



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM GEOCIÊNCIAS**

**ESTUDO HIDROGEOQUÍMICO DAS ÁGUAS
SUBTERRÂNEAS DO AQUÍFERO SERRA GERAL E SUA
RELAÇÃO COM AQÜÍFEROS SEDIMENTARES NO RIO
GRANDE DO SUL**

GUILHERME VARGAS TEIXEIRA

Orientador - Prof. Dr. Rommulo Vieira Conceição

Porto Alegre - 2020



Programa de Pós-Graduação
GEOCIÊNCIAS



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIOGRANDE DO SUL
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM GEOCIÊNCIAS**

**ESTUDO HIDROGEOQUÍMICO DAS ÁGUAS
SUBTERRÂNEAS DO AQUÍFERO SERRA GERAL E SUA
RELAÇÃO COM AQUÍFEROS SEDIMENTARES NO RIO
GRANDE DO SUL**

GUILHERME VARGAS TEIXEIRA

Orientador: Prof.Dr. Rommulo Vieira Conceição

Coorientador: Prof.Dr. Antônio Pedro Viero

Coorientador: Prof.Dr.Diego Machado Marques

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Pedro Antonio Roehe Reginato

Profa. Dra. Cristina Paixão Araújo

Prof. Dr. Tiago de Vargas

Tese de doutorado apresentada como requisito parcial para obtenção do Título de Doutor em Ciências.

Porto Alegre - 2020

DEDICATÓRIA

Eu gostaria de dedicar este trabalho ao público ávido por conhecer mais sobre novos métodos científicos como simulação e variografia e sobretudo aos estudantes que querem seguir na área de hidrogeologia com enfoque em geoquímica, e que anseiam em usar os mais modernos meios disponíveis em informática e geoestatística para levarem a geologia a um novo patamar dentro das ciências que fuja aos campos de atuação tradicionais e que encontram-se exauridos em muitos aspectos. É preciso levar a geologia a um novo patamar e que seja elevada a mesma categoria que tanto consagra químicos e físicos.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer ao programa de pós-graduação e a seus funcionários, sobretudo os da secretaria, por toda a paciência e tratamento dados a mim durante todo o processo.

Gostaria agradecer ao meu orientador Antonio Pedro Viero por toda a orientação e ensinamentos pontuais e muito úteis e a vontade de me fazer pensar por conta própria.

Aos meus pais pelo amplo apoio dados em todos os sentidos. Aos professores do Instituto Técnico Superior em Lisboa pela ajuda que me deram durante meu doutorado Sanduíche.

RESUMO

O Sistema Aquífero Serra Geral (SASG) é importante na exploração de água subterrânea no norte do Rio Grande do Sul. Ele é limitado por unidades sedimentares localizadas abaixo como Sistema Aquífero Guarani, Rio Bonito e Irati. Todos eles contribuem para salinizar o SASG por meio de falhas que atravessam estas unidades e que foram geradas no embasamento e reativadas durante a história evolutiva da Bacia do Paraná. Objetivos deste estudo são: 1) Identificar as direções preferenciais de fluxo para cada uma das variáveis de interesse por meio de modelos variográficos e de simulações geoestatísticas em cada uma das zonas. 2) Identificar a probabilidade de ocorrência de amostras simuladas e o quanto as falhas contribuem para gerar incertezas quanto aos valores simulados que não constam na malha amostral. 3) Descrever quais as falhas que contribuem mais para valores altos de salinidade e que são verificáveis através da simulação de elementos abundantes em unidades profundas como Irati e Rio Bonito e que são muito baixos no SASG e Identificar quais os comprimentos que mais influenciam nesta ascensão, se os grandes (maiores que 5 Km), ou os menores (< 5 Km). 4) Analisar a relação entre os lineamentos menores com as grandes falhas e o quanto eles interferem na diminuição das cotas potenciométricas de SASG e SAG. 5) Usar as cotas potenciométricas do SASG e do SAG e as cotas de captação dos poços do SASG para determinar os locais onde existe comunicação entre estes dois sistemas aquíferos, locais de fluxo descendente do SASG em relação ao SAG, de fluxo ascendente do SAG em relação ao SASG e onde não existe qualquer comunicação entre eles. Método: utilizados o traçamento de lineamentos em imagem de satélite e o método de K-means. Todos os altos valores de salinidade coincidem com as áreas em que ocorre a comunicação entre os sistemas aquíferos. A simulação é útil para determinar as direções de anisotropia do fenômeno geológico de salinização do SASG pelo SAG e pré-SAG. A área foi dividida em 5 zonas com base em critério hidroquímico bem definido. Resultados: evidenciado que as grandes falhas impactam os níveis potenciométricos do SAG e do SASG e que a densidade das estruturas menores associadas às estruturas maiores permite esta ascensão de águas salinizadas de aquíferos profundos até o SASG. Os grupos gerados pelo método de K-means e dendrograma pela distância de Pearson mostrou que existem três grandes grupos de águas subterrâneas. 1) restrito ao Serra Geral, com valores intermediários de cálcio e magnésio e baixo de alcalinidade; 2) intermediário, com valores altos de cálcio e magnésio e intermediário de alcalinidade com e sem sulfato e cloro; 3) rico em sódio, alcalinidade e eventualmente cloro e sulfato. Conclusão: o Serra Geral é heterogêneo hidroquimicamente e estruturalmente. As falhas menores estão associadas as maiores para permitir a salinidade, que precisa de potencimetria favorável e a presença de grandes falhas que atravessem diversas unidades aquíferas na área.

Palavras-chave: Geologia estrutural, Simulação, Hidroquímica, Hidrogeologia, Sistema Aquífero Serra Geral.

ABSTRACT

The Serra Geral Aquifer System (SASG) is important in the exploration of groundwater in the north of Rio Grande do Sul State. It is limited by sedimentary units located below such as Guarani Aquifer System (SAG), Rio Bonito and Irati. All of them contribute to salinize the SASG through faults that cross these units and that were generated in the basement and reactivated during the evolutionary history of the Paraná Basin. The objectives of this study are: 1) To identify the preferred flow directions for each of the variables of interest by means of variographic models and geostatistical simulations in each of the zones. 2) Identify the probability of occurrence of simulated samples and how much the faults contribute to generate uncertainties regarding the simulated values that are not included in the sample grid. 3) Describe which faults contribute the most to high salinity values and which are verifiable through the simulation of abundant elements in deep units such as Irati and Rio Bonito and which are very low in the SASG and Identify the lengths that most influence this rise, large ones (greater than 5 km), or smaller ones (<5 km). 4) Analyze the relationship between minor lines and major failures and how much they interfere in the reduction of potentiometric quotas of SASG and SAG. 5) Use the potentiometric isohypses of the SASG and SAG and the catchment heights of the SASG wells to determine the locations where there is communication between these two aquifer systems, sites of downward flow of the SASG in relation to the SAG, of upward flow of the SAG in relation to the SASG and where there is no communication between them. Method: the tracing of lineaments in satellite image and the K-means method were used. All high salinity values coincide with the areas in which the communication between the aquifer systems. Simulation is used to determine the directions of anisotropy of the geological phenomenon of salinization of the SASG by SAG and pre-SAG. The area was divided into 5 zones based on well-defined hydrochemical criteria. Results: evidenced that the great flaws impact the potentiometric levels of the SAG and the SASG and that the density of the smaller structures associated with the larger structures allows this rise of saline waters from deep aquifers to the SASG. The groups generated by the K-means and dendrograma based in Pearson's distance showed that there are three major groups of groundwater. 1) restricted to Serra Geral, with intermediate values of calcium and magnesium and low alkalinity; 2) intermediate, with high values of calcium and magnesium and alkalinity intermediate with and without sulfate and chlorine; 3) rich in sodium, alkalinity and eventually chlorine and sulfate. Conclusion: Serra Geral is heterogeneous hydrochemically and structurally. Smaller faults are associated with larger faults to allow salinity, which needs favorable potentiometry and the presence of large faults that cross several aquifer units in the area

Key-words: Structural Geology, Simulation, Hydrochemistry, Hydrogeology, Serra Geral Aquifer System.

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CORSAN	Companhia Riograndense de Saneamento
CPRM	Companhia de Pesquisa de Recursos Minerais
Condutividade Elétrica	Condutividade Elétrica
Condutividade Elétrica $\mu\text{S}/\text{cm}^3$	Condutividade Elétrica
Ca^{+2} (Ca)-Cálcio	
HCO_3^{-2} -(HCO_3)	Bicarbonato
Cl^-	Cloreto
$^{\circ}\text{C}$	Graus Celsius
Direção NE	Direção Nordeste
Direção NW	Direção Noroeste
Direção NS	Direção Norte-Sul
Direção E-W	Direção Leste-Oeste
F^- (F)	Fluoreto
Km	Quilômetros
LG	Lineamento Gravimétrico
LRA	Lineamento Rio das Antas
LRA-SC	Lineamento Rio das Antas-Sc
m	metros
Mg^{+2} (Mg)	Magnésio
Mg/L	Miligrama por Litro

Na ⁺ (Na)	Sódio
NE	Nível estático
%	Por cento
pH	Potencial Hidrogeniônico
SAG	Sistema Aquífero Guarani
SASG	Sistema Aquífero Serra Geral
SIAGAS	Sistema de informações de Águas Subterrâneas
SFDC	Sistema de Falhas Dorsal de Canguçu
SFTA-P	Sistema de Falhas Terra de Areia-Posadas
SFJM	Sistema de Falhas Jaguari-Mata
SFMM	Sistema de Falhas São Miguel das Missões
SO ₄ ⁻² (SO ₄)	Sulfato
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul
ZFLC	Zona de Falha Lancinha Cubatão

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 - Sistema Aquífero Serra Geral do Rio Grande do Sul. A) As rochas vulcânicas da Formação em verde claro são os riolitos, enquanto as verdes escuras são os basaltos. (modificado de Scherer, 2002; Janasi et al., 2011) B) Localização da Bacia do Paraná (em cinza escuro é a Bacia do Paraná e em cinza claro é o SASG no estado do Rio Grande do Sul (modificado de Reis, 2013).24
- Figura 2 - Divisão de área com as 5 zonas do SASG no Rio Grande do Sul; B) Localização do SASG do Rio Grande do Sul na Bacia do Paraná. ...42
- Figura 3 - Mapa do SASG com as 5 zonas definidas para este estudo. Contorno das zonas em azul escuro. Falhas que serviram de referência para a compartimentação espacial que estão em vermelho e falhas em azul claro são as que mais contribuem para a comunicação entre os sistemas aquíferos.43
- Figura 4 - Variância acumulada pelos grupos de kmeans na zona 3. Nota-se que a partir de 4 grupos, a variância não se altera mais em grande escala e está próximo de 80%.49
- Figura 5 - Variância acumulada pelos grupos de kmeans na zona 5. Nota-se que a partir de 4 grupos, a variância não se altera mais em grande escala e está próximo de 80%.49
- Figura 6 - Variograma experimental. Fonte: wikipedia (Pedro Pinto Correia, 2020).52
- Figura 7 - Princípio de construção do método de bandas rotativas em 2D (Marques et al, 2011).55
- Figura 8 - Comparação dos histogramas da malha amostral da condutividade elétrica e da simulação da condutividade elétrica na zona 3 do SASG a) Histograma da malha amostral da condutividade elétrica; b) Histograma da simulação da condutividade elétrica.57
- Figura 9 - a) Bandas de simulação na zona 3. b)Histograma das classes de sódio simuladas na zona 3.57
- Figura 10 - Relevo sombreado de uma das quadrículas com a hidrografia de apoio para o traçamento das estruturas.60
- Figura 11 - Histogramas do cloreto das zonas 1,2,3,4 e 5, que estão na ordem em que estão apresentadas da esquerda para a direita em mg/L.64
- Figura 12 - Histogramas do sulfato das zonas 1,2,3,4 e 5, que estão na ordem em que estão apresentadas da esquerda para a direita em mg/L.64
- Figura 13 - Histogramas da alcalinidade nas zonas 1, 2, 3,4 e 5, que estão na ordem em que aparecem da esquerda para a direita, em mg/L de CaCO_365

Figura 14 - Histogramas do sódio para as zonas 1,2,3,4 e 5 em mg/L, que estão na ordem em que aparecem da esquerda para a direita.....	66
Figura 15 - Histogramas da condutividade elétrica das zonas 1,2,3,4 e 5 em $\mu\text{S}/\text{cm}$, que estão na ordem em que aparecem da esquerda para a direita.....	67
Figura 16 - Histogramas do cálcio em mg/L nas zonas 1,2,3,4 e 5 em mg/L, que estão na ordem em que aparecem da esquerda para a direita.....	69
Figura 17 - Histogramas do magnésio em mg/L nas zonas 1,2,3,4 e 5 em mg/L, que estão na ordem em que aparecem da esquerda para a direita.....	69
Figura 18 - Mapa de desvio padrão do cloro nas 5 zonas.....	70
Figura 19 - Mapa do desvio padrão do sulfato nas 5 zonas.....	71
Figura 20 - Mapa de desvio do cálcio para as 5 zonas.....	72
Figura 21 - Mapa de desvio padrão do magnésio para as 5 zonas.....	73
Figura 22 - Mapa de desvio padrão para o sódio para as 5 zonas.....	74
Figura 23 - Mapa de desvio padrão para a vazão para as 5 zonas.....	75
Figura 24 - Mapa de desvio padrão da alcalinidade.....	76
Figura 25 - PCA escores para a zona 1.....	81
Figura 26 - a) Diagrama de dispersão entre alcalinidade e Ca na zona 1; Grupo 2 (vermelho), grupo 1 (amarelo), grupo 3 (azul); b) Ca x sulfato + alcalinidade para a zona 1(b). Grupo 2 (vermelho), grupo 1(amarelo), grupo 3 (azul).....	82
Figura 27 - a) Na x alcalinidade para a zona 1; b) Ca + Na x alcalinidade para a zona 1. Vermelho (grupo 2), azul (grupo 3), amarelo (grupo 1).....	82
Figura 28 - PCA escores para a zona 2.....	83
Figura 29 - a) Sulfato + alcalinidade x Ca na zona 2; b) Mg x Ca na zona 2. Vermelho (grupo 2), azul (grupo 3), amarelo (grupo 1).....	84
Figura 30 - Mg x Ca na zona 2. Vermelho (grupo 2), azul (grupo 3), amarelo (grupo 1).....	85
Figura 31 - a) Diagrama de dispersão do sódio x alcalinidade; b) Ca + Na x alcalinidade para a zona 2(b). Vermelho (grupo 2), azul (grupo 3), amarelo (grupo 1).....	86
Figura 32 - PCA escores para a zona 3.....	87
Figura 33 - a) Na x alcalinidade na zona 3; b) Ca x alcalinidade para a zona 3. Grupo 2(vermelho), grupo 1(amarelo), grupo 3(azul).....	88

Figura 34 - a) Ca + Na x alcalinidade na zona 3; b) Mg x Ca para a zona 3. Grupo 2 (vermelho), grupo 1(amarelo), grupo 3(azul).....	88
Figura 35 - Na x Condutividade na zona 3. Correlação de 0,19 para o grupo 3(azul), 0,38 para o grupo 1 e 0,66 para o grupo 2 (vermelho).....	89
Figura 36 - PCA escores para a zona 4	90
Figura 37 - A) Cálcio x alcalinidade + sulfato na zona 4. Correlação de 0,72 para o grupo 3 (azul), 0,12 para o grupo 1(amarelo) e 0 para o grupo 2 (vermelho). b) Ca x sulfato + alcalinidade na zona 4. Correlação de 0,73 no grupo 1 (azul), 0,18 para o grupo 1 (amarelo) e 0,07 para o grupo 2 (vermelho).....	91
Figura 38 - a) Alcalinidade + sulfato x Na para a zona 4; b) Ca + Na x alcalinidade para a zona 4. Grupo 2(vermelho), grupo 1(amarelo), grupo 3(azul)	91
Figura 39 - Escores de PCA para a zona 5	92
Figura 40 - a) Ca + Na x sulfato + alcalinidade para a zona 5. Grupo 4 tem correlação de 0,43 e grupo 3 tem correlação de 0,49; b) Ca x sulfato + alcalinidade. Grupo 4 tem correlação de 0,28. Grupo 2 (vermelho), grupo 3 (verde), grupo 1 (amarelo), grupo 4 (azul), grupo 5 (azul claro).	93
Figura 41 - a) Ca + Na x alcalinidade na zona 5. Grupo 4 possui 0,27 de correlação; b) Ca x alcalinidade na zona 5. Grupo 4 possui 0,22 de correlação e grupo 3 têm 0,13 de correlação Grupo 2 (vermelho), grupo 3 (verde), grupo 1 (amarelo), grupo 4 (azul), grupo 5 (azul claro).	94
Figura 42 - Na x condutividade para a zona 5. Grupo 3 tem correlação de 0,19 e grupo 4 tem correlação de 0, 16. Grupo 2 (vermelho), grupo 3 (verde), grupo 1 (amarelo), grupo 4 (azul), grupo 5 (azul claro).....	94
Figura 43 - (a,b) Mapa variográfico e variografia da condutividade elétrica; (c,d) da alcalinidade; (e,f) do sódio e (f,g) do cálcio para a zona1 na ordem em que aparecem. A condutividade está com a escala de cores invertida.....	99
Figura 44 - (a,b)Mapa variográfico e variografia da condutividade elétrica; (c) da alcalinidade; (d,e) do sódio e (f,g)do cálcio para a zona 2 na ordem em que aparecem.	101
Figura 45 - (a,b)Mapa variográfico e variografia da condutividade elétrica; (c,d) da alcalinidade; (e,f) do sódio e (g,h) do cálcio para a zona 3 na ordem em que aparecem.	102
Figura 46 - (a,b) Mapa variográfico e variografia da condutividade elétrica; (c) da alcalinidade; (d,e) do sódio e (f,g) do cálcio para a zona 4 na	

	ordem em que aparecem. O mapa variográfico da alcalinidade não está presente.	104
Figura 47 -	(a,b) Mapa variográfico e variografia da alcalinidade; (c,d) do sódio e (e,f) do cálcio para a zona 5 na ordem em que aparecem.	105
Figura 48 -	Mapa potenciométrico do SASG e cota de profundidade do poço no SASG no Rio Grande do Sul.....	109
Figura 49 -	Isolinhas potenciométricas do SASG e principais falhas que cortam o SASG no Rio Grande do Sul. Números maiores representam as zonas e o número em círculos são as principais falhas. As falhas em vermelho representam falhas que serviram de referência para a compartimentação hidroquímica. As falhas em azul contribuem para alterar os valores potenciométricos.....	110
Figura 50 -	Municípios na zona 1.....	110
Figura 51 -	Mapa potenciométrico do SASG e concentrações de condutividade elétrica na zona 1. Condutividade elétrica em $\mu\text{S}/\text{cm}^3$	111
Figura 52 -	Municípios da zona 2.....	113
Figura 53 -	Mapa potenciométrico do SASG e concentrações de condutividade elétrica na zona 2.	113
Figura 54 -	Municípios da zona 3.....	114
Figura 55 -	Mapa potenciométrico do SASG na zona 3.	115
Figura 56 -	Municípios da zona 4.....	116
Figura 57 -	Superfícies potenciométricas do SASG e concentrações de sódio na zona 4	116
Figura 58 -	Municípios da zona 5	118
Figura 59 -	Superfícies potenciométricas e concentrações de condutividade elétrica na zona 5	119
Figura 60 -	Uma comparação de dois perfis, sendo que um deles é da malha amostral (linha sólida) e outro é de valores simulados no mesmo local (linha tracejada). Note a semelhança na curva de variabilidade desses dois conjuntos. (Adaptado de Journel 1977).....	120
Figura 61 -	Variância condicional da alcalinidade e malha amostral da alcalinidade na zona 1. Potenciometria do SASG. Valor alto (144,7) e baixo (10,43) de variância condicional da alcalinidade. Valor alto da malha amostral da alcalinidade (642,36).....	121
Figura 62 -	E-Type da alcalinidade e malha amostral da alcalinidade na zona 1 e linhas potenciométricas do SASG.....	121

Figura 63 - E-Type do cálcio com desvio padrão da malha amostral do cálcio e linhas potenciomeétricas do SAG na zona 1.....	122
Figura 64 - Variância condicional do cálcio com desvio padrão da malha amostral do cálcio e linhas potenciométricas do SAG na zona 1.....	123
Figura 65- Simulação de número 2 da condutividade elétrica, com malha amostral de condutividade elétrica e linhas potenciométricas do SAG na zona 1. Condutividade elétrica em $\mu\text{S/cm}$	123
Figura 66 - Variância da simulação para a alcalinidade na zona 2 e malha amostral da alcalinidade com a potenciometria do SASG.....	124
Figura 67 - E-Type da simulação para a alcalinidade na zona 2 e malha amostral da alcalinidade com a potenciometria do SASG.....	125
Figura 68 - Média da simulação (E-Type) de sódio na zona 2. Valor alto (130) e baixo (1,39)	125
Figura 69 - Variância condicional do sódio com K-means na zona 2 com linhas potenciométricas do SAG.....	126
Figura 70 - E-Type do cálcio na zona 2. O sistema de falhas Santo Ângelo exerce muita influência nos valores altos de E-Type de cálcio.	126
Figura 71 - Variância condicional do cálcio na zona 2 com malha amostral de desvio padrão de cálcio e linhas potenciométricas do SAG.....	127
Figura 73 - Simulação número 2 para a condutividade na zona 2.	128
Figura 74 - Simulação de número 1 para a condutividade na zona 2 e a potenciometria do SAG	128
Figura 75 - Variância condicional do cálcio para a zona 3 com desvio padrão da malha amostral do cálcio e linhas potencimétricas do SAG.....	129
Figura 76 - E-Type do cálcio para a zona 3 com desvio padrão da malha amostral do cálcio e linhas potencimétricas do SAG.....	130
Figura 77 - Média da simulação (E-Type) do sódio e malha amostral do sódio na zona 3e linhas potenciométricas do SASG	130
Figura 78 - Variância condicional da alcalinidade com malha amostral da alcalinidade para a zona 3 e linhas potenciométricas do SASG. Valor alto de variância condicional da alcalinidade (153.6) e baixo (0).....	131
Figura 79 - E-Type da alcalinidade, malha amostral da alcalinidade e linhas potenciométricas do SASG para a zona 3	132
Figura 80 - Simulação de número 1 para a condutividade elétrica para a zona 3 e os grupos de K-means.	132

Figura 81 - Variância condicional do cálcio para a zona 4. Potenciometria do SASG	134
Figura 82 - E-Type do cálcio e desvio padrão da malha amostral do cálcio com linhas potenciométricas do SASG para a zona 4.	134
Figura 83 - Variância condicional da alcalinidade com malha amostral de alcalinidade para a zona 4 e linhas potenciométricas do SASG.	135
Figura 84 - Média da simulação (E-Type) da alcalinidade com malha amostral da alcalinidade para a zona 4 e linhas potenciométricas do SASG ...	135
Figura 85 - E-Type de sódio com malha amostral de sódio e linhas potenciométricas do SASG.	137
Figura 86 - Variância condicional do sódio com malha amostral de sódio e linhas potenciométricas do SASG	137
Figura 87 - E-Type da simulação do cálcio com desvio padrão da malha amostral de cálcio para a zona 5. Elinhas potenciométricas do SAG.....	138
Figura 88 - Variância condicional da simulação do cálcio com desvio padrão da malha amostral de cálcio para a zona 5 e isolinhas potenciométricas do SAG.....	138
Figura 89 - E-Type da alcalinidade para a zona 5 e isolinhas potenciométricas do SASG.	139
Figura 90 - Variância condicional da alcalinidade com malha amostral da alcalinidade para a zona 5 e isolinhas potenciométricas do SASG....	139
Figura 91 - Regimes tectônicos e posição espacial de fraturas extensionais de maior abertura (linha tracejada) e de cisalhamento (linha contínua e movimento indicado por flechas): (i) regime extensional, (ii) compressivo e (iii) transcorrente (adaptado de Ramsey & Huber, 1987).....	141
Figura 92 - Diagramas de roseta para um regime direcional com paleotensores de sentido N-S e L-W. As flechas azul e amarela representam os esforços máximos e mínimos respectivamente (adaptado de Strieder <i>et al.</i> 2015).....	145
Figura 93 - Diagramas de roseta para um regime direcional com paleotensores de sentido NE-SW. As flechas azul e amarela representam os esforços máximos e mínimos respectivamente (adaptado de Strieder <i>et al.</i> , 2015).....	146
Figura 94 - Diagramas de roseta para as zonas 1(a),2(b),3(c),4(d) e 5(e) nos comprimentos de lineamento entre 1 e 5Km, na ordem em que aparecem da esquerda para a direita.....	147

- Figura 95 - Diagramas de roseta para as zonas 1(a),2(b),3(c),4(d) e 5(e) para os comprimentos de lineamento com mais de 5Km, na ordem em que aparecem da esquerda para a direita..... 147
- Figura 96 - Mapa de densidade de lineamentos para todos as direções para comprimentos menores que 5 Km. Unidade de densidade com comprimento $\times 10^2$. Os tons em azul representam as áreas onde as densidades de lineamentos são maiores, enquanto os tons de verde têm baixo fraturamento. 148
- Figura 97 - Densidade de lineamentos para a zona 1 para comprimentos menores que 5Km em todas as direções com malha amostral de sódio e linhas potenciométrica do SAG. Manchas em azul são a densidade maior de lineamentos. Falhas regionais em laranja. Falha Jaguari-Mata em vermelho. Comprimentos com a unidade original..... 149
- Figura 98 - Densidade de lineamentos para a zona 1 na direção 22-45N para comprimentos acima de 5Km com grupos de K-means e isolinhas das cotas potenciométricas do SASG. Comprimentos da densidade de lineamentos multiplicados por 10^3 . Grupo 1 (amarelo), grupo 2(vermelho) e grupo 3 (azul). 150
- Figura 99 - Densidade de lineamentos na direção N95-120 para comprimentos maiores que 5 Km com malha amostral de condutividade elétrica. Comprimentos da densidade de lineamentos multiplicados por 10^3 . . 151
- Figura 100 - Mapa de densidades de lineamentos na direção N95-125 para comprimentos menores que 5Km e malha amostral de condutividade elétrica. Maiores valores de condutividade (entre 1067 e 4678 em verde) estão próximos ao Rio Uruguai na parte oriental do SFTA/P..... 152
- Figura 101 - Mapa de densidade de lineamentos estruturais na direção N22-45 e malha amostral de condutividade elétrica para a zona 2 com cotas potenciométricas do SASG. Maior densidade de lineamentos são as manchas em azul. Os valores de densidade estão multiplicados por 10^4 . Condutividade elétrica está $\mu\text{S}/\text{cm}$ 153
- Figura 102 - Mapa de Densidade de fraturas com comprimento menor que 5Km, na direção N90-125, malha amostral de sódio e cotas potenciométricas do SASG na zona 3. Os valores de densidade estão multiplicados por 10^4 154
- Figura 103 - Mapa de Densidade de fraturas com comprimento menor que 5Km, na direção N50-75 e malha amostral de condutividade elétrica na zona 3 com curvas potenciométricas do SAG. Os círculos em verde estão concentrados no oeste ao longo das falhas gravimétricas e rio das Antas-Sc. 155

- Figura 104 - Mapa de densidades de lineamentos para a direção N120-145 para comprimentos maiores que 5Km e malha amostral de sódio na zona 3 e linhas potenciométricas do SASG. Esta direção também é importante para a área nordeste da zona 2, porém nesta zona o intervalo de direções é de N125-145..... 155
- Figura 105 - Mapa de densidade de lineamentos para a direção 125-145 para comprimentos maiores que 5 Km, grupos de K-means e isolinhas potenciométricas do SASG na zona 4. As grandes falhas NW interferem na potencimetria do SASG e do SAG no oeste da zona. Grupo 1 (amarelo), grupo 2 (vermelho), grupo 3 (azul)..... 156
- Figura 106 - Mapa de densidade de lineamentos para todas as direções para comprimentos maiores que 5 Km, e malha amostral de sódio na zona 4 157
- Figura 107 - Mapa de densidade de fraturas na zona 5 com comprimento maior que 5Km para a direção N125-155 com grupos de K-means e isolinhas potenciométricas do SASG na zona 5..... 158
- Figura 108 - Mapa de densidade de lineamentos para a direção 90-115 para comprimentos maiores que 5Km e malha amostral de sódio com isolinhas potenciométricas do SASG. 158
- Figura 109 - Mapa de densidade de lineamentos para comprimentos menores que 5 Km na direção N22-45 com malha amostral de condutividade elétrica e curvas potenciométricas do SAG..... 159

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 -	Tabela estatística com os dados hidroquímicos das 5 zonas. Alc é abreviação de alcalinidade total e condut a abreviação de condutividade elétrica.....	62
Tabela 2 -	Desvio padrão, assimetria, variância e curtose das amostras para as 5 zonas.....	63
Tabela 3 -	Concentrações médias dos grupos em cada zona	79
Tabela 4 -	Variância das variáveis nas 5 zonas	79
Tabela 5 -	Componentes 1,2 e 3 da zona1	81
Tabela 6 -	Escores 1, 2 e 3 para a zona 2	83
Tabela 7 -	Escores para a zona 3	87
Tabela 8 -	Escores para a zona 4	90
Tabela 9 -	Componentes para a zona 5.....	92
Tabela 10 -	Variografia para as 5 zonas. Condu é a abreviação para condutividade elétrica em $\mu\text{S}/\text{cm}$ e alc é abreviação para alcalinidade e sill é o alcance do variograma.....	97
Tabela 11 -	Os lineamentos traçados em imagem de satélite em comprimento, direção e frequência em todas as zonas.....	144

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
1.1	ASPECTOS GERAIS.....	19
1.2	FORMULAÇÃO DO PROBLEMA	24
1.3	HIPÓTESES DA TESE	25
1.4	COMPARTIMENTAÇÃO ESPACIAL	25
1.5	OBJETIVOS.....	29
2	ESTADO DA ARTE	31
2.1	BACIA DO PARANÁ.....	31
2.2	HIDROQUÍMICA.....	34
2.3	ASPECTOS ESTRUTURAIS	37
3	METODOLOGIA	41
3.1	DIVISÃO DA ÁREA	41
3.2	DADOS USADOS NESTA TESE.....	43
3.3	ESTATÍSTICA UNIVARIADA E BIVARIADA	44
3.3.1	Estatística Univariada	44
3.3.2	Estatística Bivariada	45
3.4	Análise de componentes principais, dendrograma e Kmeans	46
3.5	VARIOGRAMA EXPERIMENTAL.....	50
3.5.1	Tipos de variogramas	52
3.5.2	Outliers	53
3.6	SIMULAÇÃO.....	54
3.7	LINEAMENTOS ESTRUTURAIS.....	58
4	RESULTADOS	61
4.1	ANÁLISE EXPLORATÓRIA DOS DADOS	61
4.2	ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS, HIDROQUÍMICA E KMEANS.....	76
4.3	ANÁLISE DE CONTINUIDADE ESPACIAL	94
4.4	POTENCIOMETRIA.....	106
4.5	SIMULAÇÃO GEOESTATÍSTICA.....	119
4.6	LINEAMENTOS ESTRUTURAIS.....	140
5.	MANUSCRITO 1 - REVISÃO INTEGRATIVA DA LITERATURA	1

6	MANUSCRITO 2 - STRUCTURAL COMPARTMENT, HYDRAULIC CONNECTIVITY AND HYDROGEOCHEMICAL CHARACTERIZATION OF SERRA GERAL AND GUARANI AQUIFER SYSTEMS	1
7	MANUSCRITO 3 - ESTOCASTIC SIMULATION OF THE SERRA GERAL AQUIFER IN THE STATE OF RIO GRANDE DO SUL	1
8	CONCLUSÃO	258
	REFERÊNCIAS	263
	ANEXOS	269
	Anexo A - Submissão do Manuscrito 1	269
	Anexo B - Submissão do Manuscrito 2	269
	Anexo C - Submissão do Manuscrito 3	270

1 INTRODUÇÃO

1.1 Aspectos Gerais

A valorização das águas subterrâneas ocorre em nível global, já que são essenciais para a manutenção da vida. As águas subterrâneas são reservas importantes por estarem disponíveis a qualquer momento, além de apresentarem baixo custo de armazenamento, constituindo-se em alternativa às águas superficiais, sujeitas a alterações mais frequentes na sua qualidade natural. As águas subterrâneas também são fonte de abastecimento em períodos de estiagem para rios e mananciais superficiais como nascentes, lagos e banhados. Por sua vez, o aumento da industrialização, urbanização e população tem gerado muitos problemas. O excesso de uso tem sido causa de deterioração da qualidade da água e também é responsável por mudanças químicas na água (Custódio & Silva Júnior, 2016).

No Rio Grande do Sul, períodos de escassez de água são comuns principalmente entre Janeiro e Julho, onde os índices pluviométricos costumam ser baixos, sendo que em alguns anos, por efeitos de manifestações climáticas como El Niño esses índices podem ser ainda mais baixos. No oeste do Rio Grande do Sul, este efeito é mais pronunciado e os índices pluviométricos são mais baixos que em outras regiões do Estado do Rio Grande do Sul. O Sistema Aquífero Guarani é um recurso valioso para abastecer as regiões com escassez de água. Para tal é necessário um amplo estudo de suas características estruturais e químicas.

A importância estratégica do Sistema Aquífero Serra Geral (SASG) é proporcional à dificuldade exploratória. Cabe ressaltar que foram descritos casos em que dois poços tubulares distantes entre si por menos de dez metros apresentaram capacidades específicas antagônicas (Athayde *et al.* 2012). Portanto, em anos recentes, tem havido um aumento da preocupação da população com o enorme potencial da Bacia sedimentar do Paraná, na América do Sul, e um largo número de questões relacionadas ao correto manejo desse recurso foram levantadas.

A bacia do Paraná está localizada em três países (Brasil, Argentina, Uruguai e Paraguai). Assim, é uma bacia intracratônica que cobre 1500000 Km² desenvolvida entre o Ordoviciano e o Cretáceo. A sequência sedimentar tem 7,5 Km de espessura e é composta de seis supersequências: Rio Ivaí, Paraná, Gondwana I, II e III e

Baurú (Milani *et al.* 2007). Seu preenchimento sedimentar compreende cinco grandes unidades estratigráficas, que fazem um total de 6000 metros de espessura. É uma bacia cratônica flexural, policíclica, com início de deposição no devoniano. A bacia do Paraná é considerada uma única bacia, embora tenha sido submetida a perturbações de origem variada, que incluem: 1) movimentações verticais, 2) subsidência flexural a partir das margens da placa durante o Paleozóico. As rochas da bacia são essencialmente siliciclásticas geradas no Paleozóico e Mesozóico, além de ocorrências de carbonatos esporádicos no Permiano (Rostirolla *et al.* 2000). Posteriormente a deposição das unidades sedimentares, ocorreu o vulcanismo do Serra Geral. O vulcanismo está associado à geração do oceano Atlântico. Turner *et al.* (1994), posiciona o vulcanismo entre 137 e 127.

A estruturação tectônica da Bacia do Paraná vem sendo objeto de muitos estudos voltados principalmente à prospecção de hidrocarbonetos, que utilizam técnicas de sensoriamento remoto, levantamentos geofísicos e de geologia estrutural (Asmus, 1975; Soares *et al.* 1982, Soares, 2008). Por meio dessa estruturação tectônica é possível inferir caminhos preferenciais de água e hidrocarbonetos e o volume de tais recursos, que estão diretamente relacionados com os regimes tectônicos que ocorreram em diferentes períodos do tempo geológico e que acompanharam a evolução da Bacia do Paraná.

A tectônica geral registrada no continente Gondwana é de natureza compressional nos períodos Carbonífero e Permiano. Os pacotes sedimentares da Bacia do Paraná deste período foram submetidos a esforços tectônicos desta natureza que se refletiram na reativação de estruturas do embasamento localizadas abaixo. Esforços tectônicos direcionais produzem falhas extensivas como produto, sendo que quando a diferença entre σ_1 e σ_3 é muito grande, existe aleatoriedade de direções das grandes falhas e das falhas menores, possibilitando uma maior quebra de rochas e conseqüentemente uma maior capacidade de transmissibilidade de água subterrânea nos aquíferos cortados por estas falhas, como foi demonstrado por Fernandes (2008). No caso do Serra Geral, de natureza fraturada, uma maior taxa de faturamento é vital para que ocorra maior percolação de água neste aquífero e sua transmissibilidade aumente. O Sistema Aquífero Guarani (SAG) e os aquíferos pré-SAG também tem sua transmissibilidade aumentada por estas falhas, que também contam com a porosidade de suas rochas para armazenar e transmitir água, enquanto o SASG apenas tem as falhas como meio de atingir tal fim.

A partir do Mesotriássico, a tendência de expansão regional e consequente quebra do supercontinente Pangea, favoreceu a ascensão de lavas basálticas através das falhas anteriormente criadas e formou uma das maiores manifestações vulcânicas da história da Terra. Este extenso vulcanismo propiciou a acumulação de pilhas vulcânicas que cobrem todo o norte do estado Rio Grande do Sul e que chegaram a mais de 2000 metros em alguns pontos depois de cessada a última atividade vulcânica. A Formação Serra Geral, que corresponde ao Sistema Aquífero Serra Geral tem relacionamento íntimo com a Formação Botucatu e ambas estão contidas na sequência III dentro da longa história evolutiva da Bacia do Paraná. Este relacionamento intrínseco permite a conexão entre ambas através de falhas que atravessam ambas as unidades e que também cortam unidades pré-SAG como Rio Bonito e Irati. (Holz *et al.* 2002).

O SASG é uma das principais unidades hidroestratigráficas existentes no Sul do Brasil, principalmente em razão do vasto território que abrange e pode ser utilizado como fonte de abastecimento de águas subterrâneas em diversos municípios e estados (Scheibe & Hirata, 2006). O SASG constitui um aquífero livre, podendo, em raros locais, desenvolver caráter confinado. A condutividade hidráulica do SASG é muito variável e de complexa avaliação e previsão, principalmente devido ao fato de ser heterogêneo e anisotrópico, com background entre 117,35 e 378,35 $\mu\text{S}/\text{cm}$, sendo que valores inferiores a 117,35 são detectados em zonas onde a recarga ocorre exclusivamente por precipitação pluviométrica (Tomasi & Roisenberg, 2019).

Basaltos são bons aquíferos porque eles armazenam águas de excelente qualidade, geralmente caracterizadas por baixa salinidade, e a extensão lateral e vertical permitem uma grande capacidade de armazenamento. As lavas basálticas possuem descontinuidades geológicas que refletem na dinâmica do fluxo nestas unidades (Gastmans *et al.* 2016). A anisotropia estrutural do SASG representa os registros tectônicos do ambiente deposicional vulcânico (derrames, fluxos piroclásticos, fluxos subaquosos, em diferentes graus e escalas de intensidade), assim como estruturas tectônicas relacionadas aos eventos deformacionais superimpostos, ocorridos ao longo da evolução tectônica da Bacia do Paraná (Milani, 2004).

Já o SAG, é caracterizado por aquíferos granulares, variando de confinado a livre, que ocorrem associados a rochas sedimentares pertencentes à diferentes unidades hidroestratigráficas.

O SAG consiste principalmente de duas unidades sedimentares: a Formação Pirambóia basal, composta por arenitos siltoso-argilosos de origem eólica e fluvial, e a Formação Botucatu, formada por areias eólicas depositadas em condições áridas entre a discordância Permo-Eo-Triássica e a lavas basálticas da Formação Serra Geral. Os arenitos da Formação Pirambóia apresentam argilas que envolvem clastos e cimentação de calcita, gipsita, óxido/hidróxido de ferro e sílica no momento da deposição. A calcita ocorre também como fase diagenética. A ocorrência de pirita autigênica está localizada e associada à presença de hidrocarbonetos. Sua gênese está ligada à migração de hidrocarbonetos, que é precedida pela redução de soluções de ácido sulfídrico (Caetano & Tai, 2003). A formação de Pirambóia se sobrepõe à Formação Rio do Rastro. Consiste em arenitos finos e silvestres friáveis, cinzentos, numa camada de aproximadamente 20 metros de espessura. Tem pouca expressão topográfica e seus arenitos friáveis podem formar cavidades em contato com a Formação Botucatu, formando pequenas cavidades (Camolezi *et al.* 2012). Além disso, possui mais argila e é mais fluvial em sua origem em relação ao ambiente de Botucatu, que é essencialmente deserto (Meng *et al.* 1997a).

Valores mais elevados de Ca encontrados no SAG em relação ao SASG indicam a dissolução da calcita diagenética que preenche os poros dos arenitos da formação de Botucatu. As águas mais ricas em sólidos dissolvidos totais e sódio indicam uma mistura de SAG com aquíferos subjacentes, incluindo pré-SAG (Gastmans *et al.* 2010). A mesma conclusão ocorre em Filho *et al.* (2006), onde os altos níveis de ânions e cátions provêm dos aquíferos subjacentes ao SASG.

A presença de águas que diferem do grupo de carbonatadas cálcicas e bicarbonatadas cálcicas ou magnesianas, tipicamente encontradas no SASG, apresentando concentrações intermediárias de cálcio e magnésio e baixas de sódio contrastam com as típicas concentrações do SAG e pré-SAG, que são mais ricas em sódio, sulfato e cloreto.

Dentre as unidades estratigráficas mais profundas (Pré-SAG) que contêm alta salinidade, podemos citar a Formação Irati e a Formação Rio Bonito. A Formação Irati pertence à Sequência Gondwana I e é dividida em dois membros: Taquaral e Assitência. O Membro Taquaral é composto por camadas de argila cinza escuro não

betuminosas com finas camadas de arenito e arenito. O Membro Assistência possui camadas betuminosas de argila escura. Em alguns casos, ocorre intercalação com camadas de carbonato (mármore dolomítico) e lentes finas de sílex e evaporitos nodulares (gipsita e anidrita) cobertos por siltito e xisto. Também contém carbonatos (dolomitas intercaladas com arenitos na base) e xisto betuminoso e arenito, com ou sem carbonatos intercalados, sulfato e halita na sequência. A gipsita é a fonte de sulfato, enquanto o halito é a fonte de sódio (Teixeira & Viero, 2017).

A Formação Rio Bonito também pertence à Sequência Gondwana I. Sua história está ligada à subsidência carbonífera, seguida pela deposição das unidades Aquidauana-Itararé, que são registradas com mais de 1500 metros de espessura. Sobrepondo o grupo Itararé, existem arenitos, siltitos e camadas de carvão da Formação Rio Bonito. A deposição do Grupo Itararé e a Formação Rio Bonito foi inicialmente influenciada pela fase de subsidência atribuída à sobrecarga das geleiras continentais seguida pelo peso dos sedimentos depositados durante o subsequente ciclo transgressivo-regressivo. No Rio Grande do Sul, a Formação Rio Bonito está intimamente associada à Formação Palermo (Milani *et al.* 2007).

A importância estratégica do SASG (Figura 1) é proporcional à dificuldade exploratória. Cabe ressaltar que foram descritos casos em que dois poços tubulares distantes entre si por menos de dez metros apresentaram capacidades específicas antagônicas (Athayde *et al.* 2012). Portanto, em anos recentes, tem havido um aumento da preocupação da população com o enorme potencial da Bacia sedimentar do Paraná, na América do Sul, e um largo número de questões relacionadas ao correto manejo desse recurso foram levantadas.

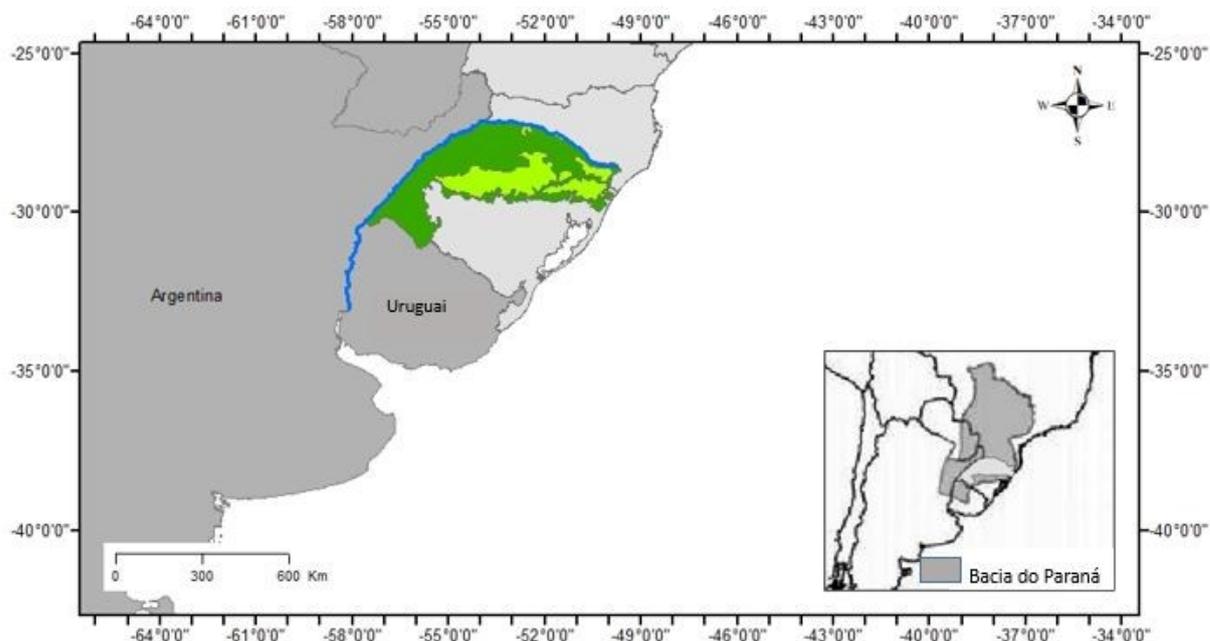


Figura 1 - Sistema Aquífero Serra Geral do Rio Grande do Sul. A) As rochas vulcânicas da Formação em verde claro são os riolitos, enquanto as verdes escuras são os basaltos (modificado de Scherer, 2002; Janasi et al., 2011) B) Localização da Bacia do Paraná (em cinza escuro é a Bacia do Paraná e em cinza claro é o SASG no estado do Rio Grande do Sul (modificado de Reis, 2013).

1.2 Formulação do Problema

O uso da água subterrânea é um dos grandes problemas para a sociedade atualmente. Muitos locais dependem da exploração de água subterrânea para a subsistência da população. O Rio Grande do Sul é vítima de estiagens de tempos em tempos e depende de um melhor entendimento do comportamento dos aquíferos que ocorrem nesses locais e que podem ser fonte de água. Um entendimento das principais estruturas que controlam a ascensão da salinidade do SAG e pré-SAG para o SASG é de fundamental importância para entender a dinâmica de circulação de águas subterrâneas e permitir um manejo de autoridades e população da água subterrânea em áreas que precisam de água subterrânea para sua subsistência. Existe também a preocupação com áreas com altos teores de salinidade que podem ser prejudiciais a saúde. Entender as principais estruturas que controlam o fluxo de água subterrânea e o grau de comunicação entre os diversos aquíferos da bacia do Paraná permite um entendimento do arcabouço estrutural do norte do estado do Rio Grande do Sul através do estudo de quais estruturas são relevantes para a comunicação destes aquíferos e quais as direções preferenciais destas estruturas. Com base no exposto, o estudo serve para se determinar exatamente ou com

proximidade os locais onde devem ser perfurados novos poços de abastecimento em todo o Serra Geral do Rio Grande do Sul.

1.3 Hipóteses da Tese

As grandes estruturas são as responsáveis pela salinidade anormal do SASG ou as estruturas menores seriam capazes também de permitir a ascensão das águas profundas do SAG e dos aquíferos permianos como Irati e Rio Bonito. Acredita-se que as direções preferenciais das estruturas tectônicas sejam NW e NE. Além das grandes falhas, acredita-se que as cotas potenciométricas do SAG e do SASG são muito influenciáveis por certas falhas e que por esta razão a ascensão de águas subterrâneas salinizadas do SAG e pré-SAG para o SASG seriam ajudadas por algumas destas falhas, que podem ser de escala regional. Algumas dessas grandes falhas são mais importantes que outras para esta diminuição das cotas potenciométricas. As direções de anisotropia da variografia, que é um método de verificação de direções preferenciais de fenômenos geológicos e que precede a técnica geoestatística simulação de pontos não amostrados seria correspondente as direções estruturais principais atuantes no SASG, no SAG e no pré-SAG. O sódio é o elemento chave para identificar os locais onde esta ascensão acontece porque as camadas sedimentares pré-SAG possuem muito sódio em sua composição mineralógica (evaporitos).

1.4 Compartimentação Espacial

Nas considerações iniciais sobre a necessidade de compartimentação do SAG no Rio Grande do Sul, salienta-se a grande diversidade estrutural, já estabelecida em trabalhos anteriores de caráter mais localizado. Com relação a estruturação do SAG e do SASG, são também descritos muitos trabalhos sobre as principais estruturas que governam a evolução da bacia do Paraná e por extensão o arcabouço estrutural destes aquíferos (Teixeira & Viero 2016; Machado, 2006; Freitas, 2016).

A idéia de dividir os aquíferos em domínios tectônicos não é nova (Machado, 2006; Lisboa, 1996). Machado (2006) utilizou o critério das principais falhas para definir 4 compartimentos tectônicos no SAG do Rio Grande do sul. O compartimento Oeste, o compartimento Missões/Fronteira Oeste, o compartimento Norte Alto

Uruguai e compartimento Leste. O compartimento Oeste é separado do compartimento Missões/Fronteira Oeste pelo SFJM. O Missões Fronteira Oeste é separado do Norte Alto Taquari/ pelo SFTAP e o limite do compartimento Leste com o Compartimento Missões/Fronteira Oeste e Norte-Alto Uruguai é a Dorsal de Canguçu.

Segundo Freitas *et al.* (2016), essas falhas representam antigas áreas de fragilidades no embasamento cristalino que foram reativadas durante o processo evolutivo da bacia do Paraná que afetou todas as seqüências nessa bacia.

Freitas *et al.* (2017) individualizou 5 zonas distintas em termos de condutividade elétrica no Sistema Aquífero Serra Geral do Rio Grande do Sul. A condutividade elétrica é diretamente proporcional ao conteúdo de sais dissolvidos totais. Este utilizou o método EAD e componentes principais com o objetivo de dar ênfase à exploração original com o objetivo de simplificar a variabilidade original dos dados e identificar quais variáveis eram as mais significativas para o seu estudo e com isso diminuir a complexidade do banco de dados. Ele percebeu que a Formação Serra Geral no Rio Grande do Sul apresenta heterogeneidade estrutural, que é refletida na diferença nos resultados estatísticos verificados no Serra Geral do Rio Grande do Sul.

Ele usou basicamente a mesma compartimentação de Machado, que dividiu apenas o SAG, para dividir o SASG. A única diferença foi a divisão do compartimento Norte/Alto Uruguai em Alto Uruguai/Meio Oeste e Alto Uruguai/extremo Oeste. O compartimento Alto Uruguai/extremo Oeste está localizado no Norte da Formação Serra Geral no Rio Grande do Sul e faz fronteira com Santa Catarina. Seu controle estrutural está relacionado com a zona de falha Lancinha-Cubatão, de direção N60°E, do lineamento do Rio Chapecó N55°E e do lineamento do Rio Uruguai, de orientação E-W. Os poços anômalos estão encaixados nessas direções. Secundariamente, ocorrem direções N10°W encaixados ao longo do rio das antas e do Rio da Várzea, na região de Frederico Westphalen e Ametista do Sul. As espessuras de rochas vulcânicas nesta zona ultrapassam os 1000 metros e os valores de condutividade são os mais altos. Outro compartimento é denominada Alto Uruguai/Meio Oeste, que está localizada no centro/oeste do Serra Geral e faz fronteira com a Argentina. Esta zona está limitada pelos rios Irani e do Peixe, de direção N60°E. A espessura aqui varia de 400 a 1000 metros e a condutividade atinge um valor máximo de 1200 $\mu\text{S}/\text{cm}$. Na zona

Taquari/Antas, na parte leste do Serra Geral no Rio Grande do Sul, o relevo é bastante dissecado e tem íntima associação com as estruturas tectônicas presentes na área. O controle estrutural dos poços está associado às seguintes feições: Sistema de falhas Lajeado-Esteio, com direção N60W; zona de falha Soledade (N65E), sistema de falha Dorsal de Canguçu (N40 E) e lineamento Bento Gonçalves (E-W).

Um dos compartimentos recebeu o nome de fronteira Oeste, no extremo oeste do Serra Geral no Rio Grande do Sul, na fronteira com Argentina e Uruguai, onde o terreno é bastante arrasado e plano. Encontra-se esta zona sob a influência da zona de falha Lancinha-Cubatão, que se estende além do estado do Rio Grande do Sul e é uma das principais estruturas do sul da bacia do Paraná, de direção NE, e com as estruturas de direção NW, do sistema de Falha Jaguari-Mata, bem como os sistemas de falha Santana do Livramento, São Francisco de Assis e Alegrete. Encontra-se muito próximo principal área de recarga e afloramento do aquífero Guarani no estado. A zona Missões/Noroeste abrange o noroeste do Rio Grande do Sul. Esta região apresenta um relevo pouco dissecado. Este sistema está limitado pelo sistema Terra de Areia-Posadas, de direção N75°W; Santo Ângelo, com direção N35°W; e Lancinha/ Cubatão.

A ideia de dividir o Sistema Aquífero Serra Geral também foi adotada por autores em outros estados e reforça a necessidade de divisão do Serra Geral em domínios.

No estado do Paraná, Athayde *et al.* (2012) também usou o critério estrutural para separar o SASG no estado do Paraná. Naquele estado o autor usou o critério de separar o SASG em duas zonas. Uma a oeste da Falha de Jacutinga e outra a leste da mesma. O setor noroeste apresenta uma capacidade específica superior ao setor leste, mostrando a importância da compartimentação do SASG.

Machado (2006) descreveu em detalhe, além da divisão da área e os aspectos estruturais do SAG, a potenciometria deste e os locais mais favoráveis ao artesianismo e conseqüentemente a conexão entre o aquífero Serra Geral e o Aquífero Guarani.

O compartimento extremo/oeste tem direções preferenciais noroeste. As cotas ao sul da calha do rio Ibicuí raramente ultrapassam +150 m. A partir do município de Alegrete, o SAG tende a um mergulho suave em direção a oeste. Nas proximidades do rio Uruguai, o SAG apresenta cotas próximas ao nível do mar, com

valores de +50 m em Uruguaiana, onde ocorrem afloramentos da unidade Botucatu. As cotas chegam a -180 m a sul de Uruguai e a -300 na fronteira com o Uruguai mais ao Sul.

No compartimento Missões/Fronteira Oeste, a partir de São Luiz Gonzaga, existe um mergulho das isolinhas em várias direções, com uma cota de +106. Existe um baixo estrutural na região de Nova Palma devido a um cruzamento de falhas nordeste e noroeste. No geral esta zona possui baixos potenciométricos tanto do SAG quanto do SASG e apenas na parte sudeste estes valores começam a subir. Próximo ao rio Uruguai, valores baixos de cota potenciométrica do SASG favorecem a ascensão de águas salinizadas do SASG.

No compartimento Norte Alto Taquari, percebe-se que existe uma influência muito grande do domo de Lages, proporcionando uma extensa área de recarga no Norte desta zona. A direção principal das estruturas associadas a este domo são nordeste. Na região centro-oeste desta zona, o SAG está bastante profundo e não permite intensa conexão com o SASG. Na região leste, próximo a Santa Catarina existe condições favoráveis de mistura. Os níveis estáticos próximos ao município de Lages estão em 800 m e no Rio Grande do Sul, em 700 e 600 m. Em direção ao sul deste compartimento, os valores de cota do SASG são bastante elevados e dificultam a conexão com o SAG.

Ao sul do compartimento Missões Fronteira Oeste, o autor não criou um nome específico mas mostrou que existe um valor negativo de cotas de no contato do SAG com SASG entre Lajeado e Teutônia, com influência de estruturas nordeste. As zonas de recarga se dão no Sul desta zona, na zona de escarpa. Os valores de pressão hidrostática acompanham o mergulho do contato do SAG com o SASG em direção ao norte. As linhas de fluxo dirigem-se em direção ao sistema de falhas Terra de Areia-Posadas. A partir de Nova Palma, no Norte desta zona, começam a predominar estruturas noroeste. No lado oriental deste compartimento não denominado, existem valores potenciométricos do SAG que permitem a ascensão de águas salinizadas para o SASG, principalmente no entorno do município de Agudo.

No compartimento Taquari/Antas, é possível identificar três áreas principais:

1°) Na região nordeste do município de Caxias do Sul, as cotas do topo do SAG crescem substancialmente em direção ao município de São Joaquim (SC), passando de +100 m logo ao norte da cidade de Caxias para +600 m logo ao sul da

cidade de São Joaquim (SC). Toda esta região está soerguida devido a esforços vinculados ao levantamento da Serra do Mar.

2°) Da região que sai de Novo Hamburgo a Caxias do Sul, destaca-se o município de Morro Reuter, como possuidor das maiores altitudes do topo do SAG, que alcança +200 m. Ao longo da falha Rio das Antas a salinidade é alta, sendo que esta falha é a mais importante para explicar a diminuição de níveis potenciométricos nos municípios que vizinhos a ela.

A distância percorrida pela água associada ao gradiente potenciométrico e a profundidade neste compartimento indicam que possa haver águas termais neste compartimento. Machado (2006).

O critério de divisão desta tese será mostrado na primeira seção da metodologia.

1.5 Objetivos

Esta pesquisa tem como pressuposto gerar um entendimento sobre quais os graus de mistura de águas do SASG pelos aquíferos sedimentares do SAG e do pré-SAG. Esta mistura pode ser influenciada tanto por motivos estruturais e hidrogeológicos. Dentre os principais objetivos deste trabalho segue-se:

- Identificar as direções preferenciais de fluxo para cada uma das variáveis de interesse por meio de modelos variográficos em cada uma das zonas.
- Identificar a probabilidade de ocorrência de amostras simuladas e o quanto as falhas contribuem para gerar incertezas quanto aos valores simulados que não constam na malha amostral.
- Descrever quais as falhas que contribuem mais para valores altos de salinidade e que são verificáveis através da simulação de elementos abundantes em unidades profundas como Irati e Rio Bonito e que são muito baixos no SASG e identificar as principais estruturas que favorecem a ascensão de águas salinizadas para o SASG. Deve-se identificar quais os comprimentos que mais influenciam nesta ascensão, se os grandes (maiores que 5 Km), ou os menores (< 5 Km).
- Analisar a relação entre os lineamentos menores com as grandes falhas e o quanto eles interferem na diminuição das cotas potenciométricas de SASG e SAG.

- Usar as cotas potenciométricas do SASG e do SAG e as cotas de captação dos poços do SASG para determinar os locais onde existe comunicação entre estes dois sistemas aquíferos, locais de fluxo descendente do SASG em relação ao SAG, de fluxo ascendente do SAG em relação ao SASG e onde não existe qualquer comunicação entre eles.

2 ESTADO DA ARTE

2.1 Bacia do Paraná

A bacia do Paraná sofreu inúmeros ciclos sedimentares ao longo de sua história evolutiva. Neste caso, existem 4 sequências deposicionais principais. A supersequência Gondwana I possui idade do Carbonífero e é caracterizada na sua base, por um grande hiato na sequência deposicional (entre a última porção da Formação Ponta Grossa e o Grupo Itararé), o qual foi estimado em 45Ma. Esse hiato é resultado da associação de fatores climáticos e tectônicos. França & Potter (1988) em estudo anterior ao período desta RIL, propuseram que o Grupo Itararé seja dividido nas formações Lagoa Azul, Campo Mourão e Taciba.

A Formação Rio Bonito também está contida na sequência I. Sua história está ligada a subsidência do Carbonífero, acompanhada da deposição das unidades Aquidauana-Itararé, com registros superiores a 1500 metros de espessura. Sobrepostos ao grupo Itararé, ocorrem arenitos, siltitos e camadas de carvão da Formação Rio Bonito. A deposição do Grupo Itararé e da Formação Rio Bonito foi influenciada inicialmente pela fase de subsidência atribuída a sobrecarga das geleiras continentais, seguido pelo peso dos sedimentos depositados durante o ciclo transgressivo-regressivo subsequente. No Rio Grande do Sul, a Formação Rio Bonito está associada intimamente a Formação Palermo.

A formação Irati documenta um movimento singular na evolução da bacia: uma efetiva restrição à circulação das águas entre a sinéclise e o Oceano Panthalassa culminou por desenvolver um contexto ambiental hipersalino na bacia interior, sendo a última incursão marinha na bacia do Paraná (Milani *et al.* 2007).

