \times 10^7$ m³ de volume total.

camadas homogêneas, agrupando as unidades B, C e D (Figura 6). A camada base do modelo representa a Unidade D e, portanto, é composta por siltitos pouco alterados da Formação Corumbataí. Para esta camada, adotou-se o valor de condutividade hidráulica de $1,04 \times 10^{-7}$ m/s. A camada superior à base abriga o siltito muito alterado, compondo o solo da Fm. Corumbataí alterado, Unidade C, e por sedimentos arenosos não consolidados depositados ao longo do ribeirão Claro, sendo representativos dos depósitos aluvionares, Unidade B. Para a porção representativa da Unidade C, adotou-se o valor de $4,6 \times 10^{-6}$ m/s, e para os depósitos aluvionares, adotou-se 6×10^{-7} m/s como valor de condutividade hidráulica.

incrementados 10% nos valores de condutividade hidráulica e recarga, objetivando-se avaliar a confiabilidade destes critérios. Os resultados obtidos foram comparados com os do modelo original (Tabela 3), e constata-se que o modelo possui alta sensibilidade a mudanças individuais nos parâmetros, mesmo a pequenas alterações, sendo a condutividade da 1^o camada o parâmetro mais sensível à mudança. O modelo gerado a partir do incremento de 10% nos valores de condutividade hidráulica e recarga, produziu uma alteração de 0,000239 % no valor do NRMSE original (5,60193 %), sendo o valor do NRMSE da análise de sensibilidade igual a 5,602129 %.