Na sequência II, o estabelecimento da ocorrência do sistema Triássico na Bacia do Paraná representa um forte vínculo ao pacote pelítico fossilífero da Formação Santa Maria, que ocorre na porção gaúcha da bacia. O pacote fossilífero ocorre intercalado com pacotes arenosos afossilíferos que abarca o intervalo entre a formação permiana da Sanga do Cabral e a Formação Botucatu (Milani *et al.* 2007). E, na formação Santa Maria, da sequência II da bacia do Paraná, a maioria dos grãos que compõe a litologia desta unidade são compostos de quartzo, feldspato e argilas. As argilas são divididas em argilas infiltradas e autigênicas. Na última, existe uma diagênese incipiente e inclui mistura de camadas de Illita e Smectita (Pierini *et al.* 2002). Além do alto flúor, o conteúdo de sódio, sulfato e cloreto ocorre na porção

mais profunda da formação Santa Maria e representou 20% das amostras num estudo de Marimon *et al.* (2013).

A supersequência Gondwana III, denominada como Sequência Jurássica-Eocretácica na concepção de Milani *et al.* (1994), compreende o intervalo do registro estratigráfico da Bacia do Paraná em que se posicionam os sedimentos eólicos da Formação Botucatu e o magmatismo da Formação Serra Geral. A supersequência Gondwana III é amplamente distribuída pela Bacia do Paraná, e seus sedimentos continentais são representativos, predominantemente, por fácies eólicas. A formação Botucatu constitui-se em toda sua área, por arenitos médios a finos de elevada esfericidade e aspecto fosco, com estratificação cruzada tangencial, de médio a grande porte. Esta formação é parte de uma grande desertificação do Gondwana, antes da quebra do Atlântico, e este processo foi responsável pela presença de largas dunas identificadas na Bacia do Paraná. Esta unidade é composta de grãos de arenito bem selecionados a bem selecionados, com estratificação cruzada com conglomerados esporádicos, além de argila depositada em lagos.

O vulcanismo da Formação Serra Geral, que é formado por uma sequência de derrames básicos e unidades eruptivas ácidas, forma o Sistema Aquífero Serra Geral (SASG), que no Rio Grande do Sul cobre aproximadamente 45% da área superficial.

O SASG é uma das principais unidades hidroestratigráficas existentes no Sul do Brasil, principalmente em razão do vasto território que abrange e pode ser utilizado como fonte de abastecimento de águas subterrâneas em diversos municípios e estados (Scheibe & Hirata, 2006). O SASG constitui um aquífero livre, podendo, em raros locais, desenvolver caráter confinado. A condutividade hidráulica do SASG é muito variável e de complexa avaliação e previsão, principalmente devido ao fato de ser heterogêneo e anisotrópico, com background entre 117,35 a 378,35 $\mu\text{S}/\text{cm}$, sendo que valores inferiores a 117,35 são detectados em zonas onde a recarga ocorre exclusivamente por precipitação pluviométrica (Tomasi & Roisenberg, 2019).

Basaltos são bons aquíferos porque eles armazenam águas de excelente qualidade, geralmente caracterizadas por baixa salinidade, e a extensão lateral e vertical permitem uma grande capacidade de armazenamento. As lavas basálticas possuem descontinuidades geológicas que refletem na dinâmica do fluxo nestas unidades (Gastmans *et al.* 2016). A anisotropia estrutural do SASG representa os

registros atectônicos do ambiente deposicional vulcânico (derrames, fluxos piroclásticos, fluxos subaquosos, em diferentes graus e escalas de intensidade), assim como estruturas tectônicas relacionadas aos eventos deformacionais superimpostos, ocorridos ao longo da evolução tectônica da Bacia do Paraná (Milani, 2004).

A importância estratégica do SASG é proporcional à dificuldade exploratória. Cabe ressaltar que foram descritos casos em que dois poços tubulares distantes entre si por menos de dez metros apresentaram capacidades específicas antagônicas (Athayde *et al.* 2012). Portanto, em anos recentes, tem havido um aumento da preocupação da população com o enorme potencial da Bacia sedimentar do Paraná, na América do Sul, e um largo número de questões relacionadas ao correto manejo desse recurso foram levantadas.

O sistema aquífero Guarani (SAG) de natureza eólica, quartzo-feldspática e cimentação eventual de carbonato e os aquíferos permianos como Rio Bonito e Irati, de composição muito mais variável e muito salinizadas contribuem para a salinidade do SASG.

A influência mais nítida do SAG e dos outros aquíferos sedimentares sobre o SASG ocorre nos poços onde os valores de sólidos totais dissolvidos vai de 1000 a 2000 mg/L com teores de cloreto e sulfato acima do bicarbonato e predominância do sódio sobre o cálcio (Filho *et al.* 2006).

Quando as quantidades de salinidade entre o SAG e o SASG são as mesmas, existe conexão hidráulica entre estes dois aquíferos, com extensão vertical de 400-500 metros, que permitem a ascensão de águas de aquíferos sotopostos ao SASG, constituindo águas mineralizadas, oriundas de mistura (Scheibe & Hirata 2008).

Para Bittencourt (2003), teores maiores de magnésio podem se relacionar perfeitamente com o SASG. As águas que possuem influências do SAG normalmente apresentam caráter alcalino. Em Londrina, altos valores de sódio coincidem com o cruzamento de estruturas NE-SW com o alinhamento São Jerônimo-Curiúva, e mais ao sul, no cruzamento de uma megaestrutura NE-SW com outra de direção E-W (Portela Filho *et al.* 2005).

2.2 Hidroquímica

Segundo Reginato *et al.* (2010), num estudo feito no nordeste do Rio Grande do Sul, no município de Carlos Barbosa, as águas do SASG são principalmente bicarbonatadas cálcicas ou magnesianas representando a composição química das rochas vulcânicas que formam o aquífero, sendo que a fonte original dos elementos cálcio, magnésio e sódio está associada a alteração dos silicatos presentes nestas rochas. O SASG tende a apresentar uma relação onde o $Ca > Mg > Na$ e um enriquecimento de cálcio e magnésio no topo (rochas ácidas) para a base (rochas básicas) do pacote de rochas vulcânicas. As águas bicarbonatadas cálcicas são as águas típicas do SASG, sendo o cálcio o cátion mais abundante, proveniente da alteração dos plagioclásios e minerais ferromagnesianos do basalto. Porém, o cálcio é sempre relacionado ao bicarbonato, que indica que sua origem é principalmente a partir da hidrólise de calcitas de amígdalas no basalto porque os feldspatos tem pouca interação com a água.

Freitas *et al.* (2016), num estudo feito na Formação Serra Geral do Rio Grande do Sul, considera zonas anômalas de condutividade as que possuem valores de condutividade entre 117,35 e 378,35 $\mu S/cm$. Valores acima e abaixo destes limites são considerados anômalos. Foram separadas quatro zonas distintas em termos de condutividade elétrica. Uma zona com valores maiores que 378 $\mu S/cm$, outra zona com valores entre 221,75 e 378 $\mu S/cm$, outra zona com valores entre 117,35 e 221,75 $\mu S/cm$ e outra com valores inferiores a 117,35 $\mu S/cm$. A classe C1 tem em geral caráter mais alcalino e altos teores de sódio, sulfato, cloretos e fluoretos. A classe C2 apresenta duas tipologias hidrogeoquímicas bem definidas: águas bicarbonatadas cálcicas/magnesianas (65%) e bicarbonatadas sódicas (34,4%). São águas menos salinas que as da classe C1, levemente alcalinas, com maior teor de cálcio, baixo sulfato, maior dureza e baixos teores de flúor.

Nota-se uma correspondência entre os sólidos totais dissolvidos e as vazões no SASG. Nos poços com contribuição do SAG, os valores de STD são elevados. Nos mapas de vazão e capacidade específica observa-se uma compartimentação espacial balizada pelo eixo do Arco de Ponta Grossa, onde ao norte desta estrutura as magnitudes de tais variáveis são mais elevadas, em contraste com a porção sul. Na escala de maior detalhe, nota-se áreas com maior produtividade, balizadas por

compartimentos com estrutura NW-SE e NE-SW. A ocorrência de valores anômalos de capacidade específica foi constatada justamente sobre alinhamentos de direção NW-SE (Filho, 2005).

Filho *et al.* (2006) num estudo feito no oeste do Paraná, verificou os seguintes grupos de águas: águas bicarbonatadas sódicas, bicarbonatadas cálcicas e bicarbonatadas sulfatada-cloretada-sódicas que são características de conexão do SAG e Pirambóia com aquíferos subjacentes. Nas zonas de alto confinamento, o pH situa-se entre 8,14 e 8,70 e a temperatura atinge entre 38 e 41°C. Estas águas apresentam elevado teor de sódio, que são maiores que o cálcio e o magnésio, e a concentração de bicarbonato é inferior ao do sulfato e cloreto. Nas águas de tipo mista com influência reduzida do SAG sobre o SASG, o pH máximo é igual a 7,9, os fluoretos tem concentrações inferiores a 0,1 mg/L e predomina o cálcio sobre o sódio. Em outro estudo do mesmo autor, efetuado na porção centro-norte do aquífero Serra Geral no Paraná, essa mesma divisão foi constatada (Filho *et al.* 2005) A elevada variabilidade do SAG não indica um tipo hidroquímicos único, e representa uma composição de águas provenientes de diferentes aquíferos. Além disso, não existe modo de identificar uma divisão espacial clara entre os diferentes aquíferos, visto que existe muita diluição de águas em qualquer um deles. Existe mistura tanto de água da chuva, quanto águas profundas com águas de profundidade intermediárias (Bonotto, 2012).

Sracek & Hirata (2002), num estudo no estado de São paulo identificou uma faixa de pH que vai de 6,9 a 9 e concluiu que o Na provavelmente é derivado da dissolução de albita ou halita, relacionados a evaporitos da Formação Pirambóia ou aquíferos do redor. Porém, apenas este processo não é suficiente para explicar todo este *input* de Na e processos de troca de cátions e outra fonte de Na, e o Ca removido por esta troca produz dissolução de calcita, e poderia explicar a diminuição em Ca com aumento de concentração de HCO_3 e Na ao longo do caminho evolutivo. A esmectita eodiagênica existe tanto no Pirambóia quanto no Botucatu, além da presença de betumen e cimentação de calcita mesodiagênica em ambos e o pH mais alto acompanha as fácies químicas mais enriquecidas em sódio e sulfato (Sracek *et al.* 2011).

A evolução diagenética da Formação Pirambóia foi mais complexa que a da Formação Botucatu, não apenas por sua idade mais antiga e maior carga de sedimentos, mas também devido a diferenças composicionais e maior variabilidade

mineralógica ligadas a uma maior presença de argilas e minerais metamórficos acessórios. (Hirata *et al*, 2011). Além disso, a análise de água permite identificar a presença de três tipos de água: água ricas em Ca-HCO_3 relacionadas a zona de recarga, com pH levemente ácido, águas subterrâneas confinadas ricas em Ca-HCO_3 e um terceiro tipo que evolui para Na-HCO_3 , que posteriormente apresentam conteúdos significativos de Cl e SO_4 , com pHs que podem chegar a 10 em zonas mais profundas. As águas profundas indicam uma transição entre um ambiente óxido e subóxico acima do ponto de redução do sulfato.

Em Bortolin *et al.* (2014), num estudo em Carlos Barbosa, no Rio Grande do Sul, os poços que apresentavam maior quantidade de cálcio, indicavam uma maior dissolução de calcita, resultando em maior tempo de armazenamento. As quantidades de carbonato e bicarbonato do SASG são inferiores ao do SAG. Existem pequenas variações na concentração de diversos íons, com exceção do magnésio, sódio, cloro e sulfato. Esta diferença está associada a diferentes profundidades de entrada de água.

Quando o nível potenciométrico do SAG é inferior à base do SASG, ocorre mistura de águas e consequente alteração química, promovida pelo aporte de fluxos descendentes através de descontinuidades (condutores hidráulicos) das rochas vulcânicas. De modo contrário, em regiões onde o nível potenciométrico do SAG é superior à base do SASG, ocorre fluxo ascendente, e as águas do SAG misturam-se às águas do aquífero superior. Ainda pode ocorrer um terceiro tipo de contaminação que é quando unidades sotopostas ao SAG como Rio Bonito, Irati, entre outros tem potencimetria superiores à base do SAG (Freitas, 2016).

Em Filho *et al.* (2005) uma maior diferença entre a superfície potenciométrica e altimétrica indica que existe um forte controle estrutural nestas superfícies e mostram o quanto a altimetria não é o único fator que controla a altura potenciométrica dentro dos aquíferos.

No oeste paranaense também foi feita uma análise da relação de potencimetria entre o SASG e o SAG, sendo que quando as cotas potenciométricas do SASG eram inferiores a 300 metros, existia a conexão entre os aquíferos na região de Marechal Rondon (Athayde *et al.* 2014).

2.3 Aspectos Estruturais

No Rio Grande do Sul, os esforços tectônicos foram preferencialmente direcionais, que geraram campos tensionais extensionais e transtensionais. Reginato *et al.* (2003) evidenciou a presença de um forte campo tectônico, marcada pela atuação de dois campos tensionais principais (o primeiro campo tensional tem direção de compressão σ_1 horizontal de orientação 082° e uma direção de tração σ_3 horizontal de orientação 352° ; o segundo campo possui orientação de compressão σ_1 igual a 174° e uma direção de tração igual a 264°), que foram responsáveis pela geração das estruturas tectônicas existentes na área. As estruturas tectônicas passam a ser o principal condicionante dos aquíferos fraturados, sendo que as estruturas primárias apresentam um grau de importância mais reduzido, visto que as condições de circulação e armazenamento de água são mais restritas. Também, definiu que a zona de Caxias do Sul, na parte leste da Formação Serra Geral do Rio Grande do Sul possui lineamentos de médio e pequeno porte, e que os mesmos possuem orientação preferencial para nordeste.

Em Misuzaki *et al.* (2014), num estudo da região sudeste de Santa Catarina, também verificou-se estes dois grupos de fraturas. Num dos grupos, de pequeno porte, existe predominância de estruturas de direção nordeste, e secundariamente de estruturas noroeste. As estruturas NW tem maior alcance e apresentam alguns quilômetros possuindo uma boa transmissividade e foi condicionada para a geração de um novo mapa de lineamentos a partir dos lineamentos traçados, que foram constatados e validados em todos os métodos.

Strieder *et al.* (2015) conduziram um estudo estrutural na Formação Serra Geral do Rio Grande do Sul. Neste ele evidenciou a larga predominância de movimento transcorrente e adotou o regime Direcional para distinguir as fases deformacionais da Bacia do Paraná. O critério principal para distinguir as fases deformacionais foi separar famílias de mesmo sentido de movimento. Estes procedimentos assumiram que houve dois tensores σ_1 e σ_3 atuando horizontalmente, com σ_2 vertical, além de uma rotação dos movimentos devido ao rifteamento do Gondwana. Os diversos eventos tectônicos verificados podem ser sintetizados por: 1) D_n (Permiano ao Cretáceo Inferior). Evento deformacional anterior à ruptura do Gondwana. Sistema orientado segundo NW (σ_3). 2) D_{n+1} (Cretáceo superior). Diques de basalto de orientação NW no arco de Ponta Grossa. Diques de

basalto de orientação NE orientados segundo (σ_3). Movimento transcorrente dextral. 3) D_{n+2} (Paleoceno para o Eoceno). Desenvolvimento estrutural da Bacia de Bauru na margem continental. Orientação segundo NW no (σ_3). Movimento transcorrente sinistral.

Strieder *et al.* (2015), busca comprovar que um regime de tensão bidirecional estava ativo durante o Jurássico (Formação Botucatu) e Cretáceo (Formação Serra Geral) e o regime foi determinado por meio de técnicas de elementos estruturais locais e regionais que caracterizaram as fases de deformação. A razão de tensão entre σ_1 e σ_3 é de 0.10-0.30 e isso sugere um regime direcional. Por fim, o regime gerou grupos de falhas conjugadas com orientação quase perpendicular aos tensores principais, sendo, portanto de orientação NW caso σ_1 seja de orientação NS.

No estado de São Paulo, este mesmo padrão de regime direcional foi verificado. Estes eventos direcionais geraram falhas conjugadas híbridas, e fraturas extensionais. Portanto, existe uma mistura de extensão com movimento direcional, resultando num aumento da transmissividade dessas fraturas. Juntas de resfriamento são facilmente preenchidas por minerais secundários (Fernandes *et al.* 2016).

Rostirolla *et al.* (2000) sinaliza que pesquisadores interpretaram movimentos transcorrentes da bacia como causadores de altos estruturais nas sequências fanerozóicas, ressaltando que a movimentação de falhas antigas é um processo fundamental na determinação de arranjo geométrico e padrão de deformação da Bacia do Paraná. No oeste do estado do Paraná ocorreram deslocamentos sinistrais de falhas NW e dextrais de falhas NE durante os derrames basálticos do fim do cretáceo.

Segundo Sordi *et al.* (2017), os lineamentos NE e NW têm sua origem relacionada ao período brasileiro (750-650 Ma) e tem influência na gênese da bacia sedimentar do Paraná que ocorreu no período Devoniano e sofreram reativações mais pronunciadas após a separação entre a placa sul-americana e africana. Os lineamentos E-W, assim como as estruturas N-S mais recentes, neoformadas, possuem associação com a abertura do oceano atlântico sul (130 Ma) e com a flexura crustal da Placa sul-americana. Porém estes lineamentos possuem uma influência secundária na Bacia do Paraná, e diagramas de roseta de diversos trabalhos mostram que as direções E-W e N-S são menos frequentes.

Freitas *et al.* (2017) individualizou 5 zonas estruturais na Formação Serra Geral do Rio Grande do Sul baseadas em grandes estruturas tectônicas. Uma zona denominada de alto Uruguai/Extremo Oeste. Nesta zona existe a zona de falha Lancinha-Cubatão, de direção N60°E, o lineamento do Rio Chapecó, de direção N55E°e do lineamento do Rio Uruguai, de orientação E-W. Os poços anômalos estão encaixados nessas direções. Secundariamente, ocorrem direções N10°W encaixados ao longo do rio das antas e do Rio da Várzea na região de Frederico Westphalen e Ametista do Sul. As espessuras de rochas vulcânicas nesta zona ultrapassam os 1000 metros e os valores de condutividade são os mais altos. Existe também a zona do Alto Uruguai/Meio Oeste. Esta zona está limitada pelos rios Irani e do Peixe, de direção N60°E. A espessura, aqui, varia de 400 a 1000 metros e a condutividade atinge um valor máximo de 1200 $\mu\text{S}/\text{cm}$. Tem a zona Taquari/Antas. Esta zona possui relevo bastante dissecado e tem íntima associação com as estruturas tectônicas presentes na área. O controle estrutural dos poços está associado: ao Sistema de falhas Lajeado-Esteio, com direção N60W; à zona de falha Soledade (N65E), ao sistema de falha dorsal de canguçu (N40 E) e ao lineamento Bento Gonçalves (E-W).

Na zona da fronteira Oeste, o terreno é bastante arrasado e plano. Nesta zona existe a zona de falha Lancinha-Cubatão, de direção NE, e as estruturas de direção NW, como o sistema de Falha Jaguari-Mata, bem como os sistemas de falha Santana do Livramento, São Francisco de Assis e Alegrete. Esta mesma zona é a que possui a maior anomalia gravimétrica mapeado pelo método de Bouguier, com valores que vão de -20 a 0mGal, que correspondem a rochas mais ácidas que basaltos, como andesitos e riodacitos, enquanto as outras zonas possuem rochas menos ácidas e, portanto, valores de gravimetria menor. A zona Missões/Noroeste do Rio Grande do Sul, apresenta um relevo pouco dissecado. Este sistema está limitado pelo sistema Terra de Areia-Posadas, de direção N75°W; Santo Ângelo, com direção N35°W; e Lancinha Cubatão (Rolim & Xavier, 2012)

Nas cidades de Foz do Iguaçu, Itaipulândia e Marechal Candido Rondon tem diferenças de cotas foram de -357 m, -631 m e -375 m, respectivamente. A diferença de cota entre a primeira e a segunda cidade é de 274 m, e entre a segunda e terceira, é de 256 m. Estas elevações são causadas por soerguimentos regionais representados por grandes falhas (Filho *et al.* 2006). Teixeira *et al.* (2019) concluiu que existe uma movimentação de blocos de até 100 metros. O bloco soerguido, na

parte mais ocidental do Rio Grande do Sul, está em cotas de 120 metros, enquanto as cotas da parte oriental, estão em cotas de 20 metros.

3 METODOLOGIA

3.1 Divisão da Área

Neste estudo, o SGAS foi dividido em 5 zonas, com os principais sistemas de falhas localizados próximos ao centro de cada uma. Esse critério foi adotado porque as grandes estruturas são consideradas as principais vias de fluxo de águas subterrâneas que promovem a recarga ascendente do SGAS. As análises de cluster reforçaram a escolha dessa divisão.

Nesta tese foi usado um outro critério para separar as regiões do aquífero heterogêneo do SASGem relação a outros autores. Para tal divisão (Figura 2) foram levadas em consideração as grandes falhas que cruzam a área do SASG e do SAG. Estas falhas (Figura 3) são as responsáveis pela conexão hidráulica vertical entre os diferentes aquíferos da Bacia do Paraná de modo que constituem os caminhos de recarga ascendente que promovem fortes alterações hidroquímicas e hidrogeológicas no SASG. Estas falhas são as responsáveis pela heterogeneidade destes sistemas aquíferos e causam variações de uma zona à outra, tanto hidroquímicas quanto hidrogeológicas, e tais variações corroboram esta divisão. Para melhor avaliar a interferência das grandes estruturas nas propriedades químicas do SASG, as mesmas foram posicionadas no interior de cada compartimento, permitindo agrupar os poços que sofrem a mesma influência em ambos os lados de cada uma delas na análise e tratamento dos dados.

O critério de divisão da área não é o mesmo adotado por outros autores porque os prováveis caminhos de recarga ascendente estão dentro de cada zona e não em seus limites. Da falha e seu entorno em diante espera-se que as análises químicas de um compartimento para outro sejam diferentes, e isto foi constatado. Foi feita uma compartimentação hidroquímica e não estrutural.

Cada uma das zonas foi considerada um domínio estacionário, conceito geoestatístico utilizado para definir um domínio que possui propriedades estatísticas semelhantes (média, autocorrelação) em toda a área de interesse. Existe a estacionariedade de primeira ordem ou a estacionariedade da média e a estacionariedade de segunda ordem ou a estacionariedade de covariância (estruturação espacial), as quais são invariantes às translações, ou seja, a

covariância de duas amostras separadas a h metros deve ser equivalente independente do local no domínio.

Considerando a divisão proposta, a zona 1 tem como referência o SFJM. A zona 2 tem como referência o SFTA/P e o SFTP. A zona 3 tem como referência o SFTP. A zona 4 tem como referência o LRA e o SFTA/P. A zona 5 tem como referência a Dorsal de Canguçu, o SFTP e o LRA. O limite das zonas ficou a certa distância dessas falhas de referência de uma zona para outra a fim de que a variabilidade a partir dessas falhas fosse incorporada em cada zona.

Esta variação de uma região para outra na área de estudo foi levada em consideração para a divisão da área em cinco domínios. Essa necessidade de divisão fica mais aparente pela heterogeneidade química e estrutural.

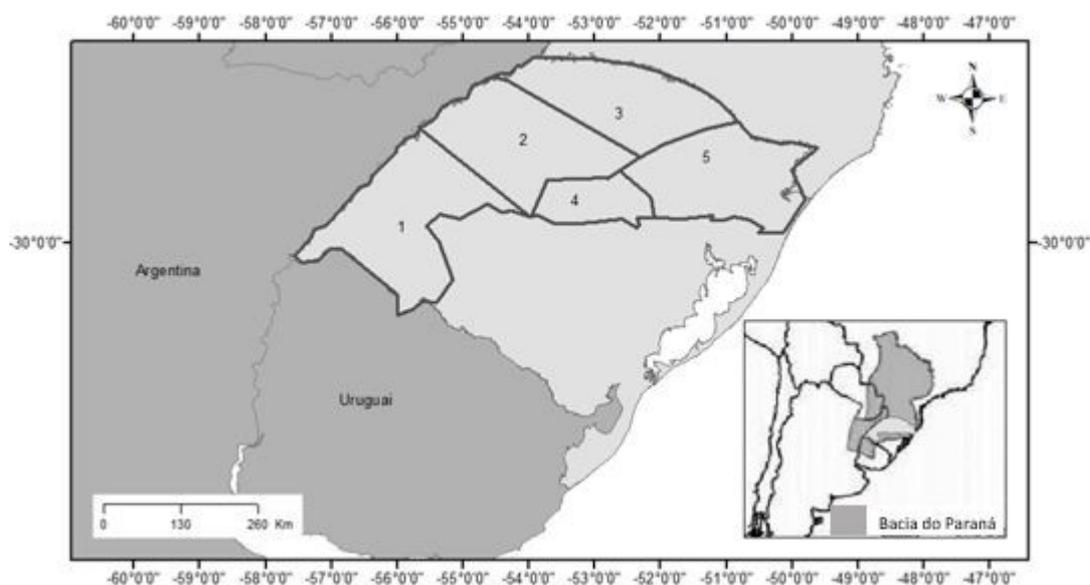


Figura 2 - Divisão de área com as 5 zonas do SASG no Rio Grande do Sul; B) Localização do SASG do Rio Grande do Sul na Bacia do Paraná.

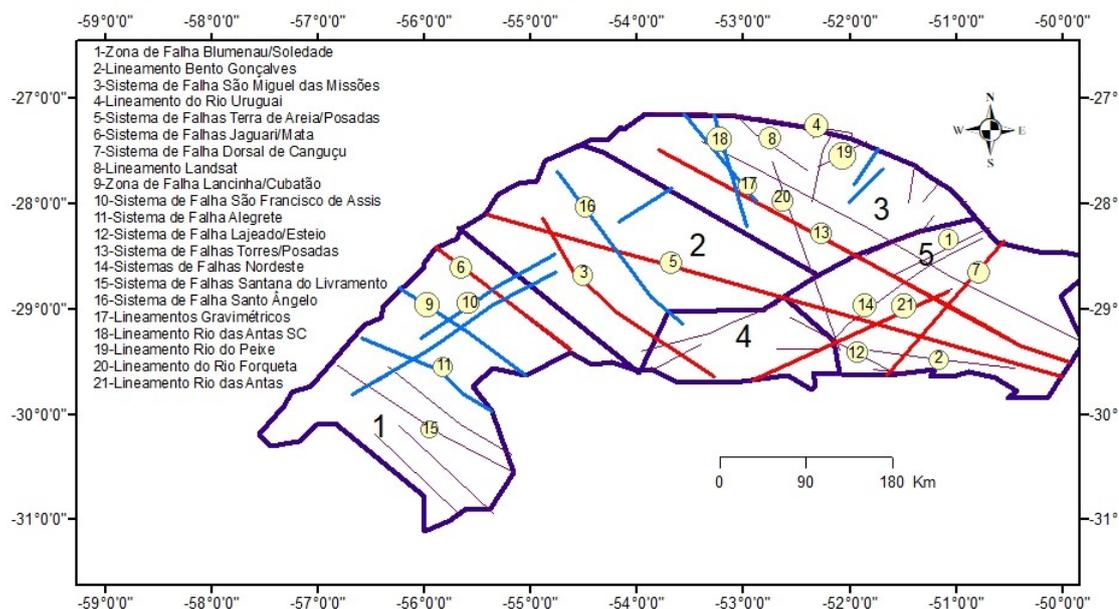


Figura 3 - Mapa do SASG com as 5 zonas definidas para este estudo. Contorno das zonas em azul escuro. Falhas que serviram de referência para a compartimentação espacial que estão em vermelho e falhas em azul claro são as que mais contribuem para a comunicação entre os sistemas aquíferos.

Para o estudo geoestatístico das variáveis geoquímicas, cada zona foi considerada um domínio estacionário, onde foram realizadas as simulações.

3.2 Dados Usados nesta Tese

Os dados originais de um banco de dados da Companhia de Recursos Minerais (CPRM) têm 4677 amostras de água coletadas em poços perfurados no SASG do Rio Grande do Sul. Estas 4677 amostras foram usadas para análise estatística univariada e bivariada.

O banco de dados apresenta é heterotópico, ou seja, não possuem todas as análises em cada ponto. Para a realização de uma análise de agrupamento, utilizando técnicas como a análise de componentes principais (PCA), é necessário que o banco de dados seja isotópico. Desse modo, foram consideradas apenas as amostras que tenham todos os elementos de interesse simultaneamente. Na zona 1, depois de desconsiderar amostras com dados ausentes, restavam 152 amostras. Na zona 2 existem 155. Na zona 3 existem 199 amostras. Na zona 4 existem 95 amostras e na zona 5, 543 amostras. As variáveis escolhidas para a análise foram: alcalinidade, sódio, cálcio, sulfato, cloreto, condutividade e magnésio por sua

importância e significado sobre o tópico deste artigo, que é a influência do SAG e do pré-SAG no SASG.

Foi acordado chamar o grupo 2 com a maior concentração de sódio, o grupo 1 com a concentração intermediária de sódio e o grupo 3 com a menor concentração de sódio. Esta convenção foi usada para as zonas 1,2,3 e 4. Para a zona 5, na qual foi usado o método da distância de Pears, os grupos 2 e 5 têm alto teor de sódio, os grupos 4 e 3 têm baixo teor de sódio e o grupo 1 possui sódio intermediário.

3.3 Estatística Univariada e Bivariada

Uma das formas mais práticas de representar os dados é sob a forma de histogramas. Muitas propriedades podem ser inferidas destes histogramas, como a assimetria, a média, a mediana, a moda e os valores extremos. Muitas variáveis nas ciências da Terra estão longe de ter uma distribuição homogênea dos valores em sua distribuição global. É bastante comum ter muitos valores baixos e alguns valores muito altos. Muitas vezes estes valores extremos, dependendo do objetivo que se quer alcançar no estudo podem ser muito úteis para determinar áreas de contaminação ou com valores extremos de algum elemento químico de interesse. Estes valores de forma alguma podem ser excluídos das análises, a menos que se verifique que não estão corretos por algum motivo.

Existem três tipos de dados estatísticos univariados: medidas de locais, medidas de espalhamento e medidas de forma. No primeiro grupo, encontra-se a média, a moda e a mediana. O segundo grupo inclui a variância, o desvio padrão e o intervalo interquartil. A forma da distribuição é dada pelo coeficiente de dispersão e comprimento das classes de distribuição (coeficiente de variação). Quando todos são levados em consideração, eles dão uma ótima idéia do que está contido nos histogramas. (Edward & Srivastava, 1987).

3.3.1 Estatística Univariada

A análise univariada leva em consideração as estatísticas das variáveis de forma independente. Nessa análise são verificadas tendência central e espalhamento. As análises estatísticas como média e desvio padrão podem ser realizadas em variáveis aditivas. Para as não aditivas, usamos a moda. No caso de

as distribuições serem pouco simétricas e a influência de valores extremos ser grande, a mediana é mais precisa que a média porque não é influenciada por valores extremos. A moda é o valor que ocorre mais frequentemente. A classe com maior altura mostra onde a moda está. Na análise de K-means e dendrograma a média é muito importante para identificar a concentração média de determinada variável em cada um dos grupos e assim podemos dizer quais dos grupos tem características mais próximas de determinada unidade sedimentar.

A variância é a medida de espalhamento mais comum usado em estatística, que consiste em diferenças quadráticas entre os valores dos dados e a média do domínio, por isso ela é sensível a dados extremos, comuns em distribuições assimétricas. Uma maneira de transformar a variância, a deixando na mesma unidade dos dados, é calcular sua raiz quadrada, conhecido como desvio padrão. A variância é sensível a dados extremos, comuns em distribuições assimétricas. Uma maneira de transformar a variância, a deixando na mesma unidade dos dados, é calcular sua raiz quadrada, conhecido como desvio padrão. Na estatística univariada a variância alta em determinado domínio serve para identificar quais variáveis são mais erráticas e que indicam locais onde ocorre ascensão de águas salinizadas.

3.3.2 Estatística Bivariada

O estudo das propriedades univariadas é com certeza muito útil. Porém, quando dispomos de muitas variáveis, é mais conveniente fazer uso de estatísticas bivariadas. O método mais comum de análise bivariada é comparar a distribuição de duas populações.

Existem ao menos três padrões de correlação entre as variáveis: as variáveis podem ser correlacionadas positivamente, correlacionadas negativamente ou estarem descorrelacionadas. Em processos geológicos, é bastante comum que certos elementos estejam correlacionados negativamente. Por exemplo, em calcários, quando o cálcio aumenta, o magnésio tende a diminuir (Edward & Srivastava, 1987).

O gráfico de dispersão é muito útil para inferir a correlação entre duas variáveis. No eixo x é plotado um valor da variável e no eixo y é plotado o valor de outra variável. Os valores largos de uma podem ser comparados com os valores largos de outra (Edward & Srivastava, 1987). Quando a correlação for alta entre duas

variáveis, o coeficiente de correlação será de 1 ou próximo de 1. Diz-se que um coeficiente entre 0,4 e 0,6 é intermediário, acima de 0,6 é alto e abaixo de 0,4 é baixo. Para a análise hidroquímica por meio de Kmeans, PCA e dendrograma por distância euclidiana que será vista adiante, vários diagramas de correlação foram analisados em todas as zonas com o intuito de perceber o relacionamento entre estas variáveis. Na estatística bivariada a correlação entre duas variáveis também foi feita, porém os resultados são menos robustos na medida em que a variabilidade original dos dados é mantida e não se pode separar as amostras por afinidade geoquímica através de grupos, como é feito no método estatístico de Kmeans e distância euclidiana.

3.4 Análise de componentes principais, dendrograma e Kmeans

Muitos estudos estão sendo feitos usando métodos de agrupamento na análise geoquímica de águas subterrâneas. Identificar a qualidade e quantidade de água subterrânea como um dos principais mananciais de água potável é essencial. Tomasi (2019) usou o método de componentes principais e dendrograma no noroeste do SASG do Rio Grande do Sul para separar classes hidroquímicas do SASG. Freitas (2016, 2017) igualmente usou estes métodos para separar grupos distintos de águas subterrâneas com assinaturas hidroquímicas do SASG do SAG no norte do Rio Grande do Sul, e mistas, quando existe a mistura entre os dois. Para Mohamadrezapor *et al.* (2018) a estatística multivariada é uma ferramenta importante na manipulação e interpretação de dados com muitas variáveis. Através desta ferramenta é possível agrupar variáveis similares, investigar a dependência entre as variáveis agrupadas, relacionar variáveis observadas objetivando predizer uma ou mais variável, além de gerar testes de hipóteses.

Para este trabalho, utilizou-se o critério de separar O SASG do estado do Rio Grande do Sul em cinco domínios, explicado conform item 3.1. Em cada domínio foram levados em consideração sete variáveis de elementos químicos possui valores próprios dos sete elementos químicos tanto para a análise de K-means quanto para a de dendrograma.

Os dados originais de um banco de dados da CPRM possuem 4677 amostras de água coletadas em poços perfurados no SASG do Rio Grande do Sul. Tanto o método de Kmeans quanto o método de correlação de Pearson representado pelo

dendrograma exige que as amostras sem dado sejam excluídas da análise, então a partir do banco de dados original, o número de amostras foi bastante reduzido.

Após a isotopização do banco de dados, obteve-se um total de 152 amostras na zona 1, 155 na zona 2, 199 amostras na zona 3, 95 amostras na zona 4 e 543 amostras na zona. A isotopização do banco de dados é um passo necessário para testes de agrupamento. As variáveis escolhidas para a análise foram alcalinidade, sódio, cálcio, sulfato, cloreto, condutividade e magnésio.

A análise de componentes principais tem por objetivo descrever os dados contidos num quadro indivíduos-variáveis numéricas: p variáveis serão medidas com n indivíduos. Esta é considerada um método fatorial, pois a redução do número de variáveis não se faz por uma simples seleção de algumas variáveis, mas pela construção de novas variáveis sintéticas, obtidas pela combinação linear das variáveis iniciais, por meio dos fatores. A ACP é uma técnica matemática multivariada, que possibilita a investigação de um grande número de dados disponíveis. Possibilita, também, a identificação de medidas responsáveis pelas maiores variações entre os resultados, sem perdas significativas das informações. Além disso, transforma um conjunto inicial de variáveis em outro conjunto: os componentes principais de dimensões equivalentes. Pretende-se ainda determinar as variáveis de maior influência na geração de cada componente, que serão usados em estudos futuros. Inicialmente, o objetivo da ACP é o de encontrar linhas e planos que melhor se ajustassem a um conjunto de pontos em um espaço p -dimensional.

A ideia central da análise consiste na redução do conjunto de dados a ser analisado, principalmente quando os dados são constituídos de muitas variáveis inter-relacionadas. Essa redução é feita transformando-se o número de variáveis originais em um novo conjunto de variáveis que mantém, ao máximo, a variabilidade do conjunto.

A análise de componentes principais tem a finalidade de substituir um conjunto de variáveis correlacionadas por um conjunto de novas variáveis não correlacionadas, sendo essas combinações lineares das variáveis iniciais, e colocadas em ordem decrescente por suas variâncias. As novas variáveis denominam-se CP, e possuem independência estatística e não são correlacionadas. Isso significa que, se as variáveis originais não estão correlacionadas, as ACP não oferecem vantagem alguma (Rocha & Ferreira, 2017).

É importante notar que, embora as técnicas multivariadas que constam na literatura tenham sido criadas com o objetivo de resolver problemas específicos, como na área da biologia e psicologia, essas podem ser criadas para resolver muitos outros problemas práticos nas diversas áreas do conhecimento. Na maioria das vezes, os objetivos desses problemas práticos só são resolvidos através do uso de mais de uma técnica multivariada, aplicados em uma sequência.

O agrupamento hierárquico tem como principal característica o tipo de resultados e está intimamente ligado com o processo usado na sua construção. Neste caso, o resultado do processo é uma árvore binária que representa possíveis divisões dos dados em clusters (conjuntos). Assim, na raiz todos os dados estão agrupados num único conjunto e, ao descer na árvore, os conjuntos vão-se dividindo de forma binária, ou seja, em cada nó da árvore são criados dois clusters pela divisão de um único (Rocha & Ferreira, 2017). Esta técnica possui um gráfico de fácil manuseio quando existe um número reduzido de dados e é usada com bastante frequência nas ciências geológicas para ajudar a identificar grupos num banco de dados (Meng & Maynard, 2001). Este método é hierárquico porque quando escolhemos a cortar a árvore do dendrograma no topo desta, todas as amostras estão contidas no mesmo grupo na base da árvore de similaridade (dendrograma). À medida que as avançamos na árvore do dendrograma, os diferentes grupos vão se formando e ficando cada vez mais distantes entre si e o número de grupos vai aumentando. Podemos definir o ponto de corte ideal da árvore por conhecimento prévio do fenômeno estudado. No final da árvore, as amostras de outra técnica de agrupamento. Já a técnica não hierárquica faz a análise de agrupamento através de centros de agrupamento que utiliza as médias das amostras a serem analisadas.

K-means é um método de clusterização muito usado nos diversos campo científicos devido a sua facilidade de implementação, simplicidade de manuseio e eficiência na aplicação. Similar a outros método de clusterização, o método k-means usa uma matriz de $n \times d$, onde n é o número de dados colocados num espaço d para criar grupos c , onde cada amostra é colocada dentro de um grupo. Os dados são agrupados primeira mente de forma aleatória e posteriormente os outros dados são agrupados de acordo com um centro mais próximo (Javadi *et al*, 2017).

O método de Kmeans foi usado para analisar a qualidade da água em um conjunto de dados complexo, com muitas dimensões. Primeiramente determinou-se o número ótimo de grupos. Pela análise de variância acumulada, ficou evidente que

4 grupos (Figura 4) e (Figura 5) são suficientes para explicar quase toda a variância dos dados nas 1,2,3 e 4, enquanto na zona 5, 5 grupos foram considerados ideais considerando o corte da árvore do dendrograma 1,9.

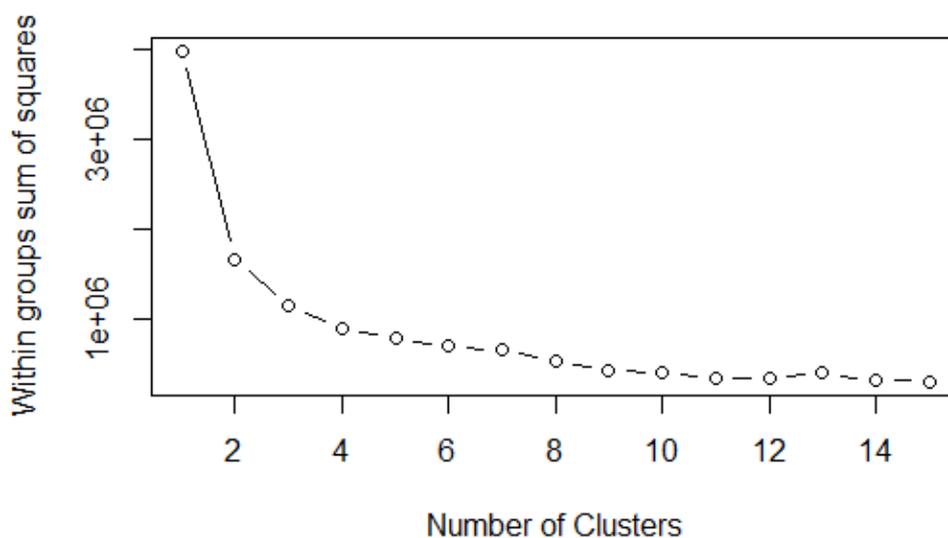


Figura 4 - Variância acumulada pelos grupos de kmeans na zona 3. Nota-se que a partir de 4 grupos, a variância não se altera mais em grande escala e está próximo de 80%.

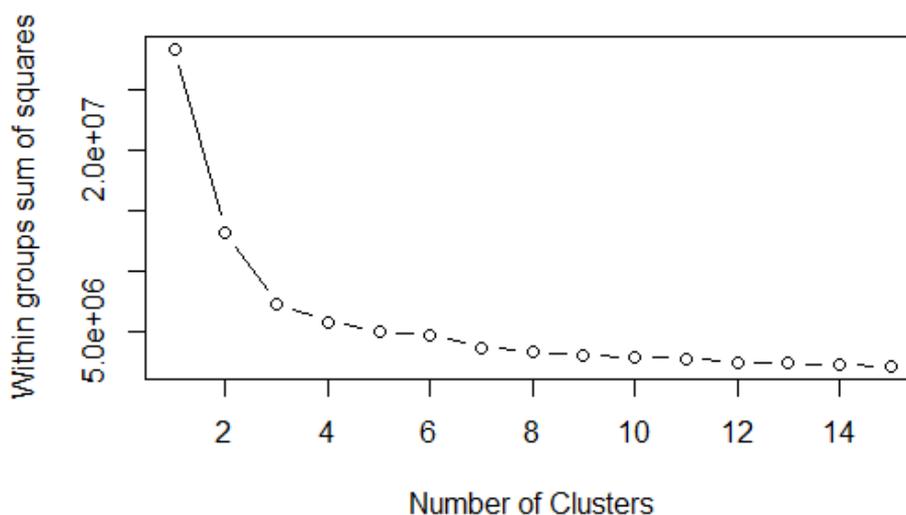


Figura 5 - Variância acumulada pelos grupos de kmeans na zona 5. Nota-se que a partir de 4 grupos, a variância não se altera mais em grande escala e está próximo de 80%.

No software R, foram excluídas as amostras sem dados em uma ou mais das variáveis. Depois, usou-se o pacote `prcomp` para a análise de componentes

principais. Com o pacote `facto extra`, extraiu-se os diagramas com a importância de cada variável em seu respectivo componente. Os escores das variáveis para cada componente em todas as amostras serviu de base para a realização do agrupamento pelo método K-means.

O método de K-means foi usado para analisar a qualidade da água em um conjunto de dados complexo, com muitas dimensões. Primeiramente determinou-se o número ótimo de grupos. Pela análise de variância acumulada, ficou evidente que 4 grupos são suficientes para explicar quase toda a variância dos dados nas 5 zonas analisadas. Posteriormente, foi executada clusterização no software R no comando `Kmeans`, com 4 grupos e `nstart=10000`. Esse número de 10000 é importante para dar mais confiabilidade ao método.

Para executar o processo de agrupamento hierárquico, recorre-se à função `hclust`. Esta recebe como argumento a matriz com as distâncias. Como argumento opcional (`method`), a função permite escolher a forma como se calculam distâncias entre clusters com mais do que um ponto nos passos intermédios do algoritmo. Para este estudo escolheu-se o método de Pearson.

3.5 Variograma Experimental

Podemos prever o comportamento de uma variável regionalizada $Z(x_1)$ coletada em n pontos. Para tal, precisamos supor que exista uma correlação entre duas amostras que estão a uma distância h . Por meio de uma função variograma e de covariância, vemos que elas dependem apenas de dois pontos situados a uma distância, e podemos fazer uma inferência estatística delas. Primeiramente precisamos determinar a correlação entre estas duas amostras e depois devemos ajustar um modelo teórico que se ajuste a esta correlação.

A hipótese de estacionariedade em relação a estes estatísticos é definida do seguinte modo: a correlação (também conhecida como covariância) entre duas variáveis aleatórias depende somente da distância espacial que as separa e é independente da sua localização.

Para que estas amostras possam ser analisadas do ponto de vista de processos estatísticos, como continuidade espacial e simulação, as amostras de uma determinada região de estudo devem ser homogêneas quanto a sua natureza e distribuição. A hipótese de que as amostras possuem a mesma média, significa dizer

que a correlação entre elas depende apenas da distância espacial que as separa. Isto implica que:

$$E[Z(x_1)] = E[Z(x_2)] = \dots = E[Z(x_n)] = E[Z(x)] = m$$

Desse modo, a média passa a ser independente da localização e obtida como média aritmética das realizações das variáveis aleatórias (Soares, 2014).

A hipótese de estacionaridade de 2ª ordem, além de definir que a esperança matemática, $E[Z(x)]$, existe e não depende do suporte x , define também que a correlação entre duas variáveis aleatórias depende somente da distância espacial, h , que as separa e é independente da sua localização (Journel, 1978).

Em estatística, a covariância é a medida da semelhança entre duas variáveis, por exemplo X e Y . Em Geoestatística, a covariância mede a relação entre valores da mesma variável, obtidos em pontos separados por uma distância h , conforme uma determinada direção. Quando a direção é alterada, a correlação espacial também se altera, e por isso temos um fenômeno anisotrópico. (Yamamoto, 2015).

A covariância de uma variável regionalizada para pontos separados por uma distância h pode ser calculada como:

$$C(h) = E\{[Z(x+h) - m][Z(x) - m]\}$$

Em que h representa um vetor entre dois pontos x_1 e x_2 no espaço tridimensional.

A função variograma é definida como a variância do incremento $[Z(x+h) - Z(x)]$

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} N(h) \Sigma [Z(x+h) - Z(x)]^2$$

Em que $N(h)$ é o número de pares de pontos para cada valor de h e γ é a variância do incremento (função variograma). Um exemplo típico com o respectivo modelo é mostrado na Figura 6. Os pares calculados para diversos h (distância) estão representados pelos pontos verdes. Note que a variabilidade entre os pares aumenta conforme a distância (Figura 6)

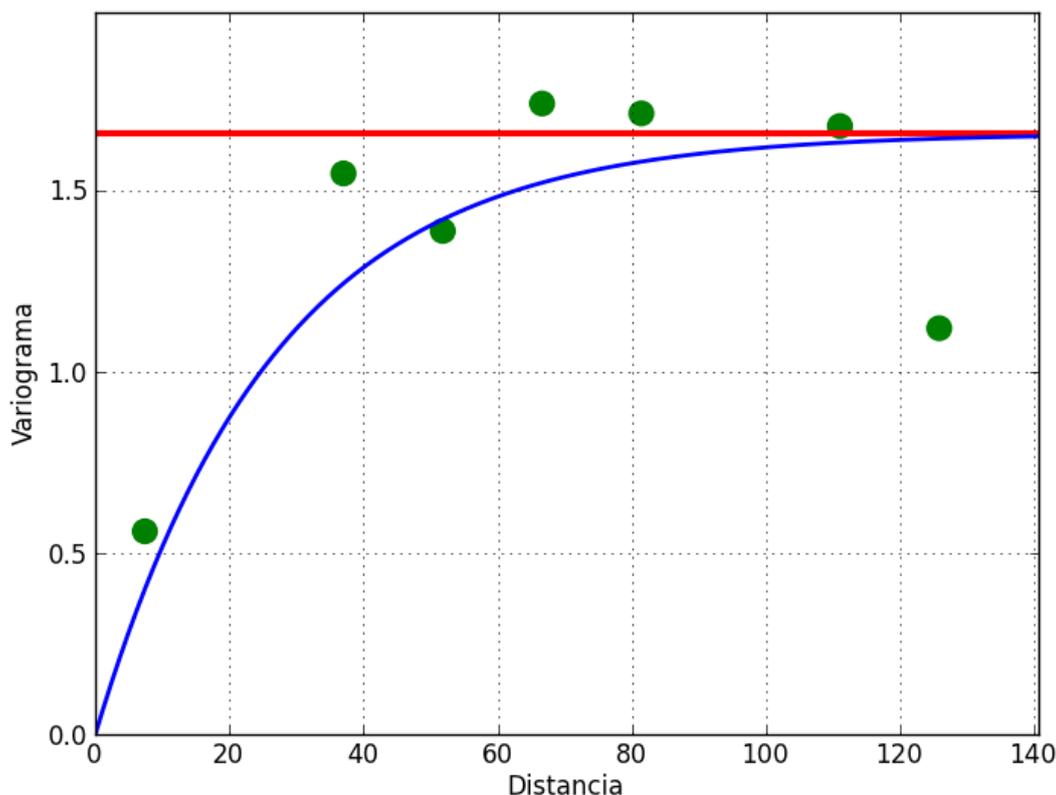


Figura 6 - Variograma experimental. Fonte: wikipedia (Pedro Pinto Correia, 2020).

3.5.1 Tipos de variogramas

A distância segundo a qual $\gamma(h)$ atinge certo nível, denominado soleira ou patamar (sill), igual à variância a priori dos dados, é chamada de alcance ou amplitude. Geralmente, a soleira é representada por $C_0 + C$ e o alcance, por a . O efeito pepita C_0 é causado pela variância aleatória e C é denominada variância espacial. O efeito pepita puro reflete um fenômeno que não é completamente conhecido, por falta de informação e representa que existe grande variabilidade em amostras muito próximas.

Os fenômenos espaciais apresentam anisotropia quando a função variograma muda conforme a direção e, portanto, a correlação entre as amostras muda conforme a direção. Quando a função variograma não se altera com a direção, diz-se que o fenômeno é isotrópico.

Ao detectar-se a presença de anisotropias, elas devem ser modeladas, ou seja, ajustadas a um modelo teórico de variograma. O modelo teórico mais utilizado

na prática é o esférico por causa da sua facilidade de ajuste. O único problema é a perda de definição na parte final da curva. A equação do modelo esférico é:

$$\gamma(h) = \begin{cases} \frac{1.5h}{a} - 0,5(h/a)^3 & \text{se } h < a \\ 1 & \text{de outro modo} \end{cases} \gamma(h) = 1$$

Nesta fórmula “a” é igual ao alcance e “h” é a distância das amostras. Quando o valor do variograma $\gamma(h)$ em pequenas distâncias é muito grande numa pequena distância amostral, dizemos que o efeito pepita é muito grande (Srivastava & Isaaks, 1989).

A distância em que se atinge 95% da variância total dos dados é a amplitude, neste modelo. Este modelo é linear a curtas distâncias, porém ele cresce subitamente e depois volta a ficar plano no final.

Depois é escolhido um modelo que se ajuste melhor ao “raw” variograma. O ideal é que o modelo escolhido deve ser bem ajustado perto da origem porque a confiança do variograma em largas distâncias diminui (Kitanidis, 1997). O patamar da curva é atingido quando não mais existe aumento da variância entre as amostras, e é a distância máxima do variograma (Yamamoto & Landim 2015). Os modelos de ajuste dos variogramas devem permitir que a covariância entre os pontos amostrais não seja negativa. Alguns poucos modelos conseguem ter essa característica como o modelo exponencial, esférico e gaussiano, que permitem que a curva siga sempre para cima quando ajustados a malha amostral.

Quando a função variograma não muda conforme a direção, dizemos que o fenômeno é isotrópico. Isso pode acontecer em camadas sedimentares em que as propriedades da rocha não se alteram conforme a direção. Por outro lado, camadas que sofreram algum tipo de deformação estrutural ou deposição num sentido preferencial tendem a apresentar uma direção preferencial na variografia.

3.5.2 *Outliers*

Muitas vezes não é correto retirar os valores extremos da distribuição porque eles podem ser a parte mais interessante dos dados. Os valores extremos do meu banco de dados estão corretos porque os valores altos estão contidos em todas as variáveis que contêm relação entre si. Amostras com valores anômalos de sódio no banco de dados da CPRM poderiam ser excluídas caso o cloreto e o sulfato fossem

muito baixas em concentração. Todas as amostras com altos teores de sódio também tiveram altas concentrações de cloro e sulfato, e, portanto, elas são estatisticamente confiáveis e ajudam a identificar as zonas anômalas de salinidade. Na simulação estes valores extremos não são suavizados como na Krigagem.

3.6 Simulação

Os métodos tradicionais de interpolação, como a krigagem tendem a suavizar a variabilidade espacial do atributo. A suavização se caracteriza pela subestimativa de valores altos e superestimativa de valores baixos. Além disso, a suavização não é uniforme, pois é zero nos pontos amostrais e vai aumentando à medida que se distancia dos pontos de dados. Normalmente verifica-se que os valores altos e baixos não são reproduzidos. A consequência é que o efeito de suavização da krigagem não reproduz adequadamente as características das amostras para fazer a estimativa em pontos não amostrados (Goovaert, 1997).

De acordo com Olea (1999) a simulação estocástica foi a solução adotada pela Geoestatística para resolver o problema da suavização da krigagem. A simulação é uma possível representação da realidade (desconhecida). Dessa maneira, precisa-se trabalhar com um número grande de simulações e quantificar a incerteza associada ao fenômeno

Os métodos de simulação existentes procuram determinar aleatoriamente a componente de erro com base no conhecido método de Monte Carlo. Assim, como o processo aleatório, as realizações serão diferentes entre si, mas honrando o histograma amostral e o modelo variográfico (Yamamoto, 2013).

A simulação estocástica também foi a solução adotada pelos geoestatísticos para modelar a incerteza associada à estimativa, uma vez que a variância de krigagem foi reconhecida apenas como um índice de configuração espacial dos pontos vizinhos próximos (Journel, 1989).

O algoritmo de bandas rotativas, dentro dos métodos de simulação, é escolhido pela sua precisão e eficiência computacional. Em suma, este algoritmo consiste em desenhar muitas linhas no espaço, com orientações aleatórias ou, de preferência, quase-regulares, e simulando um campo aleatório unidimensional ao longo de cada linha. Ao escolher adequadamente a função de covariância de tais campos aleatórios unidimensionais, sua superposição fornece um campo aleatório

multidimensional com a função de covariância de destino, cuja distribuição é praticamente gaussiana em virtude do teorema do limite central (Paravarzar, 2015).

O princípio do método consiste em adicionar um grande número de simulações independentes definido na linha de varredura do plano (Figura 7). O valor a ser simulado no ponto $x(x,y)$ em um plano, é a soma dos valores obtidos da projeção do ponto x até a linha simulada em uma dimensão (Marques, 2011).

Este mesmo método também foi empregado em Marcotte (2015), que considerou este método uma alternativa computacionalmente menos exigente.

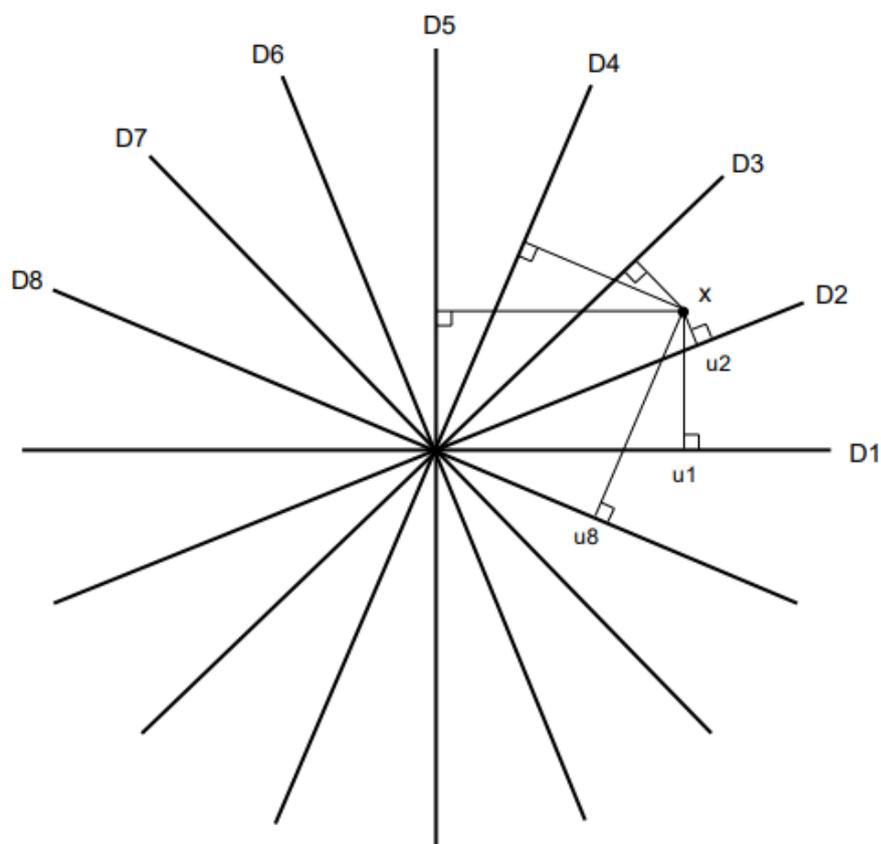


Figura 7 - Princípio de construção do método de bandas rotativas em 2D (Marques et al, 2011).

$$z^*(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1}^{N} z_{1,n}(x_{1,n})$$

Onde:

$Z^*(x)$: valor simulado em um ponto x ;

N : número de linhas que dividem o plano;

$Z_{1,n}$: valor simulado no local $x_{1,n}$.

$x_{1,n}$: local da projeção x_1 na n -ésima linha que divide o plano.

Na simulação por bandas rotativas a idéia é derivar um valor de uma distribuição baseada na teoria associada às funções randômicas multigaussianas. A distribuição condicional de frequência acumulada local é estimada por meio da krigagem simples, a qual define a média e a variância da distribuição. Como raramente as distribuições seguem uma distribuição uniforme, é preciso realizar a transformação dos dados originais para o espaço normal.

Para este estudo foram realizadas 50 simulações para as 4 variáveis em cada uma das zonas. Primeiramente foi criado um modelo de blocos com dimensões um pouco maiores que as zonas e posteriormente, foi feito um polígono de simulação para cada uma das zonas para que não fosse feita a simulação em toda área de grid. Este polígono foi posteriormente redimensionado no arcgis, que possui polígonos de dimensões iguais às das zonas. Lin et al (2017) reportou que quando o número de simulações é maior que 30, as médias das simulações e os desvios padrões eram similares. As simulações são feitas em espaço multigaussiano e, portanto tem seus valores normalizados.

Posteriormente estes valores simulados são retro-transformado para o espaço original, que é o mesmo dos dados amostrais. A simulação foi feita em bandas rotativas com tamanho de célula de 500 por 500 m. O raio de busca de uma amostra para outra foi de 60000 m para a zona 1 e 50000 m para as demais zonas. Como em algumas áreas de cada zona existem poucas amostras, foi necessário ter um valor alto para que toda a área fosse preenchida.

Antes de prosseguir com a análise da incerteza que cada modelo de simulação produz, devemos validar o mesmo para saber se a simulação está correta. Para isso comparamos o variograma gerado pela simulação e o variograma amostral.

Outra forma de validar a simulação é comparando-se os histogramas dos dados amostrais com os histogramas gerados pela simulação. Os dois histogramas devem ser parecidos, com a frequência dos blocos idênticos, com média e desvio padrão equivalentes, conforme a Figura 8a e Fig.8b.

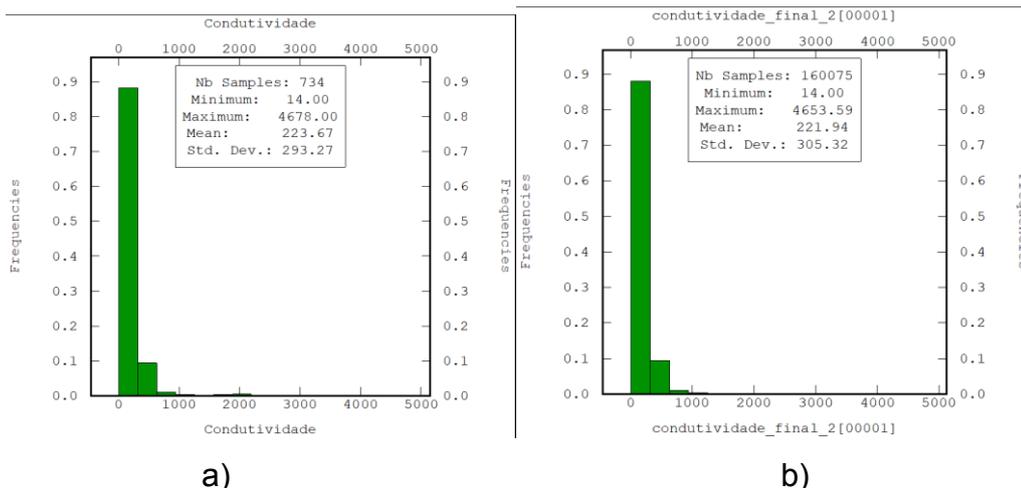


Figura 8 - Comparação dos histogramas da malha amostral da condutividade elétrica e da simulação da condutividade elétrica na zona 3 do SASG a) Histograma da malha amostral da condutividade elétrica; b) Histograma da simulação da condutividade elétrica.

Segundo Folle (2002), a perfeita reprodução é raramente atingida, a menos que se use um banco de dados exaustivo, devido à existência das chamadas flutuações ergóticas, conforme a Figura 9a e Fig.9b. Essas bandas ergóticas representam os variogramas de cada uma das 50 simulações comparada com a variografia dos dados amostrais. O ideal é que a variografia fique no centro das variografias das simulações. Quanto mais dados existirem menor será essa flutuação. Por outro lado, um tamanho de área maior e com maior alcance de variografia aumenta essa oscilação.

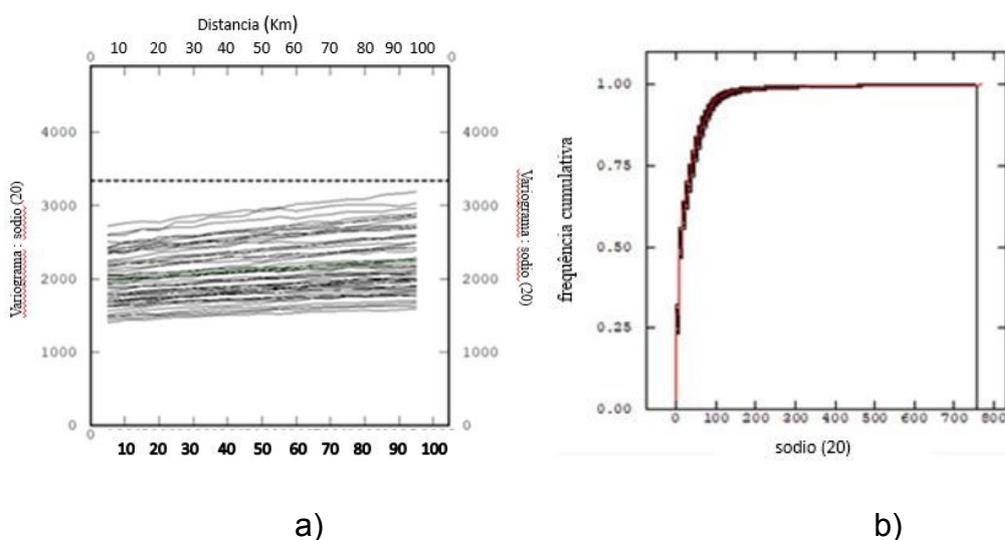


Figura 9 - a) Bandas de simulação na zona 3. b) Histograma das classes de sódio simuladas na zona 3.

O desvio padrão da simulação calcula o desvio da amostra em cada uma das células da simulação para as 50 simulações, e a média das simulações calcula a média dos valores em cada célula nas 50 simulações. Quando os outliers são muito discrepantes em relação a média, as diferenças ficam mais acentuadas. Estes valores são encontrados em zonas com altas concentrações das variáveis porque indicam recarga ascendente e conseqüentemente teores que se afastam da média. Em Karami *et al* (2018), onde o método de krigagem foi utilizado, as regiões onde existe alta variância da simulação é onde existe maior incerteza quanto a probabilidade de ocorrência desses valores. É esperado que esses valores coincidam com as falhas regionais que atravessam cada uma das zonas. A média da simulação é a média dos pontos simulados no entorno da vizinhança. Normalmente a média da simulação e a variância da simulação são bastante próximos. Em casos excepcionais, a variância pode ser diferente da média e indica que a zona possui alta incerteza e não se pode prever com certeza os valores que serão simulados em muitas realizações.

3.7 Lineamentos Estruturais

O INPE disponibiliza em seu site imagens de relevo sombreado, cujos teores de cinza ajudam a definir a altimetria do terreno. Com base nessa altimetria, é possível traçar lineamentos a fim de determinar estruturas regionais e locais. Estas estruturas estão intimamente vinculadas a história tectônica da área de estudo que sofreram por diversos períodos compressivos na borda oeste da Bacia do Paraná e extensivos na borda leste da Bacia durante as etapas iniciais da abertura do Oceano Atlântico. Para esta tese, foram usadas as imagens 30S555RS, 30S585RS, 30S57, 27S525, 28S54RS, 28S555RS, 29S57RS, 29S555RS, 29S54RS, 29S525RS, 29S51, 27S54RS, 27S555RS, 28S51, 28S57RS e 29S585RS, 28S525RS.

Camadas de imagem são na verdade mais usadas para representar fotografias aéreas e imagens gravadas por satélite orbitando a Terra. Os dados representados em uma camada de imagem são baseados em arquivos fonte em quaisquer formatos de arquivos raster de propósito em geral (BMG, GIF, PNG, TIFF, CIB, JPG). Cada pixel é uma proporção quadrada particular. Dentro daquele quadrado, a cor correspondente é determinada pelo comprimento de determinadas feições (linhas, polígonos) que estão contidas dentro deste pixel.

A opção kernel pondera valores na vizinhança por distância a partir da feição de interesse e aplica uma função de kernel para ajustar uma superfície suavemente coberta para cada ponto.

A análise tectônica da área foi desenvolvida através do tratamento de imagens de satélite, visando identificar padrões estruturais do terreno, com base nos métodos utilizados nos trabalhos de Takahashi (1991). As atividades envolveram a produção de uma imagem de relevo sombreado que correspondem à Formação Serra Geral do Rio Grande do Sul, disponíveis no site do inpe. Foi usado uma shape de hidrografia tanto do fuso 21 como do fuso 22 do Rio Grande do Sul como o principal critério para traçar lineamentos geológico-estruturais. Estes lineamentos possibilitaram a elaboração de mapas temáticos de densidade de lineamentos, diagramas de roseta, bem como filtragem por azimute e comprimento, em pequeno porte (<5Km) e grande porte (>5Km). A densidade é feita pelo método kernel no software arcgis. A técnica de contagem é um campo numérico que especifica o número de incidentes em cada local. A hidrografia (Figura 10) foi usada como suporte para o traçamento dos lineamentos. Isso dá mais credibilidade para estes traçados, visto que o efeito da sombra das imagens pode mascarar e criar a impressão de que certas regiões são vales quando na verdade não são. 4.032 lineamentos traçados em todo a Formação Serra Geral tiveram comprimento maior que 5 Km e 9720 menos que 5 Km. Os diagramas de roseta são uma referência para determinar os melhores intervalos para a confecção dos mapas de densidade kernel em cada uma das zonas. Optou-se pelos intervalos mais representativos e com maior frequência nas classes dentro dos diagramas de roseta, que foram demonstrados posteriormente nos mapas de densidade de lineamentos com estes intervalos representativos. Os diagramas de roseta usaram a notação azimutal. O tamanho deste intervalo variou em cada uma das zonas.

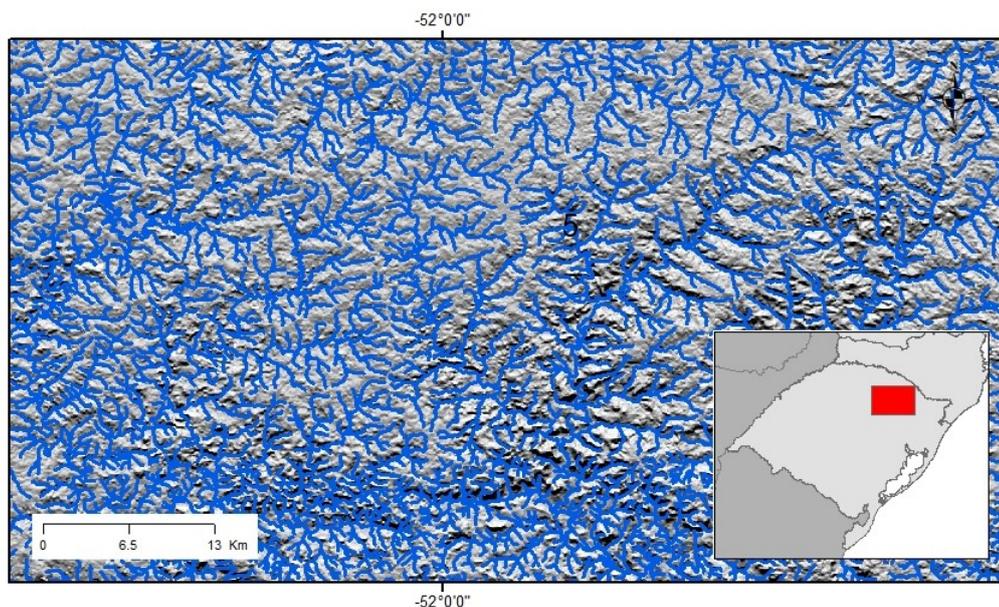


Figura 10 - Relevo sombreado de uma das quadrículas com a hidrografia de apoio para o traçamento das estruturas.

Este campo de contagem é uma área equivalente a um metro quadrado de pixel. Os pontos de entrada são agregados nestes pixels. Existem duas opções para calcular a densidade: a opção Uniforme soma todos os valores dentro da vizinhança e os divide pela área. A opção kernel pondera valores na vizinhança por distância a partir da feição de interesse e aplica uma função de kernel para ajustar uma superfície suavemente coberta para cada ponto. A opção de kernel foi a utilizada para este estudo. Este mesmo método foi desenvolvido no trabalho de Tomasi & Roisenberg (2019).

4 RESULTADOS

4.1 Análise Exploratória dos Dados

Conforme explicado nos capítulos anteriores, o estudo foi realizado em cinco domínios distintos, baseado em questões estruturais. É possível identificar diferenças composicionais entre as diferentes regiões, pois as mesmas possuem diferentes sistemas de falhas com orientação característica em cada uma delas e nos estratos sedimentares, que também contribuem de forma diferente em cada uma dessas regiões em todos os parâmetros.

Além da média, um critério bastante importante a considerar é a assimetria dos elementos em torno da mediana. Distribuições positivas ocorrem quando existem classes com valores mais elevados à direita da mediana e negativa quando existem valores altos à esquerda da mediana. O sulfato, a condutividade, os sólidos totais dissolvidos e o sódio, todos apresentam assimetria negativa. Isso causa um problema na variografia porque os valores extremos dificultam a continuidade espacial das amostras.

Na zona 1, os teores de cloreto intermediários acima de 10 mg/L (40%) (

Figura 11) são significativos. Já o sulfato tem valores irrisórios (28%). Uma camada sedimentar rica em cloreto, provavelmente a Formação Irati, está fornecendo grandes quantidades de cloreto para o SASG, especialmente na zona 1 e na zona 4. Nas outras zonas essa influência de recarga ascendente é inexpressiva. O grupo 2 de K-means apresenta média de cloreto de 50 mg/L. Na zona 2, os teores de cloreto não são tão significativos (

Figura 11), o mesmo acontecendo para o sulfato. Na zona 3, os valores são ainda mais baixos, raramente ultrapassando 10 mg/L. O cloreto tem média de 14 mg/L (Tabela 1) nas zonas 1 e 4. Pode-se ver que o Cloro possui assimetria maior na zona 5 (Tabela 2), com 11, e menor na zona 2, com 2.84. O coeficiente de variação, porém, é maior na zona 4, onde os valores até 6 mg/L são 60% das amostras. No geral, este compartimento é o que apresenta as maiores assimetrias. O sulfato tem valores mais elevados na zona 3 e 5 (

Figura 12) onde existem 16 (5%) e 19 (2%) valores acima de 130 mg/L, respectivamente (Tabela 1 **Erro! Fonte de referência não encontrada.**). A média do

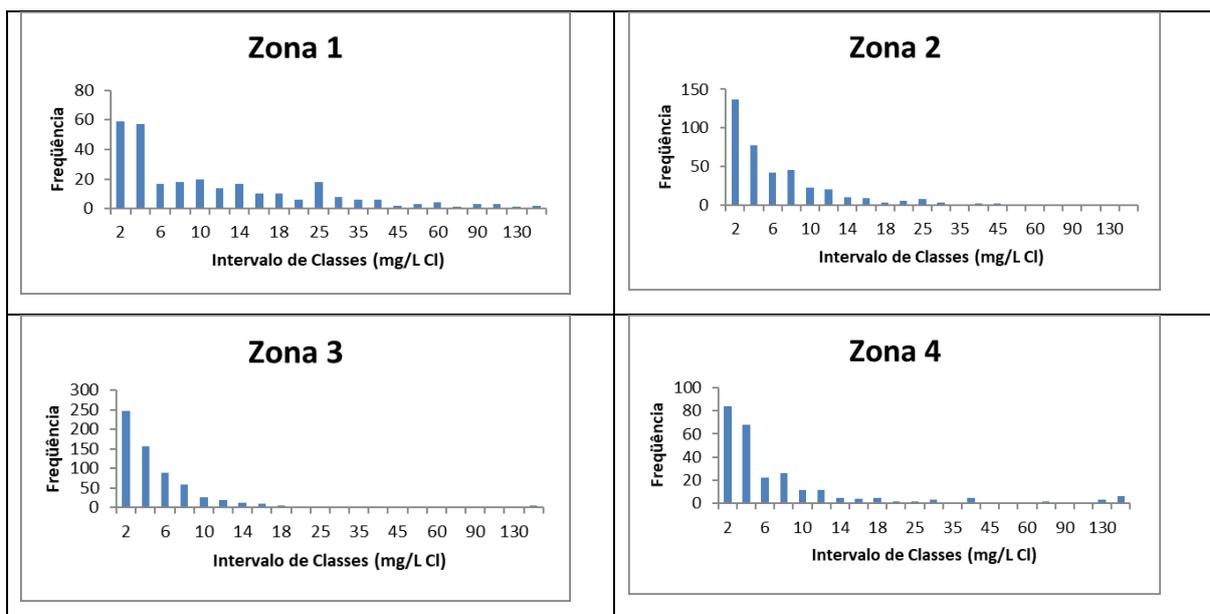
sulfato, porém, é muito mais alta na zona 3, com 24 mg/L contra 14 mg/L na zona 5. Na zona 5, as classes até 10 mg/L tem grande frequência, mas os valores mais altos não estão presentes como na zona 1.

Tabela 1 - Tabela estatística com os dados hidroquímicos das 5 zonas. Alc é abreviação de alcalinidade total e condut a abreviação de condutividade elétrica.

Zonas		Alc. (mg/L)	Ca (mg/L)	Na (mg/L)	SO ₄ (mg/L)	Condut. μS/cm	pH	Cl (mg/L)	Mg (mg/L)
1	média	106,13	20,88	26,3	14,18	258,5	6,9	13,9	7,5
	variância	6619,64	324,56	1465,46	1217,8	34429,56	0,65	419,15	80,75
	Valor max	402,32	92,0	291,0	399,0	1448,0	9,7	145,0	77,0
	quartil s.	157,0	31,0	28,0	12,0	349,0	7,5	16,7	9,0
	quartil i.	32,0	5,14	5,0	1,2	125,6	6,5	2,9	2,0
	mediana	97,7	17,45	11,3	3,7	227,0	6,9	7,5	5,0
2	média	104,31	13,0	29,9	9,81	208,41	7,5	6,0	5,9
	variância	6335,40	131,0	1464,0	1109,0	28713,89	0,99	46,48	13,49
	Valor max	642,35	102,0	219,0	401,0	1900,7	10,6	48,8	23,9
	quartil s.	132,0	18,1	38,6	6580,0	263,75	8,1	7,8	5,8
	quartil i.	52,25	4,6	5,0	1,1	110,05	6,9	2,0	1,2
	mediana	86,0	11,0	13,0	2,4	166,0	7,4	4,0	4,0
3	média	91,85	15,62	33,0	24,35	223,6	7,8	8,4	4,05
	variância	3021,0	460,56	2800,0	871,7	86124,0	1,0	1681,0	13,19
	Valor max	575,0	369,0	771,0	937,0	4678,0	10,7	901,0	21,8
	quartil s.	113,5	20,0	44,0	7,2	235,0	8,4	6,0	21,8
	quartil i.	60,0	6,0	6,72	1,2	126,7	7,1	2,0	1,1
	mediana	87,0	12,4	16,0	3,2	180,2	7,6	3,0	3,2
4	média	94,25	16,51	36,0	23,29	252,0	7,3	14,6	3,5
	variância	106462,0	108,3	6755,0	8851,0	106462,0	0,65	2834,5	7,94
	Valor max	227,0	78,0	832,0	992,0	4208,0	9,4	678,0	16,3
	quartil s.	122,25	23,0	26,0	6,5	264,0	7,8	8,0	4,82
	quartil i.	60,0	8,95	8,0	1,6	134,2	6,8	2,0	1,57
	mediana	87,5	15,0	13,5	3,0	191,7	7,2	3,7	3,0
5	média	88,35	20,5	20,46	14,74	217,8	7,2	8,9	5,6
	variância	2188,4	211,38	995,77	3187,6	32113,0	0,54	378,5	23,43
	Valor max	418,0	182,0	470,0	779,0	2450,0	11,9	364,0	53,95
	quartil s.	114,0	26,15	21,0	6,46	256,5	7,6	9,1	8,0
	quartil i.	57,0	12,0	8,0	1,3	130,15	6,7	2,7	2,2
	mediana	81,3	17,2	12,0	3,0	179,8	7,1	5,0	4,1

Tabela 2 - Desvio padrão, assimetria, coeficiente de variação e curtose das amostras para as 5 zonas.

zonas		pH	Cl	Mg	C.elétrica	Alc.	Ca	Na	SO ₄
1	assimetria	0,15	3,43	3,24	1,41	0,87	1,17	3,30	6,95
	curtose	0,32	14,52	16,22	3,78	0,65	1,41	15,0	65,98
	CV	0,11	1,47	1,19	0,7	0,76	0,86	1,45	2,46
	desvio p.	0,8	20,47	8,98	185,5	81,36	18,01	38,28	34,89
2	assimetria	0,66	2,84	1,81	4,16	1,91	2,31	1,94	8,29
	curtose	0,17	11,12	4,65	30,83	6,67	11,69	3,63	83,96
	CV	0,13	1,13	0,62	0,81	0,76	0,88	1,27	3,39
	desvio p.	0,99	6,78	3,67	169,45	79,59	11,45	38,26	33,30
3	assimetria	0,4	9,69	1,7	9,88	2,02	9,21	6,64	6,41
	curtose	-0,42	114,02	4,47	127,5	11,34	128,16	72,25	46,13
	CV	0,13	2,08	0,9	1,31	0,59	1,37	1,60	3,83
	desvio p.	1,01	17,52	3,63	293,4	54,96	21,46	52,91	93,36
4	assimetria	-0,18	9,23	1,58	8,12	0,6	1,24	6,12	8,0
	curtose	1,67	102,21	3,31	88,0	-0,11	4,4	47,51	76,57
	CV	0,11	3,64	0,8	1,29	0,48	0,11	2,28	4,03
	desvio p.	0,81	53,24	2,81	326,28	46,16	10,4	82,18	94,08
5	assimetria	0,64	11,0	2,36	5,87	1,13	2,99	6,88	8,44
	curtose	2,00	157,0	12,43	53,60	3,40	20,57	67,76	84,59
	CV	0,10	2,18	0,86	0,82	0,52	0,70	1,54	3,82
	desvio p.	0,73	19,45	4,84	179,20	46,78	14,53	31,55	56,45



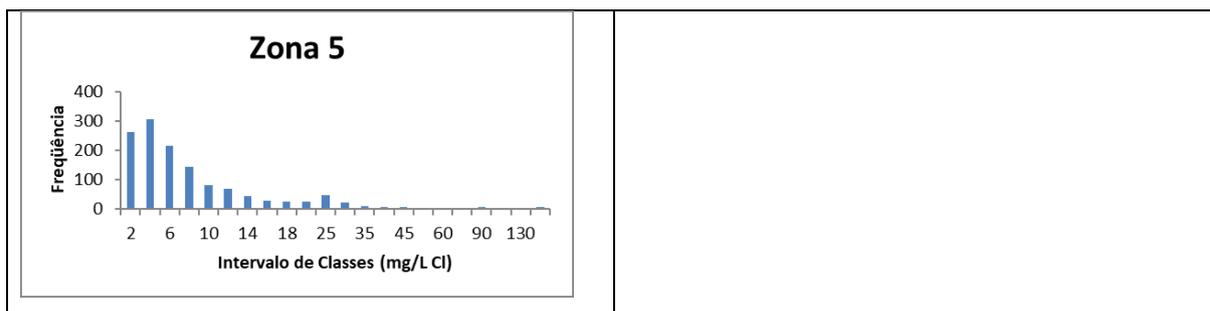


Figura 11 - Histogramas do cloreto das zonas 1,2,3,4 e 5, que estão na ordem em que estão apresentadas da esquerda para a direita em mg/L.

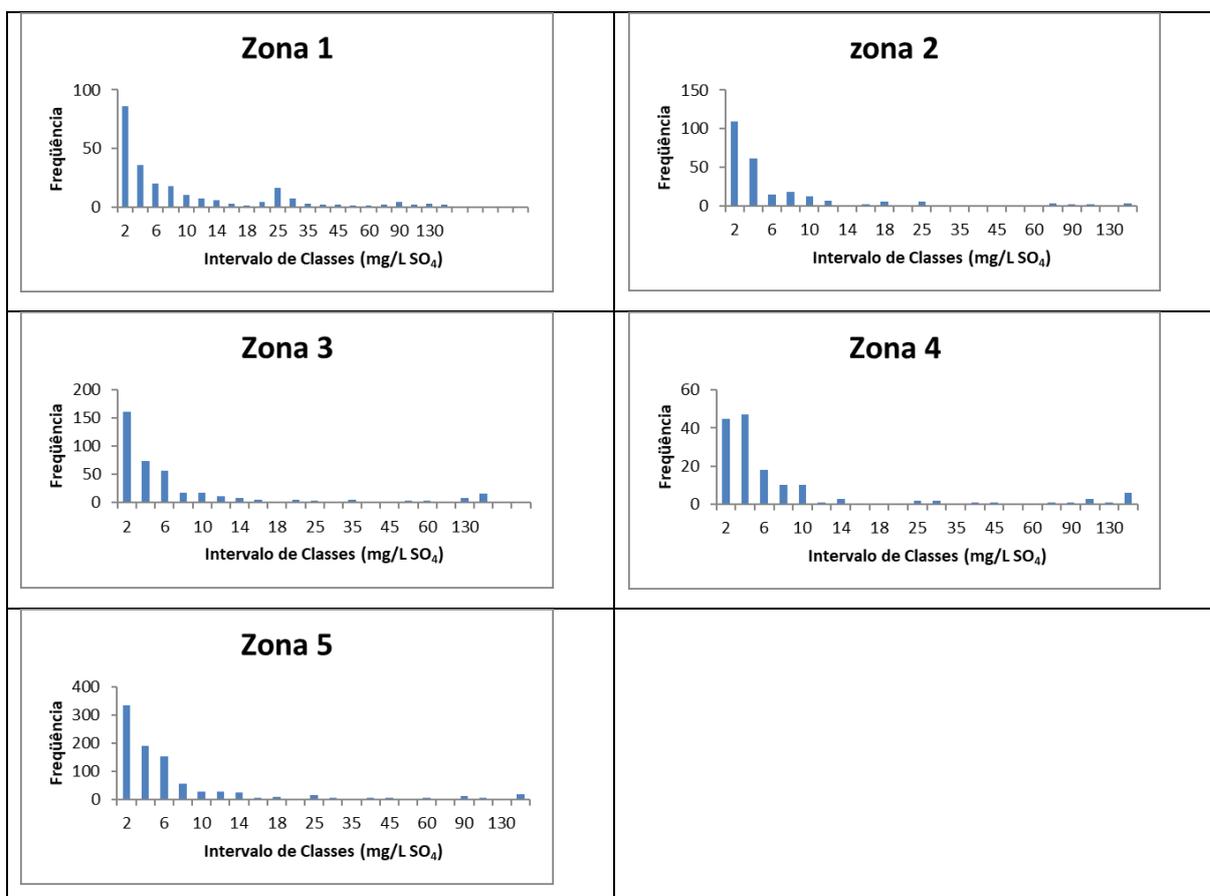


Figura 12 - Histogramas do sulfato das zonas 1,2,3,4 e 5, que estão na ordem em que estão apresentadas da esquerda para a direita em mg/L.

A alcalinidade tem comportamento bastante heterogêneo nas zonas. Por exemplo, na zona 2 existem 27 amostras com mais de 250 mg/L (5%), na zona 3 existem poucos valores acima de 170 mg/L, mas uma alta concentração de amostras entre 75 e 11mg/L (

Figura 13). De fato, a alcalinidade tem média mais alta na zona 1 e 2, com 106 e 104 mg/L, respectivamente.

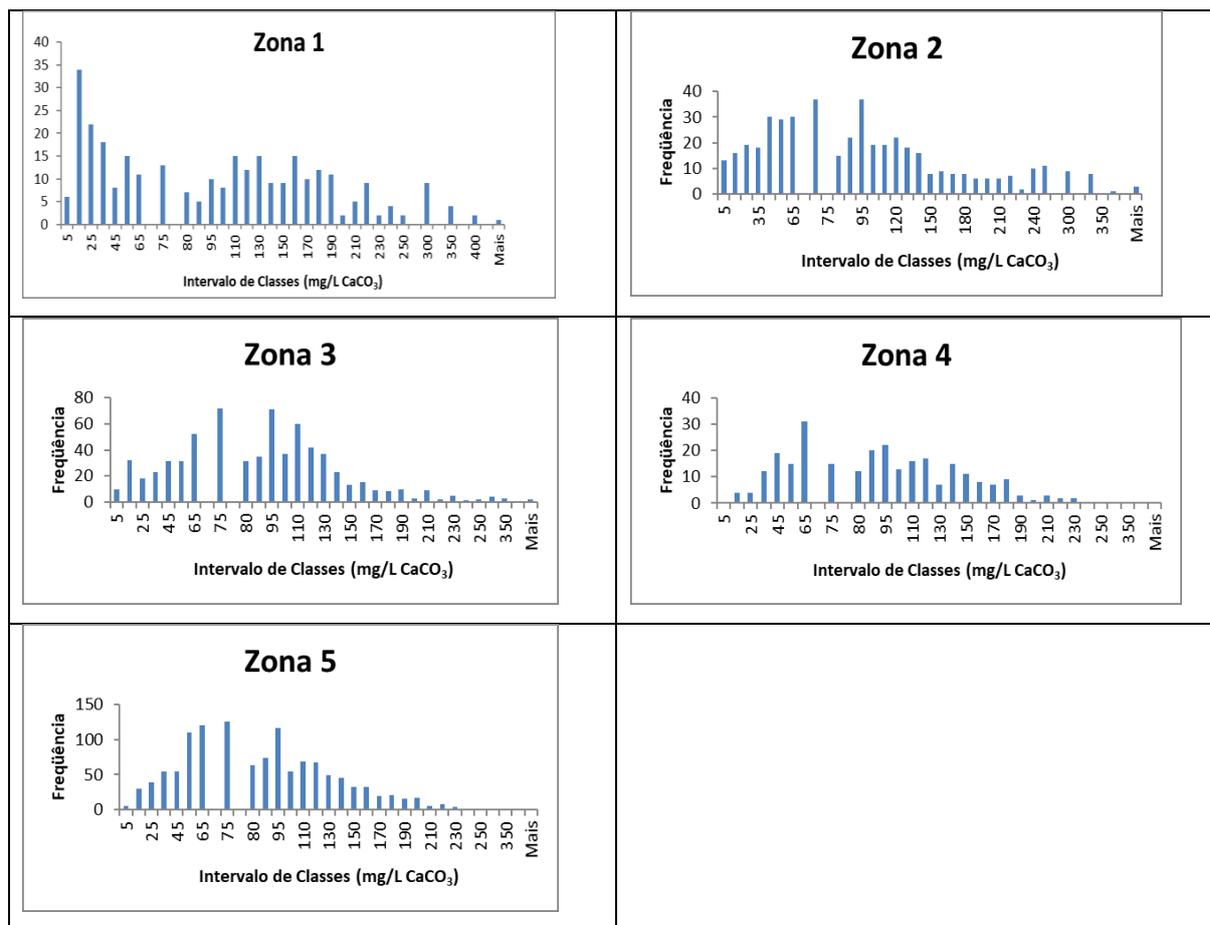


Figura 13 - Histogramas da alcalinidade nas zonas 1, 2, 3,4 e 5, que estão na ordem em que aparecem da esquerda para a direita, em mg/L de CaCO_3 .

O sódio possui valores menores que 10 mg/L com porcentagem das amostras entre 55 e 40% em todas as zonas. Na zona 3 (

Figura 14), o quartil superior é de 44 mg/L, o que indica que esta zona apresenta valores muito altos acima de 75% da distribuição (Tabela 1) O coeficiente de variação mais alto é na zona 4 (Tabela 2) com valor de 2,28, mostrando o quanto as concentrações podem ser erráticas. Na zona 1, o sódio tem apenas 10 amostras acima de 100 mg/L. Na zona 2, temos 28 amostras acima de 100 mg/L, mas apenas 2 tem valores superiores a 170 mg/L. Isso pode ser explicado pelo fato de algumas falhas, principalmente as maiores, sendo que algumas delas são usadas como referência para delimitar as zonas hidroquímicas. As falhas menores que envolvem essas grandes falhas também são importantes para distribuírem essa ascensão de águas salinizadas. De fato, na análise por K-means o grupo mais salinizado (grupo 2) apresenta uma variância de 968. Essa mesma tendência acontece nas outras zonas onde os grupos mais salinizados tem maior variância de sódio. O sódio possui

muitos valores altos na zona 3, com 28 amostras acima de 100 mg/L, sendo 10 amostras acima de 170 mg/L. Na zona 5, temos 19 amostras acima de 100 mg/L, sendo 9 acima de 170 mg/L. Na zona 5, existem poucos valores acima de 60 mg/L (5%), enquanto na zona 4 esse valor é de 15%. A zona 3 tem 17% dos valores acima de 60 mg/L. Esses altos valores estão intimamente ligados as grandes estruturas e estão bem representados pelos grupos 2 de K-means em cada zona.

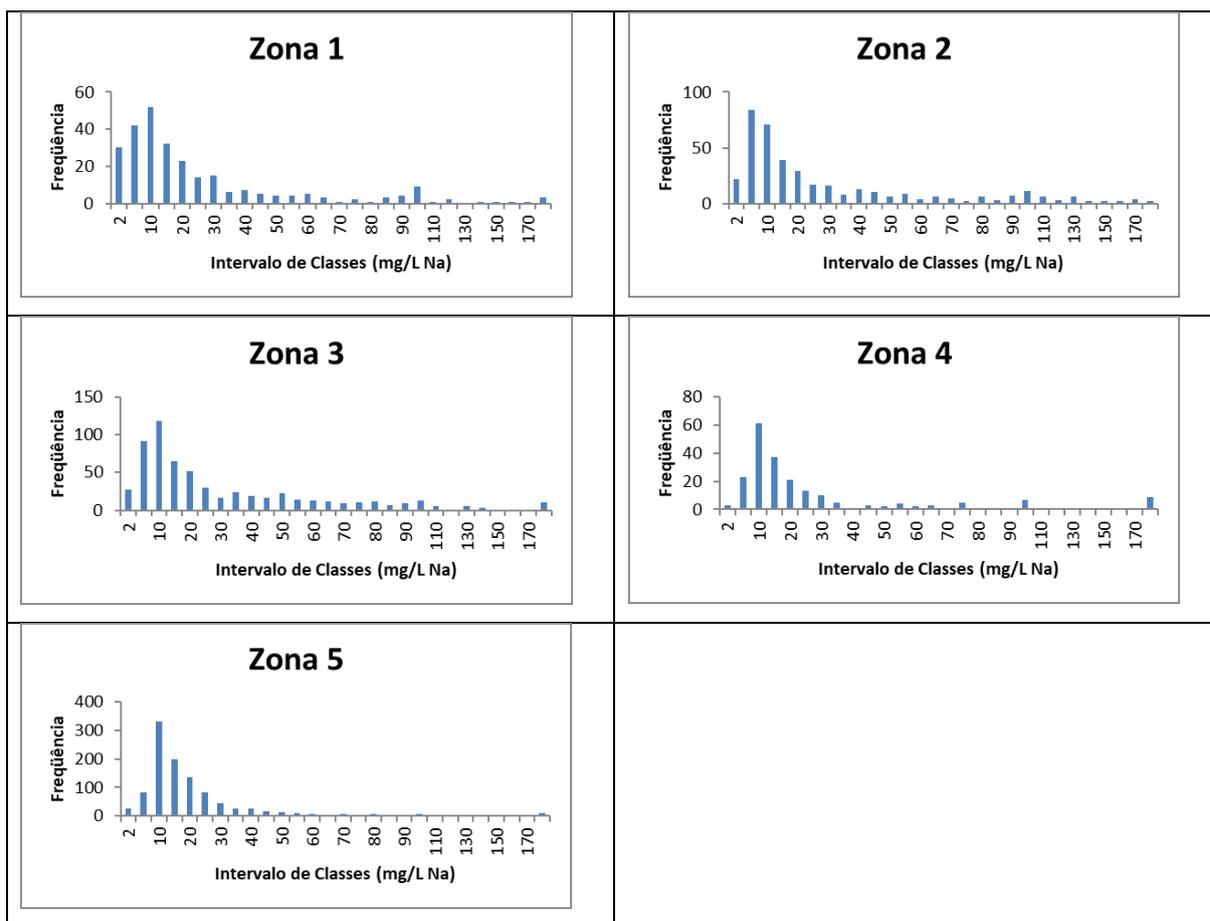


Figura 14 - Histogramas do sódio para as zonas 1,2,3,4 e 5 em mg/L, que estão na ordem em que aparecem da esquerda para a direita.

A condutividade elétrica possui variância muito alta na zona 4 (106000), onde os valores superiores a 300 mg/L são 20% das amostras. Esse mesmo comportamento ocorre para o sódio. Como sódio e condutividade apresentam correlação muito alta este valor é esperado. Na zona 3 (

Figura 15), este valor é de 15%. Na zona 1, 35% das amostras tem mais de 300 mg/L. O quartil superior da zona 1 é o mais elevado para a condutividade (349 mg/L). A variância da zona 1 (Tabela 1) é maior porque grande parte dos valores

concentram-se entre 100 e 280 mg/L (78%). A variância elevada está muito relacionada à grandes estruturas e indica claramente que existe um grau de mistura alto. Quanto maior a variância verificada, maior é o indicativo de mistura.

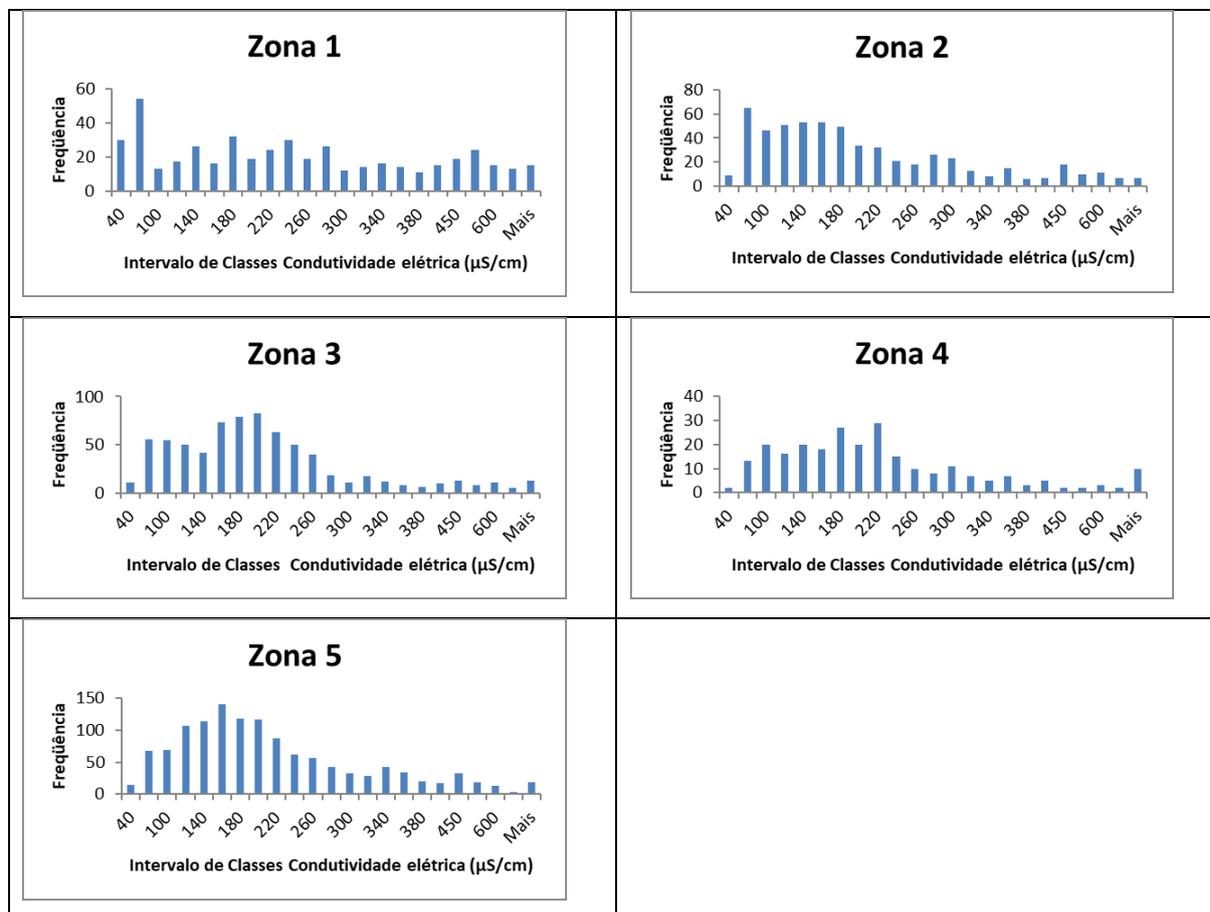


Figura 15 - Histogramas da condutividade elétrica das zonas 1,2,3,4 e 5 em µS/cm, que estão na ordem em que aparecem da esquerda para a direita.

Os sólidos totais dissolvidos possuem uma distribuição bem homogênea na zona 3, indicando que nesta zona não existe tanta discrepância entre os valores baixos e altos. O mesmo acontece nas zonas 1 e 2. Na zona 1 a frequência de valores até 80 mg/L é muito alta em relação às outras zonas (20% das amostras). Nas zonas 4 e 5, existe uma aglomeração de valores entre 100 e 200 mg/L, com 60% das amostras tendo este intervalo de valores.

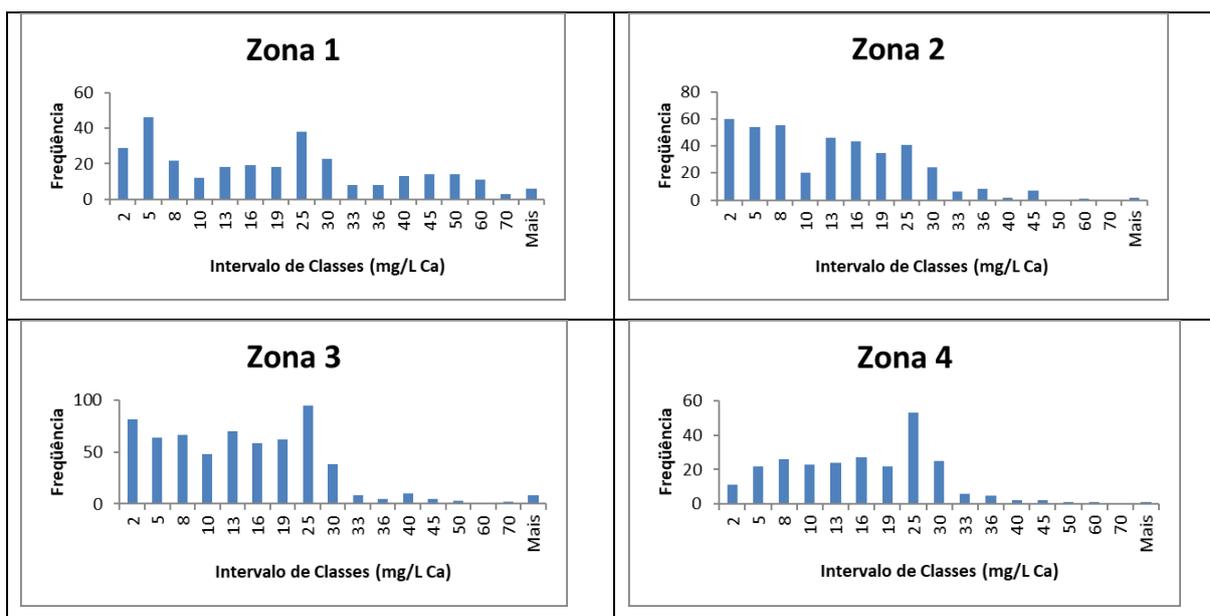
O cálcio tem alguns valores muito altos nas zonas 1,3 e 5 (

Figura 16). Na zona 2 nenhum valor ultrapassa 45 mg/L e na zona 4, 99% das amostras estão abaixo de 50 mg/L. As maiores assimetrias estão nas zonas 3 e 5 (Tabela 2) e a maior variância está na zona 3. Essa alta variância do cálcio nas zonas 3 e 5 são representadas principalmente pelos membros intermediários na

análise de Kmeans que representam a mistura de águas de aquíferos diferentes. Da mesma forma o magnésio também tem variância mais alta nesses membros intermediários. O magnésio apresenta maior variância na zona 1 (80.7) na malha amostral. A média também é alta (7.5) (Tabela 1). Os grupos mais salinizados nessas zonas apresentam menor variância do cálcio e do magnésio. O sódio, por outro lado tem a maior variância nos grupos mais salinizados, o que corrobora a mistura com outros aquíferos por recarga ascendente.

O magnésio é o elemento com menor variância entre todos, sendo que em nenhuma das zonas a variância ultrapassa 80, e o CV mais alto está na zona 1, onde o cálcio e magnésio tem altas concentrações no grupo mais salinizado. A zona 1 é a que apresenta a maior variância por se tratar da zona onde o cálcio e o magnésio estão bastante presentes nas águas subterrâneas profundas e que fazem esta variância aumentar na medida em que pode haver uma diferença muito grande entre as amostras. Essa tendência é acompanhada pelo cálcio, que tem uma variância de 324. Nesta zona é onde existe a maior média de magnésio, com 7,5. A assimetria na zona 1 também é a maior (superior a 3). Existem valores mais altos nas zonas 1 e 2, com muitas amostras acima de 18 mg/L. As zonas 3 e 4 tem valores muito baixos de magnésio, principalmente a zona 4 (

Figura 17).



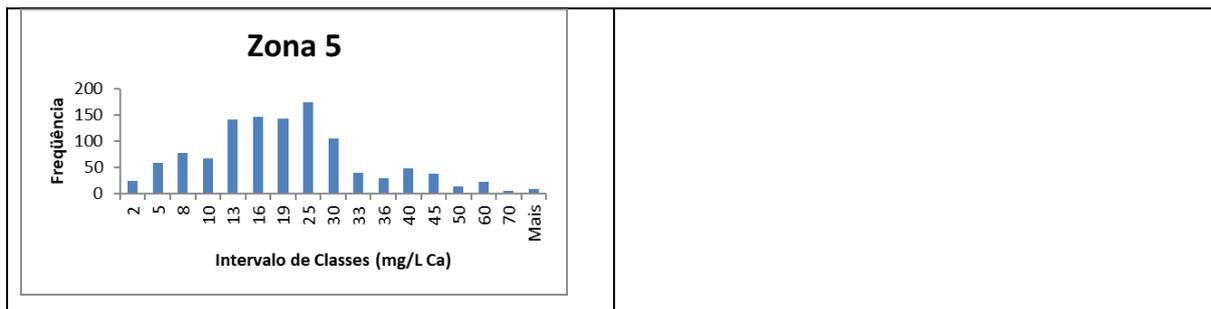


Figura 16 - Histogramas do cálcio em mg/L nas zonas 1,2,3,4 e 5 em mg/L, que estão na ordem em que aparecem da esquerda para a direita.

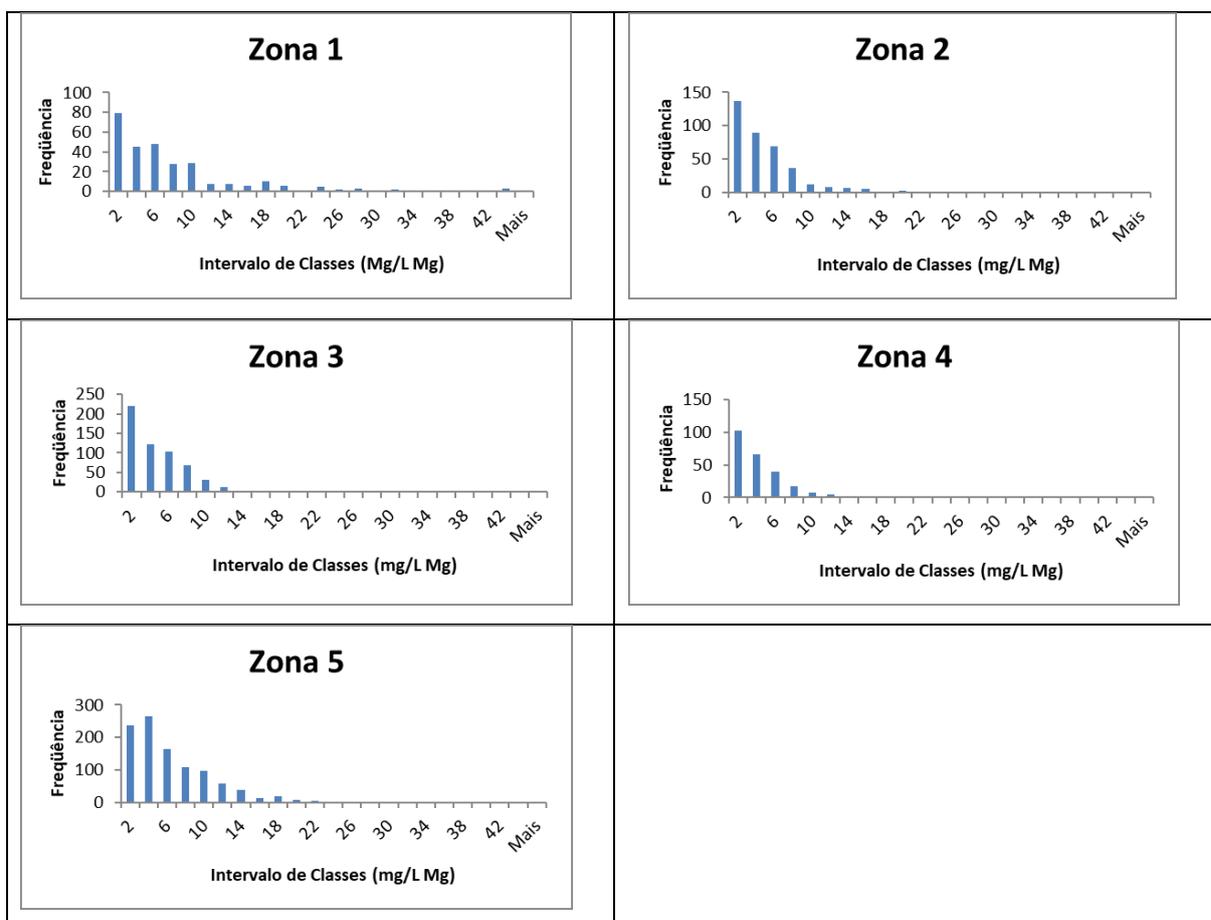


Figura 17 - Histogramas do magnésio em mg/L nas zonas 1,2,3,4 e 5 em mg/L, que estão na ordem em que aparecem da esquerda para a direita.

Usando desvios padrões para os diferentes elementos plotados no mapa, podemos ter uma idéia de zonas anômalas. O sódio, o sulfato, a alcalinidade e o cloreto geralmente seguem o mesmo padrão das simulações e tem maiores valores próximos as grandes falhas que atravessam todas as zonas.

O pH segue mais ou menos o mesmo padrão. Na zona 1, os valores altos de pH concentram-se ao longo da ZFLC, nos municípios de Uruguaiana e ao longo do

Rio Uruguai e próximo a zona 2, no entorno do município de Bossoroca, também sob a influência da ZFLC. Na zona 2, os altos valores concentram-se próximo ao município de Santa Rosa, Três de Maio e Horizontina. Valores altos também são encontrados próximos a Santo Ângelo, que é cruzado pela ZFLC. Na zona 3, temos valores altos em torno das falhas gravimétricas e LRA-Sc. Na zona 4, os altos valores coincidem com falhas de grande porte NE e NW, que em teoria são as mais abertas e profundas e que possibilitam a circulação de água de unidades localizadas abaixo do SASG. Da mesma forma, na zona 5 os valores de pH mais elevados concentram-se ao longo do LRA, mas valores altos também são verificados em zonas de mais alta potenciometria quando o cálcio também for alto.

O cloro (Figura 18) tem altos valores de desvio padrão próximo ao Rio Uruguai nas zonas 1,2 e 3. Na zona 1, próximo a São Vicente do Sul também existe uma alta concentração de cloro. Na zona 2, Horizontina e Bossoroca tem altas concentrações. Na zona 3, temos altas concentrações de cloro em Frederico Westphalen. Na zona 4, nas cidades de Agudo e Santa Cruz do Sul, existe uma concentração muito alta de cloro. Na zona 5, vemos alto cloro em Caxias e Lajeado. O cloro tem um caráter muito mais localizado em relação ao pH e altos valores são encontrados exclusivamente junto ao rio Uruguai, ao longo da LRA, do LG e do SFMM. Na zona, os teores de cloro são baixos mesmo junto ao rio Uruguai e mostra uma baixa concentração de cloro nas unidades sedimentares da região.

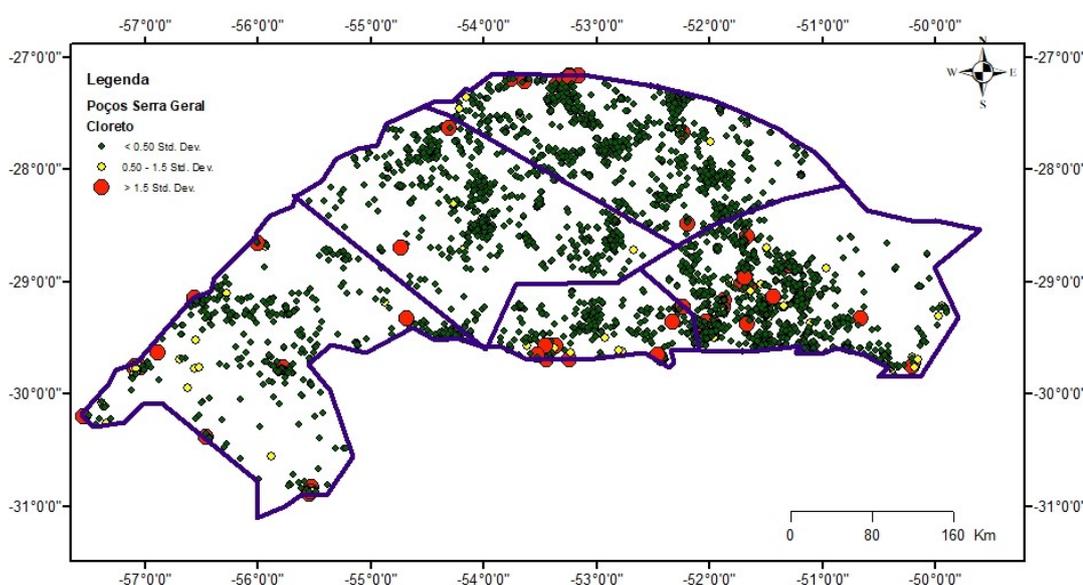


Figura 18 - Mapa de desvio padrão do cloro nas 5 zonas.

O sulfato (Figura 19) tem comportamento bastante semelhante ao cloro. Na zona 2, existem valores altos de desvio padrão próximos a Jari, Horizontina e Três de Maio. Na zona 4, altos valores de sulfato são encontrados em Venâncio Aires. Na zona 5, Novo Hamburgo tem valores altos de sulfato. Na zona 5, o sulfato acompanha o cálcio quanto a seus valores elevados ao longo do LRA. Porém, o sulfato tem valores altos apenas ao longo deste lineamento, enquanto o cálcio tem valores altos no sul da zona, em Novo Hamburgo e Igrejinha (Figura 20). O lineamento Bento Golçalves também está diretamente ligado a altos valores de cálcio. Em relação ao cloro, o sulfato tem menos amostras na zona 1 próxima a Uruguaiana e mais amostras na zona 2, no entorno de Santa Maria e Três de Maio.

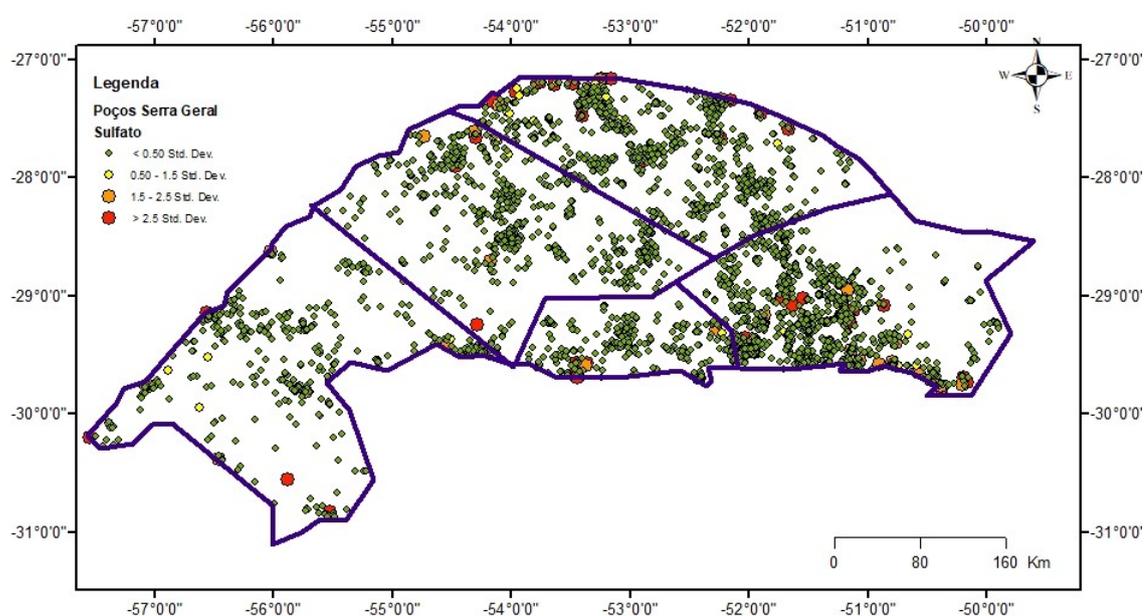


Figura 19 - Mapa do desvio padrão do sulfato nas 5 zonas.

Cálcio e Magnésio (Figura 21) também tem altos valores de desvio padrão nas mesmas localidades que o sulfato e o cloro. Na zona 5 e 3 altos valores são encontrados mesmo onde a potenciometria não é favorável, indicando que o intemperismo de calcita em amígdalas do basalto é suficiente para fornecer estes elementos em solução. Na zona 1 o SFSL onde os teores acima de 2,5 de desvio padrão estão alinhados. Em Uruguaiana e Itaqui os altos valores também aparecem. De forma geral, nas outras zonas os valores altos mais ou menos acompanham os altos valores de sódio. Isso demonstra que os mesmos locais com valores anômalos

de sódio têm valores anômalos de cálcio e magnésio. Algumas exceções acontecem. O sul da zona 5 tem valores altos de magnésio e cálcio, mas baixos de sódio. Na parte oeste da zona 4, existem valores baixos de cálcio e magnésio, enquanto os teores de sódio são altos. Da mesma forma, o leste da zona 3 tem valores altos de cálcio e magnésio, enquanto o sódio é baixo. Podemos dizer que o sódio é controlado por algumas poucas falhas, enquanto o cálcio e o magnésio também podem ser controlados por tais falhas, mas tem uma maior distribuição dentro de cada zona.

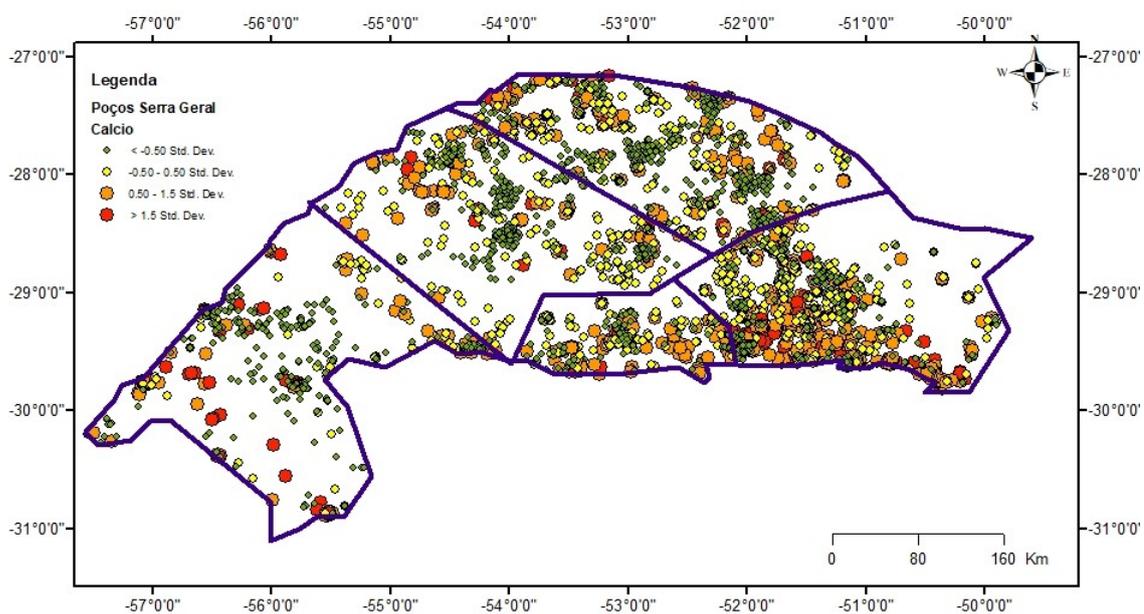


Figura 20 - Mapa de desvio do cálcio para as 5 zonas

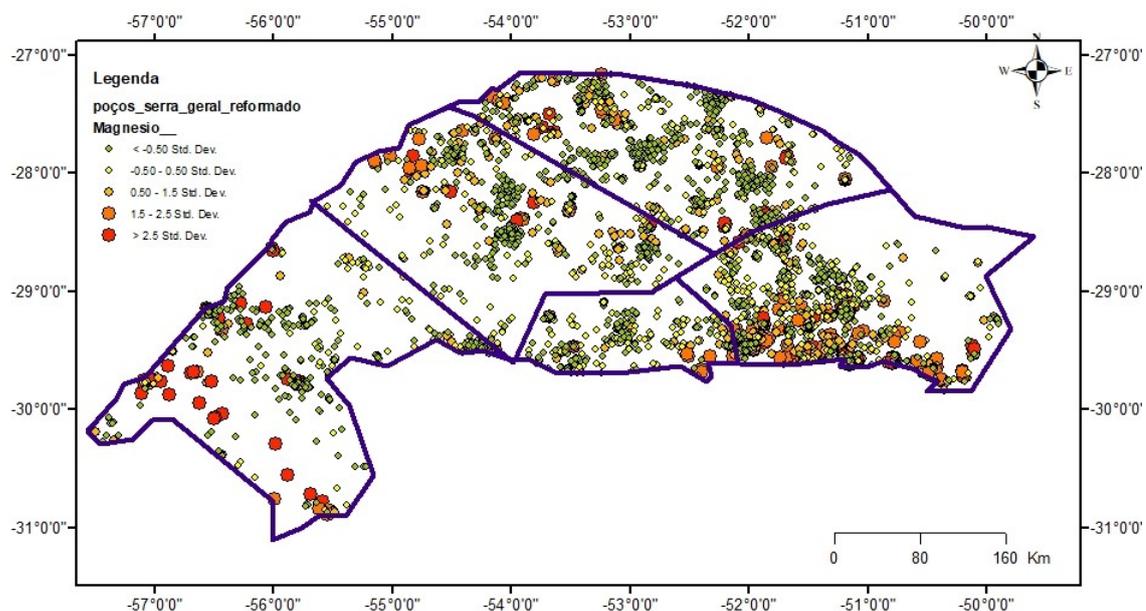


Figura 21 - Mapa de desvio padrão do magnésio para as 5 zonas.