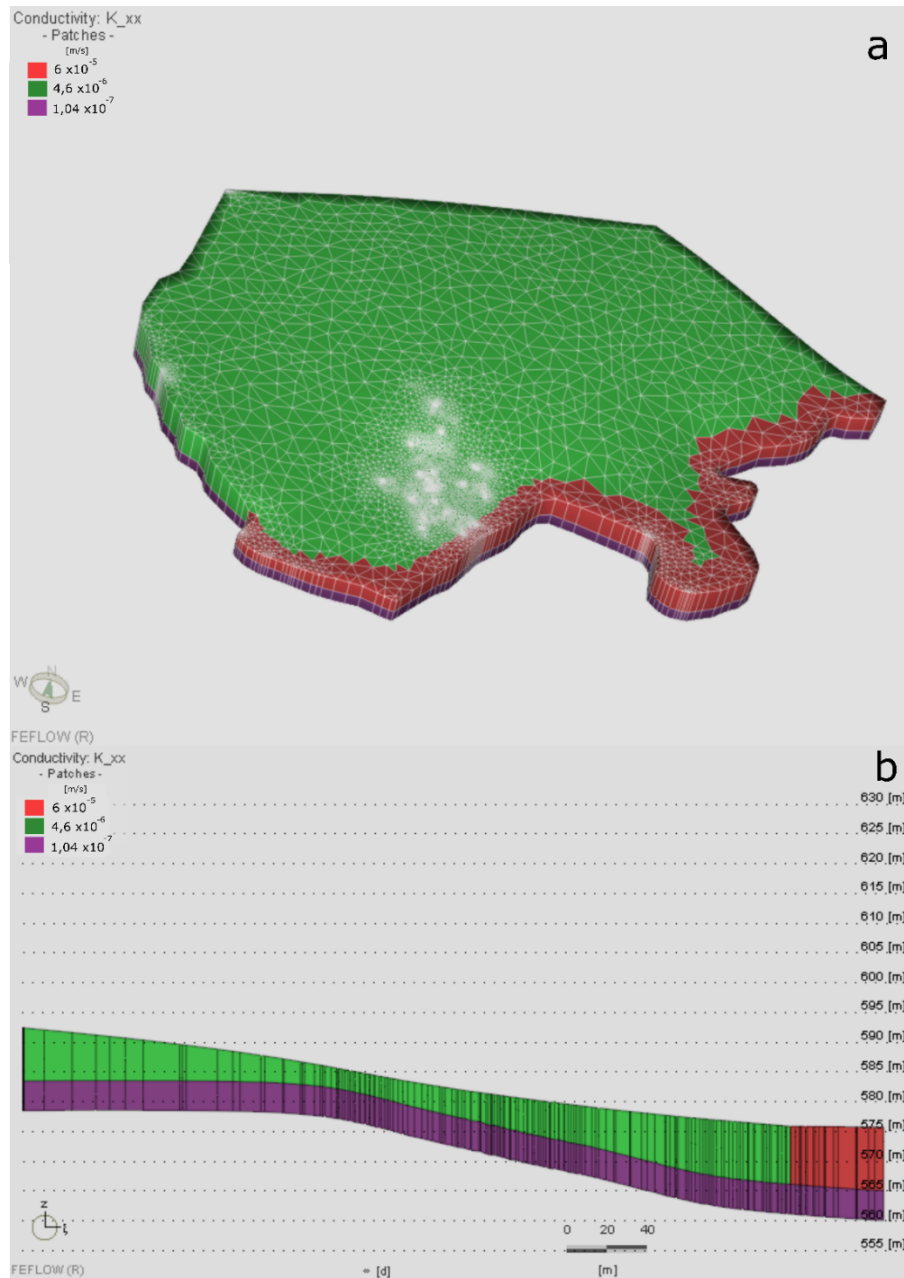


Figura 6 - Distribuição de condutividade no domínio do modelo (a); Perfil esquemático com a distribuição das camadas (b).

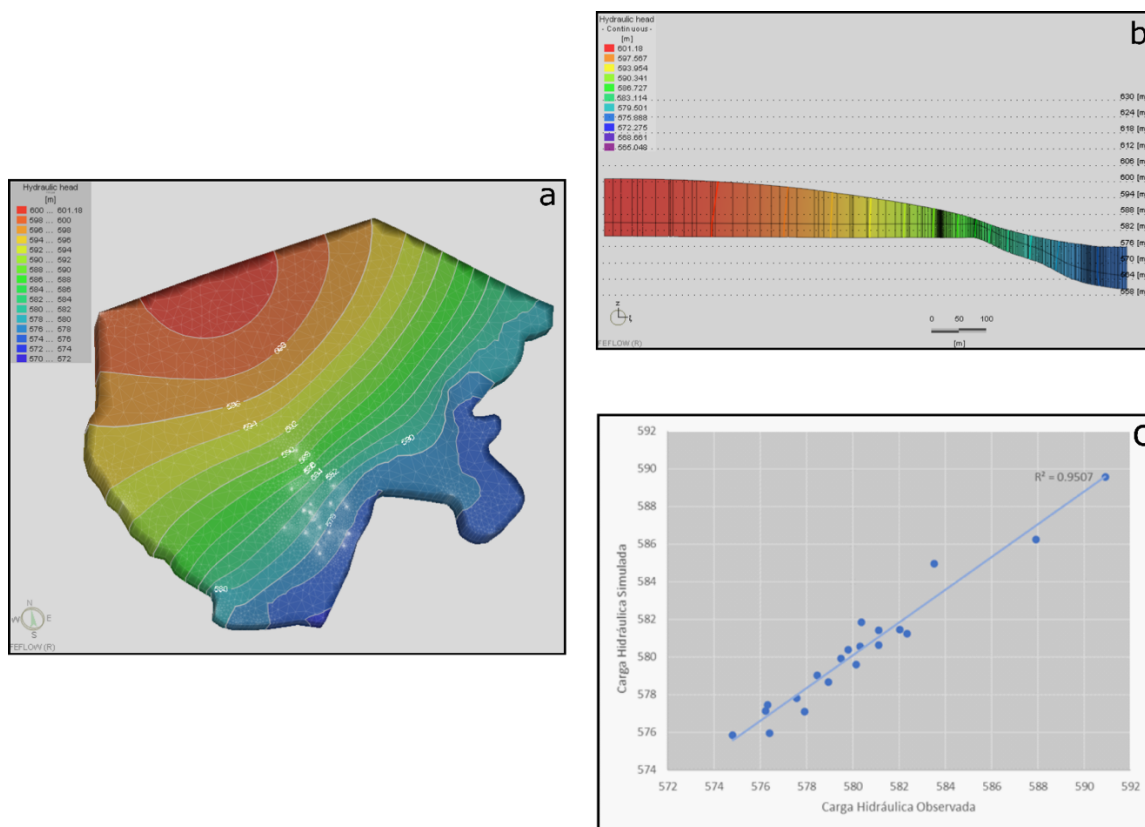


Figura 7 - Distribuição de carga hidráulica simulada (a, b); correlação entre carga hidráulica simulada e observada (c).