A malha amostral segue o mesmo padrão da simulação de sódio que será mostrado num capítulo subsequente. Na zona 3 (Figura 22), os altos valores de desvio padrão de sódio acompanham as falhas LRA-Sc e falha Gravimétrica. Na zona 1, os altos valores encontram-se próximo ao Rio Uruguai. Da mesma forma, na zona 2 os valores altos estão perto da Rio Uruguai, próximo a cidade de Santa Rosa. Na zona 4, os altos valores seguem a estrutura LRA na parte leste de orientação NE e LSMM de orientação NW na parte oeste. Na zona 5, temos os altos valores ao longo do LRA e próximo ao litoral ao longo da FT-P.

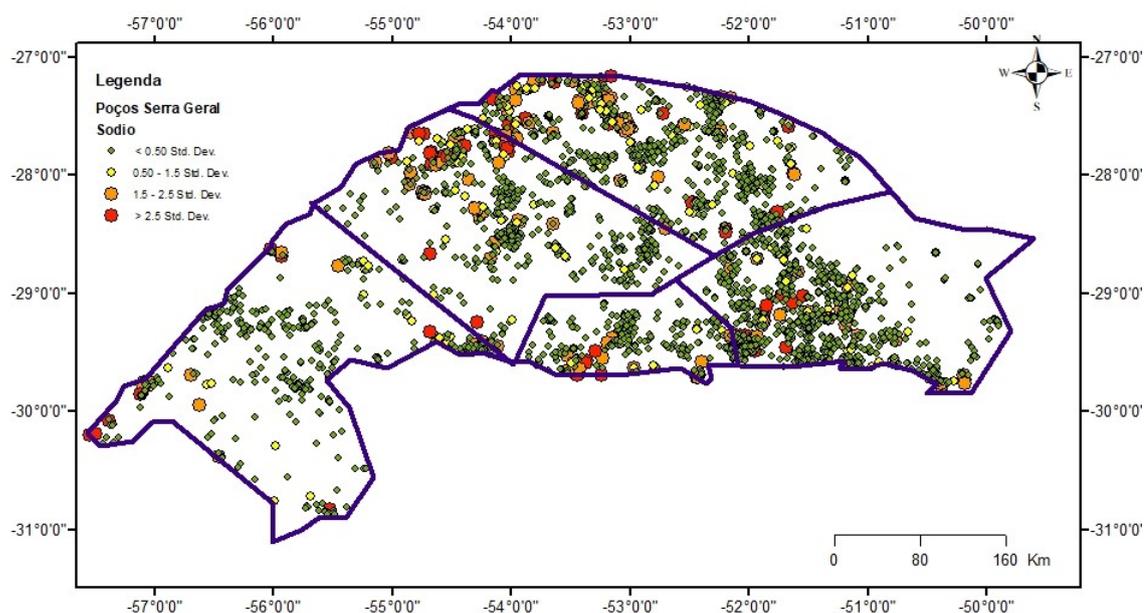


Figura 22 - Mapa de desvio padrão para o sódio para as 5 zonas.

A vazão não parece corresponder as áreas de alto sódio, cloro e sulfato (Figura 23). Isso comprova que as estruturas que fazem aumentar a vazão, não são as mesmas que trazem aqueles elementos ao aquífero do SASG. As vazões não dependem da potenciometria para serem altas, ao passo que o sódio, o cloro e o sulfato dependem. Talvez se a potenciometria do SAG coincidissem com a do SASG em todas as áreas, poderíamos ter uma maior coincidência entre a os dados de vazão e destes elementos. A vazão também depende estruturas abertas para terem altas. Era esperado que as mesmas estruturas que trazem salinidade para o SASG fossem as mesmas que tem capacidade específica acima da média. A Dorsal de Canguçu e o SFTA-P, que não interferem muito nos índices de salinidade tem um papel de destaque na vazão de poços.

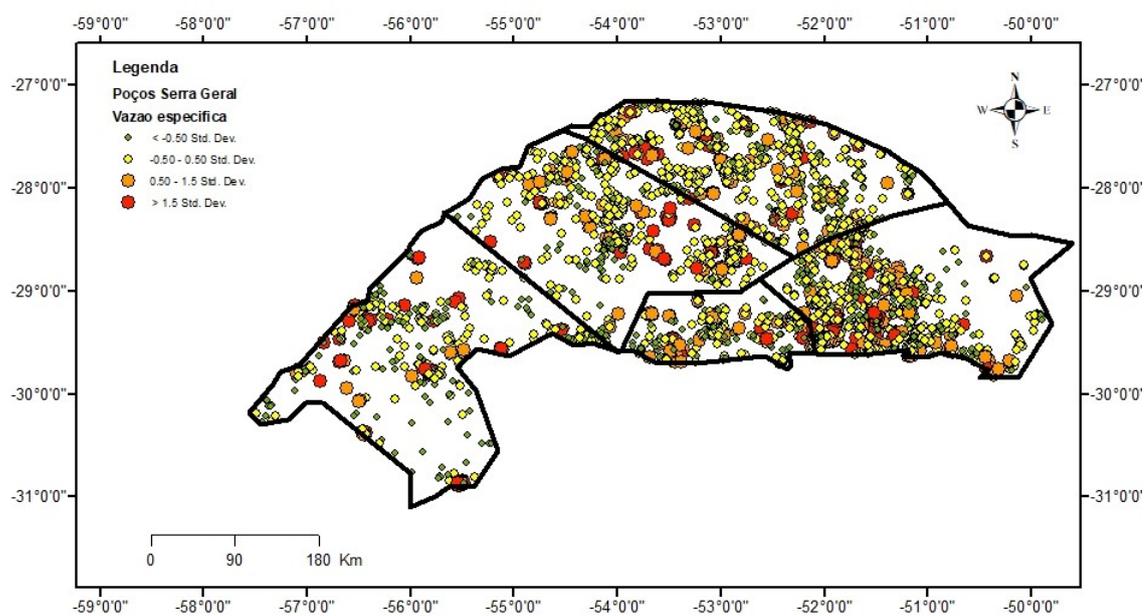


Figura 23 - Mapa de desvio padrão para a vazão para as 5 zonas

Na zona 2, a alcalinidade (Figura 24) tem altos valores de desvio padrão em Porto Xavier, Três de Maio e Horizontina tem valores muito anômalos de alcalinidade. De forma geral, a alcalinidade segue o mesmo padrão do sódio e tem concentrações mais altas onde a potenciometria é favorável. Podemos dizer que a alcalinidade tem um comportamento intermediário entre o sódio e o cálcio, sendo mais restrito que o cálcio em relação a abrangência dos altos valores, mas menos restrito em relação ao sódio nesta abrangência.

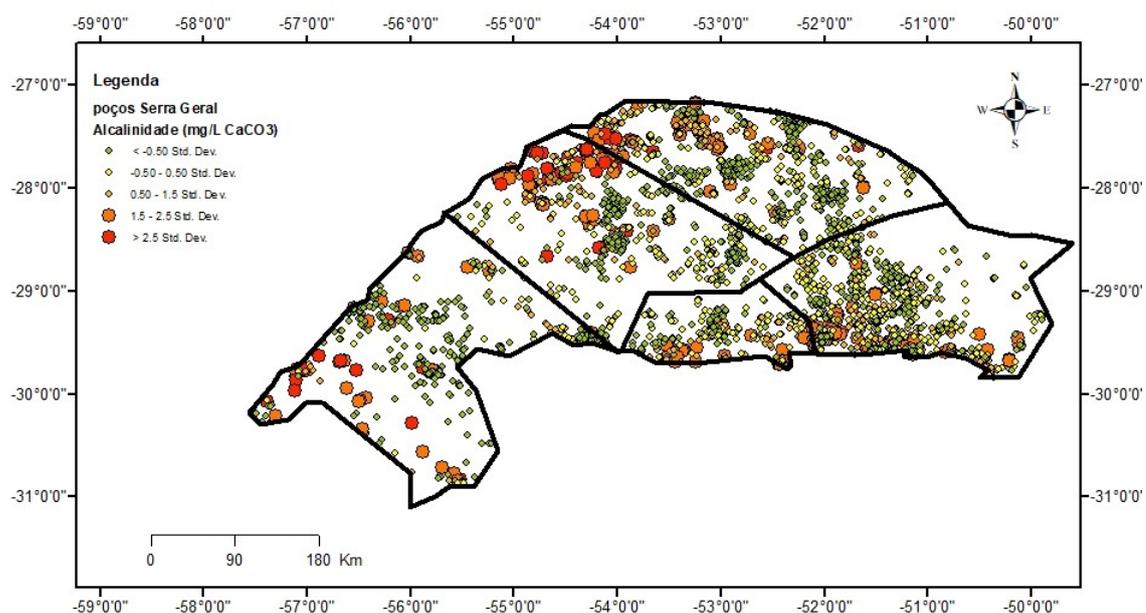


Figura 24 - Mapa de desvio padrão da alcalinidade

4.2 Análise de Componentes Principais, Hidroquímica e Kmeans

A relação entre a composição química da água os fluxos de água, podem ser considerados de duas formas: (1) diferenças entre tipos de fluxos de água e (2) mudanças químicas dentro do fluxo. A área desses fluxos é governada pela topografia na bacia de drenagem pela profundidade deste fluxo. Bacias com grande profundidade terão fluxos regionais, que atravessam vários quilômetros ou até centenas de quilômetros, ao passo que camadas finas cercadas por aquitardos terão fluxos mais locais. O fluxo regional tem recarga em zonas altas da Bacia e descarga em zonas baixas da bacia.

A composição química do aquífero é uma função da mineralogia do aquífero e a taxa pela qual a água move-se pelo sistema. Em fluxos locais, dificilmente as águas tem composição diferente das águas mais superficiais, onde domina o íon bicarbonato, seguindo a sequência de Chebotarev:



Esta sequência apenas estará completa se minerais que contenham sulfato e cloreto estaejam presentes no aquífero. Isto apenas acontece em sistemas regionais em bacias que contenham evaporitos. A evolução de cátions é mais variável que a dos ânions devido a processos de troca, precipitação e outros processos.

A composição química da água em fluxos que percolam em múltiplas camadas pode ser bem variável. A maior variabilidade acontece em sequências de rochas sedimentares (Kehew, 2000).

Alguns minerais reagem muito mais rapidamente que outros quando em contato com a água. A gipsita e a halita são bons exemplos de minerais que rapidamente entram em equilíbrio com a água. Outros minerais, porém, demoram muito para atingir este equilíbrio em baixas temperaturas. Plagioclásio, piroxênio e albita são bons exemplos. Muitas vezes os estes minerais (principalmente os feldspatos) podem se tornar praticamente insolúveis e tem a relação com a água restritas às superfícies externas dos minerais. Por outro lado, sais e sulfatos são de forma geral muito solúveis e tem sua dissolução facilmente controlada pelo fluxo de água subterrânea, enquanto os carbonatos são um pouco menos solúveis (Appelo & Postma, 2005).

Durante o movimento da água subterrânea por diferentes rochas e solos, solutos são trazidos ao contato de superfícies de minerais. As reações e processos que acontecem entre os solutos e estes minerais tem vários nomes. Quando o processo envolve a transferência de soluto da solução para o sólido, recebe o nome de sorção. Neste caso não ocorre precipitação porque uma nova estrutura não é formada na superfície. Quando um íon substitui outro íon que estava na superfície do mineral, ocorre o processo conhecido como “troca de íons”. Existem muitos casos em que a troca de íons pode mudar a composição da solução, como por exemplo a troca de Ca por Na, que é muito comum nos aquíferos sedimentares da Bacia do Paraná. A superfície de alguns tipos de partículas em contato com a água subterrânea reage com a solução porque eles desenvolvem uma carga. Esta carga pode ser desenvolvida de duas maneiras: (1) substituição isomórfica de um cátion por outro e (2) reações que envolvem grupos funcionais com íons em solução. A carga devido a substituição é fixa, enquanto a carga dos grupos funcionais são variáveis e dependem do pH. Substituições com cargas fixas são significativas apenas em argilas que possuem estrutura 2:1. Quanto aos grupos funcionais, eles podem ser internos ou externos dependendo da sua ligação com a estrutura do mineral. Em Em grupos funcionais externos, os grupos funcionais não estão tão fortemente ligados a superfície do mineral e possibilitam a substituição de seus íons por outros que estão em solução. A substituição de Ca por Na é bastante comum neste processo. A carga variável depende do pH da solução. Em soluções mais

básicas, ocorre substituição de cátions preferencialmente devido a aquisição de carga negativa na superfície.

Um dos processos mais comuns em águas subterrâneas é a troca de sódio por cálcio e magnésio em solução. As condições necessárias para que isto aconteça incluem a presença de minerais de carbonato e argilas com abundante sódio disponível para ser trocado

O aumento da concentração de Ca por causa da dissolução de gipso faz com que a calcita precipite. A quantidade de CO_3^{-2} diminui à medida que a calcita precipita, e isto provoca a dissolução de dolomita e um aumento de Mg^{+2} . (Apello & Postma, 2010).

A concentração de Ca^{+2} aumenta a raiz cúbica da pressão de CO_2 . Esta relação tem uma consequência importante. A mistura de duas águas que estão em equilíbrio com a calcita mas possuem diferente pressão de CO_2 produzem uma água com uma composição subsaturada em relação à calcita e este processo causa a dissolução de calcita e o aumento da quantidade de Ca nas águas subterrâneas.

$$m_{\text{Ca}^{+2}} = \sqrt[3]{10^{-6.0}[\text{P}_{\text{CO}_2}]/4}$$

Os diagramas de dispersão e os valores de PCA mostram os principais padrões de hidroquímica e as relações entre as variáveis. O grupo 2 é representado nos diagramas de dispersão como um quadrado vermelho em todas as zonas; o grupo 1 é representado como um triângulo amarelo em todas as zonas e o grupo 3 como uma lozango azul em todas as zonas. As análises de PCA são indicativas de comportamento em cada zona, mas não são capazes de prever a correlação em cada grupo Kmeans, pois essa correlação é diluída em todos os grupos ou concentrada em apenas um dos grupos. A (Tabela 3) mostra as médias para todos os grupos nas 5 zonas. O grupo 2 possui alta concentração de cálcio apenas na zona 1, onde o valor médio é próximo a 56 mg/L. Nas outras zonas, o cálcio apresenta conteúdo inferior a 24 mg/L.

Tabela 3 - Concentrações médias dos grupos em cada zona

Zona		Ca (mg/L)	HCO ₃ (mg/L)	Na (mg/L)	Mg (mg/L)	SO ₄ (mg/L)	Cl (mg/L)
1	Grupo 1	36,0	180,8	38,8	11,4	13,5	14,1
	Grupo 2	55,5	255,7	59,6	28,3	51,7	54,4
	Grupo 3	11,2	48,98	10,30	3,94	3,87	8,90
2	Grupo 1	34,00	127,72	16,29	12,43	3,98	15,02
	Grupo 2	3,85	205,25	90,57	1,33	6,70	5,32
	Grupo 3	12,28	74,11	15,82	3,76	2,75	3,80
3	Grupo 1	17,21	86,47	20,33	4,67	8,67	5,07
	Grupo 2	3,37	157,57	80,64	1,00	17,53	3,85
	Grupo 3	15,69	75,77	13,08	5,29	4,24	3,80
4	Grupo 1	25,75	116,49	19,62	6,18	5,86	6,31
	Grupo 2	7,35	176,28	129,78	0,97	73,56	56,20
	Grupo 3	13,08	65,19	14,61	2,16	2,16	5,55
5	Grupo 1	43,44	162,21	27,02	10,95	31,82	11,34
	Grupo 2	23,34	101,99	41,53	3,23	24,82	11,22
	Grupo 3	22,72	102,07	10,99	10,95	7,12	7,11
	Grupo 4	11,53	61,34	11,64	3,09	4,21	4,60
	Grupo 5	24,86	56,16	43,95	9,08	54,18	37,50

Tabela 4 - Variância das variáveis nas 5 zonas

Zona		Ca	HCO ₃	Na	Mg	SO ₄	Cl
1	Grupo 1	267,78	2658,35	997,10	66,32	360,10	92,54
	Grupo 2	707,88	7112,19	582,02	397,17	1210,64	859,95
	Grupo 3	89,64	1374,26	144,94	10,67	28,29	175,57
2	Grupo 1	113,37	2801,09	134,77	20,99	14,76	131,94
	Grupo 2	12,61	3124,57	968,86	2,17	32,57	15,64
	Grupo 3	50,64	1415,75	229,24	4,94	16,40	10,02
3	Grupo 1	83,36	1278,71	278,96	7,25	727,33	22,47
	Grupo 2	10,8	2813,23	916,59	1,60	2040,57	23,84
	Grupo 3	64,69	1242,77	199,19	10,78	142,66	10,11
4	Grupo 1	45,88	1310,23	275,51	8,14	97,91	60,09
	Grupo 2	61,93	616,91	9525,96	0,82	10357,00	8725,21
	Grupo 3	52,48	760,72	132,88	1,21	3,47	56,35
5	Grupo 1	432,41	1931,64	698,87	11,49	8846,49	87,02
	Grupo 2	135,10	1993,09	2670,37	3,93	5355,45	589,48
	Grupo 3	68,08	1030,84	26,69	24,69	196,71	39,57
	Grupo 4	21,99	713,55	87,55	2,99	113,81	19,53
	Grupo 5	166,68	1395,15	5965,12	20,15	17561,94	5073,72

Pelo diagrama da (Figura 25), fica claro que o sódio e o sulfato fazem parte de uma mesma variável sintética na zona 1, denominada de nova componente principal. O magnésio, o cálcio e a alcalinidade ficam bem próximos. A condutividade

ficou à parte das outras variáveis e forma um grupo sozinho. O cálcio e a alcalinidade estão reunidos numa mesma componente como é esperado por trabalhos anteriores sobre o comportamento das águas subterrâneas da da Bacia do Paraná. A solubilidade de cálcio está muito vinculada à presença de espécies carbônicas como: H_2CO_3 , HCO_3^- e CO_3^{2-} (Bittencourt, 2003). As três primeiras componentes explicam 85 % da variabilidade original. Este é um valor considerado satisfatório porque explica quase toda a variabilidade original dos dados depois da criação de variáveis independentes. Este resultado mostra que sulfato, cloreto e sódio possuem a mesma proveniência de estratos sedimentares profundos e não podem ser explicados pelo intemperismo do basalto.

Depois de ser feita o PCA, estes escores foram usados para gerar os grupos do método de Kmeans. Apenas na zona 5 optou-se em usar-se o método de dendrograma porque Kmeans deu resultados pouco satisfatórios.

Na zona 1, temos três grupos gerados; o grupo 1,2 e 4. O grupo 3 teve poucas amostras e teve que ser desconsiderado. A correlação do Ca + Na x sulfato + alcalinidade do grupo 3 é de 0,44; no grupo 1 é de 0,29, e no grupo 2, de 0,51.

Na zona 1, no segundo escore de PCA (Figura 25) o magnésio possui um escore de 0,46

Tabela 5) na segunda componente, enquanto o cálcio tem 0,5. O sódio tem um comportamento parecido com o sulfato, enquanto o cloreto diverge um pouco desses dois. As três primeiras componentes explicam 85 % da variabilidade original. Este é um valor considerado satisfatório porque explica quase toda a variabilidade original dos dados depois da criação de variáveis independentes. Todas as variáveis têm um escore parecido na primeira componente e divergem apenas na segunda componente. A segunda componente é que de fato divide as variáveis em grupos distintos. Este resultado mostra que sulfato, cloreto e sódio possuem a mesma proveniência de estratos sedimentares profundos e não podem ser explicados pelo intemperismo do basalto.

Tabela 5 - Componentes 1,2 e 3 da zona1

	1	2	3
Ca	-0.36	0.5	-0.004
Na	-0.33	-0.51	-0.39
Sulfato	-0.33	-0.44	0.18
Cl	-0.33	-0.16	0.76
Mg	-0.35	0.46	0.15
Alc.	-0.43	0.17	-0.43
Conduc.	-0.47	-0.1	-0.099

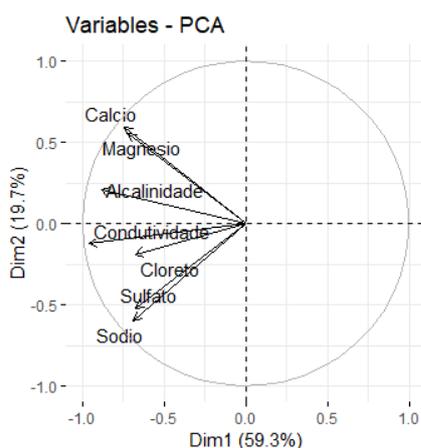


Figura 25 - PCA escores para a zona 1

O grupo 2 na zona 1 apresenta média altas para todas as variáveis e pode explicar a similaridade delas na componente 1. A primeira componente explica 60 % da variabilidade original dos dados, número bastante significativo. O sódio tem baixíssima afinidade com a alcalinidade. Apenas o grupo 3 apresenta alguma correlação do sódio com a alcalinidade (Tabela 6). No diagrama do Ca + Na versus a alcalinidade, pouca alteração acontece em relação ao diagrama do Ca x alcalinidade. O grupo 1 tem certa correlação entre o sódio e o magnésio, sugerindo que o mesmo vem junto com o sódio de zonas intermediárias, provavelmente o aquífero Pirambóia. O magnésio pode ser encontrado nas unidades permianas como

Rio Bonito e Irati, mas também no SAG (Pirambóia) que possuem dolomitas em sua composição (Caetano & Tai, 2003). A correlação do Ca com a alcalinidade (Figura 26a) é alta apenas no grupo 2 e não é esperado um processo alto de troca neste grupo. O sulfato pouco interfere na correlação do cálcio com a alcalinidade (Figura 26b). O Cálcio tem 31 amostras com valores acima de 50 mg/L. O grupo 2 apresenta a maior concentração de todas as variáveis, incluindo Mg e Ca (Tabela 4). O Ca tem melhor correlação com a alcalinidade em comparação com o magnésio no grupo 2. O sódio não tem correlação com nenhum grupo (Figura 27a). O aporte de cálcio em águas mais salinizadas pode ser explicado pela presença de carbonatos, que estão sendo intemperizados, especialmente nas formações Teresina e Irati (Freitas, 2017). A correlação do cálcio adicionado ao sódio com a alcalinidade (Figura 27b), diminui em relação a correlação do cálcio com a alcalinidade no grupo 2.

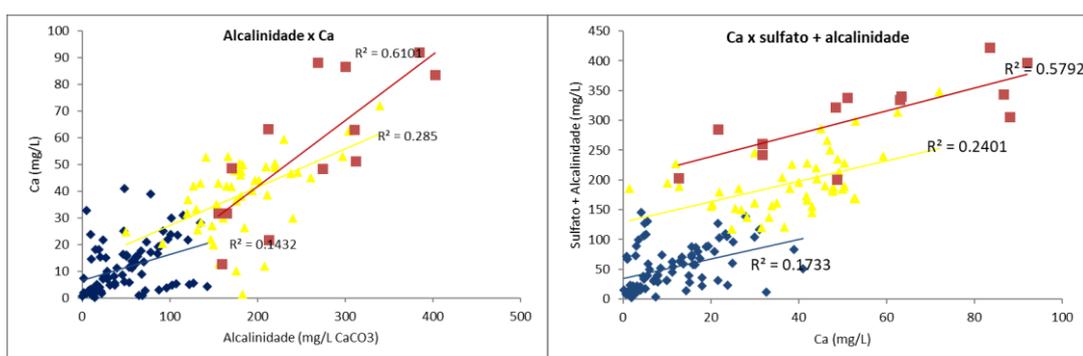


Figura 26 - a) Diagrama de dispersão entre alcalinidade e Ca na zona 1; Grupo 2 (vermelho), grupo 1 (amarelo), grupo 3 (azul); b) Ca x sulfato + alcalinidade para a zona 1(b). Grupo 2 (vermelho), grupo 1(amarelo), grupo 3 (azul)

O grupo 3 possui provavelmente três subgrupos: um com excelente correlação entre alcalinidade e cálcio (tendência central). Esse grupo está relacionado à circulação nos basaltos e à dissolução de calcita nas amígdalas nos basaltos da Formação Serra Geral. Outro subgrupo tem alta alcalinidade e baixo cálcio (tendência mais baixa) com origem pouco clara, mas pode ter a ver com a dissolução de CO_2 . Este subgrupo pertence ao SASG. E outra com alto cálcio e baixa alcalinidade (amostras sem correlação). Isso pode estar relacionado à dissolução do gesso (que ocorre nas amígdalas de basalto em algumas regiões)

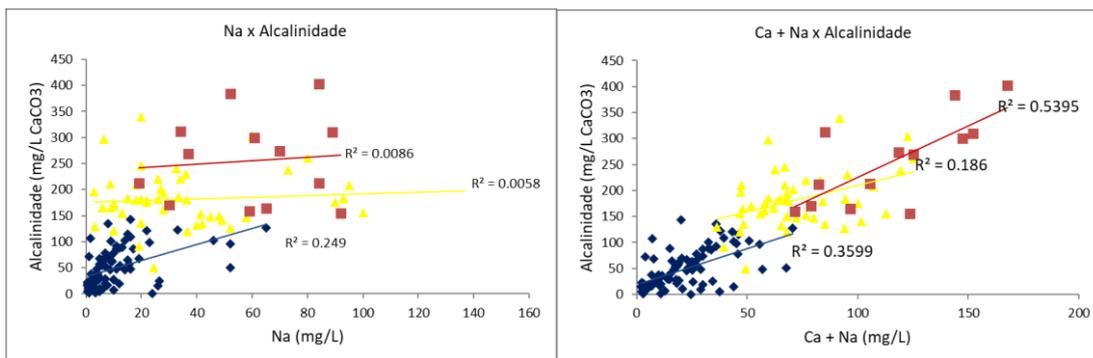


Figura 27 - a) Na x alcalinidade para a zona 1; b) Ca + Na x alcalinidade para a zona 1. Vermelho (grupo 2), azul (grupo 3), amarelo (grupo 1)

A zona 2 é a que apresenta a maior diversidade hidroquímica entre as zonas. O segundo componente (Figura 28) possui pontuações semelhantes para Ca, Mg e Cl e é representativo do grupo 1 de Kmeans. Sódio, alcalinidade e sulfato (Tabela 6) são muito próximos e têm sua afinidade comprovada pelo grupo 2 de Kmeans.

Tabela 6 - Escores 1, 2 e 3 para a zona 2.

	1	2	3
Ca	0.37	-0.49	0.072
Na	-0.55	-0.14	0.15
Sulfato	-0.34	-0.19	-0.7
Cl	0.1	-0.44	-0.17
Mg	0.35	-0.51	0.07
Alc.	-0.39	-0.27	0.64
Conduc.	-0.38	-0.39	-0.14

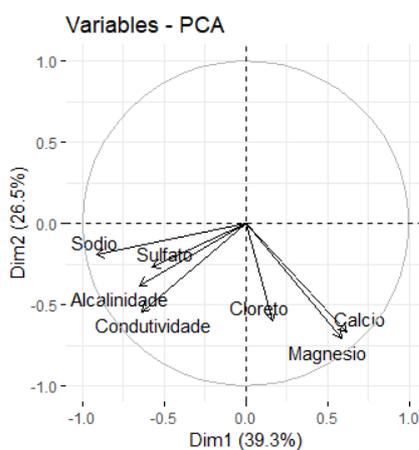


Figura 28 - PCA escores para a zona 2

Na zona 2, o sódio tem relação direta com a alcalinidade no PCA, o que pode indicar um ambiente de alta troca entre o sódio e o cálcio, enquanto nas outras regiões o cálcio possui maior correlação com a alcalinidade. Na zona 2, a relação entre sódio e a alcalinidade nos grupos de Kmeans é de baixa a intermediária, mas maior que na zona 1. O grupo 2 tem a maior correlação entre Cálcio e magnésio, porém os valores de ambos são muito baixos e provavelmente refletem o intemperismo de carbonatos nos basaltos. Neste grupo existe o fato curioso de a alcalinidade não possuir qualquer correlação com o cálcio. Isso confirma que os carbonatos não são a principal fonte de cálcio para o grupo 2. O diagrama de dispersão de Ca + Na x sulfato + alcalinidade demonstra que o grupo 1 tem alto potencial de troca de Ca por sódio. Em Meng & Maynard (2001), a análise de agrupamento demonstrou que existem dois grupos principais. Um composto de $\text{HCO}_3\text{-Mg-Ca-K-SiO}_2$ e o outro, de $\text{SO}_4\text{-Na-Cl-F}$, com grupos menores intermediários. Quando existe influência apenas do SAG sobre o SASG, apenas o primeiro desses grupos aparece. No diagrama de Ca x sulfato + alcalinidade (Figura 29a) a correlação no grupo 1 aumenta bastante, indicando a presença de sulfato em membros intermediários.

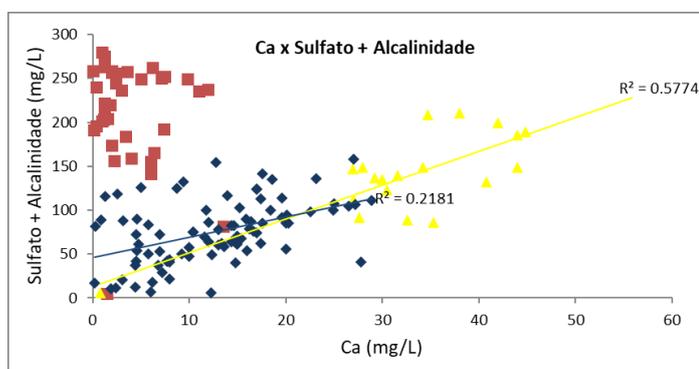


Figura 29 - a) Sulfato + alcalinidade x Ca na zona 2; b) Mg x Ca na zona 2. Vermelho (grupo 2), azul (grupo 3), amarelo (grupo 1)

A dissolução de anidrita ou gipsita causa precipitação de calcita na direção do fluxo pelo efeito do íon comum. A diminuição do pH e o aumento da pressão de CO_2 devido a precipitação de calcita leva a subsaturação da solução em relação a dolomita. A dissolução da dolomita é incongruente por causa da precipitação simultânea de calcita. Esta reação incongruente é chamada de dedolomitização. A concentração de sulfato aumenta na direção do fluxo até que a saturação de gipsita

ocorra. A presença de sulfato, portanto gera a dissolução de dolomita (Kehew, 2000). Esse processo ocorre nas unidades sedimentares que tem gipsita, como Irati, Rio Bonito. O grupo 1 está recebendo águas do Irati por causa dessa alta correlação do sulfato com o cálcio.

Provavelmente a gipsita é a fonte de Ca para esta zona. Mesmo que o Irati seja considerado um aquífero, a presença de fraturas permite a circulação de água por estes locais. Um dos Membros do Irati (Assistência) é hipersalino, e neste ambiente, gipsita, analcima, pirita e barita são comuns (Holanda *et al.*, 2019). Esta baixa correlação no grupo 3 indica que carbonatos de magnésio não estão presentes no SASG em comparação com as unidades estratigráficas do SAG e pré-SAG. A correlação de Cálcio x alcalinidade no grupo 1 é de apenas 0,19. Porém, quando vemos o diagrama de dispersão de Ca + Na x sulfato + alcalinidade, essa correlação salta para 0,57, indicando ser o sulfato uma importante fonte de cálcio, associada à troca de Na por Ca. O grupo 2 é o único que tem alguma correlação do Cálcio com o sulfato (0,3) O grupo 1 possui intermediária concentração de magnésio (12 mg/L de média) e cálcio (34 mg/L de média), conforme a Tabela 3. O grupo 1 possui correlação entre Ca e Mg de 0,42. O grupo 2 tem 0,50 e o grupo 3, 0,25 (Figura 30). A dolomita não está presente na cimentação do Botucatu ou do Pirambóia. A presença de alta correlação de Ca e Mg no grupo 2 mostra a clara influência de unidades sedimentares como Irati e Rio Bonito.

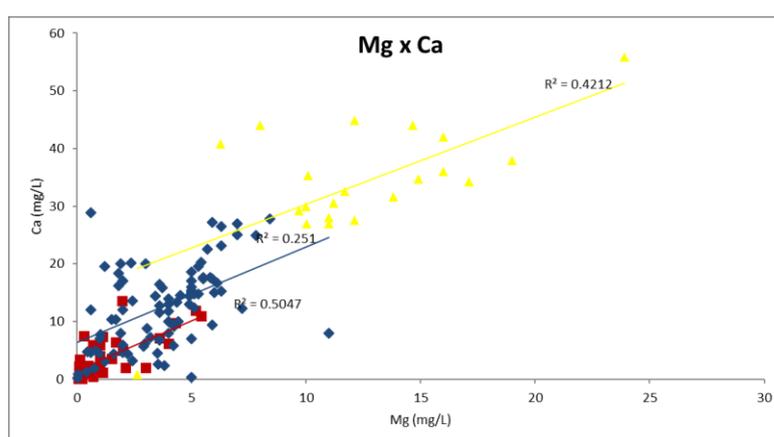


Figura 30 - Mg x Ca na zona 2. Vermelho (grupo 2), azul (grupo 3), amarelo (grupo 1)

O sódio tem correlação baixa com a alcalinidade no grupo 1 (Figura 31a) e baixa nos grupos 2 e 3 (0,26 e 0,36, respectivamente). Na análise de Ca + Na x alcalinidade (Figura 31b), o grupo 2 não se altera, enquanto o grupo 1 salta de

correlação para 0,64. Portanto, concluímos que o grupo 1 tem muita troca de cátions nas argilas enquanto o grupo 2 não as possui. O grupo 3 é um grupo restrito ao SASG. O grupo 2 provavelmente é derivado de uma unidade rica em sódio e sulfato, mas com ausência de carbonatos. O cálcio tem alta correlação com a alcalinidade nos grupos 1 e 3 porque os valores de cálcio no grupo 2 são muito baixos.

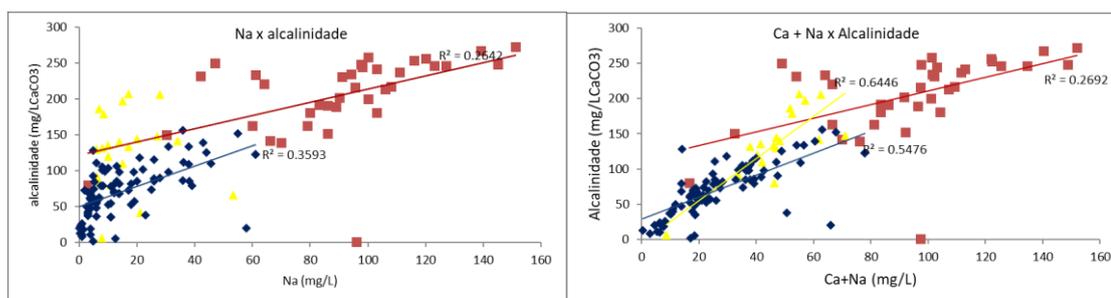


Figura 31 - a) Diagrama de dispersão do sódio x alcalinidade; b) Ca + Na x alcalinidade para a zona 2(b). Vermelho (grupo 2), azul (grupo 3), amarelo (grupo 1)

O grupo 2 (Tabela 3) é oriundo de águas mais profundas, por ter maiores concentrações de sódio e baixas de sulfato (90 mg/L e 6,70 mg/L de média, respectivamente). O cloreto está presente mais fortemente no grupo 1 com média de 15 mg/L. Esta concentração mais alta não condiz com o SASG. A unidade que contribui com cloreto, não contribui com sulfato que tem apenas 4 mg/L neste grupo. Segundo Freitas (2016), a Formação Rio Bonito possui águas tipicamente cálcicas-cloretadas. Provavelmente o grupo 1 tem a assinatura deste aquífero. No grupo 2, a correlação entre o cálcio e o magnésio é nula. O sulfato pouco interfere nesta correlação. Nesta zona, os locais propícios à salinidade do SASG estão restritos às zonas próximas ao rio Uruguai onde as cotas potenciométricas do SASG ficam entre 0 e 300. Onde as cotas do SASG ficam entre 300 e 500 não existe recarga ascendente. O fluxo ascendente é perpendicular ao sistema de falhas Terra de Areia Posadas ao Sul e do lineamento do Rio Forqueta mais ao norte. O mapa de simulações mostra que o sódio ascende num sentido norte sul nesta região, e mais ou menos segue as linhas de fluxo do SAG nesta região. Os maiores teores da simulação estão acima da falha Terra de Areia Posadas.

Na zona 3, Ca e Mg estão próximos nos componentes 1 e 2 (

Tabela 7) sendo que o componente mais importante é o primeiro que explica 36 % da variabilidade original dos dados (Figura 32). Cloreto e sulfato estão

bastante próximos nas duas primeiras componentes enquanto o sódio e alcalinidade são altos apenas na primeira componente

Num estudo no estado do Paraná, ficou comprovado que as componentes com escores altos de sódio, HCO_3 e intermediários de SO_4 e Cl são típicos de águas confinadas com alta troca de cátions e dissolução de carbonatos próximos ao rio Paraná, enquanto componentes com composição Ca-HCO_3 são encontrados em zonas desconfinadas próximas da superfície. Valores mais altos de SO_4 e Cl indicariam um ambiente oxidado (Athayde *et al*, 2005).

Tabela 7 - Escores para a zona 3

	1	2	3
Ca	0.13	-0.59	-0.18
Na	-0.53	0.08	0.19
Sulfato	-0.27	-0.41	0.33
Cl	-0.15	-0.45	0.47
Mg	0.24	-0.45	-0.48
Alc.	-0.48	0.097	-0.51
Conduc.	-0.54	-0.18	-0.3

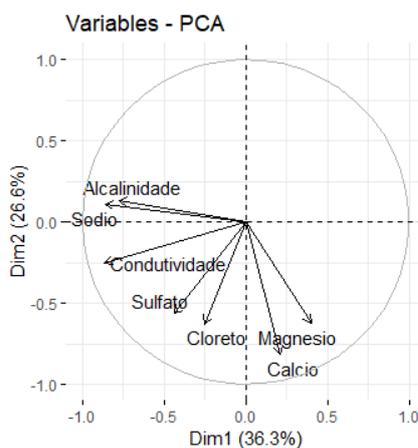


Figura 32 - PCA escores para a zona 3

No grupo 2 da zona 3, o sódio tem a maior correlação com a alcalinidade (0,63). Esta alta correlação (Figura 33a) e a alta presença de sulfato neste grupo com média de 17 mg/L (Tabela 4) indica que existe troca alta de Ca por Na e a presença gipsita nas camadas sedimentares por onde este grupo percola. O cloreto está presente mais fortemente no grupo 1 (5mg/L) de média. No grupo 2 o cálcio é baixo. Portanto, as camadas sedimentares presentes em grandes profundidades são

pobres em carbonato ou ocorre um processo de troca muito extenso que impossibilita o Ca de entrar em solução. A alcalinidade no grupo 2 é alta em relação aos outros grupos (157 mg/L), conforme Tabela 3. Isso indica que ocorre um processo de troca extenso. A correlação entre Ca e alcalinidade (Figura 33b) no grupo 3 é de 0,4, enquanto no grupo 2 já citado é nula. A correlação aumenta para 0,64 quando adicionamos sódio ao cálcio x alcalinidade (Figura 34a), indicando esta intensa troca. O grupo 1 possui quantidades baixas de alcalinidade, Ca e Mg (Figura 34b) (Tabela 4), mas são mais altas que no grupo 2. A correlação entre Ca e alcalinidade no grupo 3 é de 0,4, enquanto no grupo 2 já citado é nula. Provavelmente o grupo 3 seja restrito ao SASG e não tenha qualquer participação de unidades sedimentares mais profundas. O SAG possui calcita em sua cimentação diagenética e é capaz de fornecer Ca para a solução. A esmectita acontece devido a eodiagênese tanto no Pirambóia quanto no Botucatu, além da presença de betumen e cimentação de calcita na mesodiagênese de ambos e o pH mais alto acompanha as fácies químicas mais enriquecidas em sódio e sulfato (Sracek *et al*, 2011). Como fica evidente nos mapas estruturais, a proximidade de grandes falhas é propícia para que elevados valores de pH sejam encontrados. Valores intermediários entre águas bicarbonatadas cálcicas magnesianas, típicas de zonas de descarga e águas bicarbonatas sódicas sulfatadas, típicas de águas confinadas, são uma transição entre aquíferos livres e confinados. Portanto, o grupo com assinatura do SAG é de caráter intermediário entre estes dois extremos.

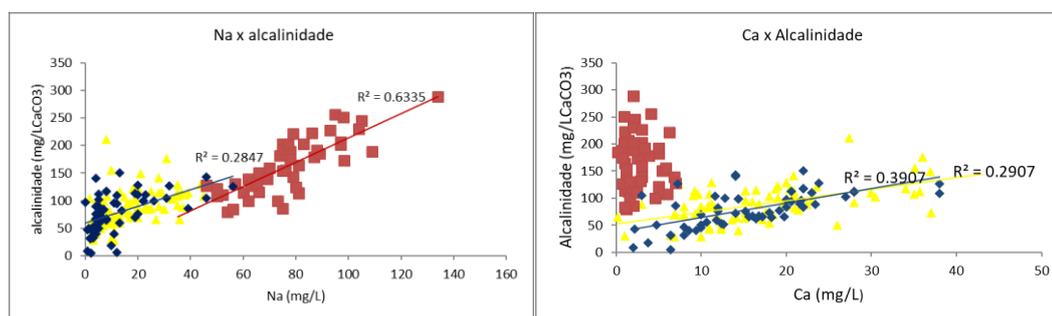


Figura 33.a) Na x alcalinidade na zona 3; b) Ca x alcalinidade para a zona 3. Grupo 2(vermelho), grupo 1(amarelo), grupo 3(azul)

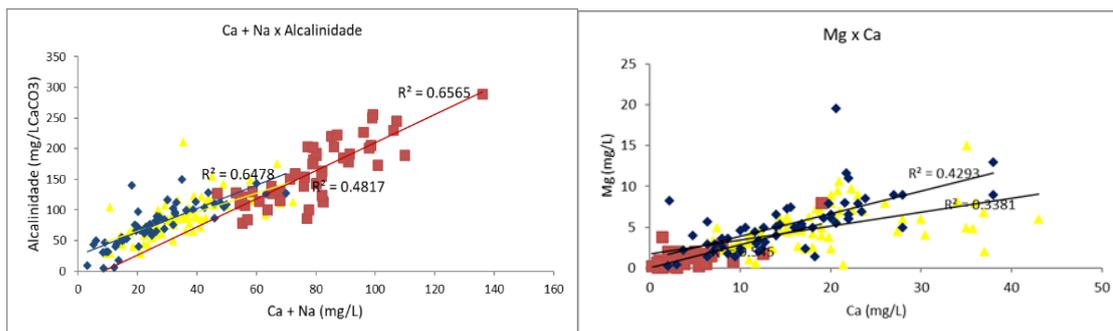
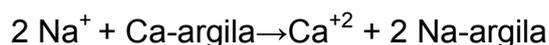


Figura 34 - a) Ca + Na x alcalinidade na zona 3; b) Mg x Ca para a zona 3. Grupo 2 (vermelho), grupo 1(amarelo), grupo 3(azul).

Para Freitas (2016), quando o conteúdo de Cl for maior que o sódio em águas com sólidos totais dissolvidos maiores que 500 mg/L, a água é derivada de salmouras, onde a troca iônica é inversa ou ocorre abrandamento natural reverso. A seguinte reação demonstra isso:



Uma igualdade entre Na e Cl indica dissolução de halita. Se o sódio for maior que o cloreto a fonte de sódio pode ser outra, como o intemperismo de calcita de amígdalas de basaltos. Ainda segundo o autor, o ambiente desértico de deposição dos arenitos Botucatu/Pirambóia propiciou a deposição de precipitados salinos, incluindo sulfatos. A correlação do sódio com a condutividade (

Figura 35) é alta apenas no grupo 2.

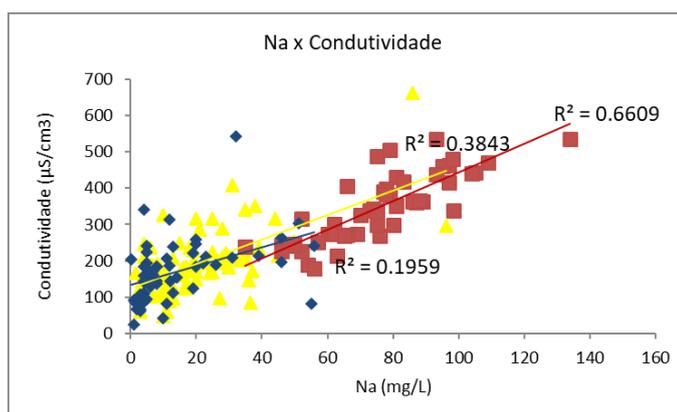


Figura 35 - Na x Condutividade na zona 3. Correlação de 0,19 para o grupo 3(azul), 0,38 para o grupo 1 e 0,66 para o grupo 2 (vermelho).

Na zona 4, embora os escores do PCA (Figura 36) tenham uma alta correlação entre alcalinidade, sódio, sulfato e cloreto (

Tabela 8), os grupos 1 e 3 de Kmeans apresentam baixa correlação entre sódio e alcalinidade. Na zona 4, chama a atenção o fato de a alcalinidade possuir escores vinculados ao sódio, ao cloro e ao sulfato. Esse mesmo comportamento pouco convencional é visto na zona 1, onde a alcalinidade não possui afinidade próxima com nenhum dos outros constituintes.

Como pode-se esperar, a correlação do sódio com a condutividade é alta apenas no grupo 2 e este comportamento é esperado em todas as zonas, e mais fortemente ainda na zona 4 quando esta correlação é de 0,9. Nesta zona, o teor de sulfato é bastante baixo. O grupo 1 apresenta altas concentrações de cálcio e magnésio. Nesse grupo, podemos notar a maior influência da dolomita atuando na solubilidade do cálcio e do magnésio. O sódio tem o mesmo comportamento que o sulfato e possui valores altos e alguns muito altos nos três grupos. Nesta área, a falha de São Miguel das Missões e as linhas de potencial entre 100 e 300 geram um aumento no fluxo na região da cidade de Agudo. Então, mais a leste, na cidade de Santa Cruz, novos poços muito salinizados são encontrados, mas com predominância da direção NE sob a influência do LRA. A simulação de sódio também mostra faixas alongadas na cidade de Santa Cruz e Agudo. Os altos valores da simulação de sódio se estendem na direção de N135.

Tabela 8 - Escores para a zona 4

	1	2	3
Ca	-0.21	-0.59	0.25
Na	-0.48	0.15	-0.07
Sulfato	-0.48	0.15	-0.07
Cl	-0.46	-0.039	-0.1
Mg	-0.019	-0.71	0.18
Alc.	-0.15	0.32	0.91
Conduc.	-0.49	0.06	-0.035

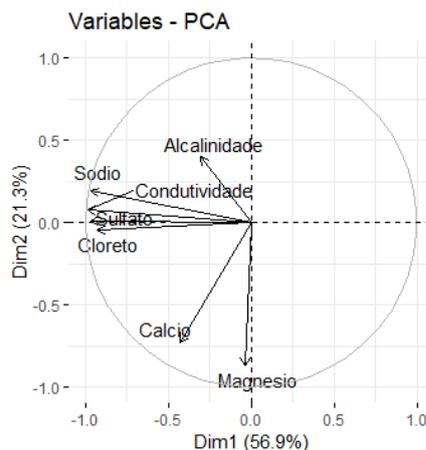


Figura 36 - PCA escores para a zona 4

Na zona 4, apenas o grupo 3 tem alguma correlação entre cálcio e alcalinidade de 0,45 (Figura 37a) sendo que o sulfato pouco interfere nesta correlação (Figura 37b). Este grupo é restrito às zonas de recarga do SASG e não possui mistura com os aquíferos sotopostos. O grupo 1 (Tabela 4) tem uma quantidade maior de cálcio e magnésio do que o grupo 2 (25 mg/L e 6,18 mg/L de média, respectivamente). Em média, no entanto, a correlação com alcalinidade não é a mesma (0,18). O sódio tem uma correlação mais alta com o sulfato no grupo 2 (Figura 38a) de 0,91. Existe troca de Ca por sódio apenas no grupo 1 quando Ca + Na x alcalinidade melhora a correlação (Figura 38b). O cloreto também tem uma correlação mais alta com a condutividade (0,97). Este grupo está diretamente vinculado às unidades mais profundas. No grupo 2, apesar da média de alcalinidade ser alta, a concentração de cálcio e magnésio é muito baixa, o que sugere que tanto o cálcio quanto o magnésio são totalmente aprisionados nas argilas como smectitas do Irati.

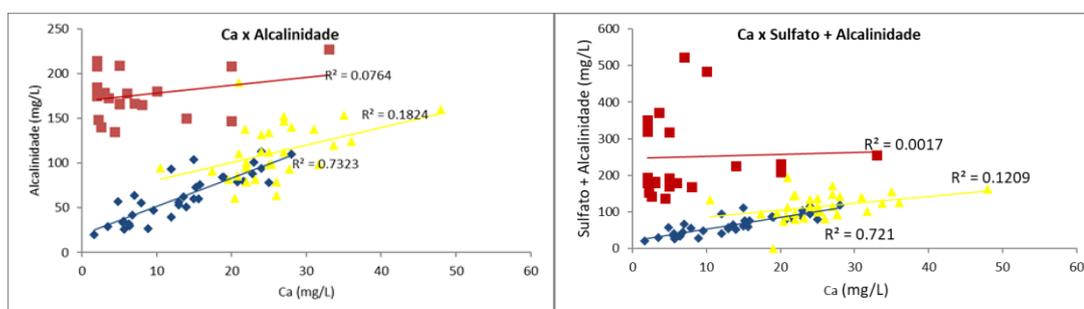


Figura 37 - A) Cálcio x alcalinidade + sulfato na zona 4. Correlação de 0,72 para o grupo 3 (azul), 0,12 para o grupo 1 (amarelo) e 0 para o grupo 2 (vermelho). b) Ca x sulfato + alcalinidade na zona 4. Correlação de 0,73 no grupo 1 (azul), 0,18 para o grupo 1 (amarelo) e 0,07 para o grupo 2 (vermelho).

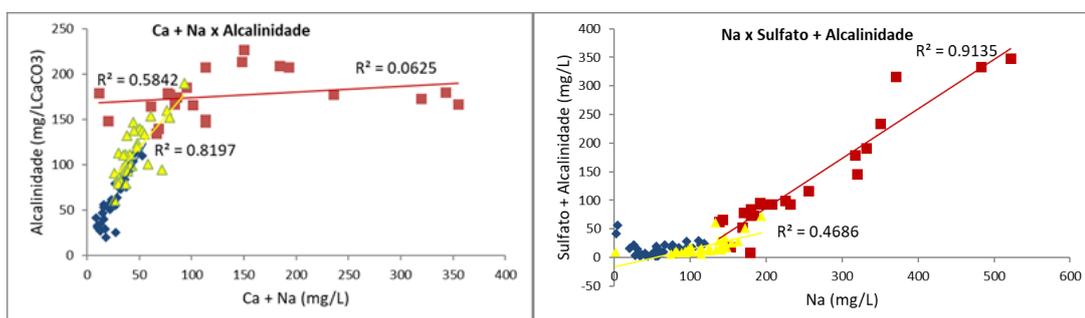


Figura 38 - a) Alcalinidade + sulfato x Na para a zona 4; b) Ca + Na x alcalinidade para a zona 4. Grupo 2(vermelho), grupo 1(amarelo), grupo 3(azul)

Na zona 5, os escores de PCA (Figura 39) mostram que o cálcio, o magnésio e a alcalinidade estão bastante próximos (

Tabela 9).

Tabela 9 - Componentes para a zona 5

	1	2	3
Ca	-0.35	0.42	0.32
Na	-0.44	-0.28	-0.35
Sulfato	-0.41	-0.19	0.43
Cl	-0.42	-0.25	0.006
Mg	-0.14	0.6	0.32
Alc.	-0.16	0.52	-0.67
Conduc.	-0.52	-0.014	-0.13

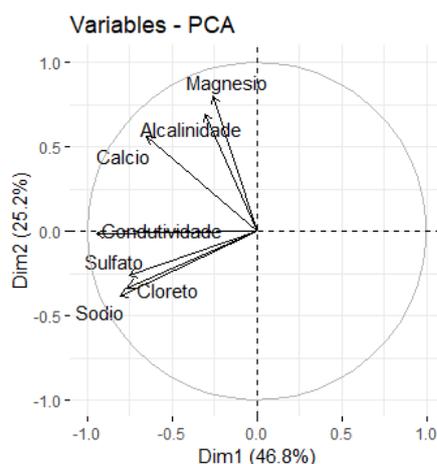


Figura 39 - Escores de PCA para a zona 5

Usando o método de dendrograma, 5 grupos foram gerados. Um dos grupos (grupo 5) possui mais sódio que os outros, com valores que podem chegar a mais de 300 mg/L. Neste mesmo grupo, o sulfato está bastante alto. Num dos grupos, o cálcio possui boa correlação com o sulfato, o que sugere que a fonte de cálcio venha dos sulfatos. Os grupos 1,3 e 5 possuem valores altos de magnésio, sendo que o grupo 3 apresenta valores que chegam a 30 mg/L. O grupo 2 possui as maiores concentrações de sódio (300 mg/L). Apenas na porção sul da zona parece haver potenciometria suficiente para fazer ascender águas mais salinas.

A correlação do $\text{Ca} + \text{Na} \times \text{sulfato} + \text{alcalinidade}$ para o grupo 1 fica em 0,42 (Figura 40a), sendo este o único grupo que apresenta alta correlação, e apenas 0,20 para o grupo 4. O grupo 1, que possui média de alcalinidade 161 mg/L e também é o grupo com maior média de cálcio (43,44 mg/L). A correlação entre $\text{Ca} \times \text{sulfato} + \text{alcalinidade}$ (Figura 40b) é de 0,4, mas entre Ca e alcalinidade é nula. No grupo 4, esta correlação é de 0,38, quando a concentração tanto da alcalinidade quanto do cálcio é baixa. No grupo 2, como o cloreto é mais baixo podemos dizer que a halita interfere menos nesse grupo em comparação ao grupo 5 e o processo de troca catiônica é mais intensa (Figura 41a). No grupo 2 a correlação é de 0,55, mas a correlação do cálcio \times alcalinidade no grupo 2 é nula (Figura 41b), quando temos valores intermediários de cálcio e alcalinidade, mas baixos de cloreto e sulfato. No grupo 1, o cálcio apresenta boa correlação com o sulfato, o que sugere que a fonte de cálcio provém dos sulfatos (Formação Irati e Pirambóia). O grupo 5 apresenta altos valores de sódio, sulfato e cloreto, mas menor concentração de alcalinidade. Esse grupo é derivado de unidades mais profundas, já que a concentração média de

sódio (43 mg/L) e a concentração média de sulfato (54 mg/L) são muito altas e podem ser chamadas de grupo sódico clorado sulfatado, pois a alcalinidade é muito baixa. Isso indica claramente que esse grupo tem um relacionamento direto com a Irati. Parte do sódio vem da halita porque a quantidade de cloreto é muito alta. A parte restante do sódio vem da troca entre cálcio e sódio na Formação Irati. O grupo 1 é o que apresenta as maiores médias de alcalinidade (162 mg/L). Provavelmente este grupo é um intermediário entre grupos superficiais restritos ao SASG e os grupos mais salinizados. Analisando a simulação nesta zona, o sódio também acompanha os níveis potenciométricos mais baixos próximos ao Rio Uruguai. Apenas uma faixa se alonga para sul ao longo da falha do Rio das Antas. A média da simulação de cálcio mostrou que os valores mais elevados de cálcio estão próximos a Dorsal de Canguçu, que corresponde ao mapa de densidades de fraturas acima de 5Km para todas as direções.

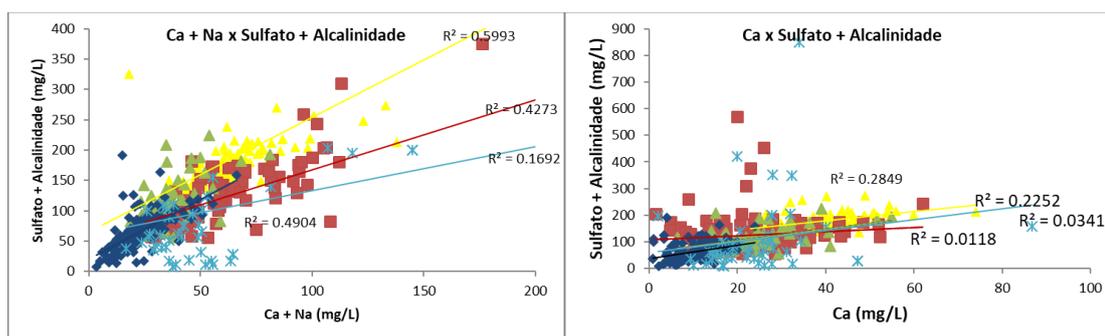


Figura 40 - a) Ca + Na x sulfato + alcalinidade para a zona 5. Grupo 4 tem correlação de 0,43 e grupo 3 tem correlação de 0,49; b) Ca x sulfato + alcalinidade. Grupo 4 tem correlação de 0,28. Grupo 2 (vermelho), grupo 3 (verde), grupo 1 (amarelo), grupo 4 (azul), grupo 5 (azul claro).

Águas bicarbonatadas sulfatadas cálcicas são encontradas no vale do Rio das Antas e do Rio do Prata, onde as espessuras das rochas vulcânicas são menores. Em Veranópolis são encontradas águas cloretadas, sulfatadas, sódicas, mas com quantidades menores de bicarbonato. Essas águas encontram-se nos municípios de Veranópolis, Vila Flores e Nova Prata. Além disso, as águas bicarbonatadas cálcicas ou magnesianas são encontradas nas áreas mais elevadas topograficamente, enquanto as águas sulfatadas, cloretadas são encontradas próximas aos vales do rio Das Antas e do Rio Carreiro (Tomasi, 2020).

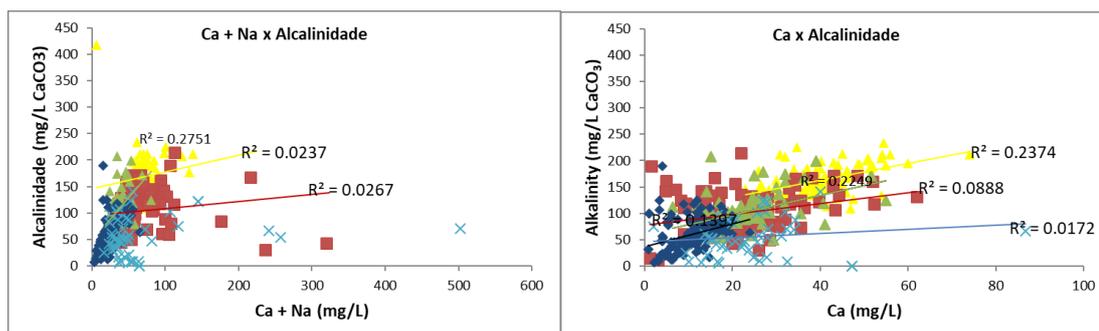


Figura 41. a) Ca + Na x alcalinidade na zona 5. Grupo 4 possui 0,27 de correlação; b) Ca x alcalinidade na zona 5. Grupo 4 possui 0,22 de correlação e grupo 3 têm 0,13 de correlação Grupo 2 (vermelho), grupo 3 (verde), grupo 1 (amarelo), grupo 4 (azul), grupo 5 (azul claro).