Tabela 3 - Resultados obtidos na análise de sensibilidade.

Parâmetros	Valores modelo original	Valores incrementados (10%)	RMS original	RMS modificado	Coefficiente de Sensibilidade
Aluvião	6	6.6	0.90242	5.43	45.2758
Condutividade Hidráulica (m/d)					
Corumbataí 1	0.4	0.44	0.90242	5.75	48.4758
Corumbataí 2	0.009	0.0099	0.90242	5.42	45.1758
Recarga					
Zona 1	0.0007	0.00077	0.90242	5.33	44.2758
Zona 2	0.00035	0.000385	0.90242	5.05	41.4758
Zona 3	0	0	0.90242	-	-

5.3 ESPECIAÇÃO QUÍMICA DO CROMO

Foram constatadas concentrações anômalas de cromo em 11 dos 22 poços de monitoramento, sendo que 10 deles possuem concentrações acima do Limite de Quantificação Praticável definido pela Resolução CONAMA nº396.

A partir da análise de Eh e pH dos poços, obtidos nos relatórios técnicos, construiu-se o diagrama de Pourbaix (Figura 8.a). O diagrama aponta que a espécie predominante é o cromo Trivalente na forma de hidróxidos de cromo. O

$Cr(OH)_2^+$ e o $Cr(OH)^{2+}$ consistem em espécies dissolvidas do Cr (III), e na faixa de pH de 4 a 7 apresentam tendências de adsorção, como demonstra a Figura 3.

A pluma que se objetiva reproduzir deve exibir comportamento semelhante ao apresentado na Figura 8.b, apresentando aproximadamente 212,80 metros de comprimento, e larguras que variam de 35 a 98 metros. Além disso, a pluma não apresenta concentrações que atingem o ribeirão Claro.

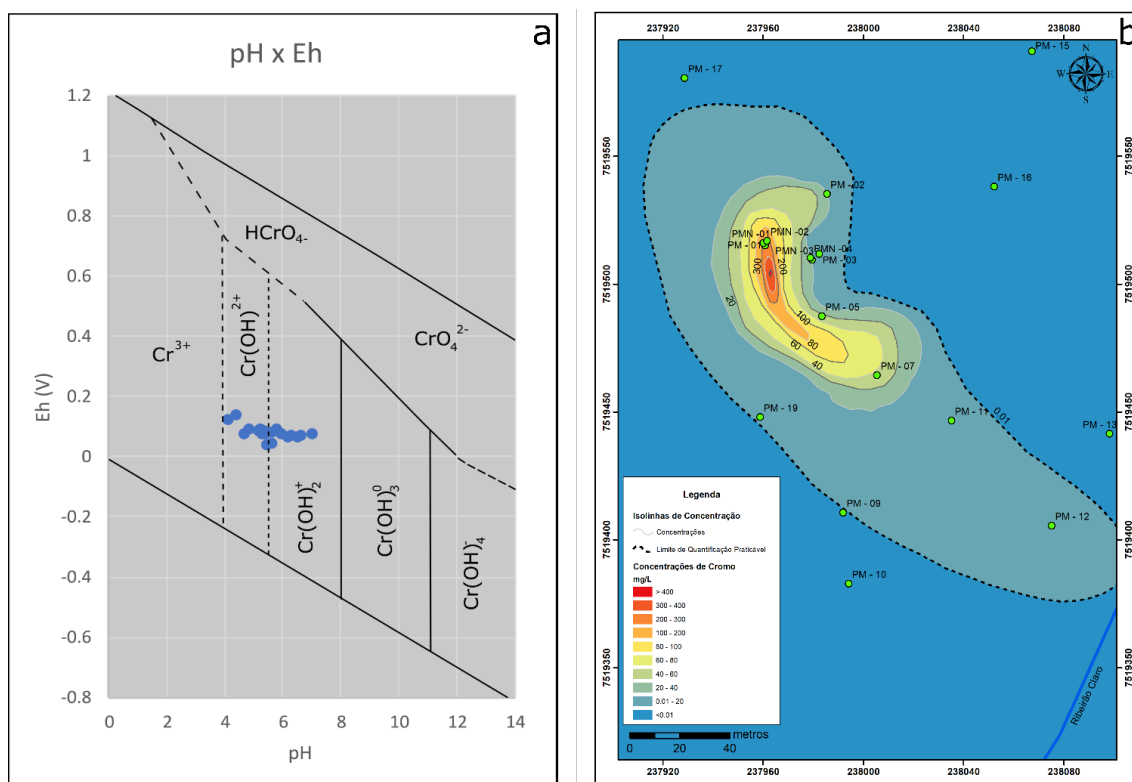


Figura 8 - Diagrama de Pourbaix com projeção dos poços em azul (a); pluma de cromo esperada, com concentrações determinadas em 2008. Fonte: CETESB, 2009.

5.4 SIMULAÇÃO DE TRANSPORTE DE MASSA

Objetivando-se obter o tamanho real da pluma, os parâmetros de porosidade, adsorção e dispersividade longitudinal e transversal foram modificados no modelo. Para a porosidade, adotou-se dois diferentes valores para o modelo (Figura 9.a), se baseando nas características geológicas da área: para as camadas referentes ao solo da Formação Corumbataí utilizou-se porosidade de 7% (0,07), enquanto que para os sedimentos arenosos dos depósitos aluvionares, a porosidade admitida foi de 15% (0,15). O valor de porosidade empregado para a Formação Corumbataí seguiu os valores propostos por Paula e Silva, 2017.

Para a dispersividade longitudinal e transversal, os valores obtidos foram constantes em todo o domínio do modelo. Para a dispersividade longitudinal o valor empregado foi de 5 metros, e 3 metros para a dispersividade transversal (Figura 9.b).

Para reproduzir o fenômeno de adsorção no modelo, foi aplicado a constante de Henry (Equação 6), alterando o valor de K_d . O valor do parâmetro K_d adotado foi de 1,5, sendo considerado constante e homogêneo em todas as camadas (Figura 9.c). A adsorção se mostrou como o principal parâmetro controlador do comportamento da pluma.

Na simulação de transporte de massa o fluxo foi simulado em regime permanente, enquanto o transporte foi simulado em regime transiente, com concentrações iniciais de cromo dissolvido constantes de 406,56 mg/L, com tempo de simulação igual a 930 dias.

A pluma obtida ao final de simulação (Figura 10.a) apresenta 209,15 metros de comprimento, e largura que varia de 58 a 130 metros, e não apresenta concentrações que atingem o ribeirão Claro.

Com intuito de avaliar os efeitos da sorção no modelo, realizaram-se simulações onde este parâmetro foi removido. A pluma resultante destas simulações, se comparada à pluma calibrada (Figura 10.b), apresenta um aumento em seu comprimento para 213, 82 metros, fazendo com que o contaminante percorra distâncias maiores e concentrações de cromo alcancem o ribeirão Claro, o que evidencia um forte controle deste parâmetro no comportamento desta pluma.

O mesmo foi feito para a dispersividade transversal, a pluma decorrente da remoção deste parâmetro exibiu, quando comparada a pluma calibrada (Figura 10.c) uma redução de 54 metros na largura da pluma, mas teve o comprimento pouco alterado.