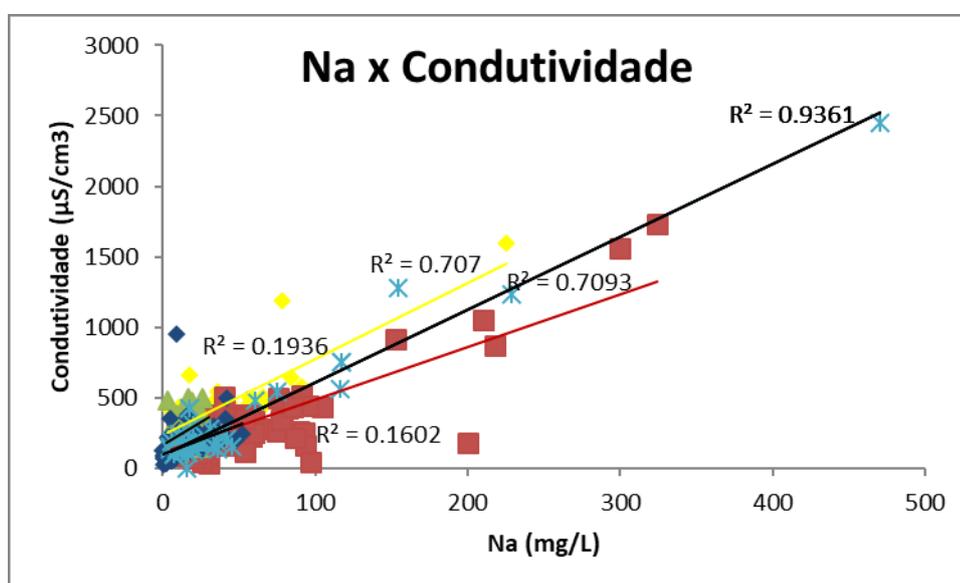


Figura 42 - Na x condutividade para a zona 5. Grupo 3 tem correlação de 0,19 e grupo 4 tem correlação de 0,16. Grupo 2 (vermelho), grupo 3 (verde), grupo 1 (amarelo), grupo 4 (azul), grupo 5 (azul claro).

4.3 Análise de Continuidade Espacial

A análise de continuidade espacial é uma etapa de extrema importância na geoestatística, pois nos permite entender o comportamento espacial do fenômeno e quantificar sua extensão. Em muitos casos a direção preferencial de determinada variável coincide com falhas, caso exista um controle estrutural na distribuição dos elementos (nesse caso, geoquímica). No caso do sódio isso pode ser visto nos mapas de simulação e densidade de fraturas.

A medida de continuidade espacial foi realizada através de variogramas. Os modelos variográficos foram ajustados pelo modelo esférico, e as análises foram realizadas até a distância de 80 000 m, as quais se mostraram adequadas para o

estudo. Foram realizadas as análises tanto com os variogramas experimentais, bem como o mapa de continuidade espacial. O mapa de continuidade espacial mostra de forma clara as anisotropias do fenômeno, mas não permite quantificar os alcances do fenômeno, e o variograma experimental, bem como o modelo variográfico, quantificam essas relações anisotrópicas entre as direções preferenciais de continuidade espacial. As direções de continuidade espacial aqui apresentam a notação azimutal e no plano horizontal (sem mergulho).

Para esta tese usou-se a notação que vai de N0 até N180, que incorpora tanto as direções do terceiro quanto as do quarto quadrante. Essa notação (azimutal) é usada porque o software usado na variografia e na simulação utiliza esta notação e optou-se por uniformizar todo o texto com base nela. Os lineamentos estruturais também foram tratados com base nesta notação.

Os 4 parâmetros (condutividade elétrica, alcalinidade, sódio e cálcio) tiveram seus dados amostrais normalizados. Todas as transformações alteram a média e a variância da distribuição original, mas a transformação tem por objetivo a mudança da forma de distribuição de frequências. A transformada gaussiana é baseada na curva teórica de Gauss. Somente os dados com distribuição normal ou negativa não precisam ser normalizados (Yamamoto, 2009).

Procedeu-se então a variografia dos dados normalizados, e estes variogramas, posteriormente, foram usados na simulação em Turning Bands, que exige dados transformados. Os variogramas foram ajustados pelo modelo esférico. Deve-se ajustar os variogramas na direção de máxima e mínima continuidade espacial, que estão a 90 graus entre si.

Neste estudo, percebemos que as 4 variáveis têm comportamento anisotrópico, e, portanto existe diferença na continuidade espacial do fenômeno em direções distintas. Existem muitos casos em que a estrutura de certa variável depende da orientação da mesma. Com isso a diferença quadrática entre duas amostras medidas na vertical é diferente na horizontal na mesma distância. A diferença no meu estudo, porém, não é tão grande, e em alguns casos, o alcance do eixo máximo e do eixo mínimo é quase a mesma. O número de passos ideal ficou entre 10 e 20 e o alcance de cada passo entre 3000 e 4000 metros.

Analisando a tabela de variogramas (

Tabela 10), percebeu-se que a alcalinidade varia nas 5 zonas, mas a direção preferencial N113 ocorre em 3 destas zonas. A condutividade elétrica também

possui a direção de N113 em uma das zonas (zona 5). O sódio mostra a maior variação nas direções dos variogramas em comparação com outras variáveis analisadas e possui direção preferencial de N45 na zona 1; N113 na zona 3; N90 na zona 5; N0 zona 2 e N135 na zona 4. O sódio, diferentemente do cálcio e da alcalinidade, é controlado por falhas mais regionais e, portanto, espera-se que a direção dessas falhas em cada zona varie. A faixa de sódio foi maior nas zonas 1 e 3 (70000 e 55000 nos eixos com maior continuidade espacial, respectivamente). Após essa distância, não há mais continuidade espacial entre as amostras. Isso vale para as outras variáveis. O cálcio e a alcalinidade são preferencialmente controlados por pequenas falhas disseminadas na Serra Geral, mas eventualmente, a alcalinidade também pode estar associada ao sódio, especialmente nos valores mais altos. A condutividade elétrica, como o sódio, também é afetada por falhas altamente difundidas que penetram várias camadas sedimentares e na Serra Geral. O efeito pepita das zonas 5 e 3 é bastante alto e é explicado pela grande variabilidade e heterogeneidade do sistema em estudo, uma vez que o critério para dividir a área por meio de grandes estruturas não é 100% correto. No entanto, nas zonas 1, 2 e 4, vemos que o efeito pepita é menor.

Na zona 1, a alcalinidade tem direção preferencial de N144, conforme pode ser verificado na análise do mapa variográfico. Essa direção coincide muito com as falhas regionais que cortam esta zona, como o sistema de falhas São Francisco de Assis e Alegrete, que possuem direção de N120. Já o sódio possui direção preferencial na direção N45, mas também existe uma boa continuidade espacial na direção N135. Vale lembrar que o Sistema de Falhas Lancinha Cubatão possui orientação N60. Tanto em Uruguaiana quanto em São Borja, as direções de densidade de fraturas que mais contribuem para altas concentrações de sódio estão na direção 22-45° para comprimentos maiores que 5Km. Esta direção é muito representativa para lineamentos menores que 5 Km na zona 1(15%).

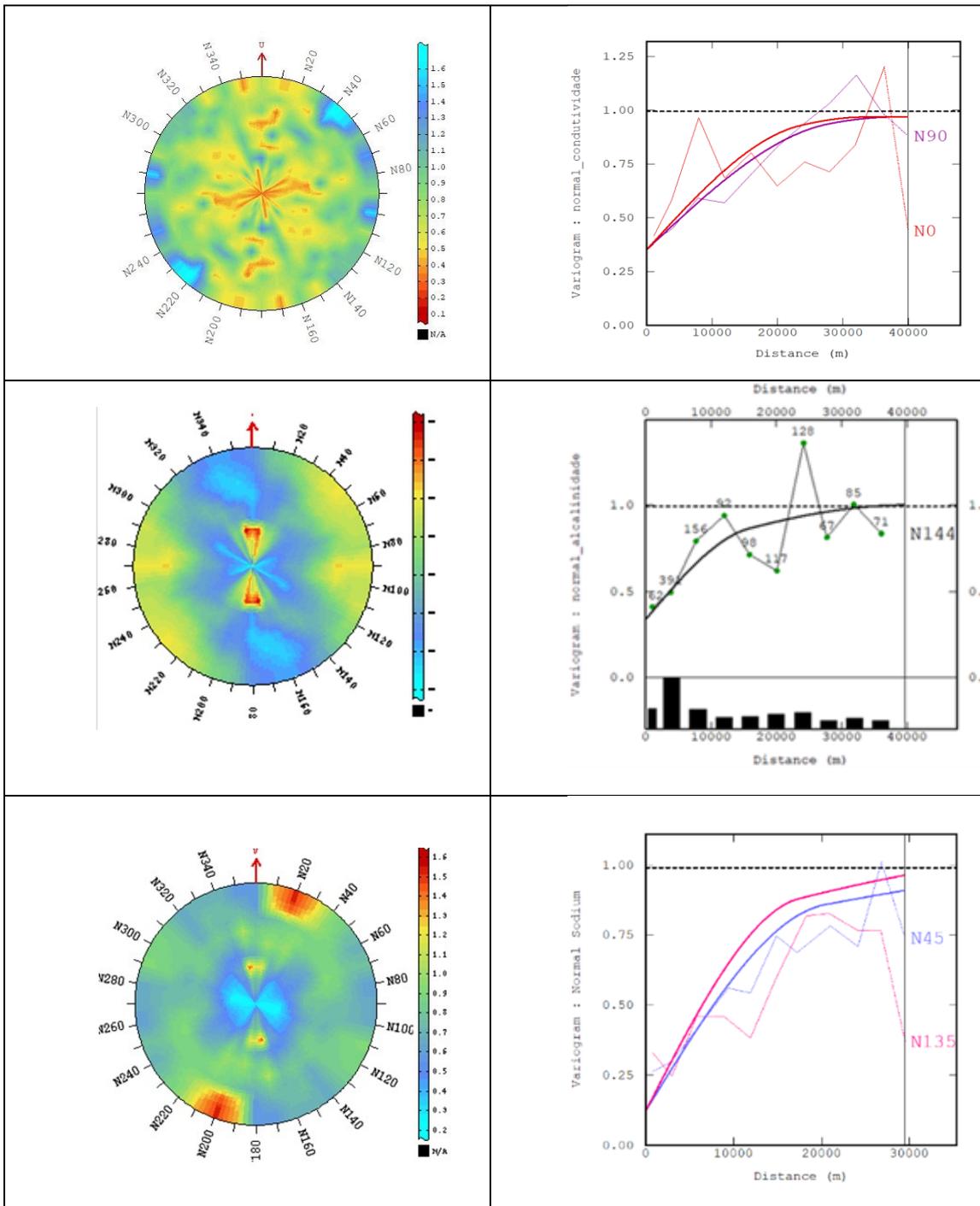
Na zona 1, a condutividade tem direção preferencial N90 (

Figura 43a). Esta direção contrasta com a direção NW e NE que são típicas do sódio, da alcalinidade e do cálcio. O sódio, a alcalinidade e o cálcio estão bastante próximos nos escores de PCA nesta zona, principalmente nos valores mais altos. Esta é a única zona em que o sódio é influenciado tanto pelos lineamentos nordeste quanto pelos lineamentos Noroeste (

Figura 43c). O cálcio mostra direção preferencial N-S na variografia, embora as maiores concentrações de cálcio sigam as direções das falhas de grande porte. O mapa variográfico indica uma boa continuidade N-S em curtas distâncias, mas em longas distâncias, a direção N60 parece ser a mais importante.

Tabela 10 - Variografia para as 5 zonas. Condu é a abreviação para condutividade elétrica em $\mu\text{S}/\text{cm}$ e alc é abreviação para alcalinidade e sill é o platô do variograma.

Zona	Variável	Direção de maior continuidade	Efeito pepita	1°structura do variograma			2°structura do variograma		
				sill	Direção de menor alcance	Direção de maior alcance	sill	Direção de menor alcance	Direção de maior alcance
1	Condu.	N90	0.35	0.29	23409	27864	0.32	33600	38000
	Alc.	N144	0.33	0.35	6000	15979	0.31	33600	40000
	Sódio	N45	0.1	0.7	12000	14000	0.3	50600	70000
	Cálcio	N0	0.45	0.27	8400	8400	0.27	15600	25600
2	Alc.	N113	0.36	0.31	6000	15000	0.31	10000	28800
	Sódio	N0	0.5	0.2	7828	26094	0.27	28384	39422
	Cálcio	N45	0.5	0.25	7200	10000	0.25	28800	40000
	Condu.	N135	0.35	0.22	3500	9000	0.43	9000	45000
3	Condu.	N45	0.41	0.29	50000	50000	0.29	40000	40000
	Alc.	N113	0.49	0.15	29760	62000	0.32	29194	50685
	Sódio	N113	0.5	0.1	14652	14652	0.37	55268	55268
	Cálcio	N0	0.47	0.31	6138	12985	0.2	26695	26695
4	Alc.	N67	0.25	0.37	13000	13000	0.37	45000	45000
	Sódio	N135	0.44	0.27	40000	30000	0.27	10000	35000
	Cálcio	N45	0.2	0.33	20000	20492	0.43	8000	16515
	Condu.	N0	0.34	0.43	17933	53800	0.28	2710000	112145
5	Condu.	N113	0.7	0.1	15000	4222	0.2	33579	43173
	Alc.	N113	0.5	0.22553	22553	22553	0.245	19467	19467
	Sódio	N90	0.6	0.21	9111	6833	0.15	20000	30000
	Cálcio	N113	0.6	0.22	6343	4757	0.15	20000	30000



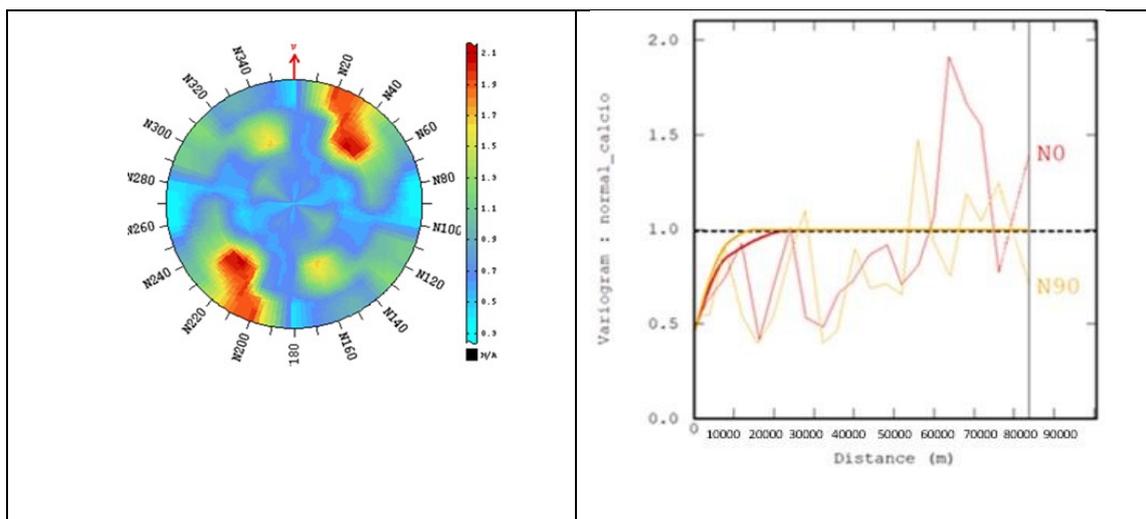


Figura 43 - (a,b) Mapa variográfico e variografia da condutividade elétrica; (c,d) da alcalinidade; (e,f) do sódio e (f,g) do cálcio para a zona1 na ordem em que aparecem. A condutividade está com a escala de cores invertida.

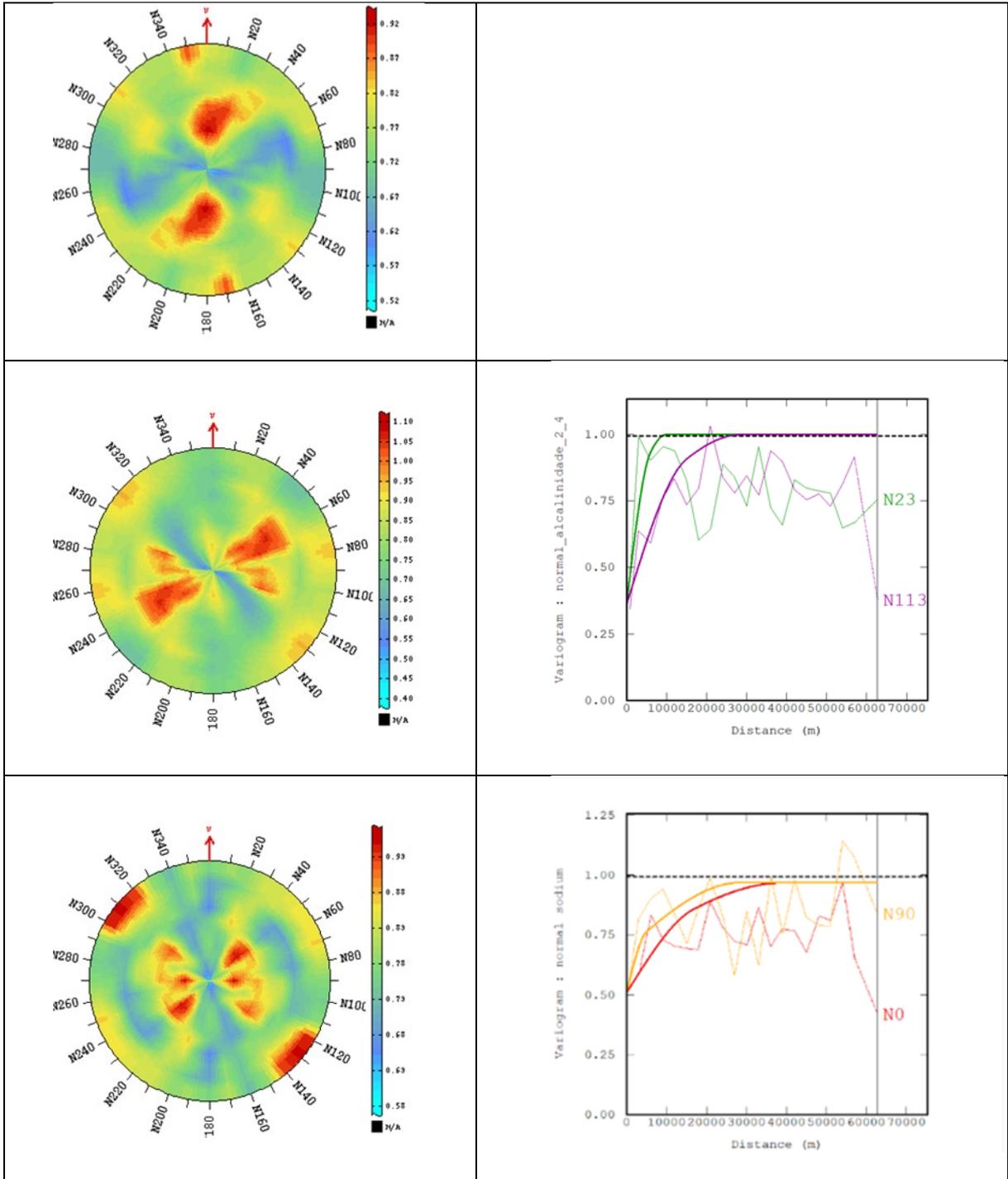
Na zona 2, o cálcio foi analisado até a distancia de 60 000 m (o passo de 3 000 m). O mesmo foi usado para a condutividade, alcalinidade e sódio.

Na zona 2, a direção N90-125 no mapa de densidades é muito importante próximo ao rio Uruguai, principalmente para os comprimentos menores que 5 Km, onde tanto a alcalinidade quanto o sódio estão em elevadas concentrações. O variograma da alcalinidade tem maior continuidade espacial na direção N113 e a condutividade na direção N135. A alcalinidade tem um alcance maior e pode chegar a 30Km antes de alcançar o patamar do variograma, que é onde não existe mais continuidade espacial. Algumas das grandes falhas da zona 2 tem uma orientação próxima de N105 como o SFTA/P. No mapa variográfico da alcalinidade (Figura 44c) fica claro que esta variável segue esta orientação.

O mapa variográfico e a variografia do sódio (

Figura 44d e Fig.44e) tem direção NS, mas nos mapas de simulação os valores altos seguem uma orientação NE. Isso indica que as estruturas que mais influenciam nestas altas concentrações são NE na parte central desta zona, enquanto próximo ao rio Uruguai a orientação muda para próximo de L-O. O mapa da alcalinidade e da condutividade tem uma orientação NW, enquanto o cálcio (

Figura 44f) segue a mesma tendência do sódio.



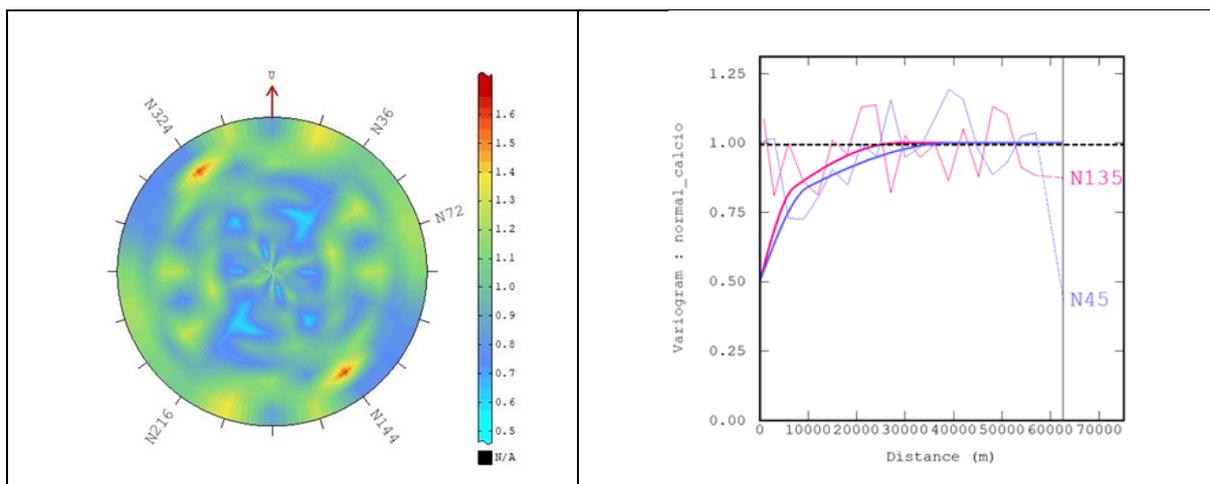
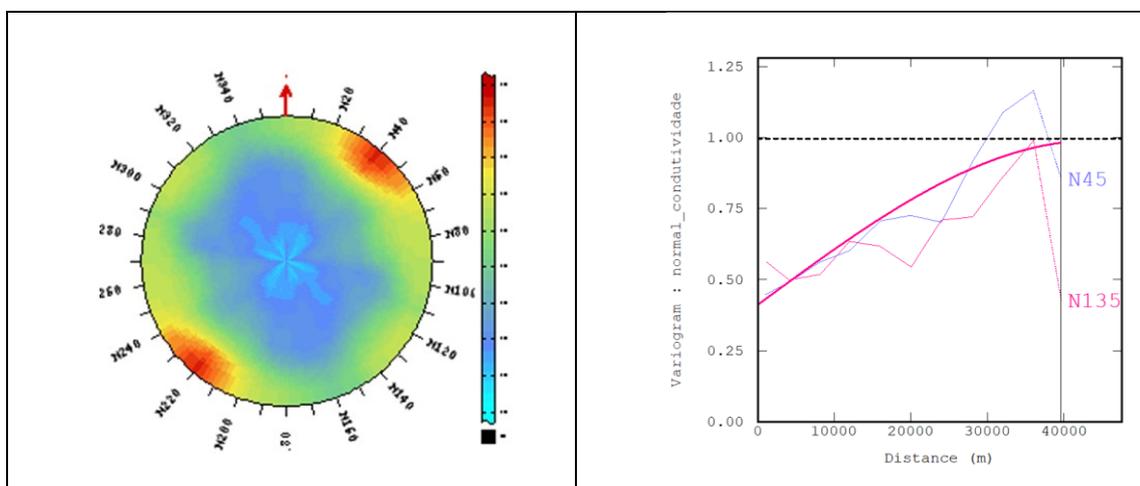


Figura 44 - (a,b)Mapa variográfico e variografia da condutividade elétrica; (c) da alcalinidade; (d,e) do sódio e (f,g)do cálcio para a zona 2 na ordem em que aparecem.

Na zona 3, foi utilizado número de passos 10 e o alcance de passo 4000 m para cada uma das 4 variáveis.

A direção N113 é a principal tanto para o sódio quanto para a alcalinidade (Figura 45c) e (

Figura 45d). Esse valor está de acordo com as grandes falhas desta zona, como as falhas gravimétrica e rio das Antas-Sc que possuem também orientação próxima a N113. A condutividade tem orientação da variografia em NE e o cálcio N0. As estruturas NE têm importância secundária e são bem representadas por falhas que atravessam o Rio Grande do Sul vindo de Santa Catarina. Algumas destas falhas NE diminuem a potenciometria do SASG e do SAG ali, e são capazes de aumentar a salinidade. A falha RA-Sc e gravimétrica claramente diminui a potenciometria do SAG e do SASG e permite a ascensão de águas salinizadas na parte oeste desta zona.



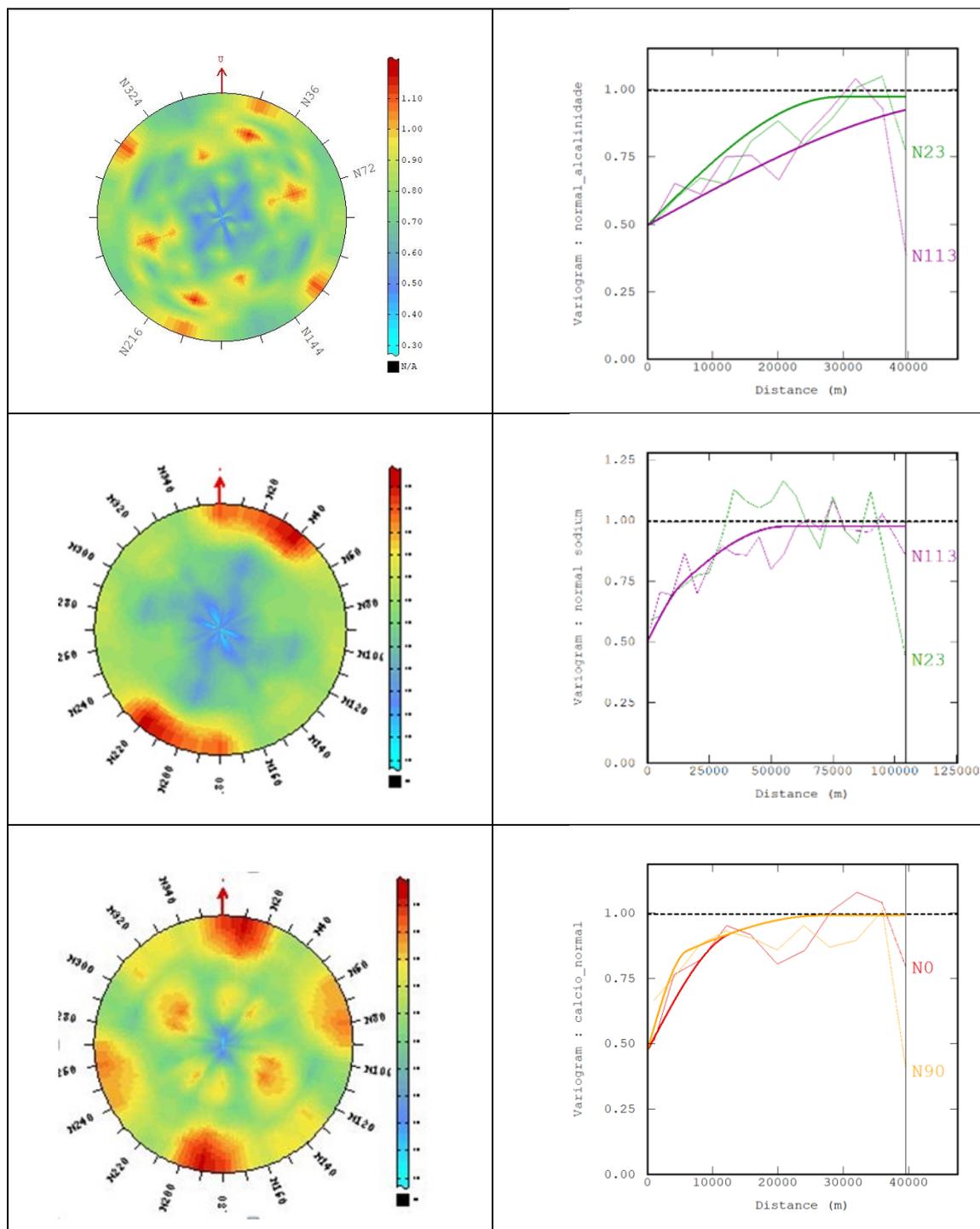
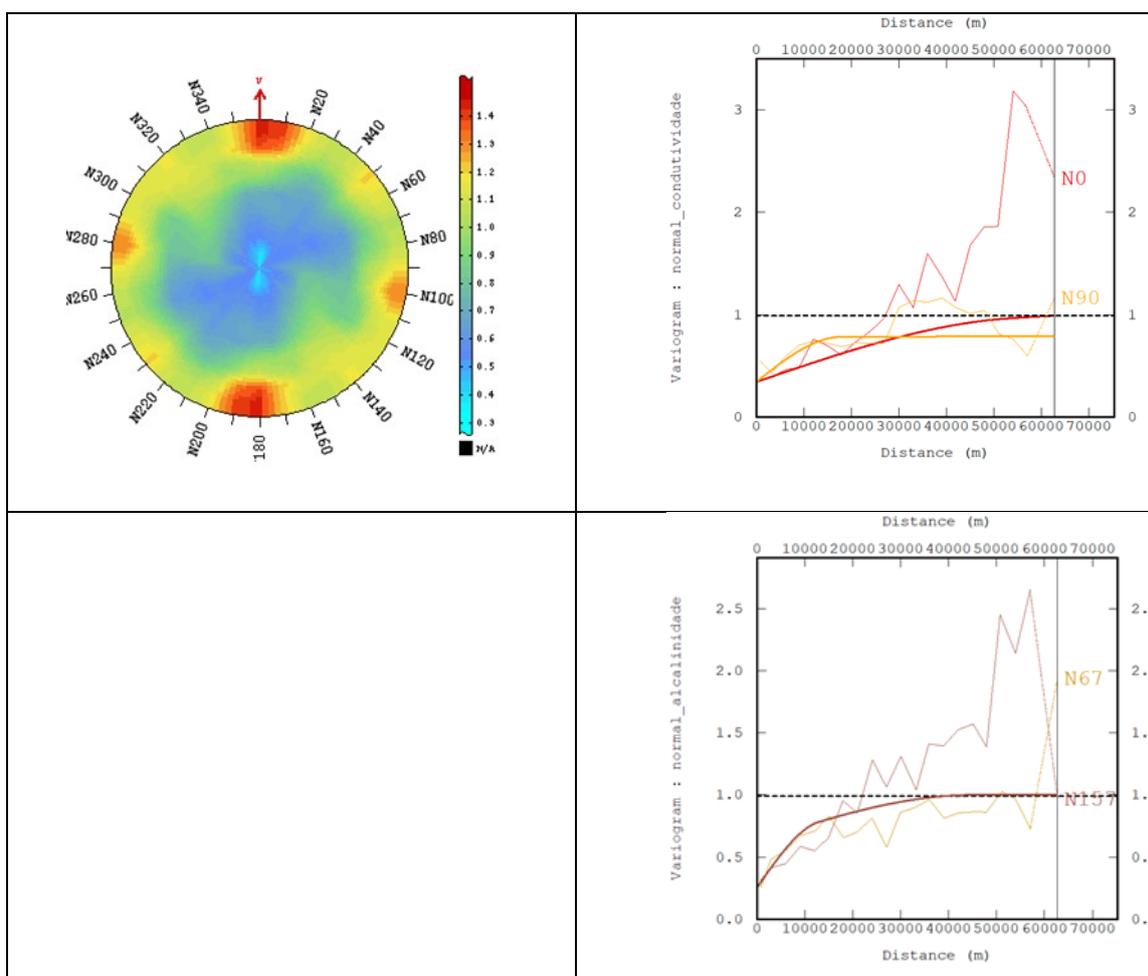


Figura 45 - (a,b)Mapa variográfico e variografia da condutividade elétrica; (c,d) da alcalinidade; (e,f) do sódio e (g,h) do cálcio para a zona 3 na ordem em que aparecem.

Na zona 4, temos número de passo de 20 e alcance de passo 3000 para todas as variáveis.

Na zona 4 a condutividade elétrica, que possui estreita afinidade com o sódio, conforme demonstrado na tabela 3d, tem direção preferencial N-S na variografia e no mapa variográfico (

Figura 46a e Fig.46b). O sódio, porém, tem variografia na direção N135 (Figura 46e). Esta é a direção mais importante desta zona e acompanha o sistema de falha São Miguel das Missões, que atravessa o Oeste desta zona e influencia altas concentrações de sódio em cidades como Agudo. Já o cálcio (Figura 46g) tem orientação preferencial NE. Esta é a mesma orientação da grande falha Rio das Antas que atravessa o Leste desta zona. O E-Type da alcalinidade mais ou menos indica a direção NE como a preferencial, assim como o E-Type do cálcio.



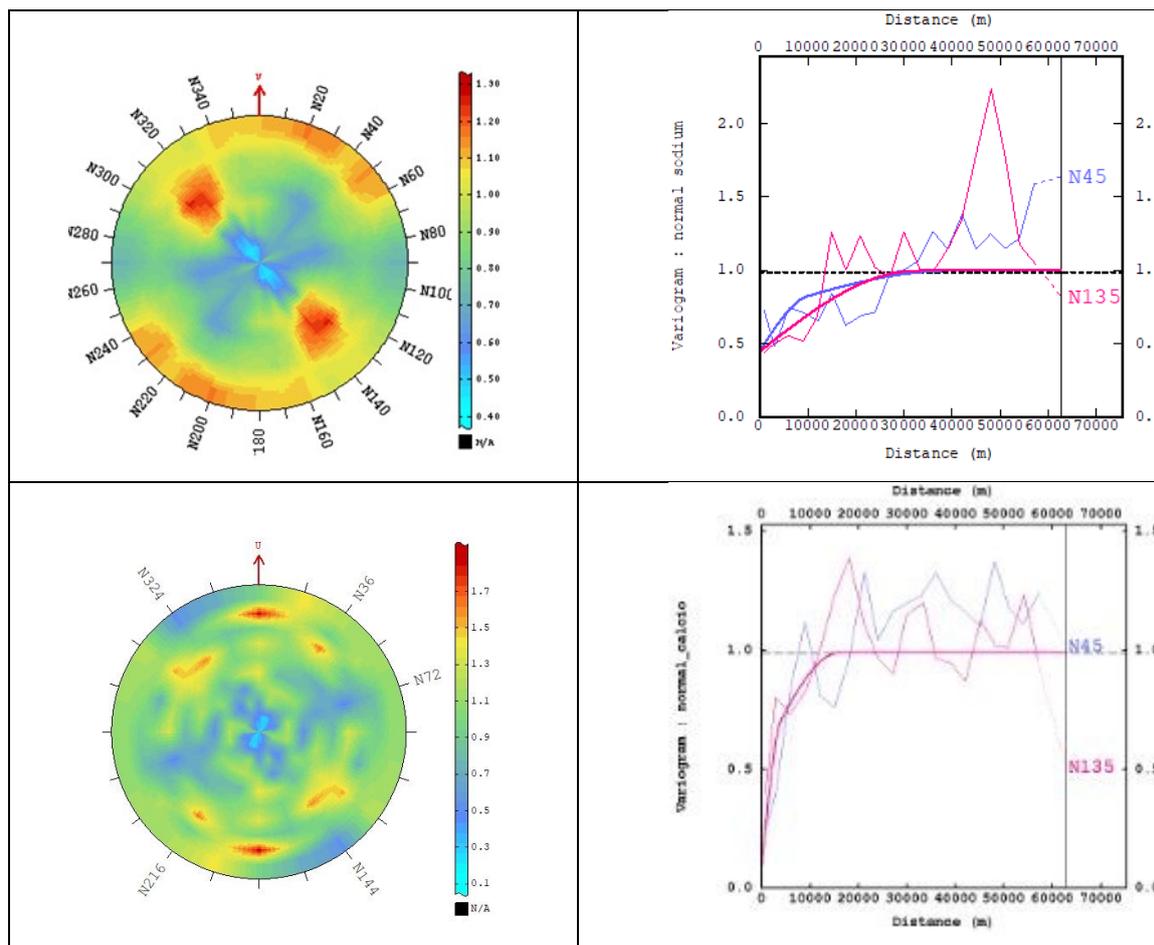


Figura 46 - (a,b) Mapa variográfico e variografia da condutividade elétrica; (c) da alcalinidade; (d,e) do sódio e (f,g) do cálcio para a zona 4 na ordem em que aparecem. O mapa variográfico da alcalinidade não está presente.

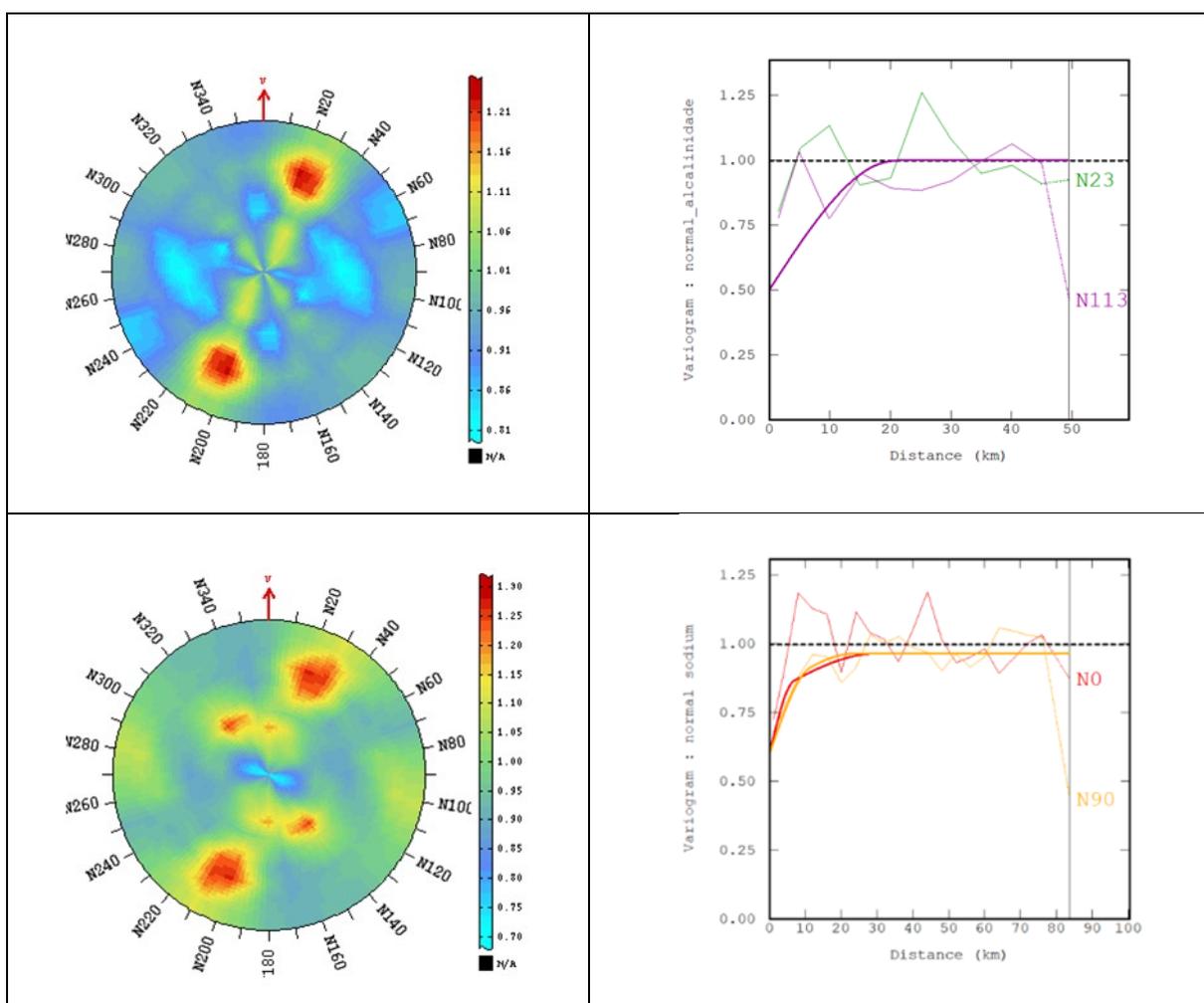
Na zona 5, foi usado o número de passos 20 e alcance de passo 4000 m para todas as variáveis. O variograma do cálcio para a zona 5 tem efeito pepita de 0.6. A primeira estrutura tem alcance de 6000 para ambos os eixos e 24000 para ambos os eixos.

Na zona 5, o variograma normalizado da condutividade tem 0.6 de efeito pepita e 30000 de alcance. Utilizou-se uma busca de 4000 metros e tolerância angular de 25 graus. O variograma do sódio na zona 5 mostra um efeito pepita de 0.6. Foram utilizadas duas estruturas. A primeira estrutura tem alcance de 10000 para o eixo máximo e 10000 para o eixo mínimo. A segunda estrutura tem também 10000 para o eixo mínimo e 24000 para o eixo máximo. O alcance é de 0,2 para a primeira e segunda estrutura

Zona 5, surpreende o fato de o mapa variográfico do sódio (

Figura 47c) indicar a direção preferencial noroeste, sendo que as maiores concentrações de sódio nesta zona seguem a grosso modo a orientação de falhas regionais, tais como o SFRA. Porém, o mapa variográfico determina a correlação das amostras não levando em conta os valores extremos e por isso às vezes ocorre discrepância entre os altos valores e o mapa variográfico. Vale lembrar que a distribuição do sódio pode seguir principalmente as estruturas menores que podem ter um efeito de mudar a direção de maior continuidade deste elemento. O cálcio (

Figura 47e Fig.47f) segue uma direção N-S e NW-SE. De fato, o lineamento Bento Gonçalves contribui muito para altas concentrações de cálcio, bem como o SFRA. A condutividade possui uma diferença de alcance com correlação entre as amostras grande da direção principal para a secundária, o que mostra o forte caráter anisotrópico desta variável. O sódio também tem uma diferença grande da direção principal para secundária.



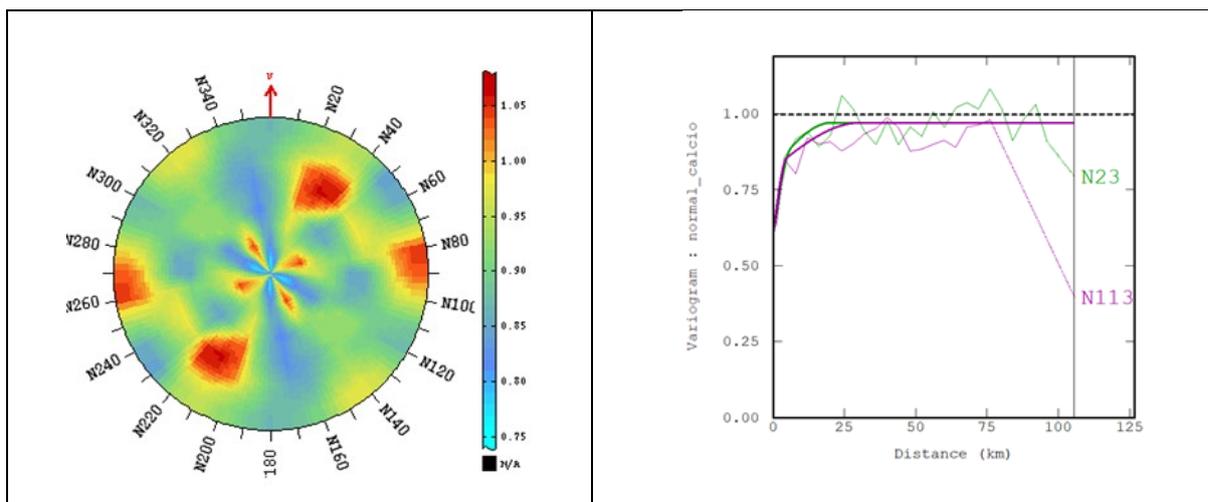


Figura 47 - (a,b) Mapa variográfico e variografia da alcalinidade; (c,d) do sódio e (e,f) do cálcio para a zona 5 na ordem em que aparecem.

4.4 Potenciometria

Quando possuímos poços distribuídos numa área, podemos calcular a superfície potencial destes poços por meio da interpolação ou linhas de interpolação. Os gradientes hidráulicos estão na direção perpendicular a estas linhas que possuem a mesma cota e estão ortogonais ao fluxo da água subterrânea. É possível desenhar as linhas potenciométricas com apenas 3 poços, desde que seja conhecida a cota do terreno e a cota do nível freático. A carga hidráulica em cada poço é equivalente a pressão causada pela coluna de água daquele ponto:

$$h = z + h_p$$

Os piezômetros são os aparelhos usados para medir a carga hidráulica em cada ponto. Portanto, a pressão de água em um ponto é determinada pela subtração da cota do terreno (h) pela linha potenciométrica daquele ponto (h_p), conforme a equação acima. Quando não existe pressão suficiente dentro de um aquífero confinado, não é possível que ocorra a ascensão da água para aquíferos localizados acima que estão confinados ou não. No caso do SAG, a potenciometria do topo do aquífero deve ser a mesma da base do SASG para que ocorra conexão entre os dois (Fetter, 2010).

Nas zonas confinadas, a mistura de águas com aquíferos situados acima ou abaixo do SAG ocorre frequentemente e depende das condições potenciométricas relativas. (Freitas, 2016).

A superfície onde a pressão da água é a mesma que a pressão atmosférica é chamada nível freático. A posição da lâmina de água segue geralmente a forma da topografia naquela área.

- a) Na ausência de fluxo de água, a lâmina da água será reta.
- b) Uma lâmina de água com mergulho indica que existe movimento.
- c) As áreas de descarga estão na zona de baixa topografia
- d) A água geralmente segue o formato da topografia.

Se a superfície potenciométrica estiver acima da superfície, a água irá jorrar através de poços jorrantes. As linhas potenciométricas de mesma cota são unidas da mesma forma que curvas de nível. Quando o gradiente hidráulico é íngreme, as linhas potenciométricas serão bastante próximas.

Num fluxo regional para aquíferos não confinados, as linhas de fluxo são perpendiculares às linhas potenciométricas. A zona de recarga se concentra nos altos topográficos e dirigem-se para as zonas de descarga, que geralmente são rios localizados em vales em cotas inferiores ou o oceano. A tectônica tem importante papel na distribuição das linhas de fluxo e para determinar zonas de recarga e descarga porque os rios estão frequentemente encaixados em grandes falhas tectônicas.

Em rochas fraturadas, como é o caso do SASG, o fluxo de água subterrânea é completamente controlado pela direção das fraturas. Os basaltos são anisotrópicos, porque o fluxo não é homogêneo e é controlado estritamente por falhas e fraturas (Fetter, 2001).

Algumas feições superficiais, como rios e lagos podem estar na altura da lâmina de água. Isso ocorre porque a altura do nível freático depende basicamente da topografia. Rios podem influenciar para diminuir as cotas potenciométricas na medida em que as linhas de fluxo tendem a se curvar em direção aos vales. Por este motivo, os vales de rios são locais favoráveis a comunicação de diferentes fontes

por estarem encaixados em grandes estruturas, que às vezes comunicam estratos diferentes.

Quando o nível potenciométrico do SAG é inferior à base do SASG, ocorre mistura de águas e conseqüente alteração química, promovida pelo aporte de fluxos descendentes através de descontinuidades (condutores hidráulicos) das rochas vulcânicas. De modo contrário, em regiões onde o nível potenciométrico do SAG é superior à base do SASG, ocorre fluxo ascendente, e as águas do SAG misturam-se às águas do aquífero superior. Ainda pode ocorrer um terceiro tipo de contaminação que é quando unidades sotopostas ao SAG como a Formação Rio Bonito, Irati, entre outros tem potencimetria superiores à base do SAG (Freitas, 2016).

A profundidade de captação de água (cota de captação do poço) no SASG é a cota do terreno menos a profundidade do poço. Essa cota está intimamente ligada ao SAG na medida em que quando as linhas potenciométricas do SAG alcançam a cota de captação do SASG, este pode ser “contaminado” por águas do SAG que por sua vez pode ter sido salinizado por águas do pré-SAG. Isso acontece claramente a oeste do SFTA/P na zona 2 e no município de Itaqui na zona 1.

Em Filho *et al.* (2005), uma maior diferença entre a superfície potenciométrica e altimétrica indica que existe um forte controle estrutural controlando estas superfícies e mostram o quanto a altimetria não é o único fator que controla a altura potenciométrica dentro dos aquíferos.

No oeste paranaense também foi feita uma análise da relação de potencimetria entre o SASG e o SAG, sendo que quando as cotas potenciométricas do SASG eram inferiores a 300 metros, existia a conexão entre os aquíferos na região de Marechal Rondon (Athayde *et al.* 2014).

Para confeccionar o mapa potenciométrico, utilizou-se uma tabela da CPRM com mais de 15000 poços do SASG no Rio Grande do Sul. O valor de carga hidráulica para cada poço foi feito subtraindo-se a cota do terreno pelo nível estático. Depois foi feita a interpolação desses poços.

A profundidade de captação dos poços do SASG é mostrado na Figura 48. As isolinhas potenciométricas do SASG são uma boa indicação do local onde pode haver mistura, mas o mais importante é saber a profundidade de captação dos poços do SASG. Portanto o que realmente importa é saber onde a superfície potenciométrica do SAG encontra a profundidade de captação do SASG. Nos locais onde a diferença entre as linhas do SASG e do SAG fica em 200 m, é provável que

a mistura aconteça porque muitos dos poços do SASG têm a profundidade de captação que alcança as isolinhas do SAG.

Muitas das falhas contribuem para diminuir as cotas das superfícies potenciométricas, e em alguns casos as linhas acompanham as isolinhas (Figura 49). Na zona 1, as falhas noroeste como a de Alegrete e São Francisco de Assis influenciam na diminuição da potenciometria neste sentido. Não existe um abaulamento justo em torno dessas falhas como em outros casos, porém existe um abaulamento largo que adentra para leste partindo rio Uruguai. Este abaulamento das linhas potenciométricas permite que poços de alta salinidade sejam encontrados próximos ao rio Uruguai. A condutividade elétrica tem um comportamento diferente do sódio na zona 1 em Itaqui onde os valores de profundidade do SASG podem acarretar em recarga descendente porque as cotas de captação do SASG são muito baixas. Nas outras localidades onde o sódio é alto, a condutividade também é, especialmente no rio Uruguai e no alargamento para dentro da curva de 100 metros m do SASG.

Ao norte do rio Ibicuí, devido à influência de estruturas noroeste que formam o sistema de falhas Jaguari-Mata que cortam tanto o SASG como o SAG, existe uma inversão do sentido do fluxo regional, que nesta região é de sentido sul, com valores de cota em Unistalda atingindo valores de +300m. O mapa potenciométrico possui muitas semelhanças com os mapas estruturais. Neste caso, é muito semelhante o gradiente hidráulico em direção a oeste a partir do município de Alegrete (Figura 50) e os valores de pressão hidrostática variam de +100m a +50m na fronteira com a Argentina (Rio Uruguai).

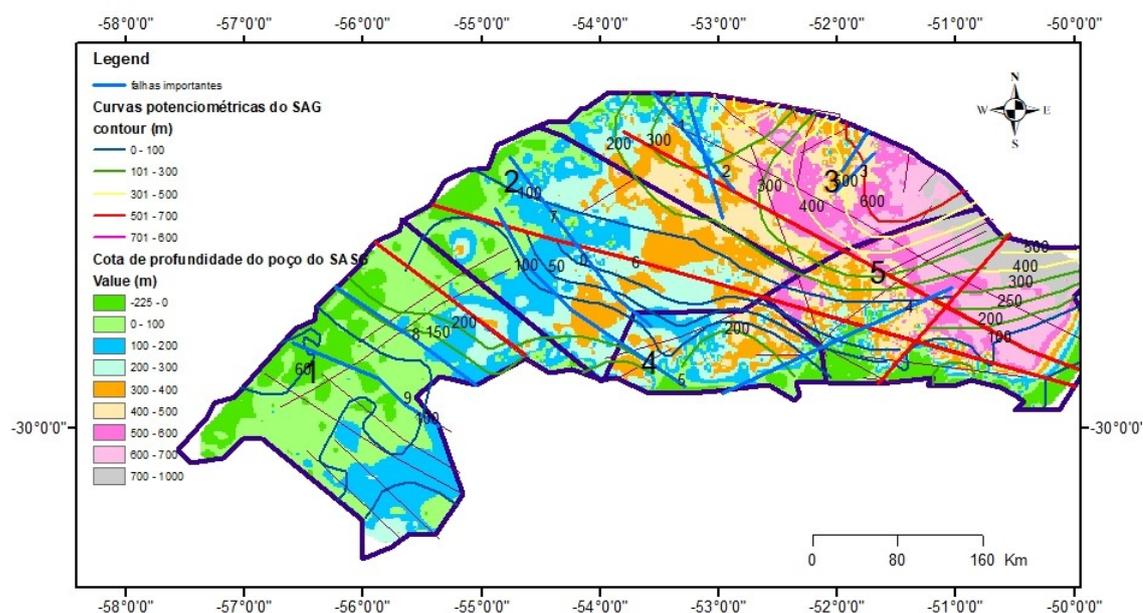


Figura 48 - Mapa potenciométrico do SAG e cota de profundidade do poço no SASG no Rio Grande do Sul

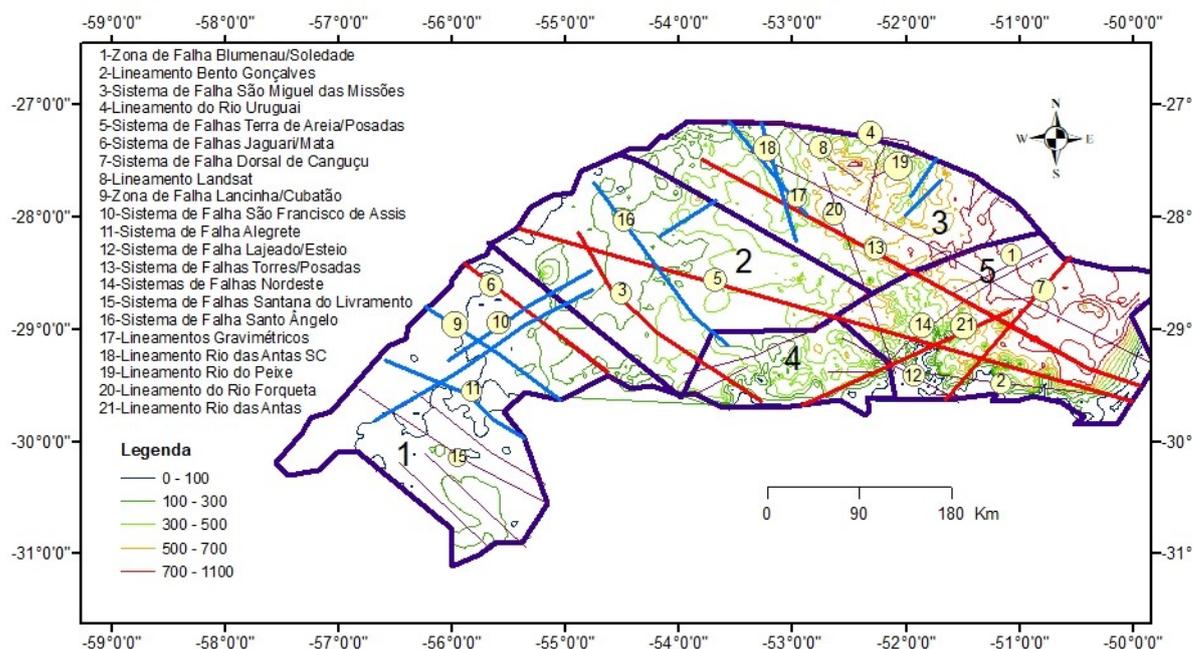


Figura 49 - Isolinhas potenciométricas do SASG e principais falhas que cortam o SASG no Rio Grande do Sul. Números maiores representam as zonas e o número em círculos são as principais falhas. As falhas em vermelho representam falhas que serviram de referência para a compartimentação hidroquímica. As falhas em azul contribuem para alterar os valores potenciométricos.

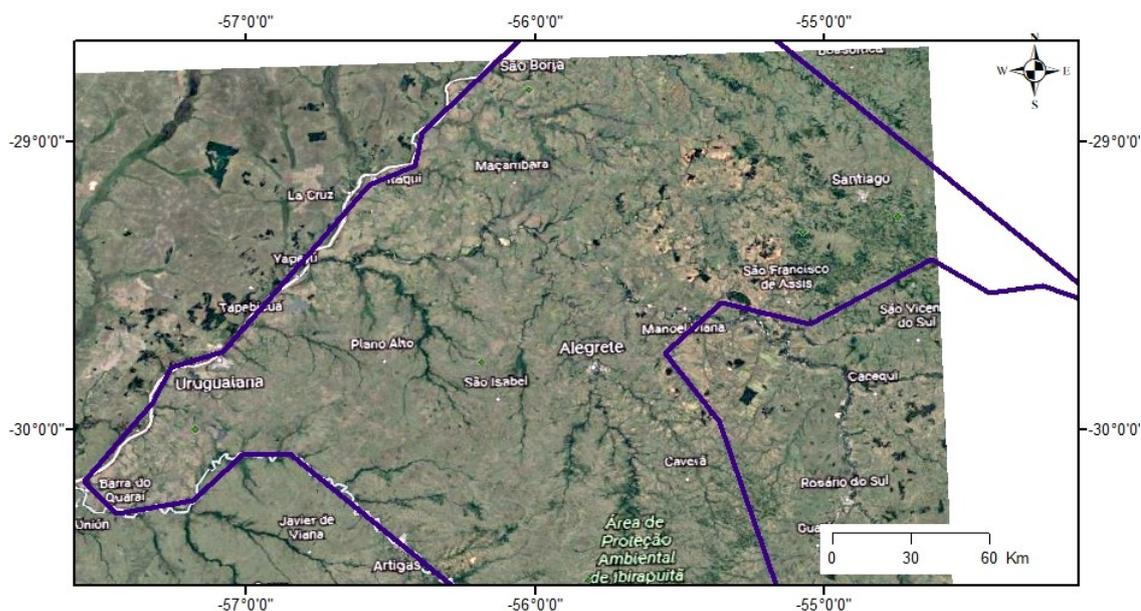


Figura 50 -Municípios na zona 1.

Na zona 1 tem direções preferenciais noroeste. As cotas do SAG ao sul da calha do rio Ibicuí raramente ultrapassam +150 m. A partir do município de Alegrete o SAG tendem a um mergulho suave em direção a oeste (Machado, 2006). O gradiente deste mergulho é de aproximadamente 1m/Km. Nesta zona as linhas de fluxo seguem a partir de Alegrete para Quaraí. Estas linhas potenciométricas do SASG (Figura 51) tem os mesmos valores do SAG (100) e facilitam a comunicação entre os aquíferos. Por este motivo explica-se os altos índices de salinidade em Uruguaiana e Quaraí. No município de Itaqui, as cotas de captação dos poços do SASG são muito baixas e explicam a baixa salinidade dos poços neste local. A oeste da cidade de Santana do Livramento, os níveis potenciométricos são concêntricos e dirigem-se para várias direções. A partir de Santana do Livramento, o fluxo é norte sul, e valores altos de salinidade são registrados no sul da área, onde a potenciométrica do SAG é 150 e do SASG é de cerca de 300. No leste da zona, na região da cidade de Unistalda em direção aos municípios de Santiago e São Pedro do Sul, a potenciométrica do SAG e do SASG é de cerca de 200, possibilitando a comunicação entre os dois sistemas aquíferos.