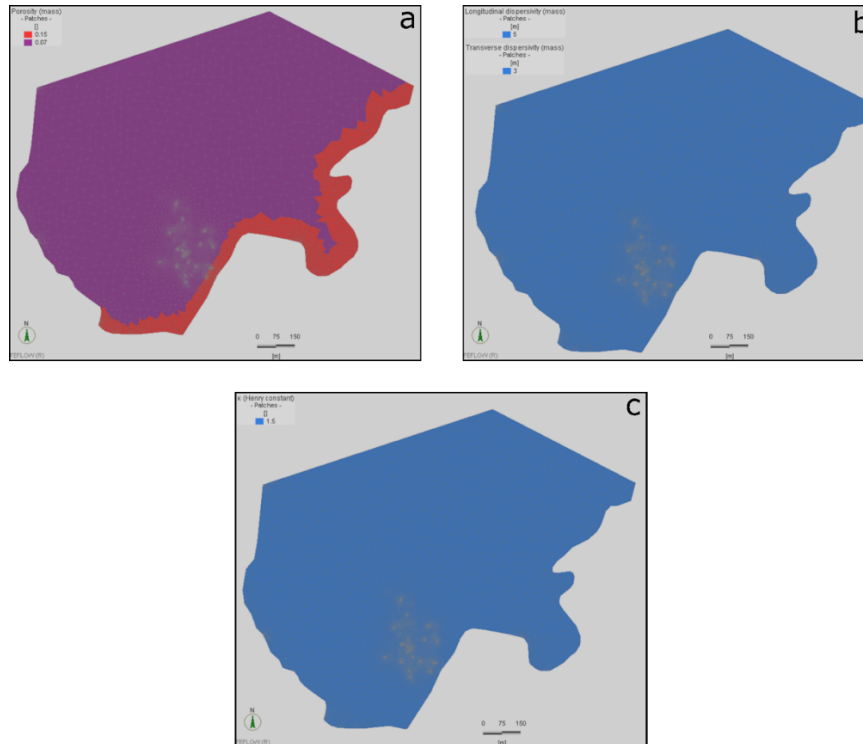


Figura 9 - Distribuição de valores de porosidade (a), dispersividade longitudinal, transversal (b) e de adsorção (c) no domínio do modelo.

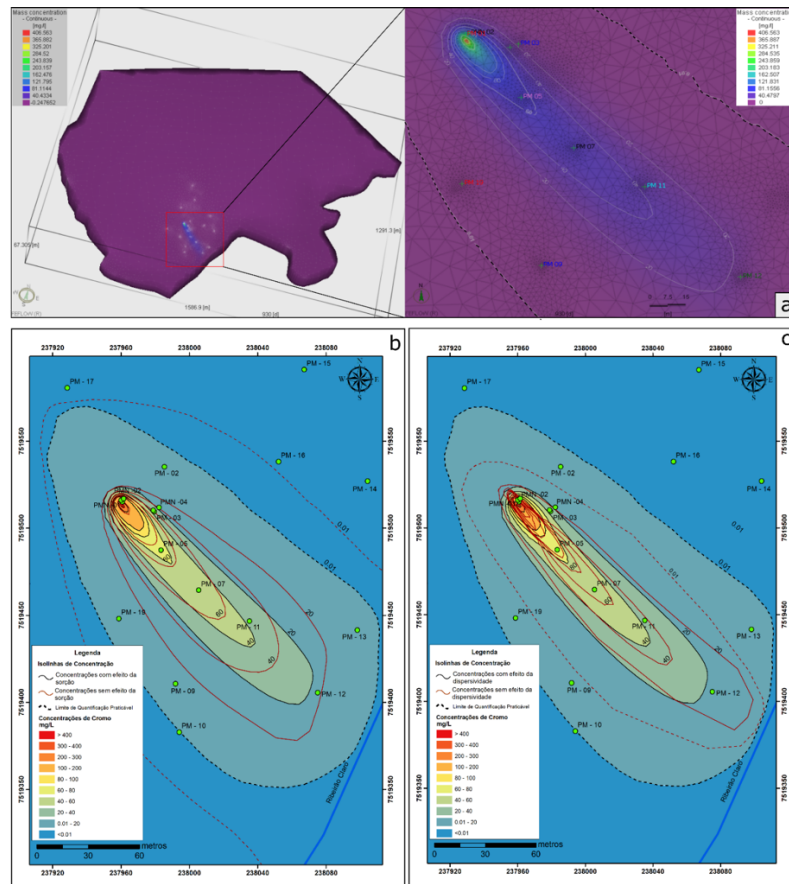


Figura 10 - Pluma obtida a partir da simulação (a); comparação entre a pluma sem o efeito da sorção (em vermelho) e a pluma simulada (b); comparação entre a pluma sem dispersividade transversal (em vermelho) e a simulada (c).

6. CONCLUSÃO

O modelo conceitual, bem como o modelo de fluxo em regime permanente expressam a representação simplificada do fluxo de água subterrânea no aquífero raso e local. O modelo numérico apresentou boa calibração, indicando correlação de 95,07% entre as cargas hidráulicas simuladas e observadas, e obteve NRMSE de 5,600193 %. Entretanto, a análise de sensibilidade evidenciou que o modelo possui alta sensibilidade a mudanças nos parâmetros de condutividade hidráulica e recarga, mesmo a pequenas modificações.

O mapa potenciométrico obtido pela simulação apresentou configuração semelhante à topográfica, com fluxo predominante para sudeste, sendo o ribeirão Claro a principal região de descarga, assemelhando-se ao mapa potenciométrico obtido através das cargas hidráulicas observadas.

Assim como a potencimetria, as zonas de recarga também seguem a conformação topográfica, como proposto por Toth, (1963). Dessa forma, a zona que recebe maior volume de recarga, e por consequência é a principal área de recarga do modelo, situa-se na região norte do modelo, região mais alta e topograficamente aplainada.

A reprodução da pluma de cromo resultou em uma simulação de transporte para 930 dias. A pluma obtida pela simulação e a pluma esperada possuem dimensões de comprimento semelhantes, mas largura e geometrias distintas, o que evidencia uma necessidade de maior

detalhamento geológico na área, que não foi possível no presente trabalho devido a carência de dados litológicos. Além disso, o comprimento entre a pluma obtida e a esperada apresenta uma diferença de 3,65 metros, essa diferença é produto do espalhamento por difusão molecular do contaminante acima do ponto de vazamento, efeito no qual não foi reproduzido pela simulação.

A pluma simulada evidenciou forte controle dos parâmetros de adsorção e dispersividade transversal, sendo a adsorção o parâmetro de maior influência no comportamento desta, evidenciada pela diferença entre o comprimento da pluma resultante da simulação e a pluma com sorção ausente. A discrepância entre a geometria das plumas esperada e simulada, pode ainda ser um indicativo da necessidade de criação de zonas de diferentes valores de sorção no modelo, e não a adoção de um único valor para todo o domínio do modelo, como foi aplicado neste trabalho.

Afim de reproduzir as condições de fluxo e transporte local de forma mais acurada, recomenda-se um estudo hidrogeológico de maior detalhe na área. Além das imprecisões causadas pela ausência de dados com maior detalhamento, é importante ressaltar as incertezas inerentes ao processo de modelagem, que são minimizadas também ao passo que as informações sobre a área se tornam mais abundantes.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANDERSON, M. P.; WOESSNER, W. W.; HUNT, R. J. **Applied groundwater modeling: Simulation of flow and advective transport**. Academic Press Inc., San Diego, CA. *Journal of Hydrology*, v. 140, p. 393-395, 1992.
- ANDERSON, M. P.; WOESSNER, W. W.; HUNT, R. J. **Applied Groundwater Modeling: simulation of flow and advective transport**. Academic press, 564 p. 2015.
- APPELO, C. ANTHONY J.; POSTMA, D. **Geochemistry, groundwater and pollution**. CRC press, 2004.
- BERTOLO, RA; MARCOLAN, LNO; BOUROTTE, CLM **Relações água-rocha e a hidrogeoquímica do cromo na água subterrânea de poços de monitoramento multiníveis de Urânia, SP, Brasil**. *Geologia USP. Série Científica*, v. 9, n. 2, p. 47-62 2009. <https://doi.org/10.5327/Z1519-874x2009000200003>
- CALDER, L. M. **Chromium in Groundwater**. In: NRIAGU, J.; NIERBOER, E. **Chromium in the natural and human environments-advances in environmental science and technology**. Ontario: John Wiley & Sons, p.:31. 1988
- CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Relatório de áreas contaminadas**. CETESB. São Paulo. 2022. Séries Relatórios <https://mapas.infraestruturameioambiente.sp.gov.br/portal/apps/MapJournal/index.html?appid=28e7bb2238a443819447a8ec3ae4abe5>
- CETESB – Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Crômio e seus compostos**.