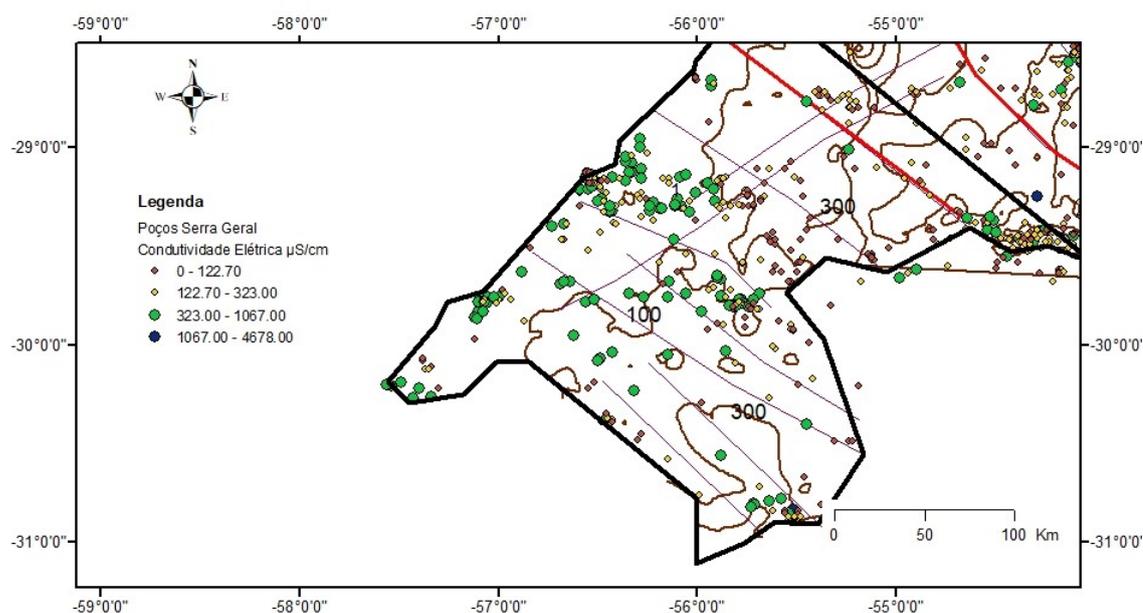


Figura 51 - Mapa potenciométrico do SASG e concentrações de condutividade elétrica na zona 1. Condutividade elétrica em $\mu\text{S}/\text{cm}^3$.

A zona 2 ocupa mais ou menos a área conhecida como Central/Missões de Machado (2006). A partir de São Luiz Gonzaga (Figura 52) existe um mergulho das isolinhas em várias direções, com uma cota de +106 m para o SAG, conforme Machado (2006), e em torno de 100 m para o SASG. Existe um baixo estrutural na região de Nova Palma devido a um cruzamento de falhas nordeste e noroeste.

A pressão hidrostática acompanha o mergulho das camadas sedimentares em direção ao norte, sendo que os valores variam de +300 m até aproximadamente o nível do mar, indicando que a recarga do SAG e do SASG se processa nas regiões ao sul, nas proximidades da escarpa do planalto (Machado, 2006). As linhas de fluxo se dirigem para o Sistema de falha Terra de Areia-Posadas, demonstrando ser esta estrutura tectônica a principal área de descarga desta porção central do SASG. No Norte destas estruturas, as cotas de captação do SASG são mais altas em relação as cotas ao Sul desta falha, onde as cotas de captação extremamente baixas do SASG indicam fluxo descendente de águas do SASG e impedem a ascensão de águas salinizadas. De fato, as isolinhas do SASG servem de referência e normalmente são um bom indicativo de onde pode acontecer a mistura, mas o que determina ou não a mistura é a comparação das isolinhas do SAG com as cotas de captação do SASG, que são mais profundas que as isolinhas do mesmo.

Os valores de vazão específica aumentam exatamente em cima desta falha. A potenciometria do SAG em todo o sul da área é menor que a do SASG (100 contra 300). Isso faz com que esta parte tenha valores baixos de sódio, que não ultrapassam nunca 70 mg/L. A única exceção é o município de Jari, no Sudoeste, onde as cotas potenciométricas do SAG alcançam 300 metros, e poços com até 700 mg/L de sódio são encontrados. Próximo ao Rio Uruguai, no município de Santa Rosa, que está acima do SFTA/P, os valores potenciométricos do SAG e do SASG coincidem em cerca de 100 m. Em São Luiz Gonzaga, apesar das cotas potenciométricas coincidirem, os valores de salinidade não são tão altos. Isso provavelmente ocorre porque a densidade de fraturamento de falhas menores não é grande ali, o que impede a conexão entre os sistemas aquíferos. Até mesmo um fluxo descendente do SASG não é descartado. A condutividade elétrica é maior em locais onde a potenciometria do SASG e do SAG é baixa.

Valores de condutividade elétrica (Figura 53) altos são encontrados apenas onde as cotas potenciométricas do SASG não ultrapassam os 300 m ou ao Sul do SFTA/P, e a densidade de fraturamento de falhas menores que 5 Km não é alto. Quanto à vazão, O SFTA/P é muito importante por aumentar os valores de vazão significativamente. Isso prova mais uma vez que as grandes falhas regionais têm muito poder para aumentar as vazões dos poços. Valores altos de vazão nem sempre são acompanhados por altos valores de salinidade, porque estas são mais dependentes de um alto grau de fraturamento no entorno das grandes falhas.

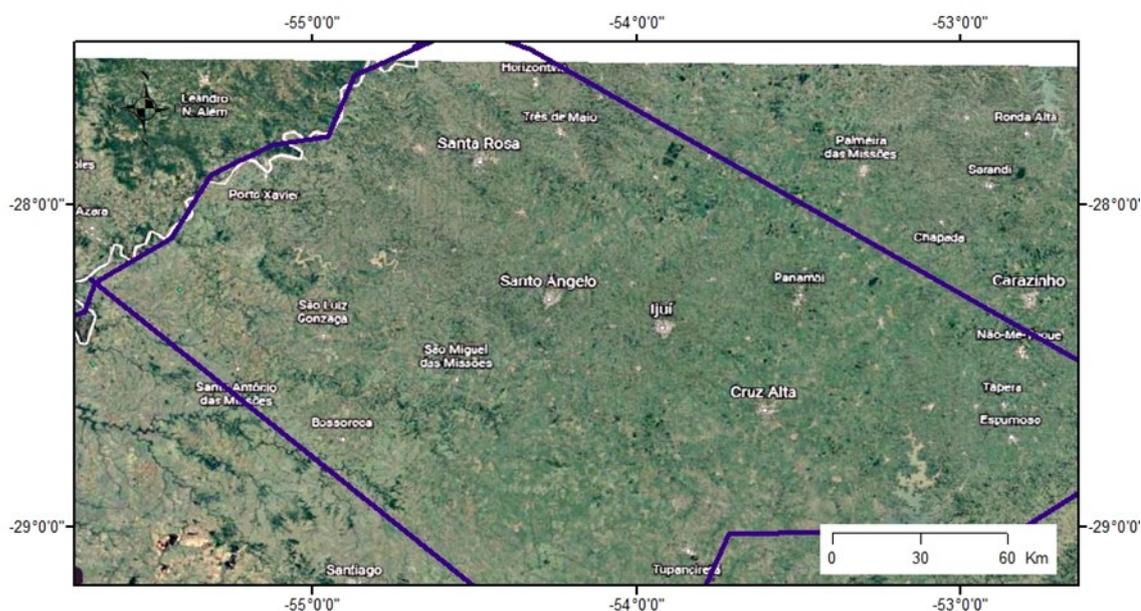


Figura 52 - Municípios da zona 2.

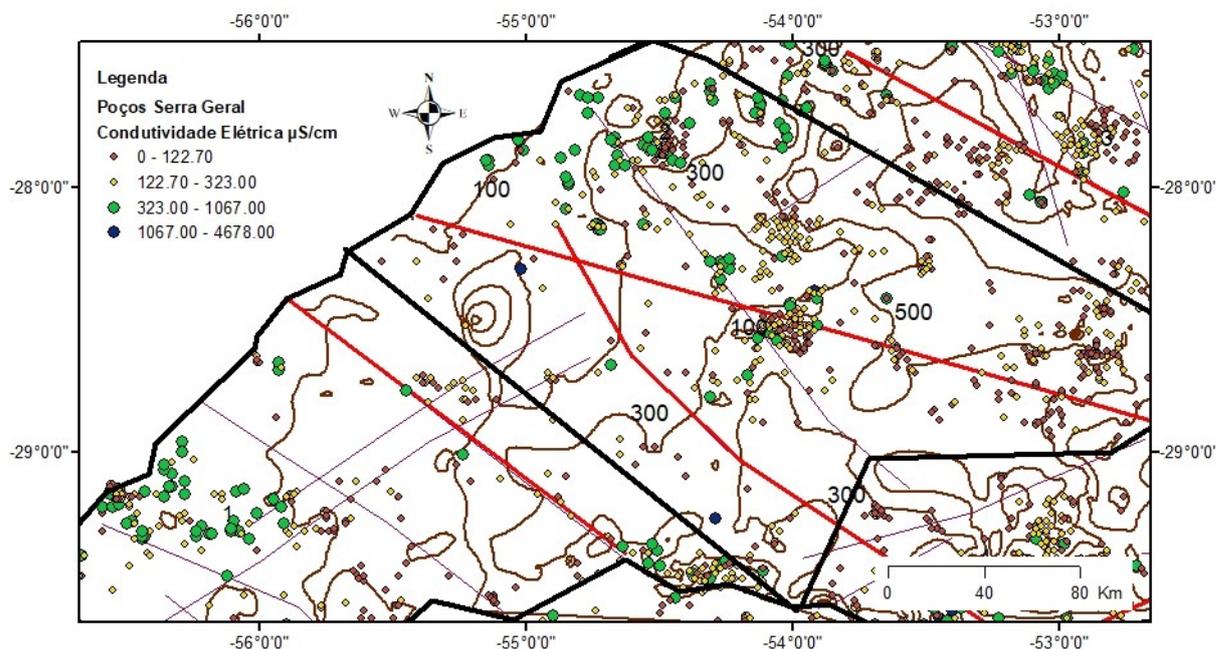


Figura 53 - Mapa potenciométrico do SASG e concentrações de condutividade elétrica na zona 2.

Na zona 3, a falha gravimétrica de direção N160 atua muito fortemente para reduzir a potenciometria tanto do SAG quanto do SASG. As linhas claramente contornam esta estrutura, sendo que valores altos de salinidade coincidem exatamente com esta estrutura, que nasce mais ou menos em Frederico Westphalen (Figura 54). Em direção ao sul da zona 3, os valores de cota de captação dos poços do SASG são bastante elevadas e dificultam a conexão com o SAG. Isso fica bastante evidente na análise de K-means em que o grupo 3 com baixa salinidade está presente na parte leste desta zona e impossibilita a conexão entre o SASG e o SAG. As concentrações altas de sódio, cálcio, alcalinidade e condutividade elétrica são concentradas todas nos mesmos locais próximos ao rio Uruguai, ao longo da falha gravimétrica e dos lineamentos que vem de Santa Catarina, como o Rio do Peixe.

Na zona 3, percebe-se que existe uma influência muito grande do domo de Lages, proporcionando uma extensa área de recarga no Norte desta zona. A direção principal das estruturas associadas a este domo é nordeste. Os níveis estáticos próximos ao município de Lages estão em 800 m e no Rio Grande do Sul, em 700 e 600 m (Machado, 2006).

Na região centro-oeste desta zona, o SAG está bastante profundo e não permite intensa conexão com o SASG (Figura 55).

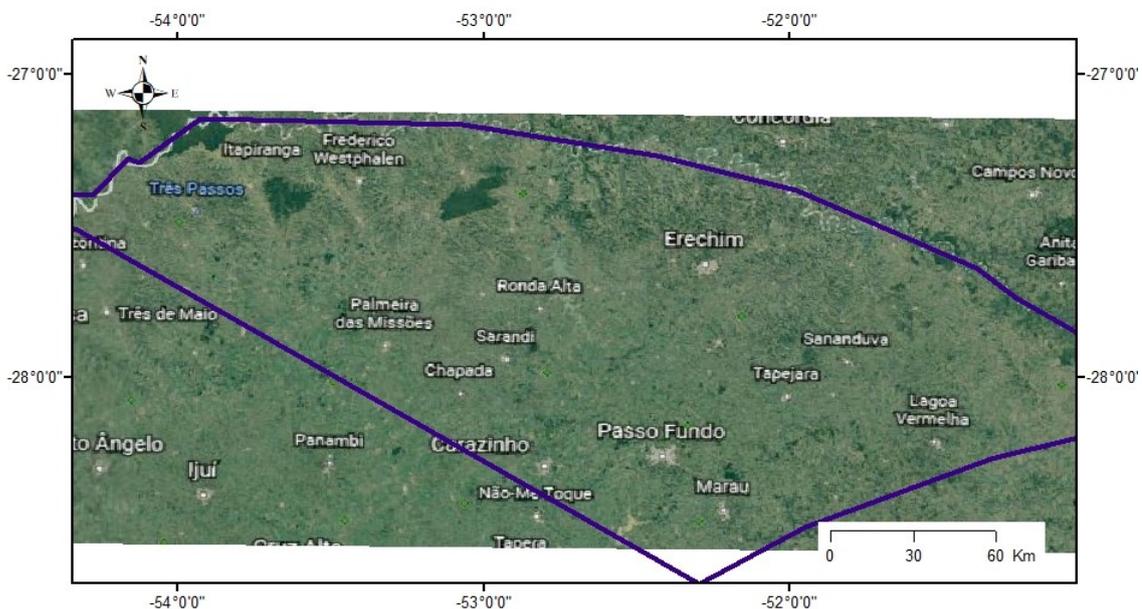


Figura 54 - Municípios da zona 3.

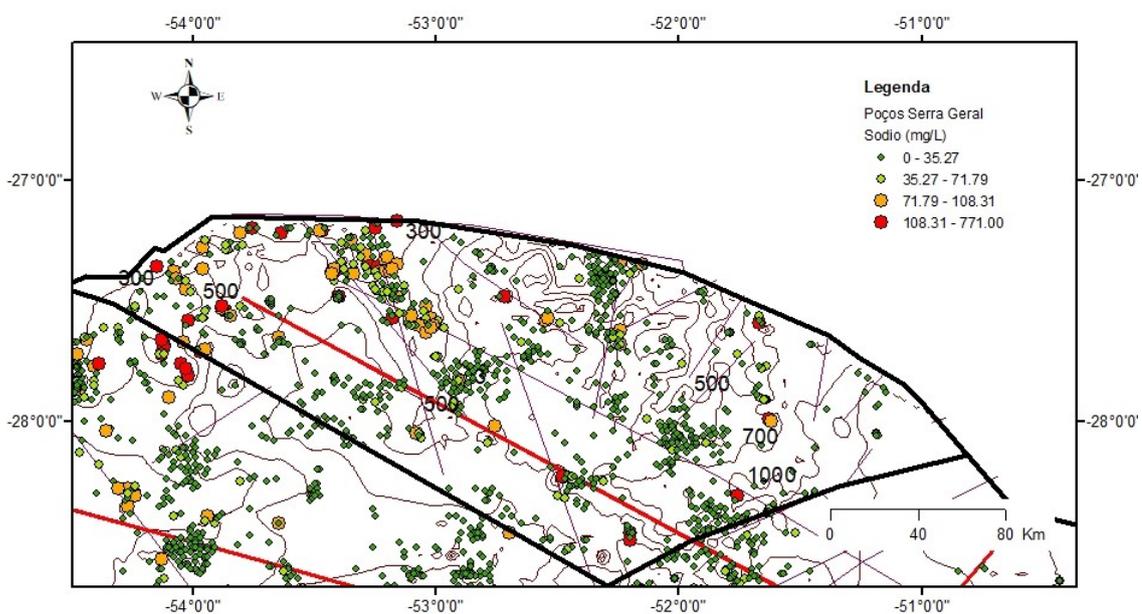


Figura 55 - Mapa potenciométrico do SASG na zona 3.

Na zona 4 percebe-se que um valor negativo de cotas no contato do SAG com SASG entre Lajeado e Teutônia (Figura 56), com influência de estruturas

nordeste. As zonas de recarga se dão no Sul desta zona, na zona de escarpa. Os valores de pressão hidrostática acompanham o mergulho do contato do SAG com o SASG em direção ao norte. As linhas de fluxo dirigem-se em direção ao sistema de falhas Terra de Areia-Posadas. A partir de Nova Palma, no Norte desta zona, começam a predominar estruturas noroeste.

Tanto as isolinhas potenciométricas do SAG quanto as do SASG ficam baixas no extremo Oeste como no extremo Leste da zona. Nessas duas áreas é onde acontece a mistura das águas dos dois sistemas aquíferos com cotas de 100 metros para ambos. Na zona central existem poços de alta concentração de cálcio e poucos poços com alta salinidade são encontrados mesmo com cotas mais altas por se tratar de uma área de extenso fraturamento.

O LSMM possui um papel fundamental para a alta salinidade na parte Oeste da zona 4 (Figura 57). O mesmo acontece com o lineamento do rio das Antas que corta a parte leste desta zona. Os mapas variográficos do sódio mostram direção preferencial N113, muito próximo da direção do LSMM que atravessa o oeste da zona. Na zona central existe também conexão do SASG com o SAG muito por causa do grande fraturamento de lineamentos menores que 5 Km.

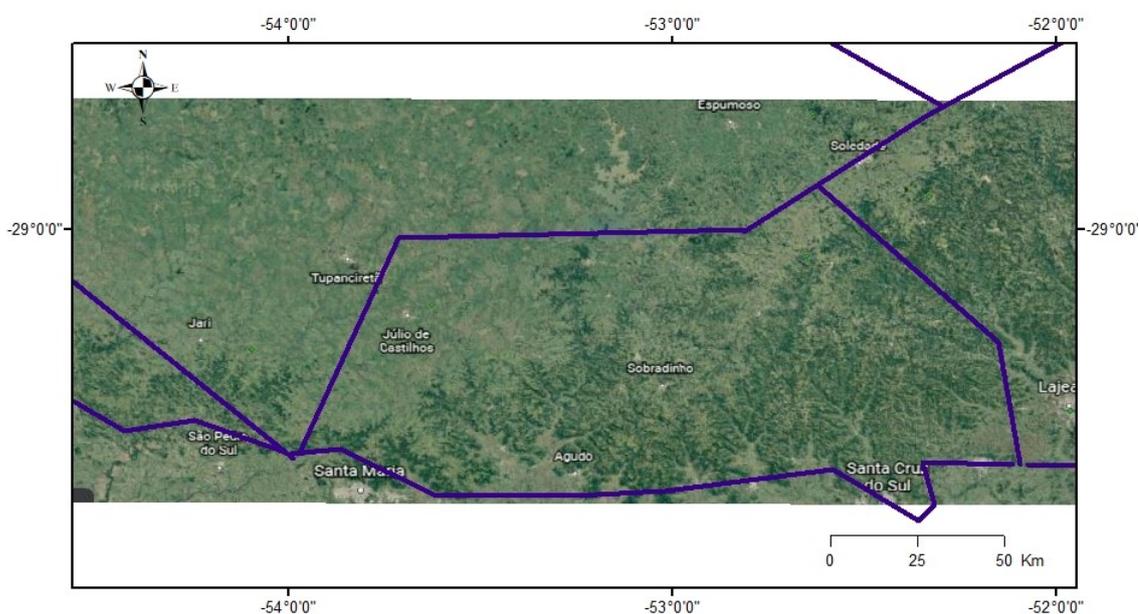


Figura 56 - Municípios da zona 4.

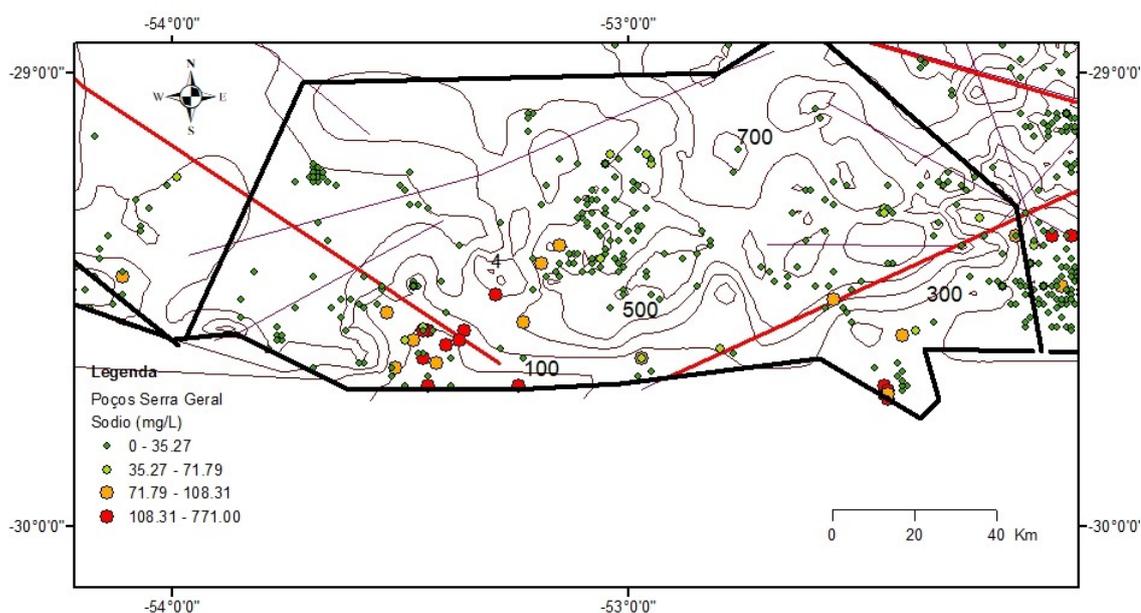


Figura 57 - Superfícies potenciométricas do SASG e concentrações de sódio na zona 4

Nota-se que o lineamento do Rio das Antas que corta as zonas 4 e 5 com orientação N45E tem muita importância para a diminuição das cotas potenciométricas na zona 5. Os municípios de Veranópolis e São Valentim do Sul tem poços de alta salinidade justamente por estarem sobre esta grande falha. As cotas potenciométricas ao redor desta falha ficam próximas de 100 tanto para o SAG quanto para o SASG.

De acordo com o mapa potenciométrico do SAG, é possível verificar-se que a área regional de descarga do SAG está relacionada as regiões litorâneas. As linhas de fluxo seguem um gradiente sudeste, indo descarregar suas águas na região litorânea onde ocorre importante cordão de lagoas. Para o restante da área, a isolinha de +100 m ocupa a área que vai do litoral norte até as proximidades de São Joaquim. Em todo o restante da zona os valores vão de +100 a +200 m dependendo do grau de erosão do arenito Botucatu.

Na zona 5, é possível identificar três áreas principais:

1°) Na região nordeste do município de Caxias do Sul (Figura 58) as cotas do topo do SAG crescem substancialmente em direção ao município de São Joaquim (SC), passando de +100 m logo ao norte da cidade de Caxias para +600 m logo ao sul da cidade de São Joaquim (SC). Toda esta região está soerguida devido a esforços vinculados ao levantamento da Serra do Mar. Mesmo assim, as cotas do

SASG são muito mais altas que as do SAG e impedem a mistura entre os dois sistemas aquíferos nesta área.

2º) Da região que sai de Novo Hamburgo a Caxias do Sul, destaca-se o município de Morro Reuter, como possuidor das maiores altitudes do topo do SAG, que alcança +200 m. Machado (2006)

Entre os municípios de Caxias do Sul e São Joaquim (SC), o nível potenciométrico varia de +150 m a valores que superam +500 m, com um gradiente hidráulico de 6,4 m/Km. As linhas de fluxo estão limitadas pelo falhamento nordeste correspondente à falha do Leão indicando que a recarga está associada com o alto relacionado com a região de São Joaquim. Na região do município de Morro Reuter, acompanhando as feições estruturais, as curvas apresentam um formato ovalado de direção Leste Oeste, com as linhas de fluxo em direção Norte-Sul-Leste-Oeste dirigindo-se aos cursos de água da região. É possível verificar que a área de descarga regional está relacionada com as mesmas estruturas que controlam o topo do SAG e dirigem-se para o litoral (Machado, 2006).

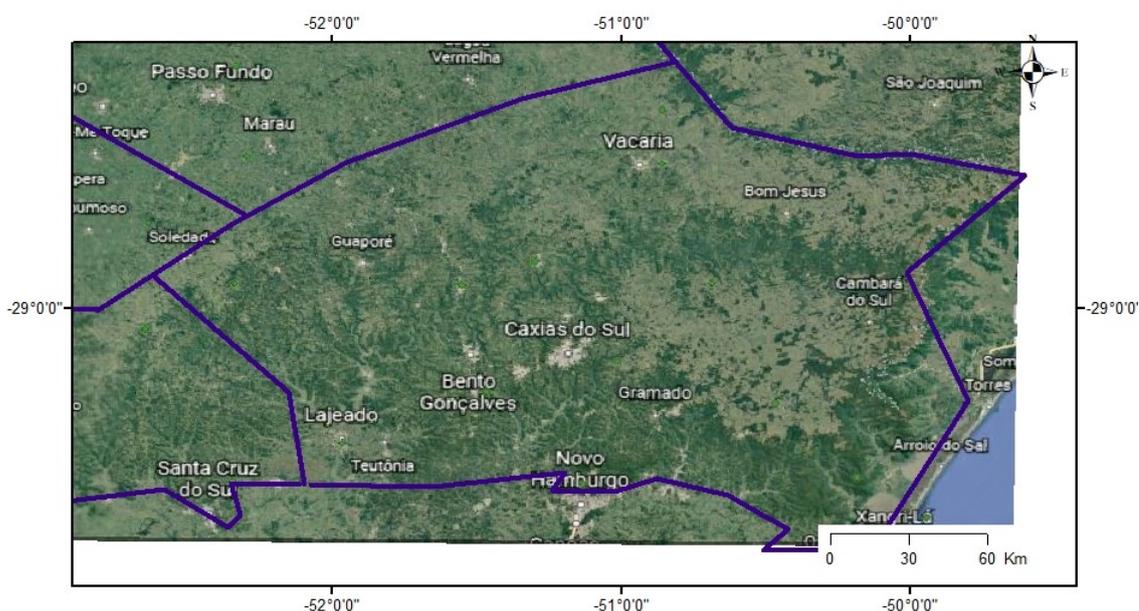


Figura 58 - Municípios da zona 5

Cotas potenciométricas que circundam a falha rio das Antas do SASG (Figura 59) tem valores que vão de 100 a 300 m tanto do SAG quanto do SASG. Nessa área ocorrem as maiores concentrações de condutividade elétrica, sódio e cálcio. Ao

longo da escarpa e no litoral essas baixas cotas potenciométricas acontecem e os valores de condutividade elétrica também são altos. O SFTA/P parece influenciar estes valores. O cálcio e o sódio também têm valores altos próximo ao município de Guaporé, indicando que este elemento é controlado por outros fatores além dos estruturais. Em Guaporé, as cotas potenciométricas do SAG e do SASG são mais ou menos as mesmas (300 m) e permitem a mistura. O SFTP não controla a salinidade representada pelo sódio e pela condutividade elétrica, mas controla a vazão porque os valores mais altos de vazão específica estão alinhados ao longo desta falha. No Norte, extremo Oeste, Leste e Nordeste, as cotas potenciométricas do SASG são muito altas e impedem qualquer conexão entre o SASG e o SAG.

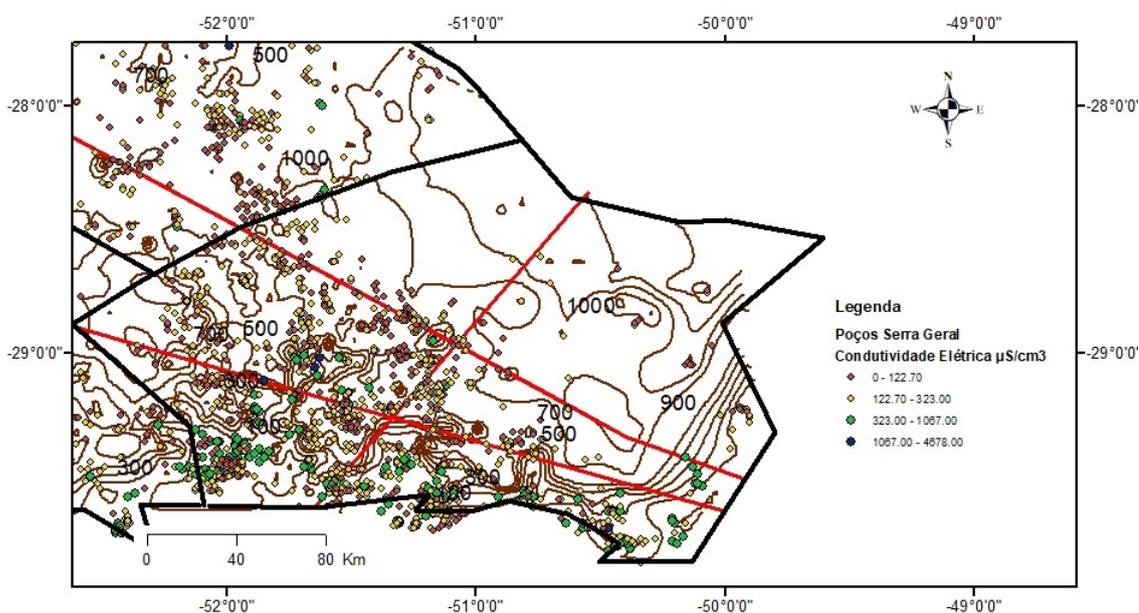


Figura 59 - Superfícies potenciométricas e concentrações de condutividade elétrica na zona 5

4.5 Simulação Geoestatística

A simulação geoestatística tem como objetivo a caracterização do fenômeno analisado, respeitando suas estatísticas de primeira e segunda ordem (média, variância e continuidade espacial), sem a suavização apresentadas por métodos de estimativas. As simulações são baseadas em métodos de monte carlo, apresentando componentes aleatórias devido ao nosso desconhecimento do fenômeno de forma completa. Dessa maneira, as simulações têm como objetivo, realizar diversos cenários equiprováveis do fenômeno e quantificar a incerteza

associada ao mesmo. Uma maneira de fazer isso é através do uso da variância condicional (Figura 60). Para cada ponto do modelo gerado, tem-se n possíveis valores, um para cada simulação, e através deles pode-se obter o valor médio e o espalhamento das simulações em torno dessa média.

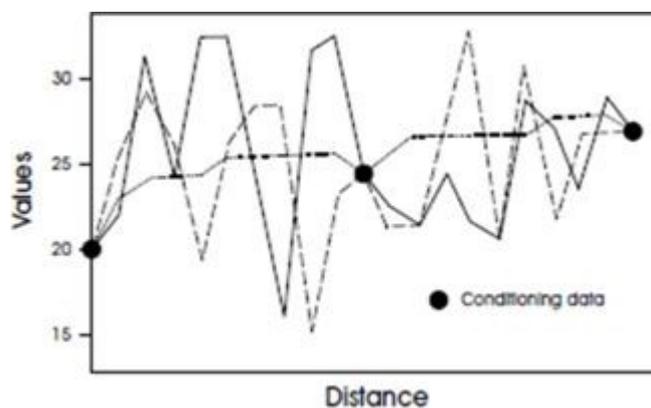


Figura 60 - Uma comparação de dois perfis, sendo que um deles é da malha amostral (linha sólida) e outro é de valores simulados no mesmo local (linha tracejada). Note a semelhança na curva de variabilidade desses dois conjuntos. (Adaptado de Journel 1977).

A variância condicional pode estar associada a variabilidade intrínseca do fenômeno, baixo condicionamento amostral alta. Nessa tese a variância condicional está associada a zonas de recarga ascendente. Nessas regiões específicas, tem-se alguns valores diferentes da média local, os quais poderiam ser considerados como uma segunda população ou outliers. É esperado que esses valores coincidam com as falhas regionais que atravessam cada uma das zonas. A variância condicional mais elevada geralmente está bem alinhada com as grandes falhas regionais.

Na zona 1, o mapa da variância condicional da alcalinidade (Figura 61) concentra-se no entorno do Rio Uruguai e seguindo as mesmas direções das falhas Alegrete e Santana do Livramento. Isso explica-se (faixas lilás) porque as falhas tendem a causar uma variação muito abrupta em amostras vizinhas às amostras simuladas. Nas zonas que sofrem menor influência de grandes falhas essa variação é menor, e teores em azul são comuns. Estas faixas em azul se destacam no município de Manoel Viana e São Francisco de Assis e Caverá. Em Uruguaiana a média da simulação acompanha os valores altos de desvio padrão de Cálcio, mas em São Borja, os valores de desvio padrão são baixos. O E-Type da alcalinidade (Figura 62) é bem diferente da variância condicional e as manchas mais pronunciadas estão restritas a Uruguaiana, no extremo Sul, em Maçambará e em

São Pedro do Sul. Isso indica que nestes locais existe muita incerteza quanto aos valores simulados mesmo onde existem baixos valores de E-Type.

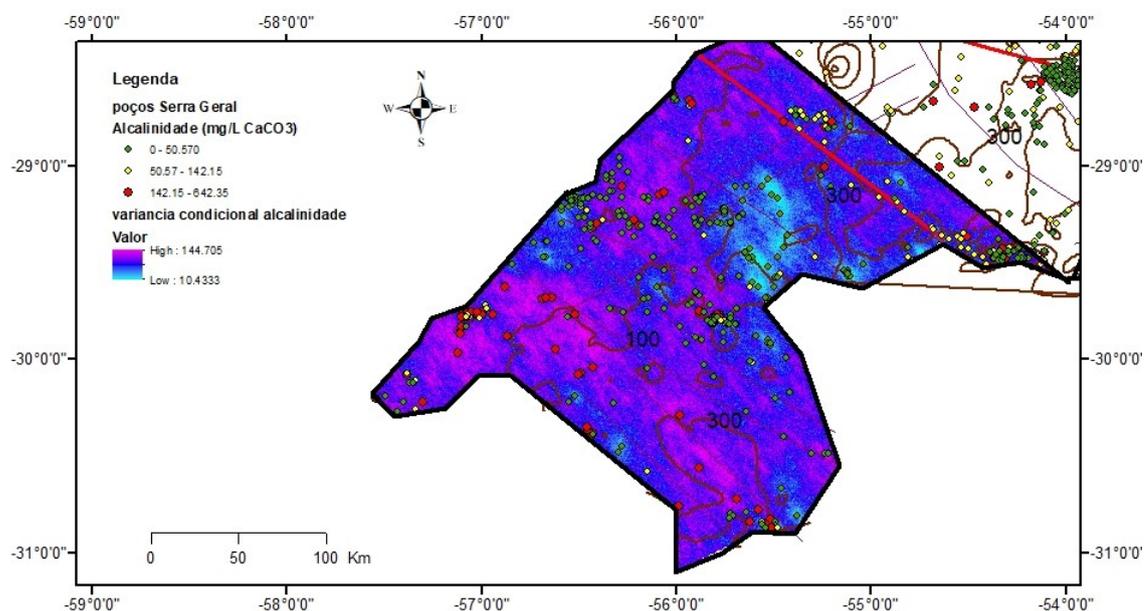


Figura 61 - Variância condicional da alcalinidade e malha amostral da alcalinidade na zona 1. Potenciometria do SASG. Valor alto (144,7) e baixo (10,43) de variância condicional da alcalinidade. Valor alto da malha amostral da alcalinidade (642,36).

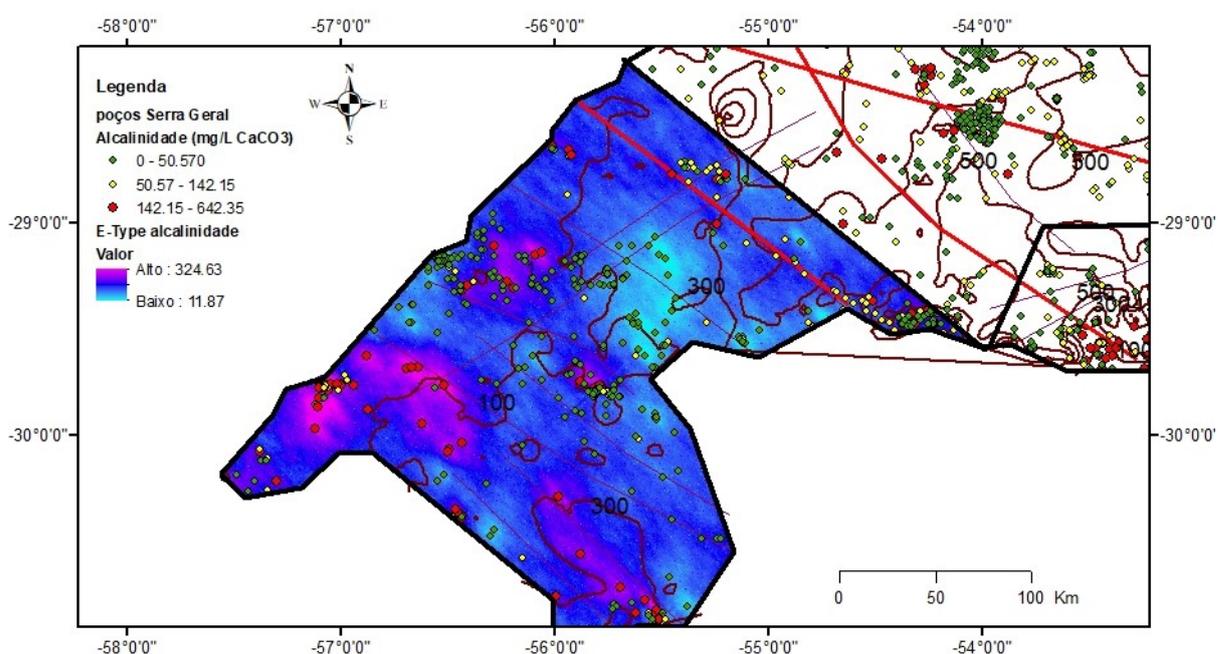


Figura 62 - E-Type da alcalinidade e malha amostral da alcalinidade na zona 1 e linhas potenciométricas do SASG.

O E-Type de cálcio (Figura 63) tem valores altos menos pronunciados que a alcalinidade, mas segue os mesmos padrões. A variância condicional da simulação

de cálcio (Figura 64) aponta para a mesma direção de grandes falhas NW (Figura 64), enquanto o E-Type da simulação tem valores mais altos restritos no Sul e no extremo Oeste. A variografia do cálcio tem um sentido preferencial NS, enquanto a alcalinidade tem um sentido preferencial NW. O sódio tem uma alternância de valores altos na direção NE e NW, como mostrado na variografia, seguindo também a orientação das principais grandes falhas. Este elemento parece ter mais influência das direções NE em relação aos demais. A simulação de número 2 da condutividade elétrica (Figura 65) segue o mesmo padrão do E-Type da alcalinidade e do sódio, diferindo apenas na concentração maior de amostras no município de São Isabel.

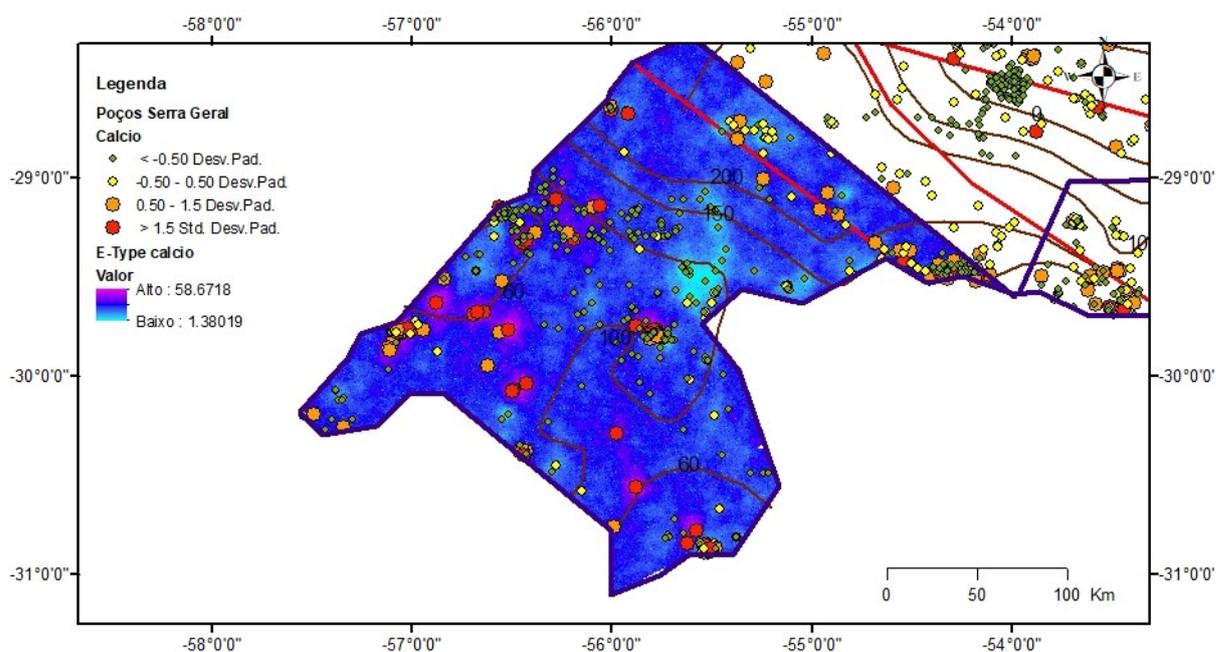


Figura 63 - E-Type do cálcio com desvio padrão da malha amostral do cálcio e linhas potenciométricas do SAG na zona 1

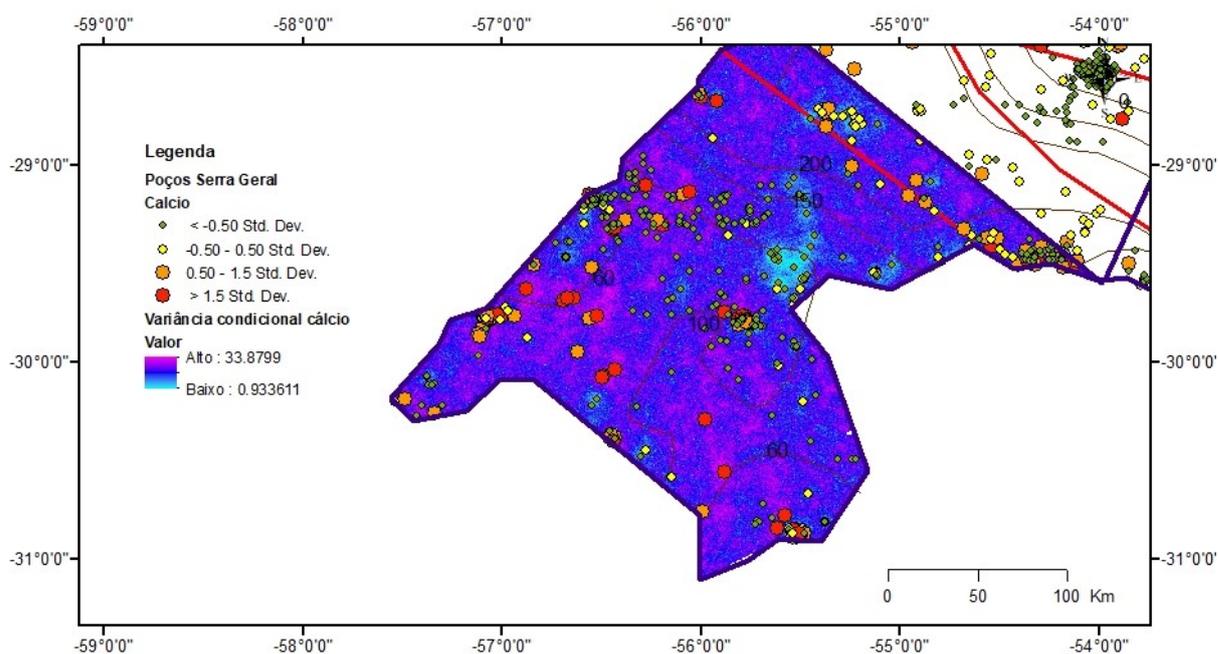


Figura 64 - Variância condicional do cálcio com desvio padrão da malha amostral do cálcio e linhas potenciométricas do SAG na zona 1.

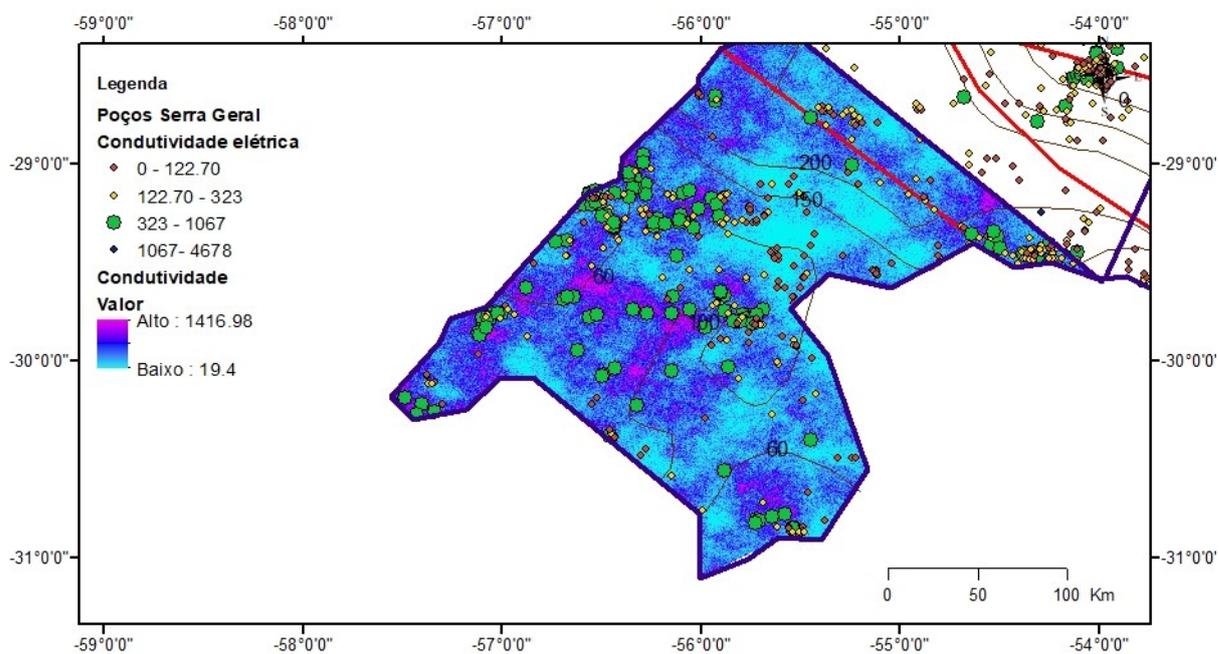


Figura 65 - Simulação de número 2 da condutividade elétrica, com malha amostral de condutividade elétrica e linhas potenciométricas do SAG na zona 1. Condutividade elétrica em $\mu\text{S}/\text{cm}$

Na zona 2, a variabilidade é maior do centro para o norte da área, justamente onde existe o grupo 2 da análise de K-means com teores mais altos de sódio e na

malha amostral do sódio onde os pontos com desvio padrão alto coincidem perfeitamente com o desvio padrão da simulação.

A variância condicional da simulação da alcalinidade (Figura 66) quanto o E-Type da alcalinidade (Figura 67), apesar de este último ter erraticidade abaixo do SFTA/P mesmo tendo valores baixos de simulação, possui o mesmo comportamento do desvio padrão da simulação do sódio no norte da área nos municípios de Santa Rosa e Porto Xavier, porém estas altas concentrações seguem direções NW, enquanto as orientações do E-Type de sódio (Figura 68) tem uma orientação NS e NE. As linhas potenciométricas nestas duas cidades não ultrapassa os 100 metros no SASG e no SAG. Porém, na zona central e sudoeste estes dois parâmetros têm comportamento distinto, sendo que a variância condicional da simulação do sódio é maior (Figura 69). O grupo 3 de K-means coincide com as zonas de menor variância condicional e comprova que este grupo representa áreas de pouca mistura e pouca variabilidade entre amostras vizinhas. A variância condicional do cálcio (Figura 71) é a única que apresenta uma grande variabilidade a oeste do SFTA/P e o sistema de falhas Santo Ângelo exerce muito influência nos valores altos de E-Type de cálcio (Figura 70).

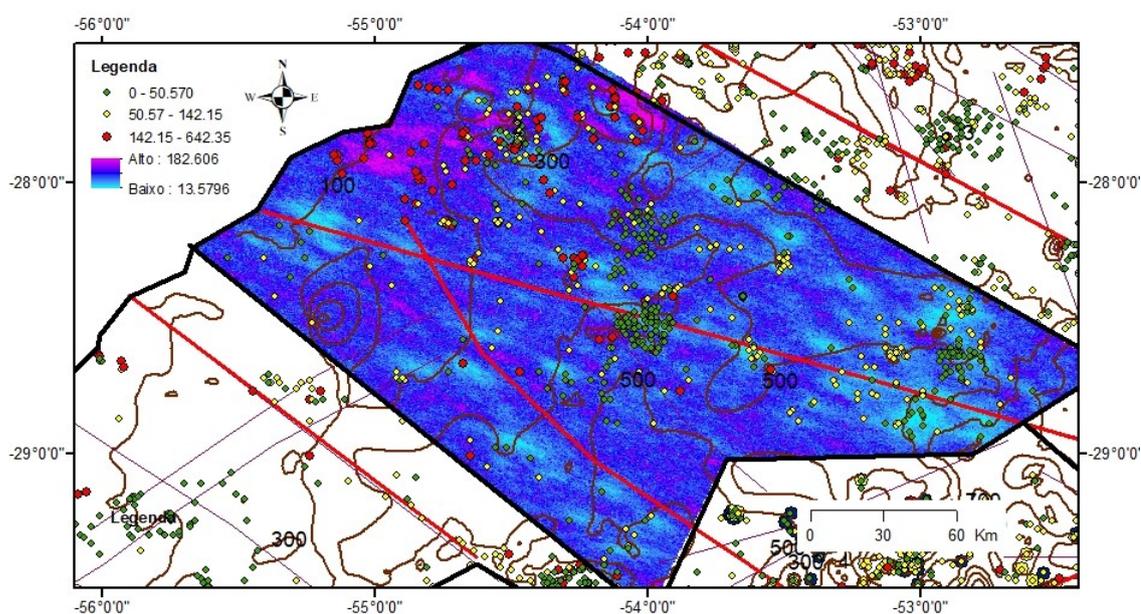


Figura 66 - Variância da simulação para a alcalinidade na zona 2 e malha amostral da alcalinidade com a potencimetria do SASG

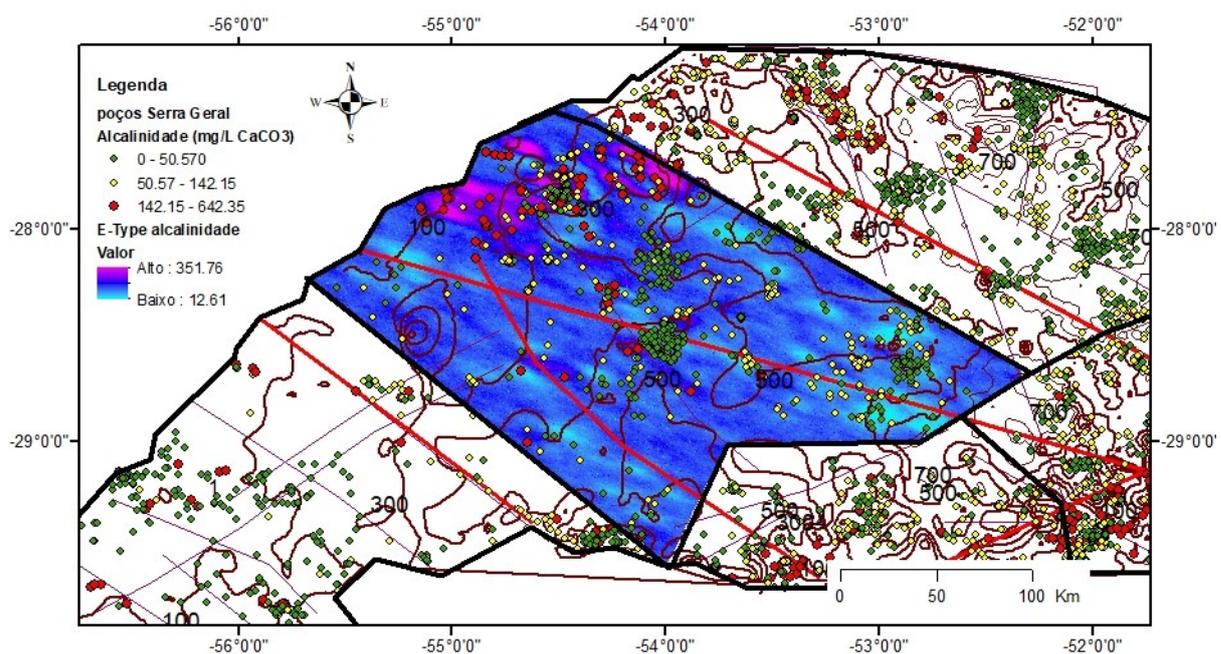


Figura 67 - E-Type da simulação para a alcalinidade na zona 2 e malha amostral da alcalinidade com a potenciometria do SASG.

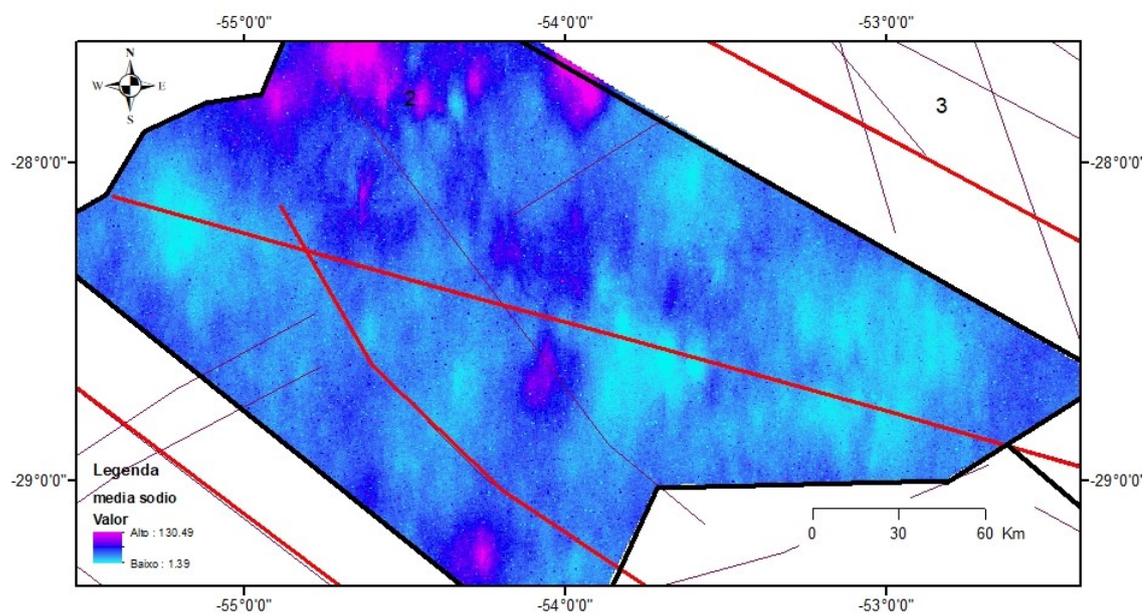


Figura 68 - Média da simulação (E-Type) de sódio na zona 2. Valor alto (130) e baixo (1,39)

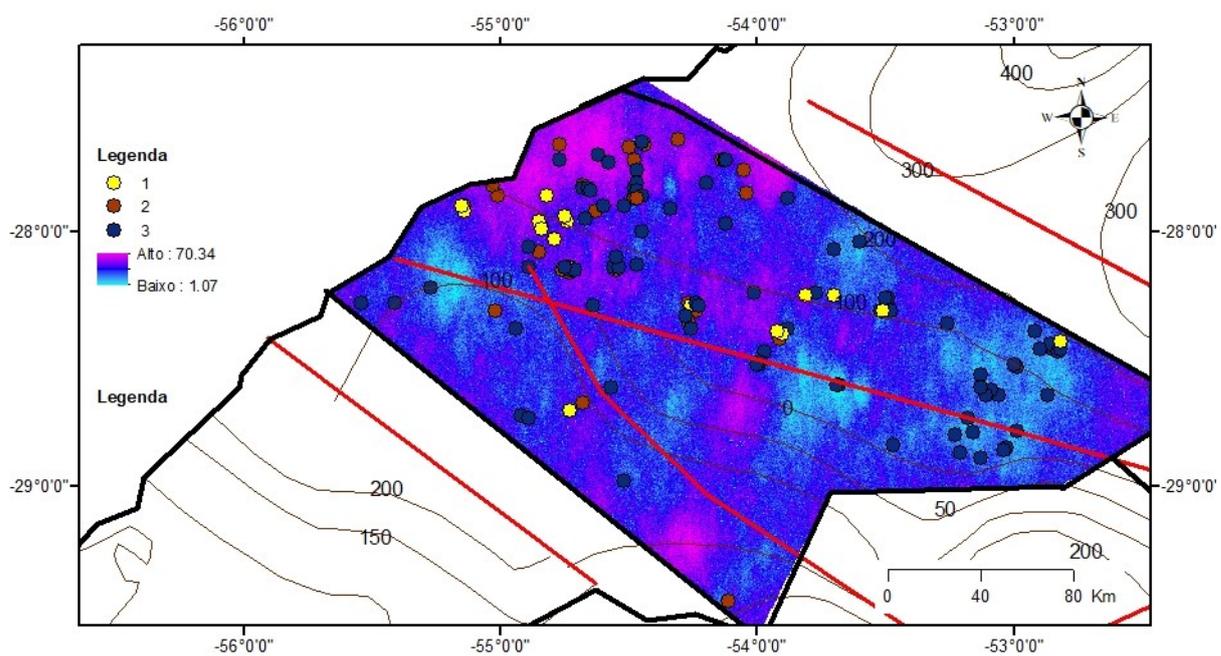


Figura 69 - Variância condicional do sódio com K-means na zona 2 com linhas potenciométricas do SAG.

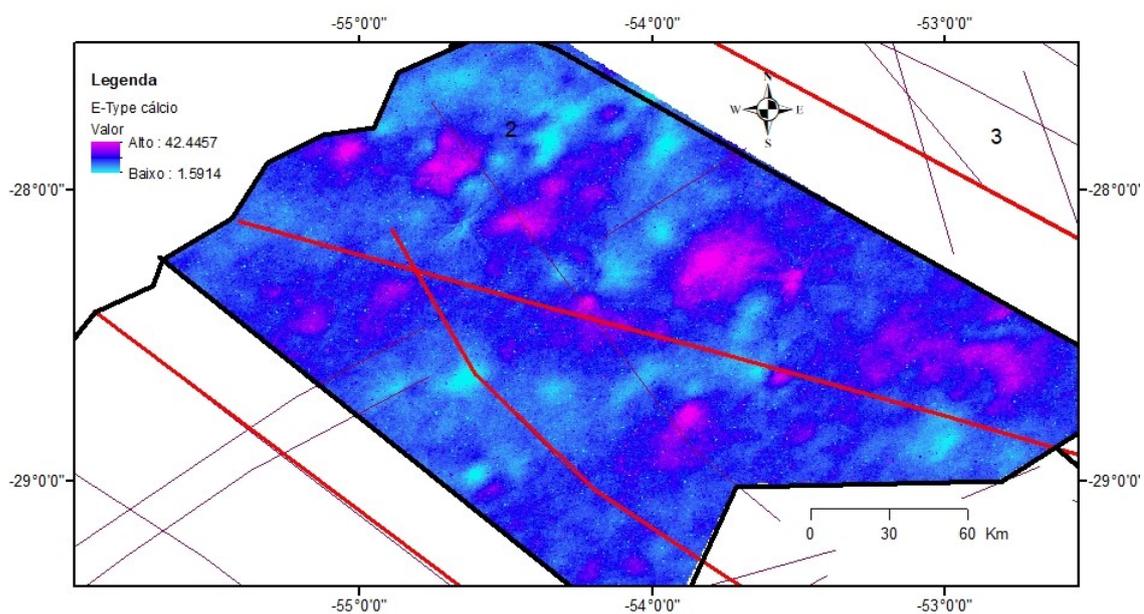


Figura 70 - E-Type do cálcio na zona 2. O sistema de falhas Santo Ângelo exerce muita influência nos valores altos de E-Type de cálcio.

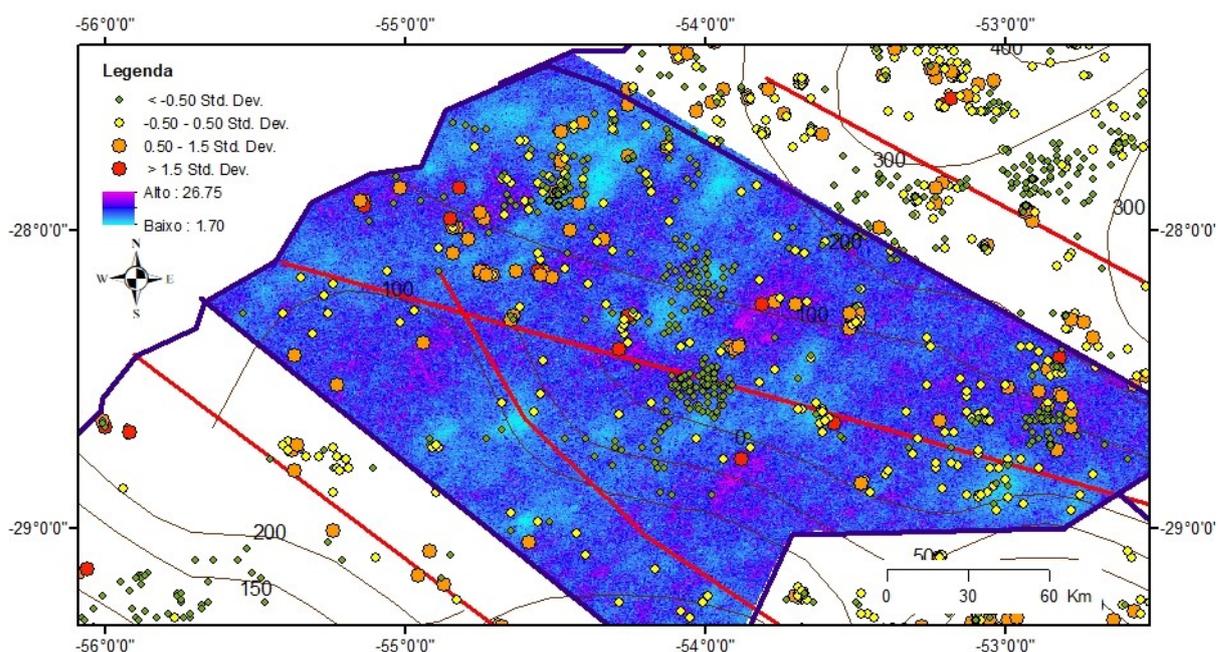


Figura 71 - Variância condicional do cálcio na zona 2 com malha amostral de desvio padrão de cálcio e linhas potenciométricas do SAG.

Na zona 2, as manchas com maior variabilidade da simulação de sódio têm orientação NE do Sul para o centro, e apenas no norte da área seguem para L-O seguindo a orientação do rio Uruguai. Isso é confirmado pela densidade de fraturas que indica que a parte central é dominada por estruturas NE. Essas manchas indicam que ali existe uma forte incerteza quanto aos valores simulados no entorno da malha amostral, indicando que nesta área provavelmente ocorre recarga ascendente. Este mesmo padrão é verificado pela média da simulação do sódio. O cálcio também tem essas manchas na direção NE e alinham-se com a zona de falha Lancinha-Cubatão, mas existem concentrações altas de simulação do cálcio também no Sul e no Leste da zona, indicando que este elemento não é tão controlado tectonicamente. A alcalinidade, curiosamente segue uma direção NW, o que mostra que a alcalinidade é mais controlada por estruturas maiores. O SFTA-P parece estar influenciando a distribuição de cálcio na zona 2. Os valores são mais altos a direita da falha. Isto pode ser explicado por recarga descendente. As cotas potenciométricas do SASG não ultrapassam os 300 metros, enquanto as do SAG não estão entre 100 e 300. Todos os municípios próximos ao Rio Uruguai têm altos valores médios de cálcio. Duas simulações de condutividade para a zona 2 (Figura 72) e (Figura 73) mostra que as simulações são diferentes uma da outra. Em 50

simulações existem 50 cenários diferentes. Apenas o E-Type da simulação e a variância condicional da simulação tem uma única imagem porque faz a média das médias da simulação e a variância das médias da simulação. De qualquer forma, não existe uma mudança significativa de uma simulação para outra como pode ser visto nas imagens.

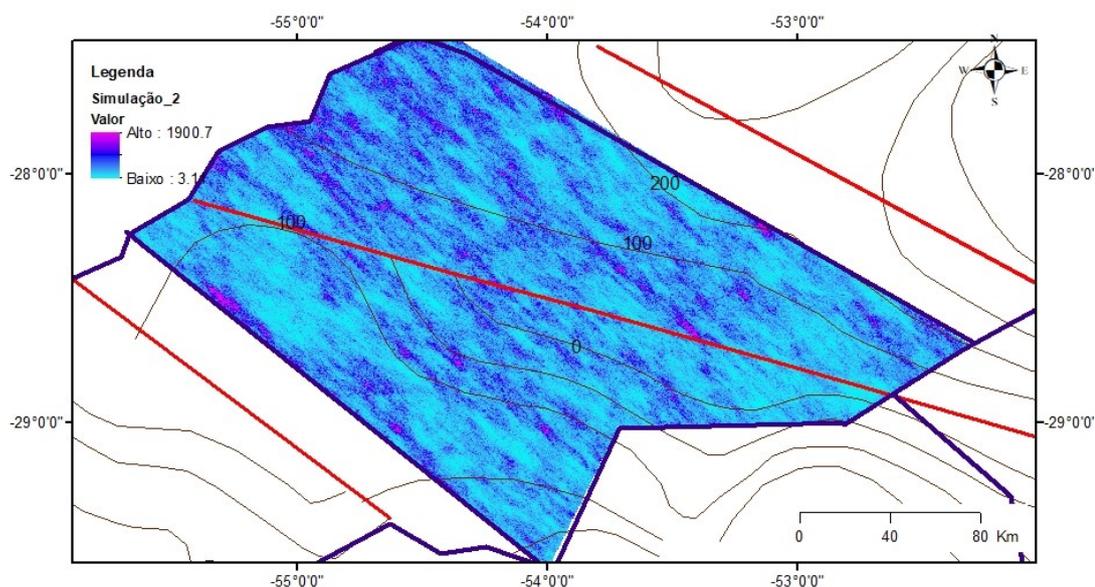


Figura 72 - Simulação número 2 para a condutividade na zona 2.

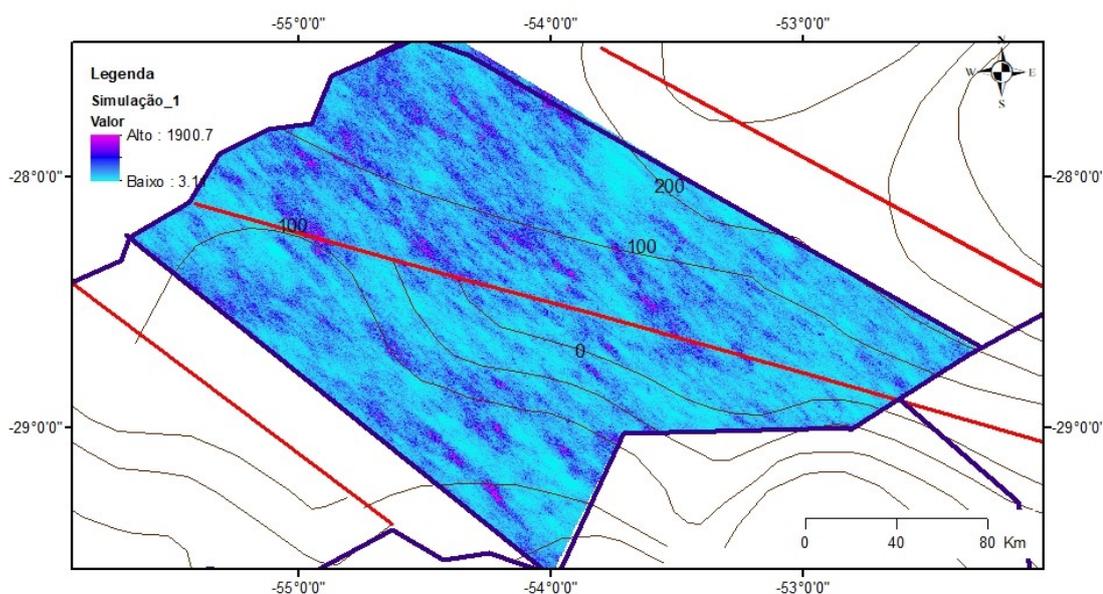


Figura 73 - Simulação de número 1 para a condutividade na zona 2 e a potenciometria do SAG

Na zona 3, o cálcio é bastante controlado por lineamentos à leste do lineamento Rio do Peixe, próximo a fronteira com Santa Catarina (Figura 74) e

(Figura 75). O mapa da variância condicional é muito similar ao mapa do E-Type. Curiosamente, estes lineamentos influenciam também a concentração de sódio, porém, o lineamento que mais influencia é o LRA-Sc (Figura 76) que tem direção N170. Já a alcalinidade parece seguir igualmente o Lineamento Rio das Antas de Santa Catarina e não é influenciado pelos mesmos lineamentos do cálcio no leste da área. Existe uma mancha de alcalinidade muito marcada ao norte de Lagoa Vermelha (Figura 77) que não existe nem para o sódio, nem para o cálcio. A variância condicional da alcalinidade (Figura 78) é baixa ao longo da falha Gravimétrica mesmo tendo valores altos de E-Type mostrando que existe pouca variabilidade nas amostras ao longo desta falha. Outra mancha, a oeste de Erechim, não existe igualmente para os referidos elementos. Quanto as isolinhas potenciométricas do SASG, estas alinham-se com o lineamento Rio das Antas, o que indica o quanto este lineamento tem potencial para diminuir as cotas potenciométricas deste sistema aquífero. O mesmo nota-se em relação aos lineamentos que vem de Santa Catarina em sentido norte-sul que corroboram igualmente para este efeito. As isolinhas potenciométricas do SAG seguem o mesmo padrão que as curvas do SASG. Parece haver um relacionamento íntimo entre as curvas do SAG e do SASG porque as mesmas são controladas pelas mesmas estruturas.

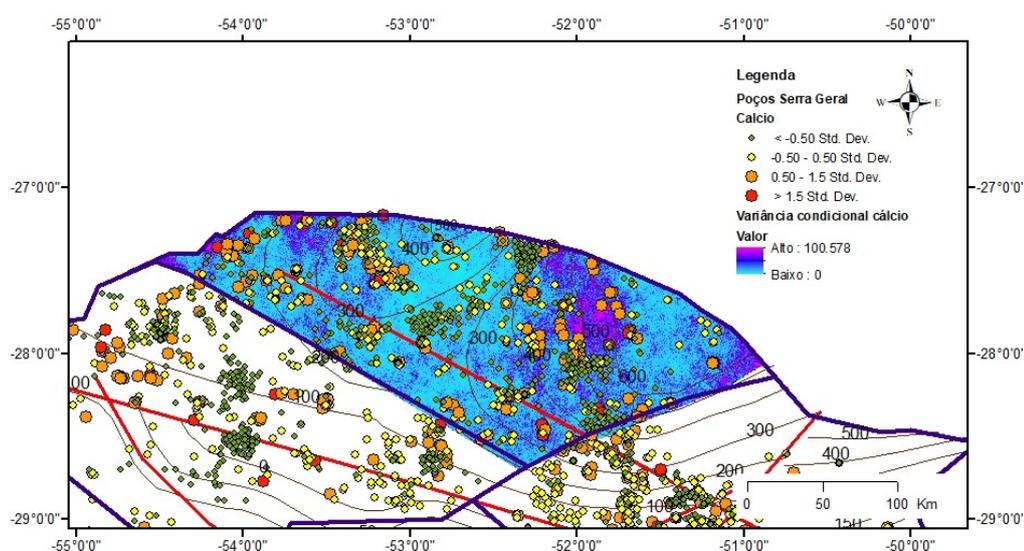


Figura 74 - Variância condicional do cálcio para a zona 3 com desvio padrão da malha amostral do cálcio e linhas potenciométricas do SASG.

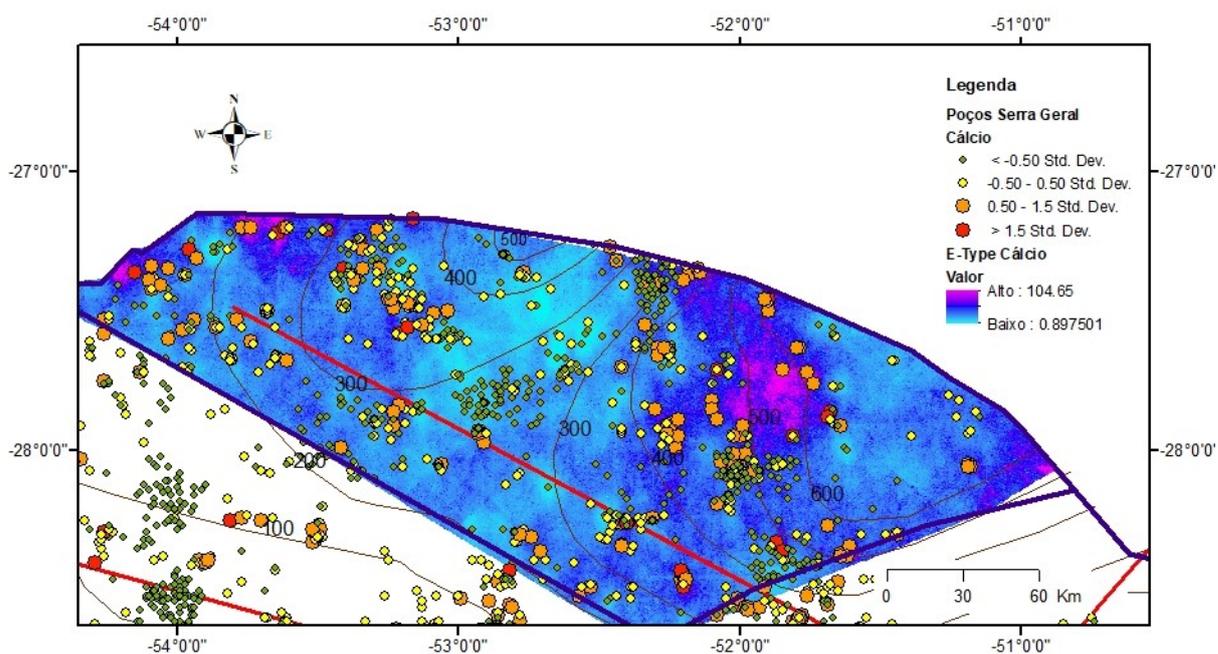


Figura 75 - E-Type do cálcio para a zona 3 com desvio padrão da malha amostral do cálcio e linhas potencimétricas do SAG.

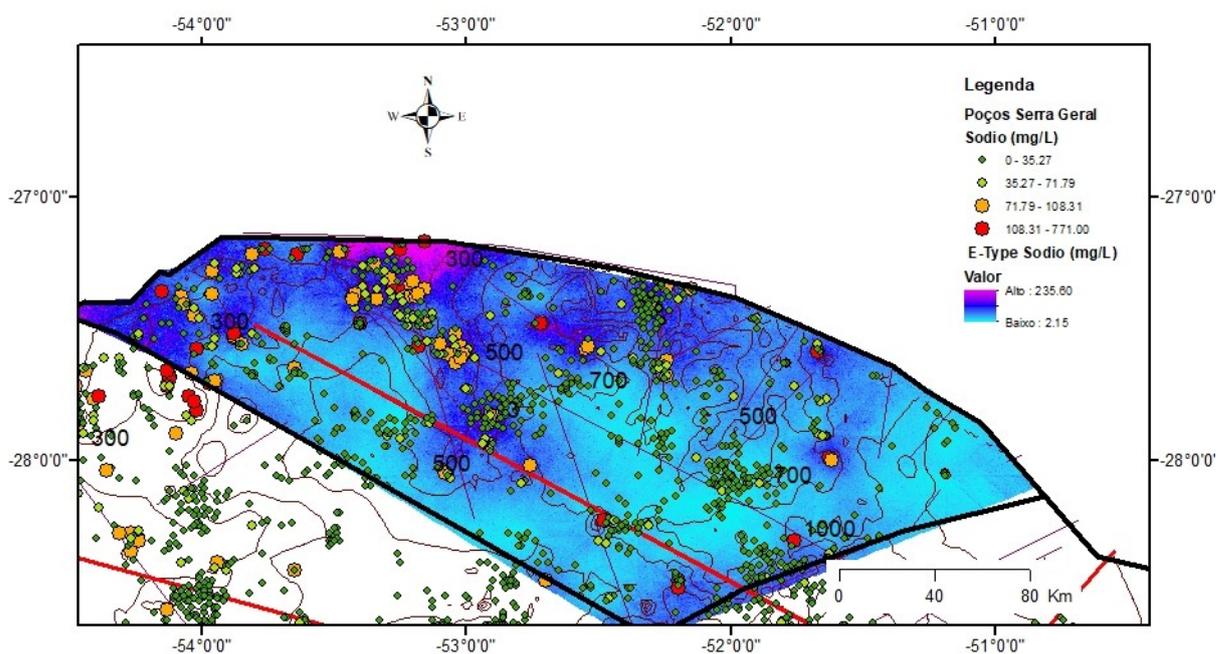


Figura 76 - Média da simulação (E-Type) do sódio e malha amostral do sódio na zona 3e linhas potencimétricas do SASG

Na média da simulação do sódio comparando-a com a malha amostral do mesmo, percebemos claramente que existe um prolongamento das altas concentrações de sódio ao longo do lineamento Rio das Antas e do lineamento

Gravimétrico. O E-Type do cálcio e a variância condicional do cálcio são altos mesmo onde a potenciometria do SASG é alta, na parte leste da zona, mostrando que este elemento não é controlado por recarga ascendente. Os valores altos de E-Type de cálcio indicam recarga ascendente e por haver valores altos intercalados com valores baixos em curtas distâncias, a variância condicional também é alta, o que resulta em semelhanças altas entre as duas figuras. A simulação de número 1 da condutividade elétrica mostra o mesmo padrão do sódio com valores altos ao longo da falha gravimétrica e e das falhas NE menores, que possuem orientação aproximada de N60 na parte Leste da zona (Figura 79). O grupo 2 de K-means está bastante associado ao grupo 1 e ambos ocorrem principalmente alinhados a algumas das grandes falhas desta zona, sendo que o grupo 3 ocorre apenas na parte Leste da área onde as linhas potenciométricas do SASG muito altas impedem qualquer mistura com outros sistemas aquíferos.

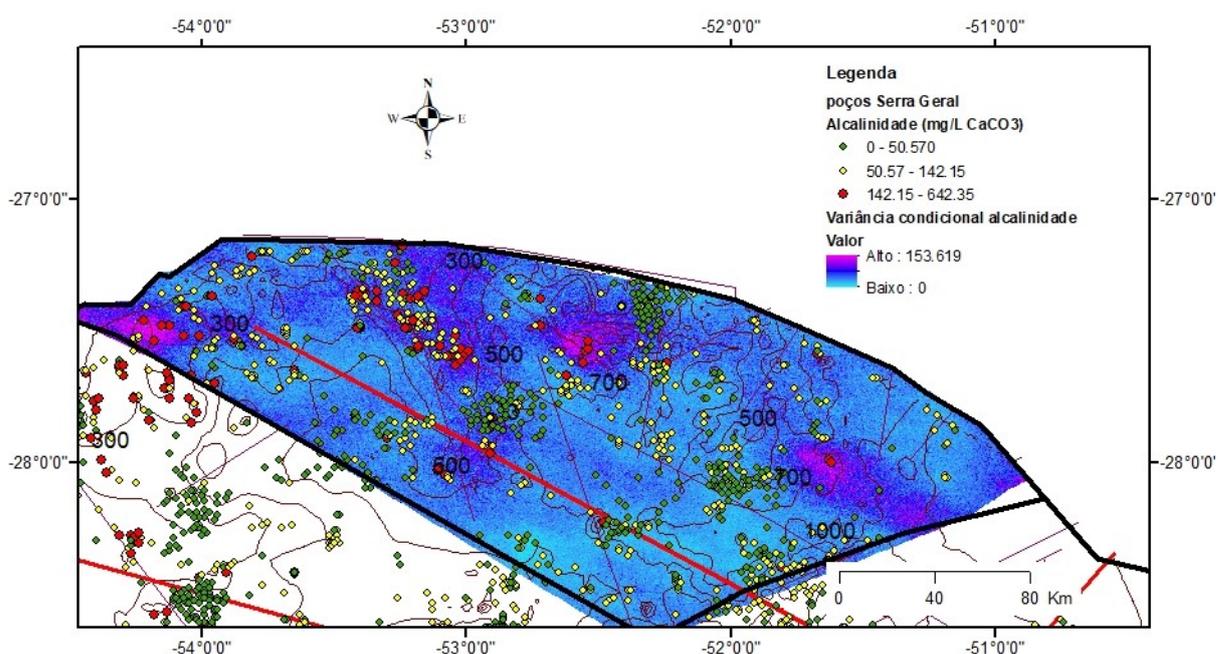


Figura 77 - Variância condicional da alcalinidade com malha amostral da alcalinidade para a zona 3 e linhas potenciométricas do SASG. Valor alto de variância condicional da alcalinidade (153.6) e baixo (0).

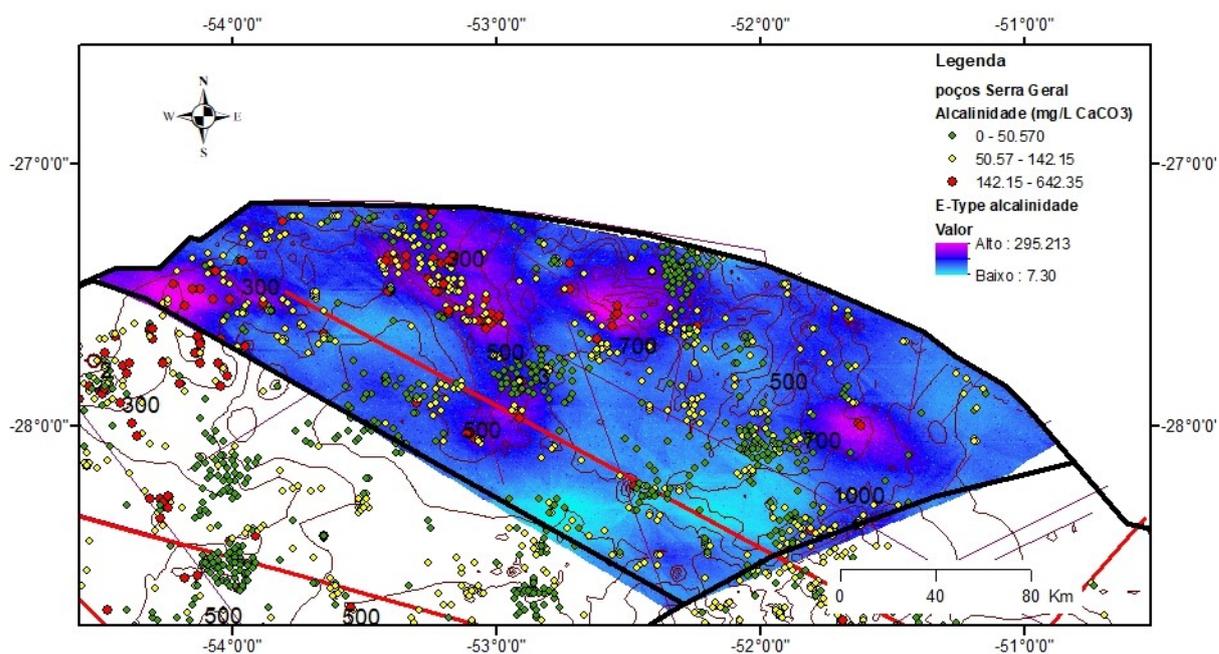


Figura 78 - E-Type da alcalinidade, malha amostral da alcalinidade e linhas potenciométricas do SASG para a zona 3

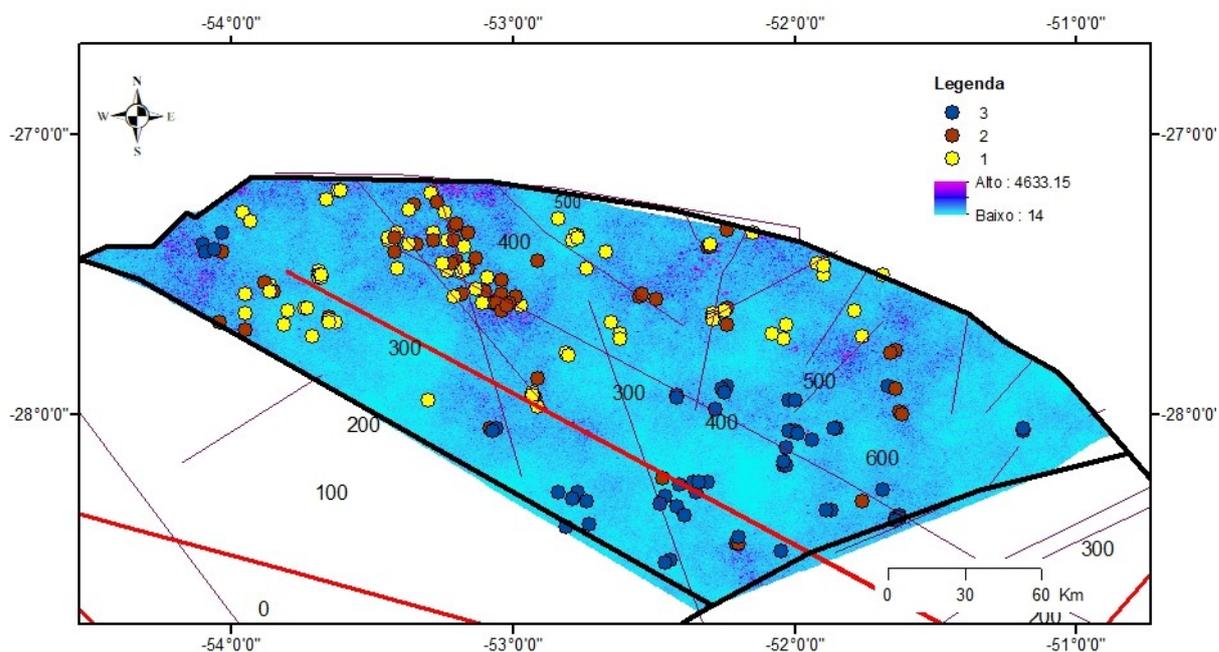


Figura 79 - Simulação de número 1 para a condutividade elétrica para a zona 3 e os grupos de K-means.

Na zona 4, a variância condicional do cálcio (Figura 80) não corresponde exatamente ao E-Type de cálcio (Figura 81) porque os valores altos de E-Type que estão no centro da zona tem baixos valores de variância condicional, indicando que

estes valores tem alta probabilidade de ocorrência. No norte da zona, a alta variância condicional pode acontecer pela falta de amostras, o que tende a aumentar a incerteza no local.

O sistema de falhas São Miguel das Missões é muito importante para alta variabilidade de simulação do sódio. Este lineamento corta os municípios de Faxinal do Soturno e Agudo. O mesmo acontece com a alcalinidade. Porém, outra falha de direção N45 (LRA), que corta o leste da zona cria condições para o aumento da variabilidade da simulação da alcalinidade. A densidade dos lineamentos menores que 5 Km em todas as direções acompanha a LRA bem como possui alta densidade na parte central da zona. Este lineamento passa entre as cidades de Venâncio Aires e Boqueirão do Leão. Este lineamento coincide com elevada densidade de lineamentos estruturais para comprimentos maiores que 5 Km em todas as direções. Os lineamentos com direção entre N40 e 85 também tem alta densidade nesta área. Dentre os lineamentos maiores que 5Km, a direção preferencial foi a de N125-145.

Os mapas variográficos do sódio mostram direção preferencial N113, e a alta média de simulação de sódio. A direção N113 é a mesma SFSA. No leste da área, porém as falhas têm direção N45. A alcalinidade tem variografia na direção N67, e esta orientação segue a FSMM. O E-Type da alcalinidade tem com valores altos de alcalinidade na parte Oeste, no Sul e Sudeste, exatamente na zona de escarpa. A variância condicional da alcalinidade (Figura 82) é muito diferente dos valores de E-Type de alcalinidade (Figura 83) no norte da zona, indicando que existe uma incerteza quanto aos valores simulados ali, mesmo que os valores de E-Type não sejam tão altos.

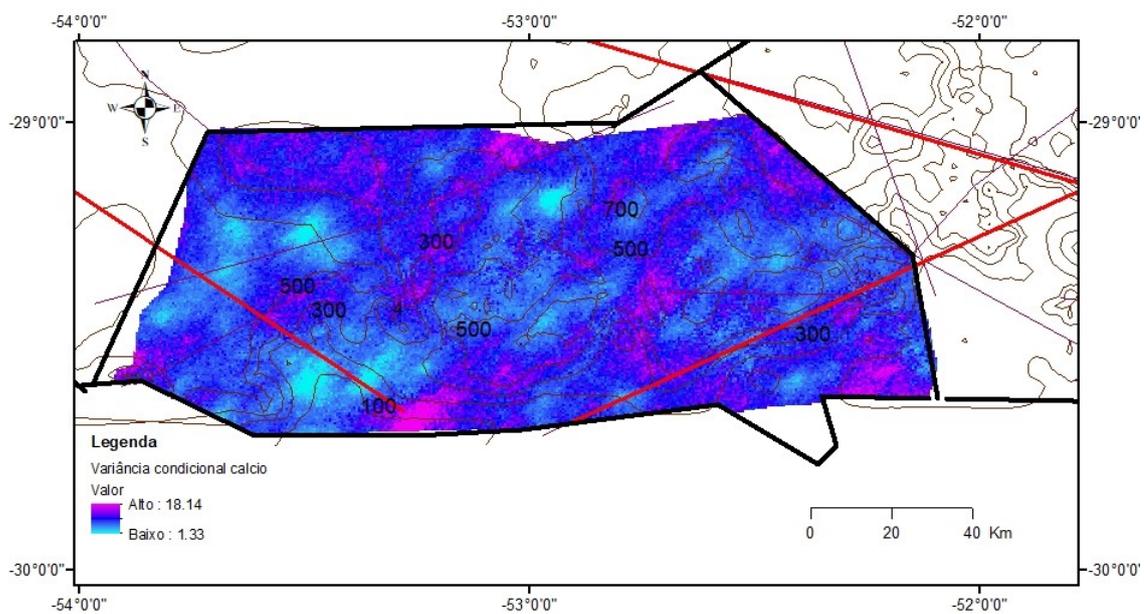


Figura 80 - Variância condicional do cálcio para a zona 4. Potenciometria do SASG.

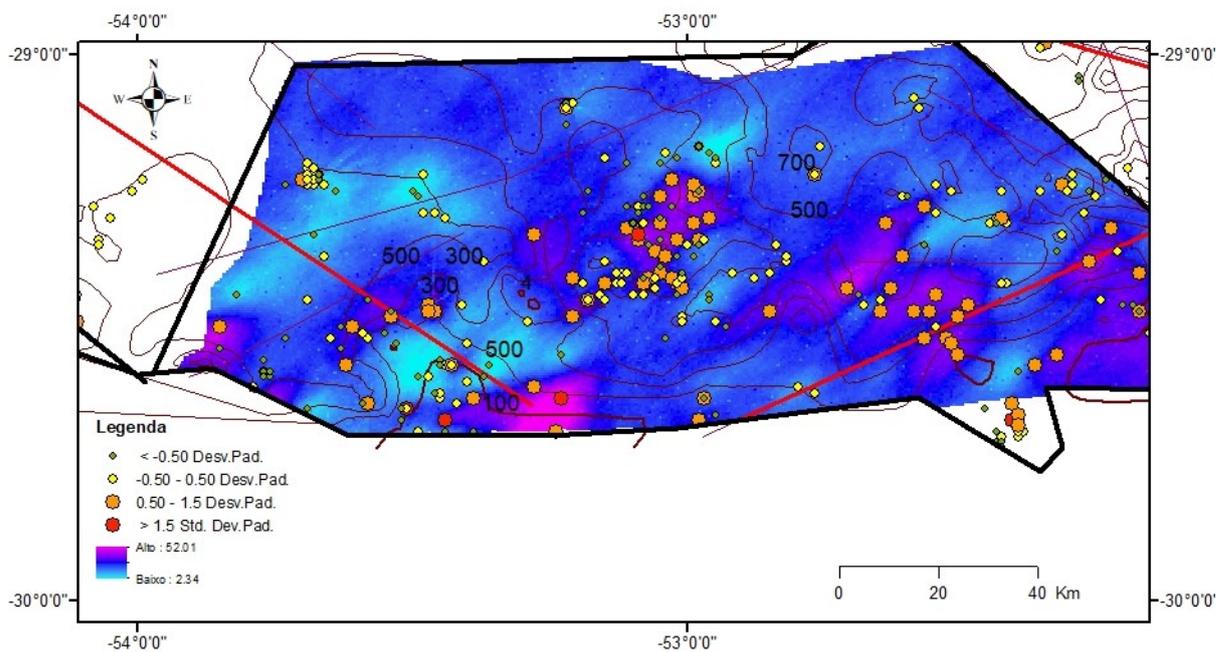


Figura 81 -E-Type do cálcio e desvio padrão da malha amostral do cálcio com linhas potenciométricas do SASG para a zona 4.

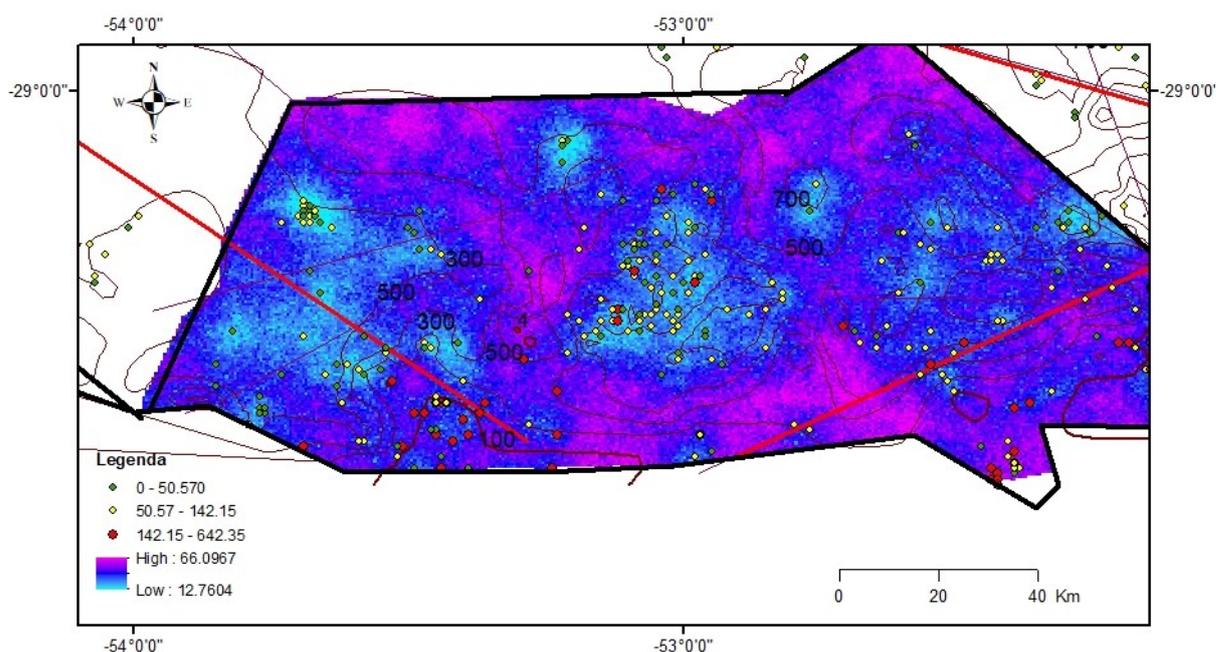


Figura 82 - Variância condicional da alcalinidade com malha amostral de alcalinidade para a zona 4 e linhas potenciométricas do SASG.

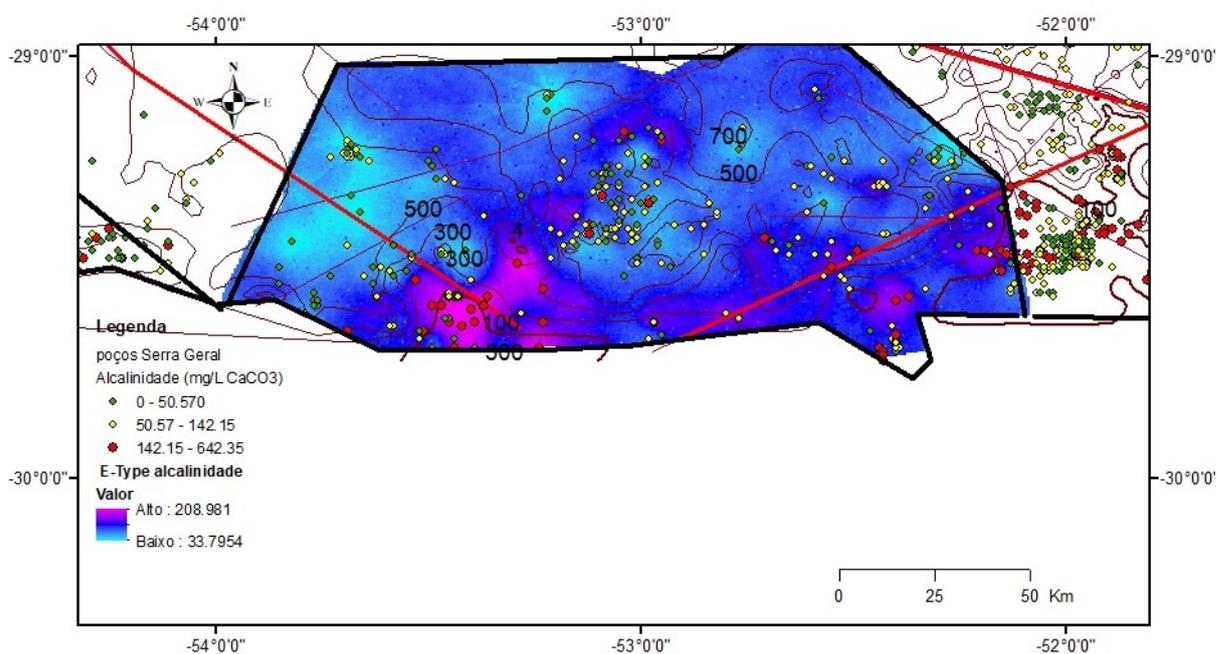


Figura 83 - Média da simulação (E-Type) da alcalinidade com malha amostral da alcalinidade para a zona 4 e linhas potenciométricas do SASG.

Na zona 5, os valores de variância da simulação para o cálcio são também altos nas linhas potenciométricas baixas do SASG e do SAG. O E-Type da simulação do sódio (Figura 84) acompanha igualmente o LRA, sendo que as

manchas mais fortes estão em Encantado e São Valentim do Sul. Outra mancha bastante proeminente encontra-se no litoral, próximo ao município de Terra de Areia, que coincide com o final da grande Falha Terra de Areia Posadas, que corta todo o SASG desde o Rio Uruguai, passando pelas zonas 2 e 5.

O SFDC, curiosamente, tem pouca influência sobre altas concentrações de sódio, cálcio e alcalinidade na zona 5. O lineamento mais importante que controla os valores elevados de todos os íons é o lineamento do rio das Antas, enquanto o lineamento Bento Gonçalves controla valores altos apenas do cálcio.

A variância condicional da simulação de cálcio (Figura 87) não é diferente da média (E-Type) da simulação do cálcio (Figura 86), indicando que ocorre muita incerteza em torno dos altos valores de cálcio simulados. Este mesmo padrão acontece para o sódio.

O E-Type da alcalinidade (Figura 88) e a variância condicional da alcalinidade (Figura 89) diferem ligeiramente dos outros elementos porque apresenta também altos valores nas proximidades de Bento Gonçalves, enquanto a simulação do cálcio e do sódio são mais altas apenas no entorno de Lajeado.

A potenciometria alta do SASG ao longo do SFDC ajuda a entender esta baixa concentração de diversos parâmetros ao longo deste lineamento. Este lineamento não está influenciando o cálcio da mesma maneira. A variância da simulação também está fortemente controlada pelo LRA. Esse importante lineamento passa através de um vale que fica entre Veranópolis e Bento Gonçalves e se prolonga até chegar ao sopé da escarpa. Os lineamentos com direção entre N20-45 menores que 5 Km coincidem com este grande lineamento.

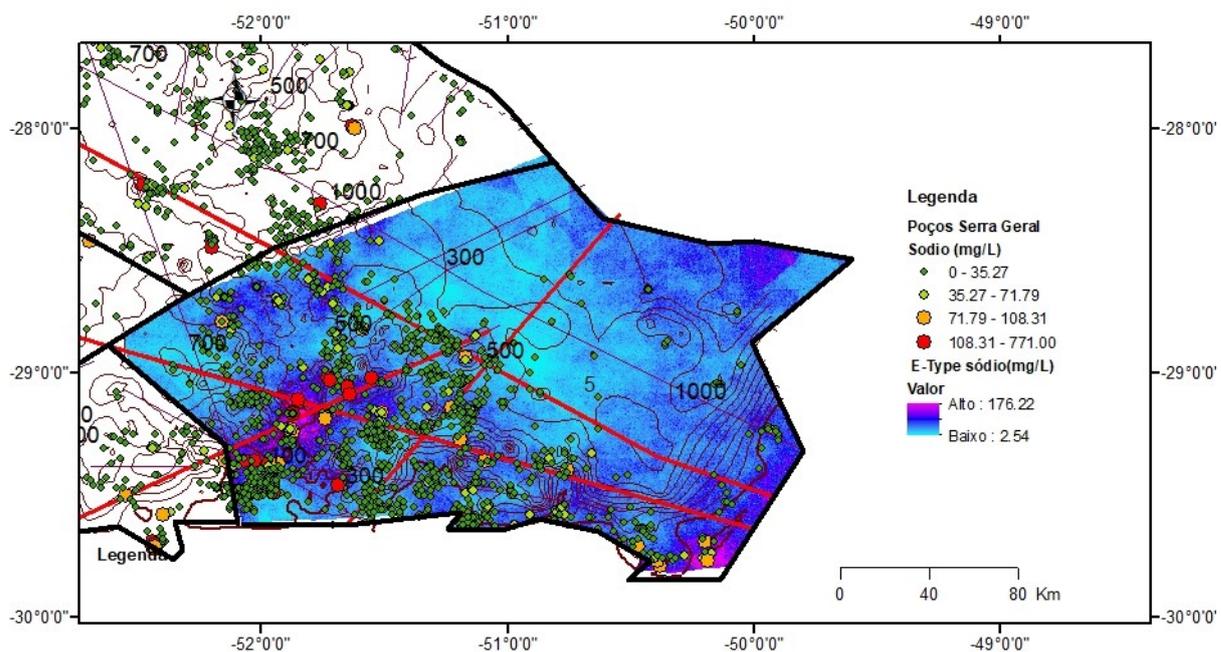


Figura 84 - E-Type de sódio com malha amostral de sódio e linhas potenciométricas do SASG.

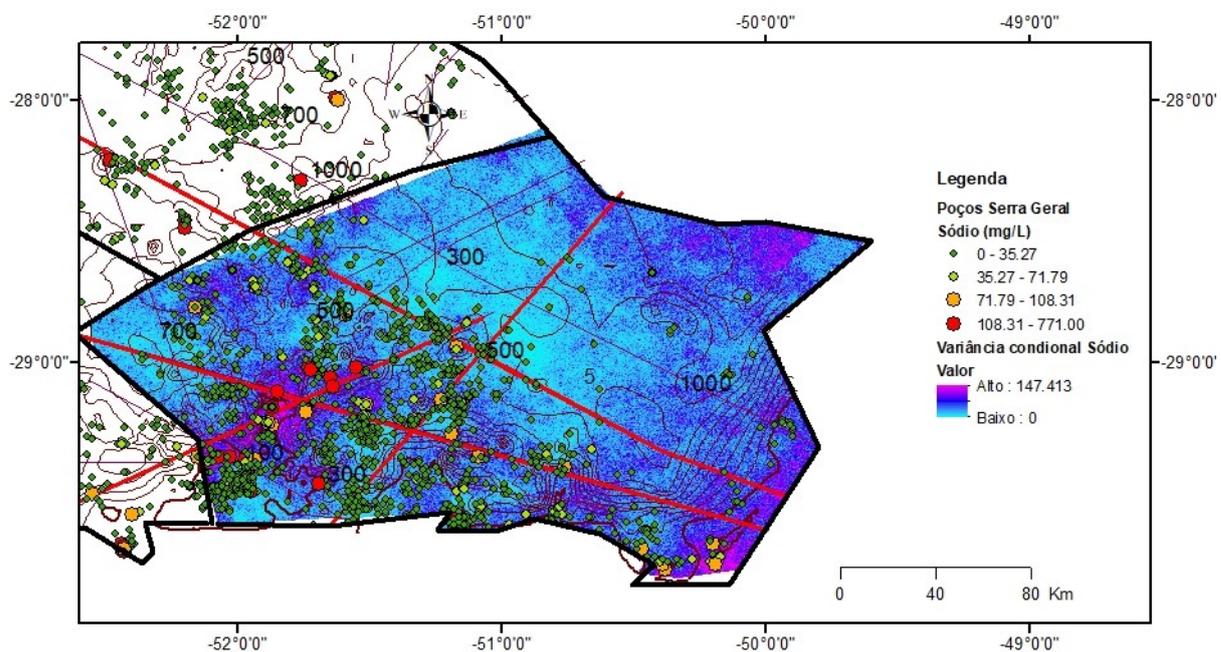


Figura 85 - Variância condicional do sódio com malha amostral de sódio e linhas potenciométricas do SASG

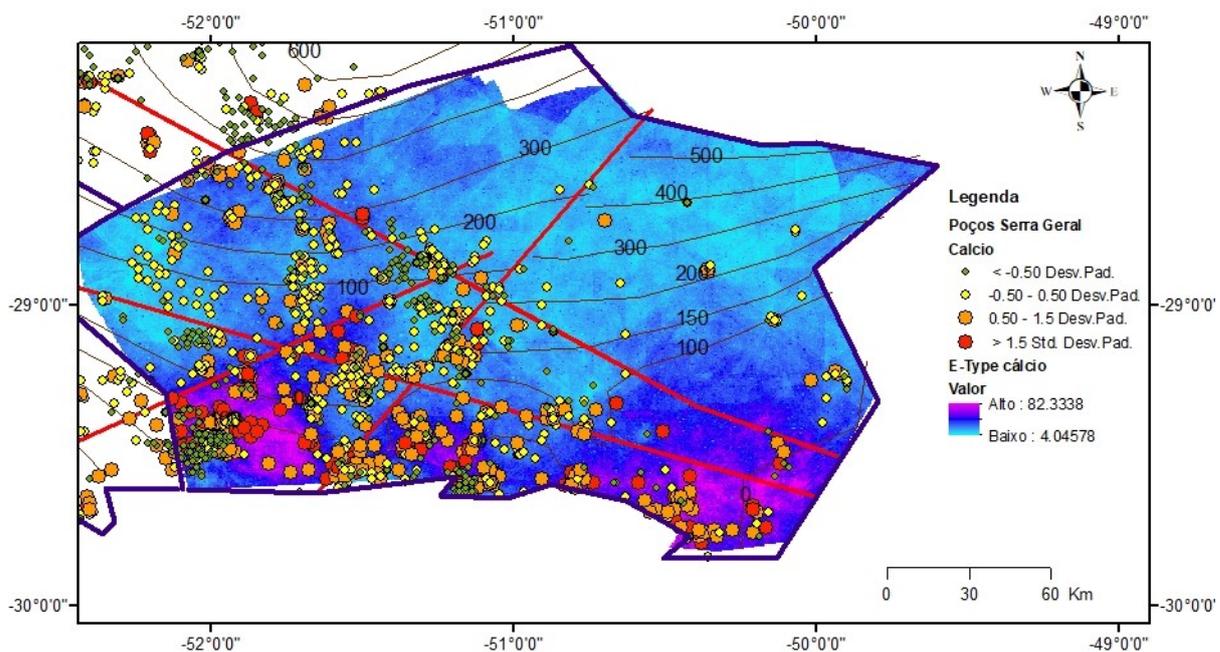


Figura 86 - E-Type da simulação do cálcio com desvio padrão da malha amostral de cálcio para a zona 5. E linhas potenciométricas do SAG.

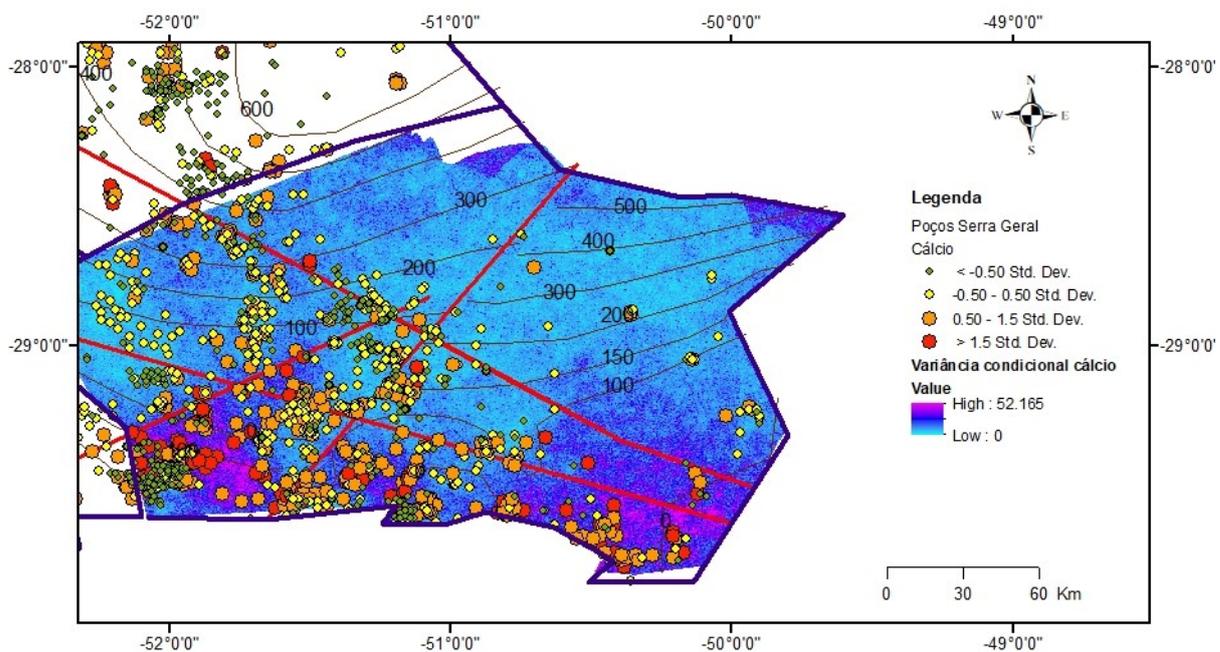


Figura 87 - Variância condicional da simulação do cálcio com desvio padrão da malha amostral de cálcio para a zona 5 e isolinhas potenciométricas do SAG.

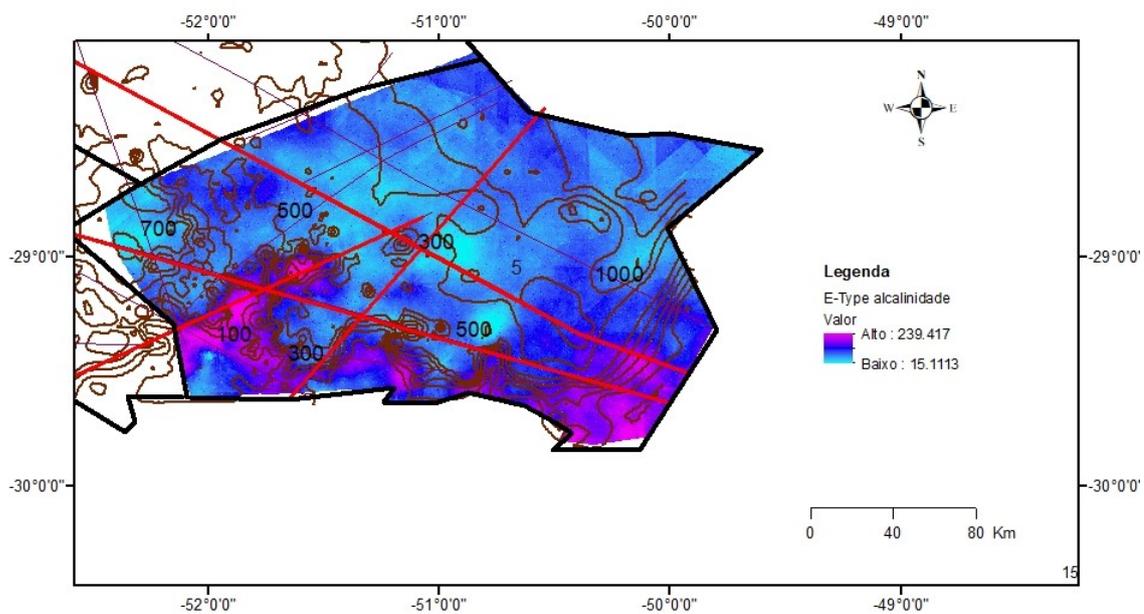


Figura 88 - E-Type da alcalinidade para a zona 5 e isolinhas potenciométricas do SASG.

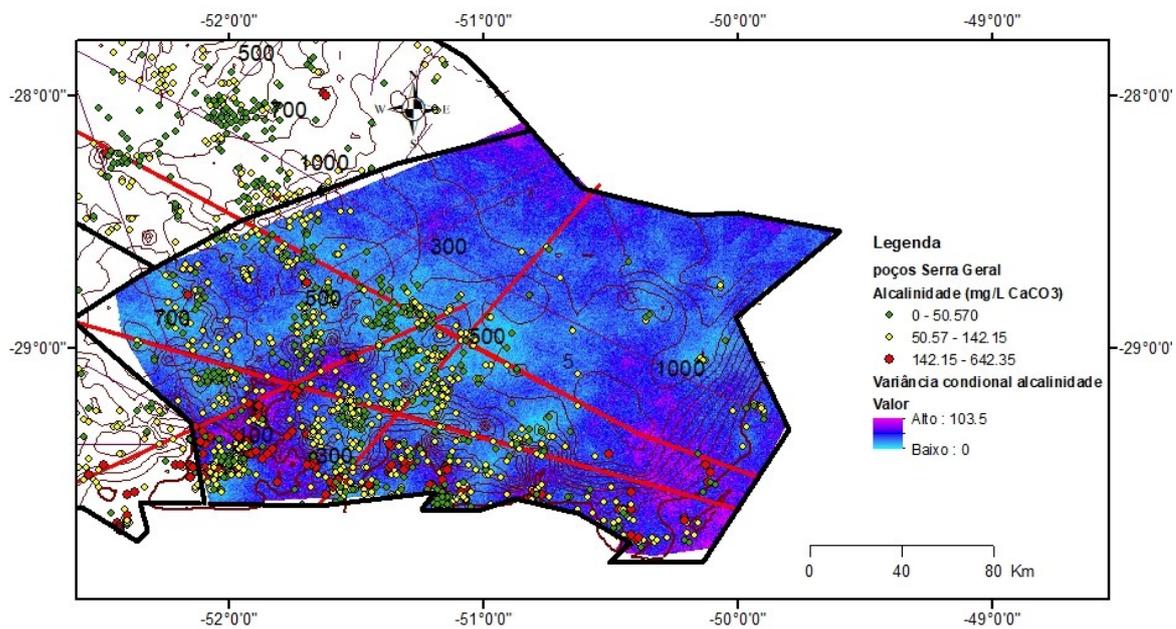


Figura 89 - Variância condicional da alcalinidade com malha amostral da alcalinidade para a zona 5 e isolinhas potenciométricas do SASG

4.6 Lineamentos Estruturais

A quantidade ou mesmo a existência de água subterrânea através de rocha fraturada vai depender da densidade e da abertura das fraturas presentes, sendo que a abertura é mais importante que a densidade das mesmas. Tanto em regimes tectônicos extensionais quanto em regimes transcorrentes podem ser geradas fraturas extensionais capazes de transmitir água em meio fraturado. Em regimes tectônicos transcorrentes, fraturas extensionais são geradas quando a diferença entre σ_1 e σ_3 é grande. Em situações intermediárias, formam-se estruturas conjugadas ou híbridas que dependem do ângulo 2θ e a relação com a litologia afetada. Dependendo da magnitude do esforço diferencial, as falhas terão uma orientação bem definida ou uma orientação totalmente aleatória. As direções das fraturas mais condutoras tendem a ter um ângulo agudo em relação ao esforço máximo principal.

Nos regimes transcorrentes, os esforços tectônicos máximos e mínimos são horizontais (Figura 90) e o esforço intermediário é vertical ou subvertical.

As falhas mais propícias para transmitir água são aquelas que possuem uma longa história evolutiva, fruto de muitas etapas de geração e reativação de estruturas. Essas falhas tem uma zona de deformação no entorno da estrutura principal que também é capaz de transmitir água. Muitas vezes, as falhas menores que cercam as falhas maiores também são transmissíveis e ajudam na circulação das águas subterrâneas.

O entrelaçamento de estruturas está associada à conectividade das mesmas e determina a transmissividade de água subterrânea. Portanto, onde existe uma maior densidade de estruturas, é esperado que exista uma maior capacidade específica e conexão entre sistemas aquíferos. Para fraturas verticais ou semi-verticais a profundidade pouco interfere na transmissividade (Fernades *et al*, 2008).

Para Strieder *et al* (2015) na Formação Serra Geral do Rio Grande do Sul existem dois grupos principais de paleoestresses gerados em ambiente compressivo transcorrente; um mais antigo com σ_1 variando de N-S para E-W em seu sentido e outro mais recente com sentido NE-SW. As falhas extensionais e cisalhantes geradas a partir deste campo tensional teriam um ângulo aproximado de 45° em relação ao σ_1 , que são chamadas de R e tensionais e explicam a geração de falhas

abertas em regime transcorrente. O autor cita dois dois eventos deformacionais importantes; um que aconteceu do Permiano ao Cretáceo, com campo tensional σ_3 orientado para NW causando falhas na direção NE; e outro que aconteceu no cretáceo superior com diques com orientação NW causados a partir de uma junção tríplice na borda da placa, além de outros eventos posteriores menores com direção NW e dique de direção NE durante o Cenozóico. Isso explica muito a intercalação de estruturas ora com orientação NE, ora com orientação NW.

Num contexto tectônico direcional onde a σ_1 e σ_3 tem magnitudes semelhantes, podemos esperar que ocorra uma maior aleatoriedade de direções. Onde existe uma direção com predominância sobre as outras, podemos esperar que a diferença tectônica entre σ_1 e σ_3 tenha sido maior de modo a manter as falhas extensionais resultantes destes esforços dispostas em direções perpendiculares entre si. O esforço tectônico transcorrente gera falhas conjugadas com ângulo de aproximadamente 60° entre si. Isso explica a alternância de falhas de direção NW e NE na Formação Serra Geral do Rio Grande do Sul. Pela análise da comparação dos mapas de densidade com concentração da malha amostral de sódio e de condutividade elétrica parece claro que as falhas de direção NW tem uma maior vazão e capacidade de transmitir água.