- Disponível em:
<https://cetesb.sp.gov.br/laboratorios/wp-content/uploads/sites/24/2013/11/Cromio.pdf>. Acesso em 15 novembro 2022.
- DAEE – Departamento de Águas e Energia Elétrica. **Estudo de Águas Subterrâneas, Região Administrativa 5 (Campinas), SP.** DAEE. São Paulo. 1981. Série Relatórios.
- DIAS GONÇALVES, R. **Modelagem Numérica e Avaliação Hidrogeológica do Aquífero Rio Claro.** Dissertação de Mestrado, Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, 2016.
- DIERSCH, HJG. **FEFLOW: finite element modeling of flow, mass and heat transport in porous and fractured media.** Springer Science & Business Media, 2013.
- FETTER, CW; BOVING, T; KREAMER, D. **Contaminant hydrogeology.** Waveland Press, p.:1-3. 2017.
- GLEICK, PH. **Water in crisis.** New York: Oxford University Press, p.:13-15. 1993.
- KRESIC, N.; MIKSZEWSKI, A. **Hydrogeological Conceptual Site Models: data analysis and visualization.** CRC press, Boca Raton, 584 p, 2013.
- MILANI, EJ **Geologia do Continente Sul – Americano: Evolução da Obra de Fernando Flávio Marques de Almeida.** In: MANTESSO-NETO, V.; BARTORELL, A.; CARNEIRO, CRD. (Eds.) **Comentários sobre a origem e evolução tectônica da Bacia do Paraná.** Beca. p. 265-291. 2004.
- MONDIN, Marcos. **Avaliação e quantificação do processo de recarga do aquífero livre e raso no Parque Ecológico do Tiête-SP.** Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo, 8 p. 2005.
- MORRIS, B. L.; LAWRENCE, A. R. L.; CHILTON, P. J. C.; ADAMS, B.; CALOW R. C.; KLINCK, B. A. **Groundwater and its Susceptibility to Degradation: A Global Assessment of the Problem and Options for Management.** Early Warning and Assessment Report Series, RS. 03-3. United Nations Environment Programme, Nairobi, Kenya. 2003.
- OLIVA, A. **Estudo Hidrofaciológico do Aquífero Rio Claro no Município de Rio Claro – SP.** Tese de Doutorado, Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista, 196 p. 2006.
- PAULA E SILVA, F; CHANG, HK **Interferência da atividade minerária argileira nos recursos hídricos da Bacia do Ribeirão Santa Gertrudes, SP.** Estudo de caso. Associação Brasileira de Águas Subterrâneas/ Laboratório de Estudo de Bacias – LEBAC – UNESP. P. 17, 57 – 63. 2017.
- RAMOS, Raquel Lima. **Estudo do comportamento geoquímico do cromo (III) e (VI) no solo.** Dissertação de Mestrado, Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal do Estado de São Paulo. p.7. 2015.
- RICHARD, FC.; BOURG, ACM. **Aqueous geochemistry of chromium: a review.** *Water research* 25(7):807-816, 1991. [https://doi.org/10.1016/0043-1354\(91\)90160-R](https://doi.org/10.1016/0043-1354(91)90160-R)
- SIGRH – Sistema Integrado de Gerenciamento de Recursos Hídricos do Estado de São Paulo. **Bacias Hidrográficas dos Rios Piracicaba, Capivari e Jundiaí – UGRHI 5.** SIGRH. São Paulo. 2015. https://sigrh.sp.gov.br/public/uploads/documents/CBH-PCJ/19390/pcj_rs-2015_relatoriofinal_crh-sp.pdf
- SCANLON, B.R.; HEALY, R.W.; COOK, P.G. **Choosing appropriate techniques for quantifying groundwater recharge.** *Hydrogeology journal*, 10(1):18-39, 2002. doi:10.1007/s10040-001-0176-2
- TERAMOTO, EH; CHANG, HK; CAETANO-CHANG, MR. **Transporte de solutos em diferentes cenários geológicos gerados por modelos estocásticos de cadeias de Markov.** *Águas Subterrâneas*. 31(4):316-326, 2017. <https://doi.org/10.14295/ras.v31i4.28860>
- TOTH, J. **A theoretical analysis of groundwater flow in small drainage basins.** *Journal of geophysical research*, 68(16):4795-4812, 1963. <https://doi.org/10.1029/JZ068i016p04795>