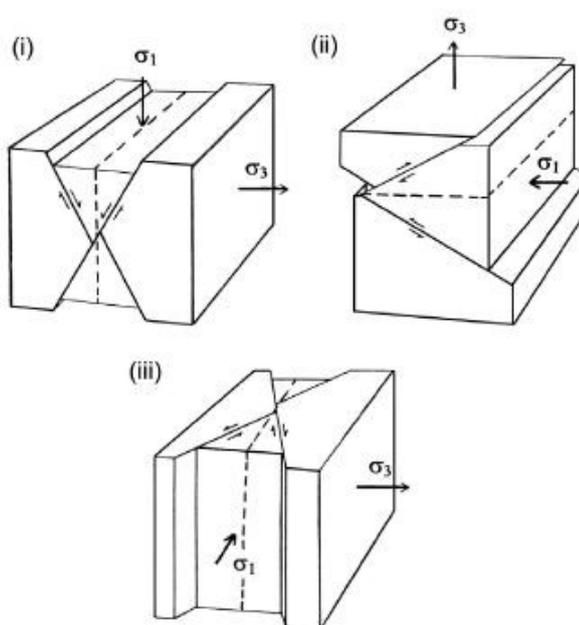


Figura 90 - Regimes tectônicos e posição espacial de fraturas extensionais de maior abertura (linha tracejada) e de cisalhamento (linha contínua e movimento indicado por flechas): (i) regime extensional, (ii) compressivo e (iii) transcorrente (adaptado de Ramsey & Huber, 1987).

A avaliação tectônica da área de estudo por sensoriamento remoto resultou no mapeamento das fraturas da Formação Serra Geral. O critério foi utilizado apenas nos dois primeiros quadrantes, e as direções dos outros quadrantes foram incorporadas nos quadrantes com as direções correspondentes. A notação escolhida foi a azimutal.

Os diagramas de roseta são um bom indicativo das direções dos paleotensores que atuam em determinada área. Quando o esforço mínimo é de N90, podemos dizer que provavelmente as falhas conjugadas geradas terão um ângulo agudo em relação a N90. Falhas menores como as falhas R, C e anti-R tem ângulos bastante próximos das falhas de cisalhamento principais. De fato, esta direção é a mais favorável a ter estruturas abertas no SASG do Rio Grande do Sul. Em todas as zonas esta direção se mostrou favorável para a ascensão de águas salinizadas do SAG e pré-SAG. Pode-se dizer que os paleotensores que atuaram na Formação Serra Geral eram principalmente NS nos primeiros eventos deformacionais (Figura 91), mas eventualmente este eixo foi rotado em direção a EW, mudando a direção de falhas maiores em eventos que aconteceram no Mesozóico e terminaram no Período Cretáceo (Figura 92). O trabalho de Strieder *et al.* 2015 demonstra a direção dos paleotensores em diagramas de roseta. Esses lineamentos foram colhidos em trabalhos de campo e não usaram do tratamento de imagens de satélite como nesta tese. As direções das falhas NW tem ângulo agudo em relação a N90 e mostram a direção NS dos paleotensores, com σ_1 orientado para N0 e o σ_3 orientado para N90.

Pela análise dos diagramas de roseta para os comprimentos entre 1 e 5 Km (Figura 93) vemos que com a exceção da zona 4, todas as outras possuem direção N45 como uma das preferenciais, porém a direção N135 é a mais favorável para a salinização do SASG. Quando analisamos as direções com mais de 5 Km, vemos que as proporções mudam. Quase todas as zonas, com exceção da zona 5 possuem maioria dos lineamentos no entorno da direção N135. As grandes falhas realmente estão alinhadas nesta direção. Na zona 5, duas das grandes falhas orientam-se na direção N45 e na direção N75, como já verificado em diversos trabalhos. Existe maior homogeneidade dos lineamentos com dimensões menores que 5 Km.

Na zona 1, o diagrama de roseta de comprimentos tem na direção N45 tanto para os comprimentos menores que 5 Km quanto os maiores que 5 Km (

Figura 94), e esta direção coincide com o mapa variográfico do sódio para esta zona, que também tem a direção N45 como sendo muito importante. Esta direção também é a da variografia do sódio para esta zona. A direção N100 também é significativa na zona 1, e esta coincide preferencialmente com o cálcio em longas distâncias. A variografia da alcalinidade indica direção preferencial em N144 e está mais alinhada com as grandes estruturas NW.

Na zona 2, a direção do sódio de maior continuidade é próxima de N-S. A variografia da alcalinidade tem direção N113. A alcalinidade tem alta correlação com estruturas maiores. A direção N90-125 (17%) (Tabela 11) é muito importante numericamente, ela é muito importante para explicar os altos valores de sódio e alcalinidade próximos ao rio Uruguai.

Na zona 3, o cálcio tem direção do mapa variográfico em N0. A direção N20 está bem representada principalmente nos comprimentos menores que 5 Km, ao contrário das zonas 1 e 2, enquanto para as direções maiores que 5 Km, esta frequência diminui. Para o sódio, a direção N23 é a de maior continuidade na variografia, enquanto para a alcalinidade é de N100, que está muito destacada nos comprimentos acima de 5 Km, indicando novamente que a alcalinidade é muito controlada por comprimentos maiores que 5 Km.

Na zona 4, para comprimentos menores que 5Km, as direções N160-170 e N20-35 concentram 20% dos lineamentos (Tabela 11), porém outras direções são importantes, como L-O e N135. Nesta zona não existe uma direção destacada para comprimentos menores que 5 Km, sendo que existe um pequeno déficit de frequências nas direções entre N45 e N90. Para as direções acima de 5Km, existem frequências muito altas nas direções N60 e N135, que coincidem com as grandes falhas que cruzam o leste e oeste desta zona.

Tabela 11 - Os lineamentos traçados em imagem de satélite em comprimento, direção e frequência em todas as zonas

quadrantes	zonas	direção	lineamentos>5 Km	direção	lineamentos<5Km
1	1	22-45	251/1223	22-45	192/1340
	2	22-45	219/1141	22-45	221/1037
	3	22-45	128/685	15-45	429/2146
	4	15-35	29/259	15-35	54/373
	5	22-45	190/919	22-45	155/928
1	1	45-60	109/1223	45-60	235/1340
	2	45-60	129/1141	45-60	98/1037
	3	50-75	119/685	50-75	445/2146
	4	40-85	75/259	40-85	102/373
	5	70-85	111/919	70-85	158/928
2	1	95-125	117/1223	95-125	318/1340
	2	95-125	204/1141	95-125	180/1037
	3	90-110	91/685	90-125	388/2146
	4	90-120	32/259	95-125	63/373
	5	90-115	167/919	90-115	124/928
2	1	125-145	266/1223	130-150	215/1340
	2	130-160	268/1141	130-160	191/1037
	3	120-145	112/685	130-165	479/2146
	4	125-145	50/259	125-145	85/373
	5	125-160	172/919	125-155	221/928

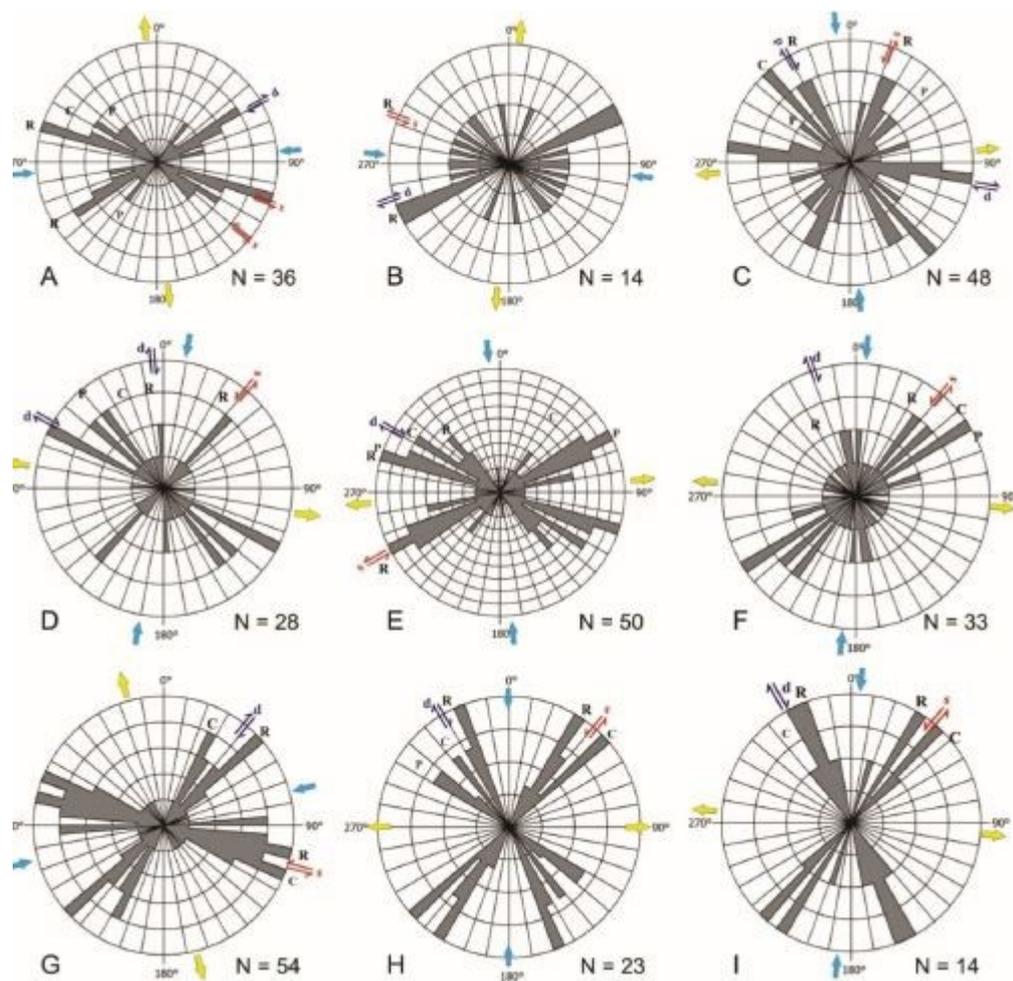


Figura 91 - Diagramas de roseta para um regime direcional com paleotensores de sentido N-S e L-W. As flechas azul e amarela representam os esforços máximos e mínimos respectivamente (adaptado de Strieder *et al.* 2015).

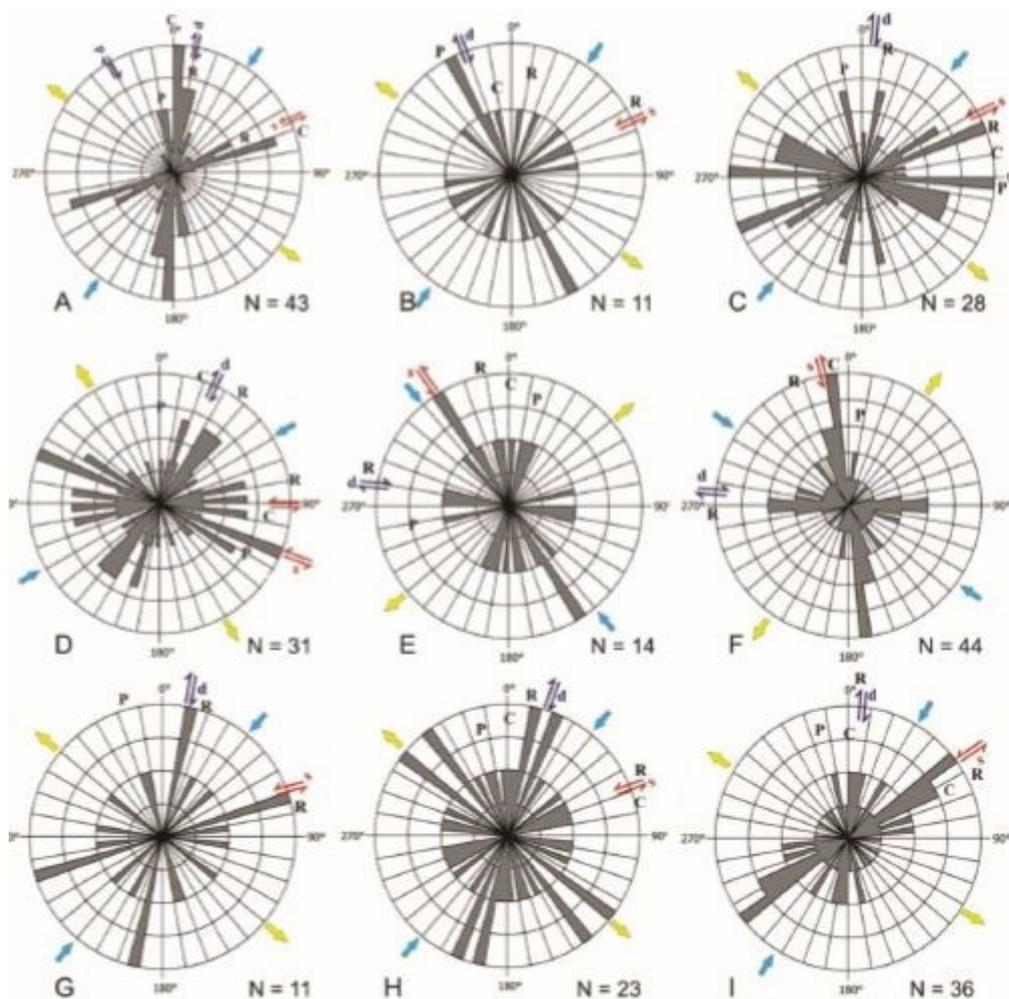
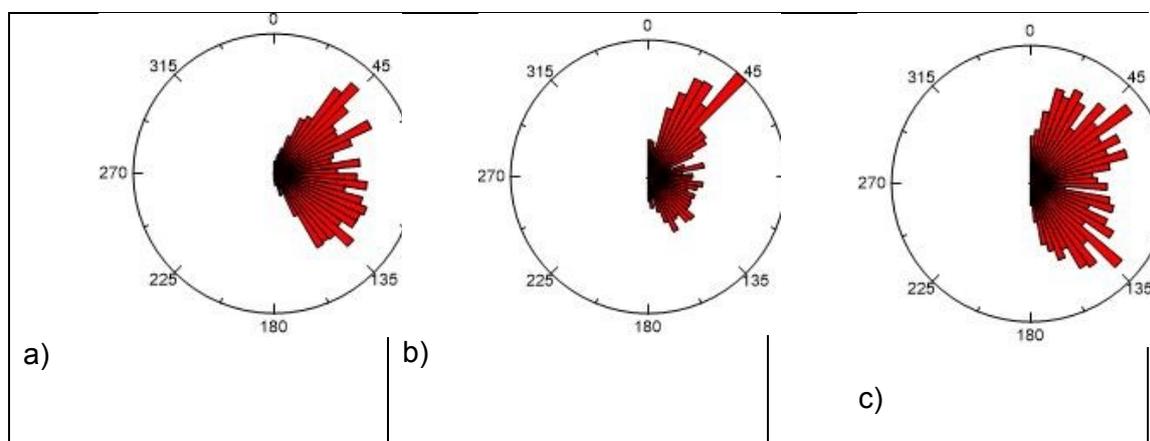


Figura 92 - Diagramas de roseta para um regime direcional com paleotensores de sentido NE-SW. As flechas azul e amarela representam os esforços máximos e mínimos respectivamente (adaptado de Strieder et al, 2015).



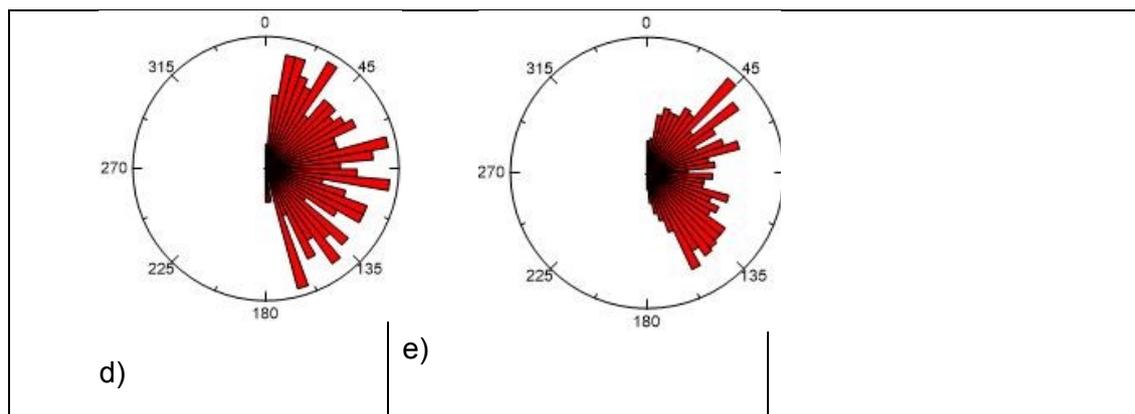


Figura 93 - Diagramas de roseta para as zonas 1(a),2(b),3(c),4(d) e 5(e) nos comprimentos de lineamento entre 1 e 5Km, na ordem em que aparecem da esquerda para a direita.

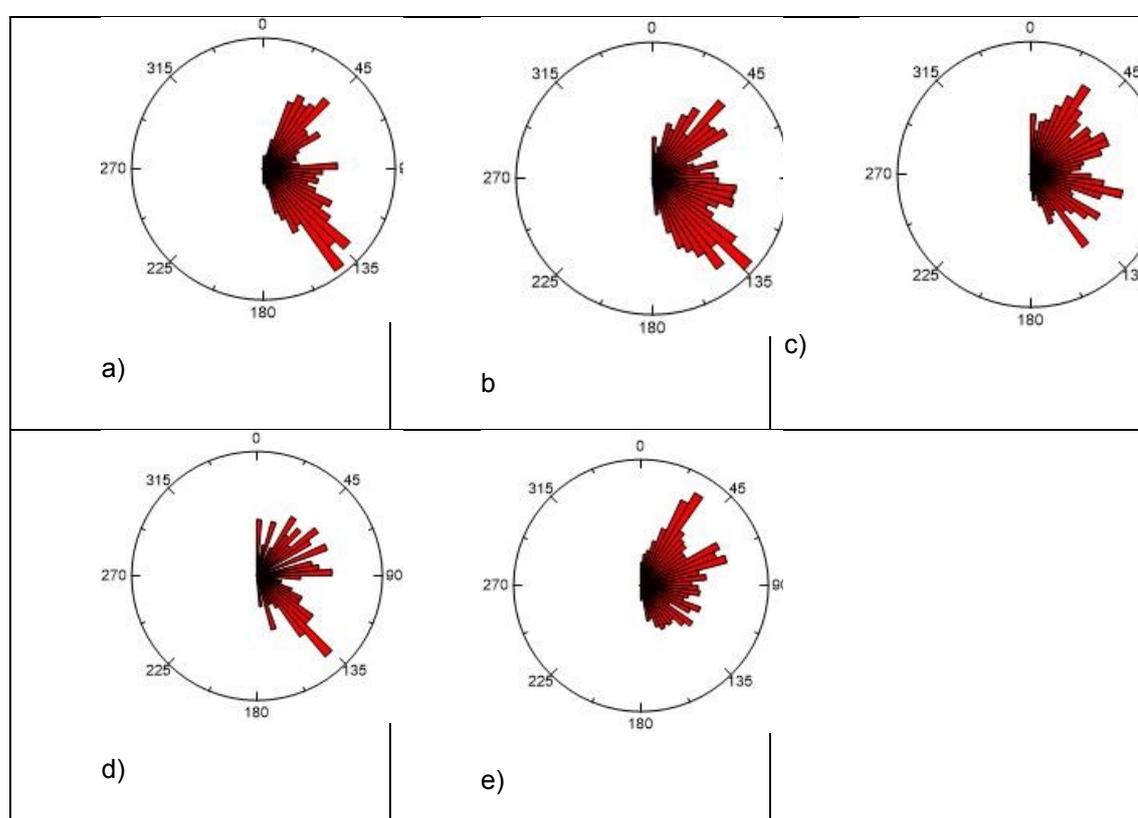


Figura 94 - Diagramas de roseta para as zonas 1(a),2(b),3(c),4(d) e 5(e) para os comprimentos de lineamento com mais de 5Km, na ordem em que aparecem da esquerda para a direita.

Quando analisamos as direções de densidade de lineamentos e também as direções de maiores frequências do diagrama de rosetas, nem sempre coincidem com as maiores salinidades, mas em muitos casos onde existe uma maior densidade de falhas a tendência é que as linhas potenciométricas do SAG e do SASG sejam menores. Além disso, certas direções coincidem com maiores concentrações de elementos que tem relação direta com a alta salinidade, como é o caso do sódio, do cloro e do sulfato. Pela análise de K-means, o grupo com mais

sódio (grupo 2) é sempre representado por círculos vermelhos. Em outros casos é mostrada concentração amostral do elemento sódio, onde igualmente os maiores valores são mostrados em vermelho e são uma influência direta do Irati, do Rio Bonito e do SAG.

É muito importante que falhas menores com alta densidade de fraturas estejam associadas às falhas maiores para que ocorra maior distribuição de salinidade para o SASG a partir de unidades sedimentares inferiores. Quando o alto fraturamento existe, como mostrado na Figura 95 e que corresponde aos tons de azul, a potenciometria é favorável e provavelmente ocorre a mistura entre estes sistemas aquíferos.

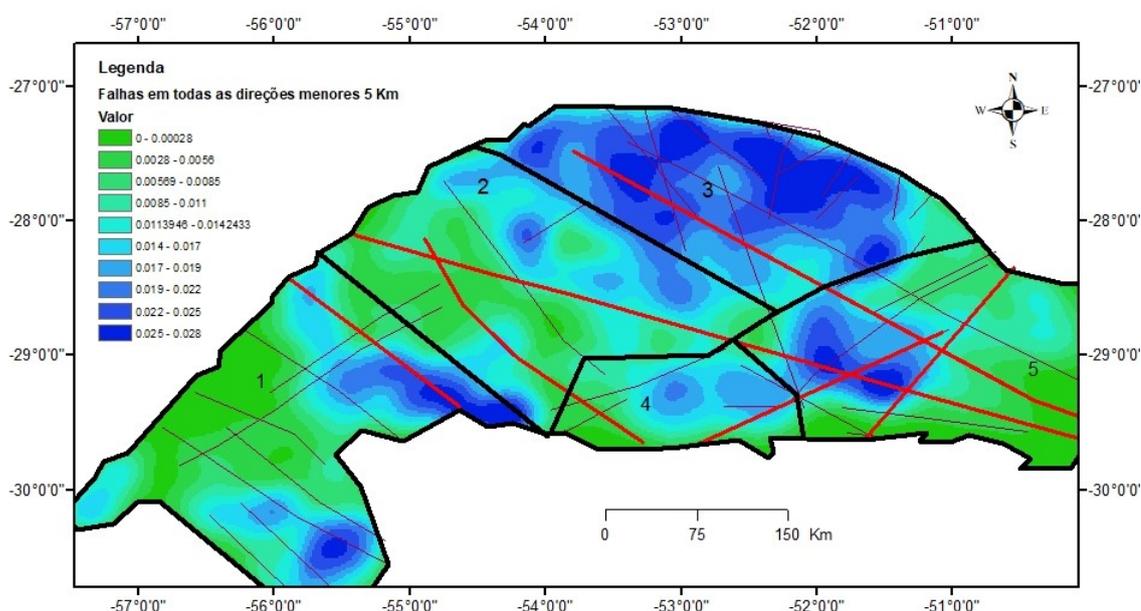


Figura 95 - Mapa de densidade de lineamentos para todas as direções para comprimentos menores que 5 Km. Unidade de densidade com comprimento $\times 10^2$. Os tons em azul representam as áreas onde as densidades de lineamentos são maiores, enquanto os tons de verde têm baixo fraturamento.

Através do mapa de densidade de lineamentos em todas as direções para comprimentos inferiores a 5 km na zona 1 (Figura 96) fica evidente que a área no extremo leste da zona 1 é bastante fraturada em todas as direções, com exceção da direção N22-45. Essa área apresenta potenciometria favorável para ascensão de águas salinizadas. Esta alta densidade de lineamentos menores está interferindo diretamente na diminuição da potenciometria no entorno do município de São Pedro do Sul. O SFJM passa justamente por esta área e parece indicar um complexo sistema de falhas secundárias no entorno desta falha regional. O grupo 2 de

Kmeans possui apenas 13 amostras concentradas principalmente ao longo do rio Uruguai. Esse grupo está preferencialmente alinhado às estruturas Nordeste (zona de falha de Lancinha-Cubatão). A média da simulação de sódio segue esta mesma estrutura que atinge a zona 2. As direções N22-45 para comprimentos superiores a 5 km tem muita influência ao longo do Rio Uruguai, principalmente em Uruguaina e São Borja (Figura 97). A densidade de fraturas na direção N95-125 acima de 5Km que ocorre localizada em Uruguaiiana poderia explicar em parte a alta salinidade de Uruguaiiana em relação a São Borja (Figura 98), além do fato de a região de Uruguaiiana ter um fraturamento maior de estruturas menores. Esta direção também é importante no extremo Leste da área, no município de São Pedro do Sul. Na zona 1, o esforço L-W é importante e provavelmente a falha cisalhante principal seja próxima de N45. O grupo 2 de K-means está restrito a poucas áreas (em Uruguaiiana e extremo Sul), enquanto o grupo 1 ocorre ao longo do Rio Uruguai e no extremo Leste.

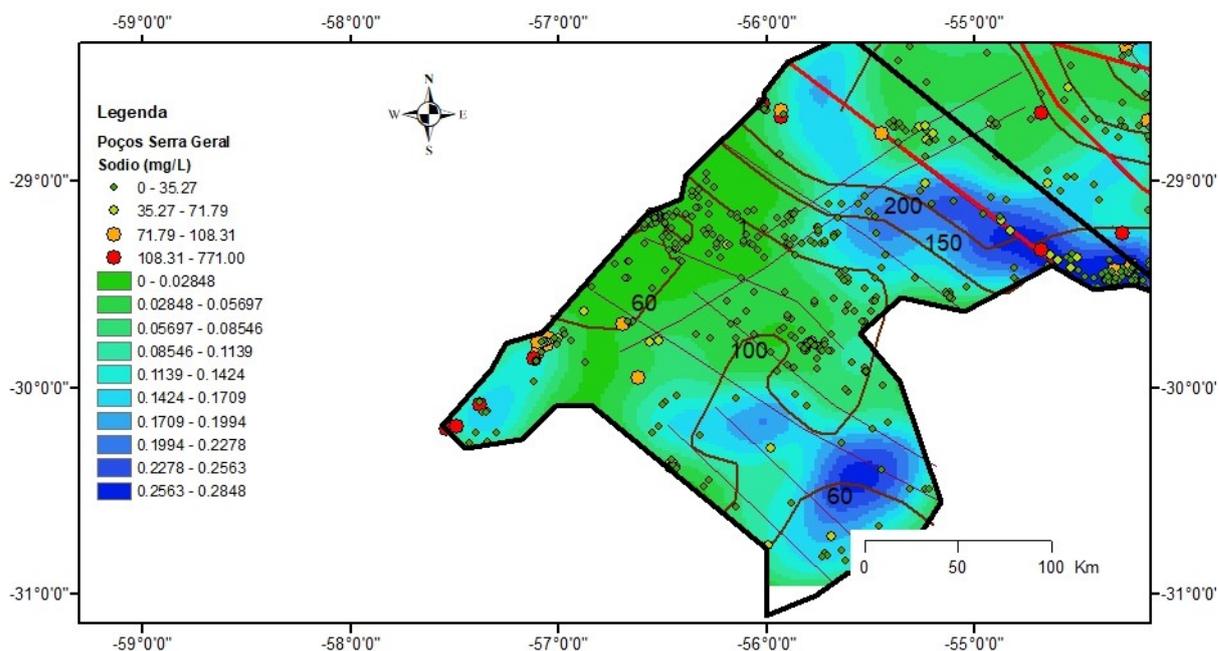


Figura 96 - Densidade de lineamentos para a zona 1 para comprimentos menores que 5Km em todas as direções com malha amostral de sódio e linhas potenciométrica do SAG. Manchas em azul são a densidade maior de lineamentos. Falhas regionais em laranja. Falha Jaguari-Mata em vermelho. Comprimentos com a unidade original

A direção N125-145 não tem uma relação tão direta com altos valores de salinidade em nenhum local desta zona. Entre Uruguaiiana e São Borja a densidade

de fraturamento é baixa e pode ser a explicação das baixas concentrações de sódio, além do fato de as cotas de captação do SASG serem muito baixas. Tanto as curvas potenciométricas do SAG, quanto as do SASG que vão até 100m afastam-se do Rio Uruguai de forma suave, com distâncias altas entre as cotas potenciométricas. No extremo leste da zona 1 ocorrem altas salinidades. Todas as direções controlam esta salinidade, com exceção da direção N22-45. Isso mostra que não existe uma direção preferencial de fluxo naquela área para comprimentos menores que 5 Km.

Do centro para o Oeste da zona 1, conforme Machado (2006), as linhas de fluxo dirigem-se de Alegrete a Quaraí. As linhas potenciométricas do SASG têm os mesmos valores do SAG (100) e facilitam a comunicação entre os aquíferos. Em Alegrete, existem altas concentrações de magnésio, alcalinidade, cloreto, mas não de sódio, que concentram-se apenas em Uruguaiana. Por esse motivo, são explicados os altos níveis de salinidade em Uruguaiana e Quaraí. A partir de Santana do Livramento, o fluxo é norte-sul, e altos valores de salinidade são registrados no sul da área, onde a potencimetria SAG é 150 e o SASG também.

O SFJM afeta muito a salinidade da zona 1 no extremo leste desta zona.

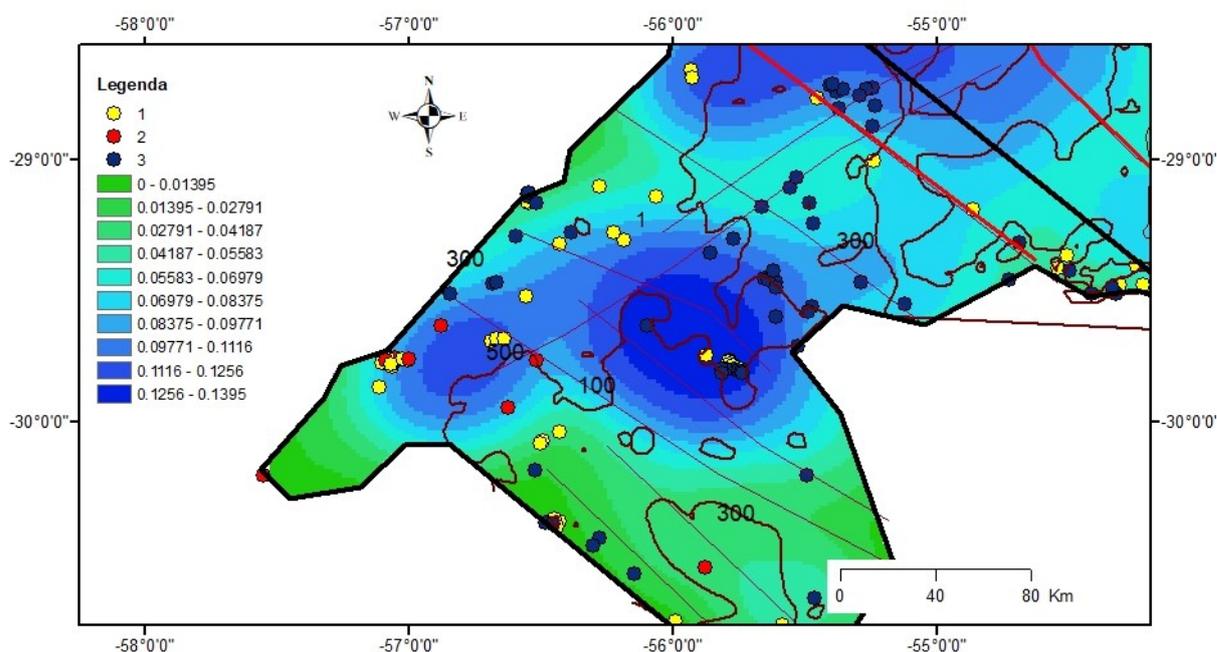


Figura 97 - Densidade de lineamentos para a zona 1 na direção 22-45N para comprimentos acima de 5Km com grupos de K-means e isolinhas das cotas potenciométricas do SASG. Comprimentos da densidade de lineamentos multiplicados por 10^3 . Grupo 1(amarelo), grupo 2(vermelho) e grupo 3 (azul).

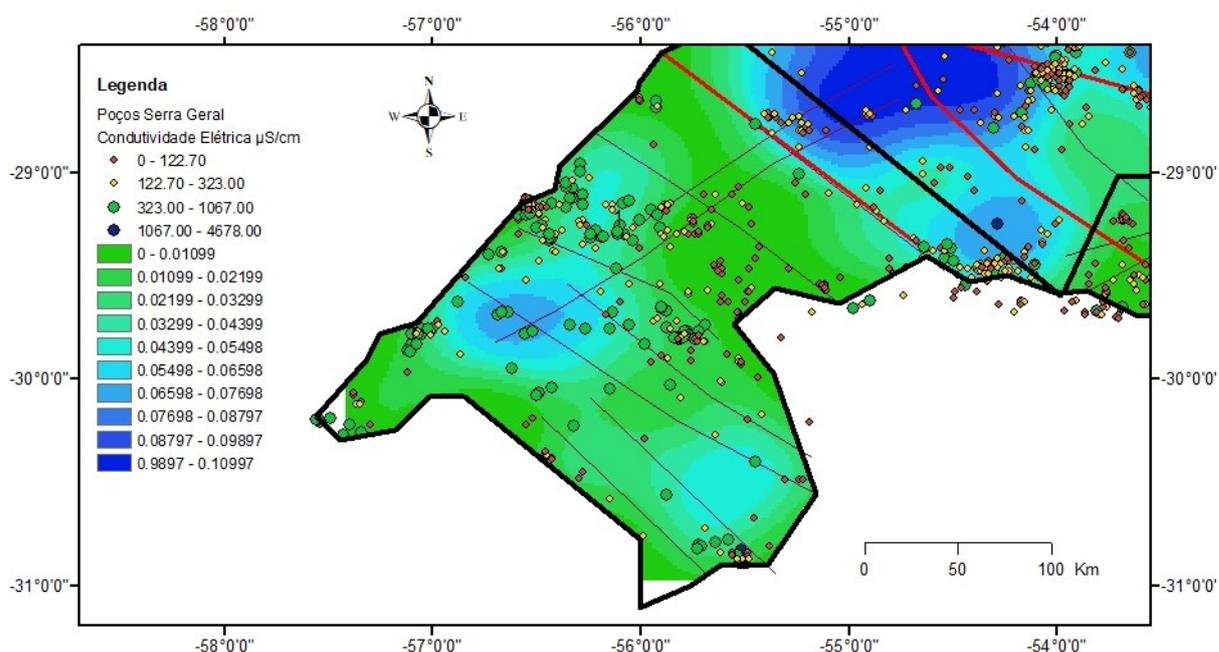


Figura 98 - Densidade de lineamentos na direção N95-120 para comprimentos maiores que 5 Km com malha amostral de condutividade elétrica. Comprimentos da densidade de lineamentos multiplicados por 10^3 .

Na zona 2, para comprimentos maiores que 5 km, não está nítido qual a direção que mais interfere para a alta salinidade. Para comprimentos inferiores a 5 km, o grupo 2 está preferencialmente localizado na direção de N95-125 (Figura 99) próximo ao Rio Uruguai, no município de Santa Rosa. A potenciometria do SAG no sul da área é menor que a do SASG (100 versus 300). Isso faz com que esta porção tenha baixos valores de sódio, que nunca excedem 70 mg/L. A única exceção é o município de Jari, no Sudoeste onde as ações potenciométricas do SAG atingem 300 metros e são encontrados poços com até 700 mg/L de sódio e que também sofre influência da direção N95-120. Na porção central, em Ijuí e Santo Ângelo, a direção com maior densidade está na direção N22-45 (Figura 100), mostrando claramente que existe um cruzamento de falhas Nordeste e L-W acontecendo, o que representa o típico padrão de falhas conjugadas de um ambiente direcional com esforço principal próximo de L-W. Para lineamentos com comprimentos maiores que 5 Km, pode-se dizer que a direção N95-125 é a que mais coincide com valores de alta salinidade no nordeste da área. Nesta parte notamos a influência nítida do SFTA/P que diminui as cotas potenciométricas do SASG no entorno desta falha e permite que águas salinizadas aconteçam ali. A oeste desta falha as cotas

potenciométricas do SASG são excessivamente baixas, do mesmo modo que acontece entre Uruguiana e Itaqui na zona 1. Quando as cotas de captação do SASG são excessivamente baixas, parece não haver mistura. Além disso, a densidade de fraturamento das falhas menores que 5 Km é muito baixa a Oeste do SFTA/P e poderia ser o principal motivo da baixa salinidade do SASG nesta região. Valores altos de cálcio parecem não obedecer a nenhuma direção específica, e altos valores de simulação de cálcio são distribuídos por toda a área. A alcalinidade segue o mesmo padrão que o sódio. No caso da condutividade existe alta concentração de valores anômalos em dois locais. Na parte central e próximo ao Rio Uruguai existe uma alta densidade de fraturamento de falhas menores em todas as direções e próximo ao Rio Uruguai a direção N95-125 também é importante acima do SFTA/P no entorno do município de Santa Rosa. Esse sistema de fraturas é muito importante porque permite a conexão do SASG com o SAG e aquíferos subjacentes. O intervalo N120-145 também possui alta densidade no Nordeste da zona, mas provavelmente não é tão importante para a transmissividade quanto o intervalo de N95-125, mais uma vez mostrando que as falhas próxima de L-W são mais importantes, mesmo quando não são tão extensas.

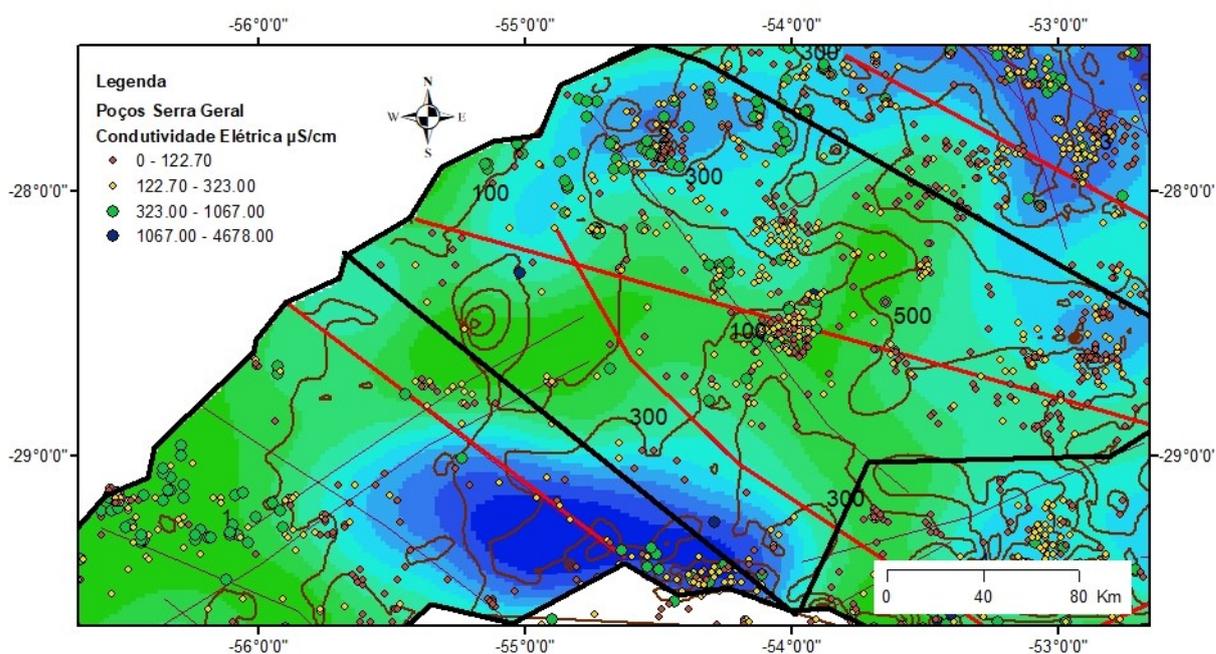


Figura 99 - Mapa de densidades de lineamentos na direção N95-125 para comprimentos menores que 5Km e malha amostral de condutividade elétrica. Maiores valores de condutividade (entre 1067 e 4678 em verde) estão próximos ao Rio Uruguai na parte oriental do SFTA/P.

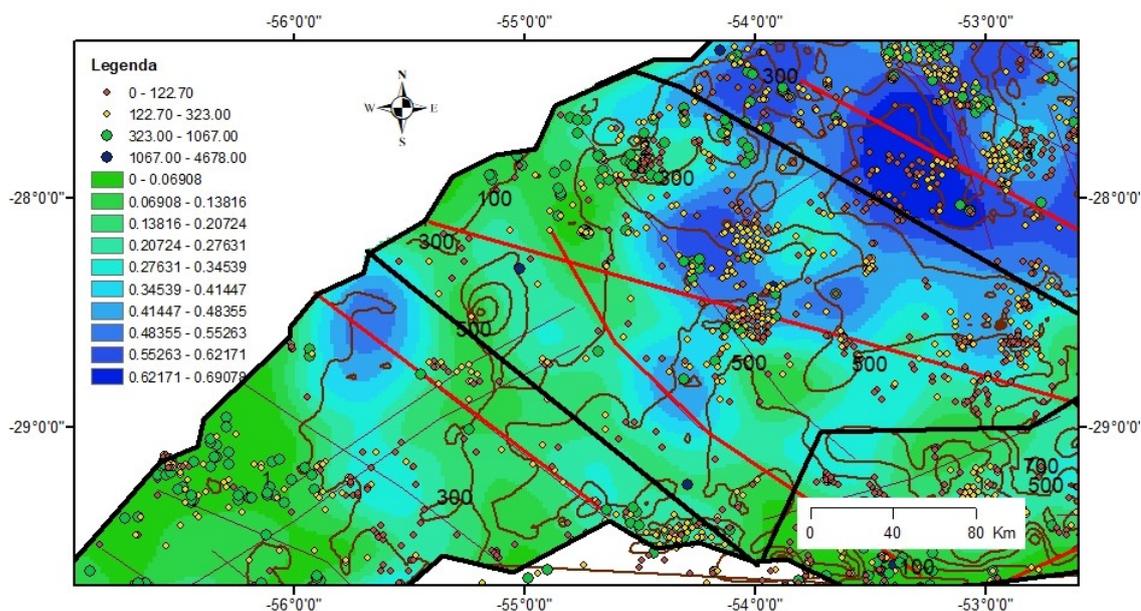


Figura 100 - Mapa de densidade de lineamentos estruturais na direção N22-45 e malha amostral de condutividade elétrica para a zona 2 com cotas potenciométricas do SASG. Maior densidade de lineamentos são as manchas em azul. Os valores de densidade estão multiplicados por 10^4 . Condutividade elétrica está $\mu\text{S}/\text{cm}$.

Os mapas estruturais refletem a densidade dos lineamentos em cada célula para diferentes filtros de direção. Os mapas com comprimento menores que 5Km em todas as direções na zona 3 coincidem com os lineamentos gravimétricos e com o lineamento do Rio das Antas-SC. A direção N90-125 (Figura 101) com comprimentos abaixo de 5 Km coincide mais perfeitamente com estas grandes falhas apesar de estas terem uma direção N160. Isso demonstra que um sistema de falhas bastante complexo atua na área e falhas subsidiárias de menor porte e de orientação distinta das grandes falhas são geradas num regime tectônico como esse. A densidade de fraturas para a direção N50-75 (Figura 102) também tem representatividade alta nas mesmas localidades da direção N90-125.

Para comprimentos maiores de 5Km, podemos destacar a direção N120-145 no extremo Oeste da zona como a que mais contribui para a salinidade na zona 3 (Figura 103). Na zona 2 este mesmo intervalo é muito importante para a salinidade no nordeste da área, porém com uma pequena diferença no intervalo de direção (125-145).

Na Formação Serra Geral do Rio Grande do Sul, existem basicamente duas famílias de fraturas.

- a) Predominantemente N-S de esforço máximo com permutações para E-W
- b) Tensores alinhados predominantemente para NE-SW com permutações para NW-SE.

Em ambos os casos, o estresse intermediário principal é subvertical, que determina um regime direcional. Na região de Caxias do Sul, diques de arenito que cortam a Formação Serra Geral mostraram uma grande gama de direções. Alguns diques estão orientados na direção N-S e E-W. Outros tem orientação N-S, e outros ainda possuem orientação NW-SE. Esses diques são subparalelos ao esforço máximo σ_1 . Essas estruturas podem ser consideradas como fraturas do tipo-R subsidiárias. Tais fraturas tem capacidade de dilatação e geralmente acomodam mineralizações de zeolitas. (Strieder et al, 2015). Para Freitas (2006) na região de Ametista do Sul, Taquaruçú e Frederico Westphalen, a CE apresenta forte controle estrutural na direção N60-70E e em Santa Catarina, o autor comenta que a salinidade é controlada por estruturas noroeste.

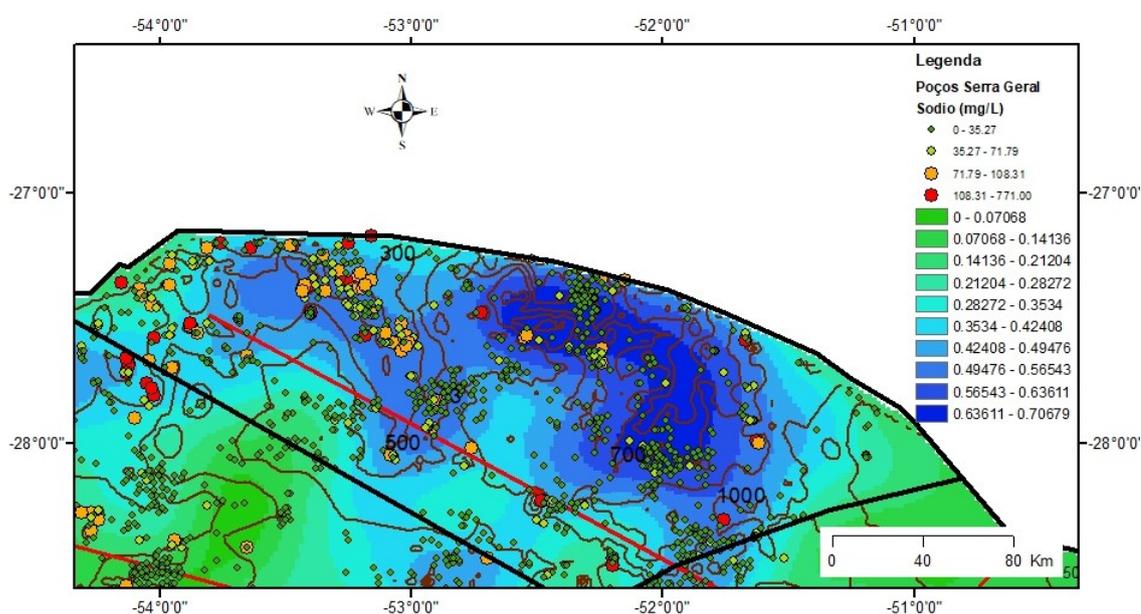


Figura 101 - Mapa de Densidade de fraturas com comprimento menor que 5Km, na direção N90-125, malha amostral de sódio e cotas potenciométricas do SASG na zona 3. Os valores de densidade estão multiplicados por 10^4 .

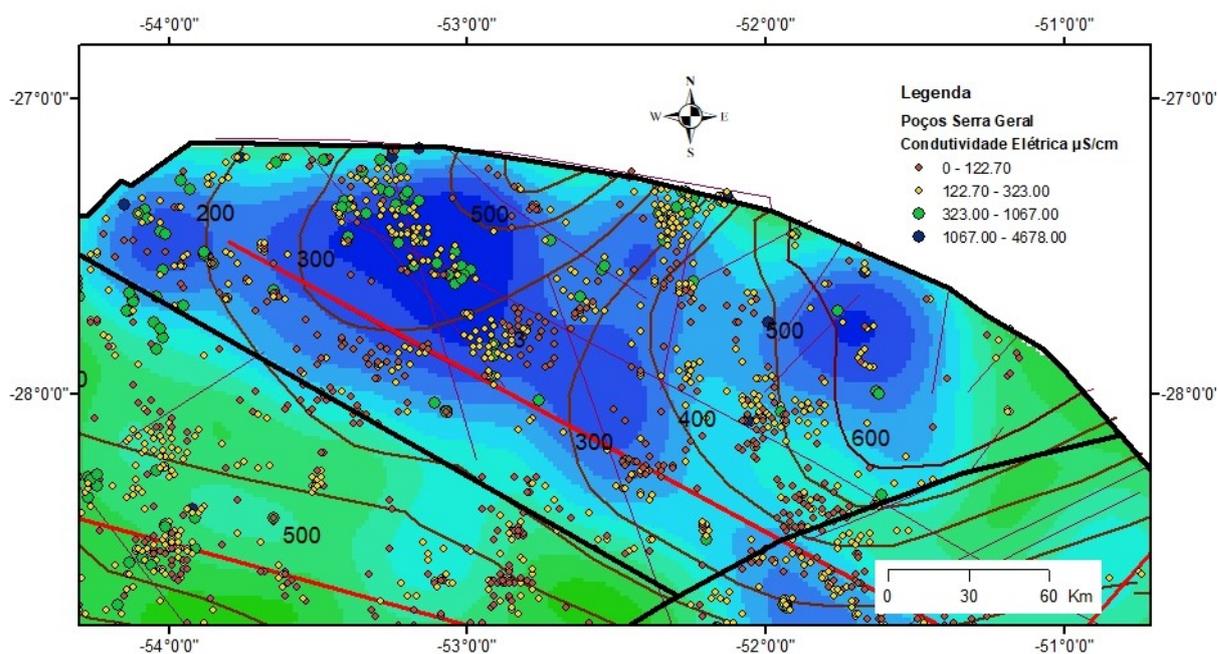


Figura 102 - Mapa de Densidade de fraturas com comprimento menor que 5Km, na direção N50-75 e malha amostral de condutividade elétrica na zona 3 com curvas potenciométricas do SAG. Os círculos em verde estão concentrados no oeste ao longo das falhas gravimétricas e rio das Antas-Sc.

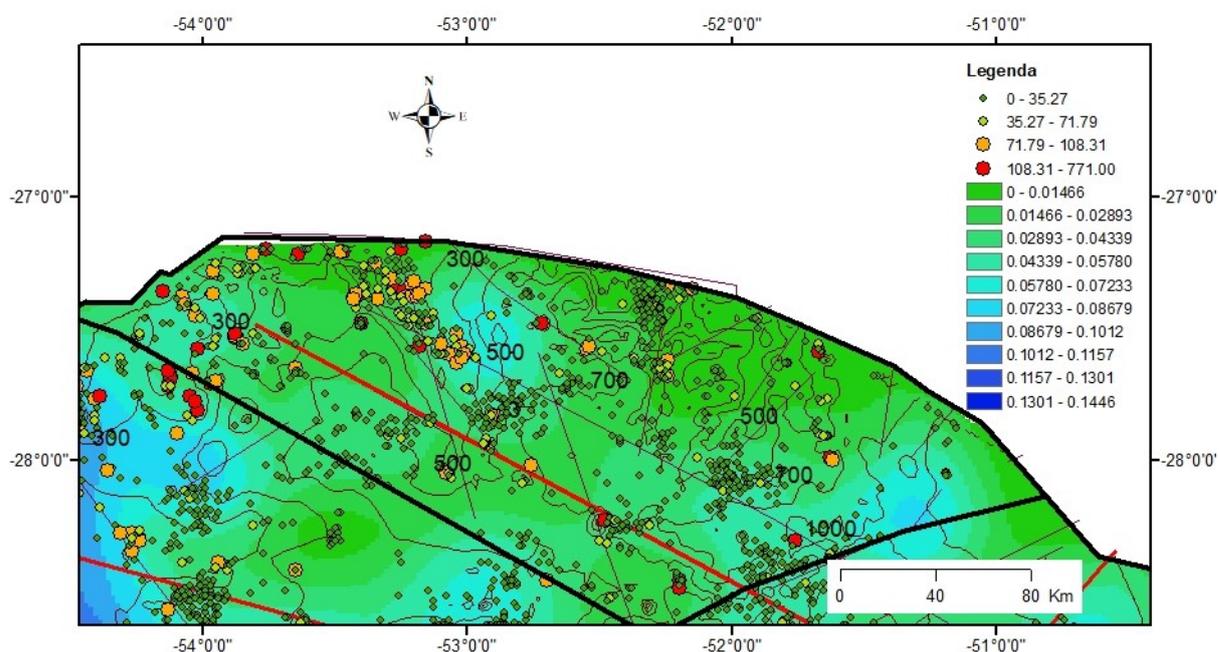


Figura 103 - Mapa de densidades de lineamentos para a direção N120-145 para comprimentos maiores que 5Km e malha amostral de sódio na zona 3 e linhas potenciométricas do SASG. Esta direção também é importante para a área nordeste da zona 2, porém nesta zona o intervalo de direções é de N125-145.

Na zona 4 (Figura 104) o grupo de águas salinizadas está concentrado no centro da zona, no município de Arroio do Tigre e Sobradinho. Lineamentos com

comprimentos menores que 5 Km em todas as direções se concentram na parte central desta zona. Essa é uma parte bastante fraturada e é justamente onde grupos salinizados acontecem. Também existe alta densidade de fraturas na direção N125-145 para comprimentos maiores de 5 Km próximo dos municípios de Agudo e que coincidem com a direção da FSMM. No mapa de todas as direções para lineamentos maiores que 5 Km (Figura 105), fica claro que as estruturas maiores estão concentradas nos dois extremos desta zona. Estruturas de pequeno porte com direção N45-60 na parte Leste da área possibilitam a presença de grupos de salinidade intermediária. Essas direções coincidem com a grande falha do Rio das Antas. Na zona 2, as estruturas menores que cercam a o SFTA/P têm orientação distinta da grande falha. É esperado que as falhas menores tenham orientação distinta das falhas maiores porque no processo cinemático de geração das falhas menores, elas possuem certo ângulo em relação as falhas maiores, conforme mostrado por Fernandes (2008). Esta zona, portanto, tem direções NE de pequeno porte no Leste com alta densidade e NW no Oeste, onde estruturas de maior porte interferem mais. Isso demonstra que nesta parte não existe uma direção preferencial para concentrar alta salinidade. As linhas potenciométricas tem um comportamento concêntrico em torno desta região, indicando que existe alguma estrutura dômica ali. Essa mesma interrelação de estruturas NW e NE foi verificada em diversos trabalhos (Filho *et al*, 2005; Strieder *et al*, 2015).

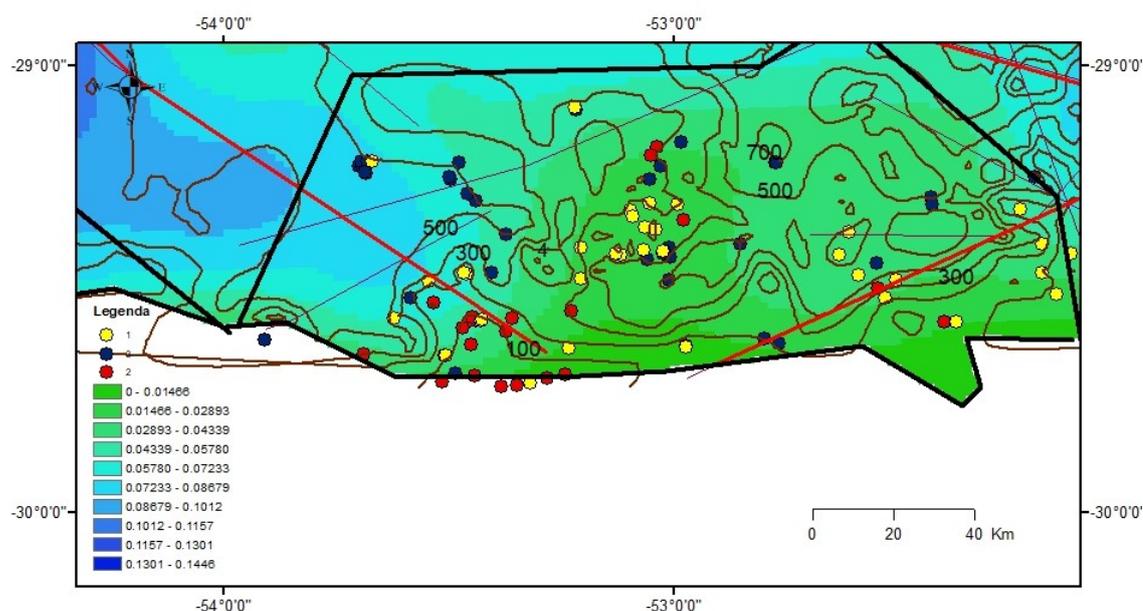


Figura 104 - Mapa de densidade de lineamentos para a direção 125-145 para comprimentos maiores que 5 Km, grupos de K-means e isolinhas potenciométricas do SASG na zona 4. As grandes falhas

NW interferem na potenciometria do SASG e do SAG no oeste da zona. Grupo 1 (amarelo), grupo 2 (vermelho), grupo 3 (azul).

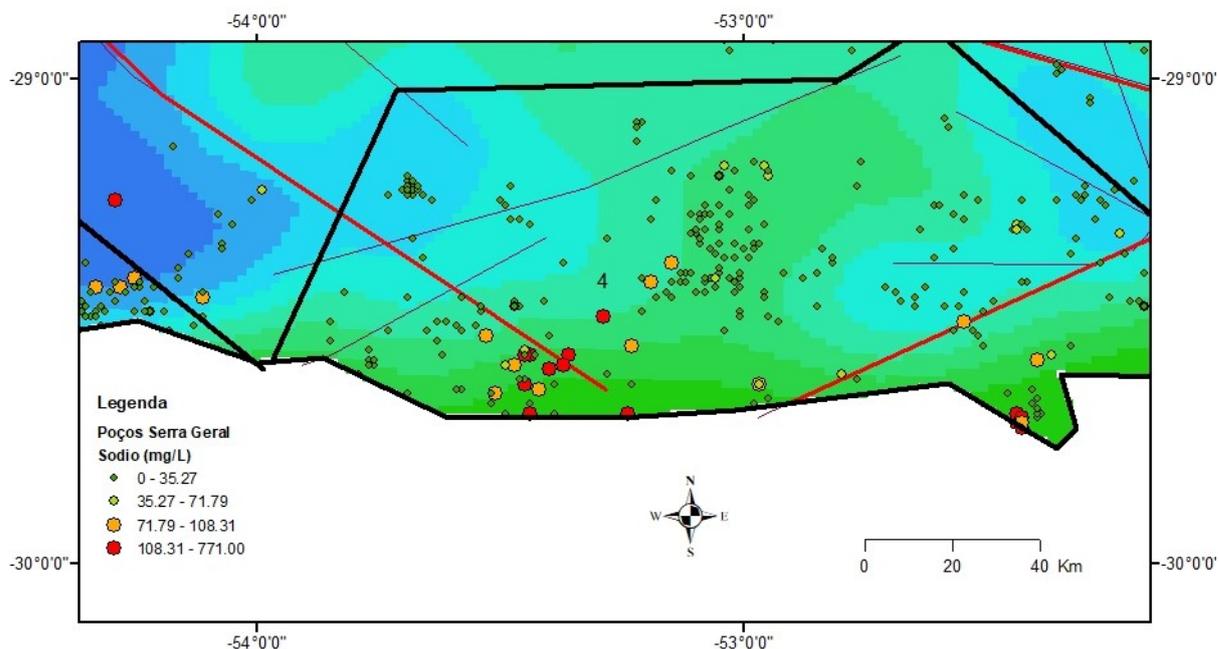


Figura 105 - Mapa de densidade de lineamentos para todas as direções para comprimentos maiores que 5 Km, e malha amostral de sódio na zona 4

Na zona 5, existe alta densidade de fraturas nas direções N70-85 e N90-115 abaixo de 5 Km e na direção N20-45 acima de 5Km. No entanto, nem todas estas direções contribuem para altos valores de salinidade. Isso demonstra que existem diferentes famílias de fraturas com orientação distinta nesta zona com comprimentos menores que 5 Km. Na região do Rio das Antas, em especial o trecho entre os municípios de Bento Gonçalves, Cotiporã e Veranópolis, existe a influência de diversas estruturas de menor porte que são responsáveis pela formação de blocos. Os blocos baixos não necessariamente encontram-se posicionados nos vales dos rios, reforçando a atuação de esforços estruturais (Matos, 2020). A densidade das falhas maiores que 5 Km possuem também correlação com os grandes lineamentos. Nos comprimentos maiores que 5 Km, existe correlação moderada dos altos valores de salinidade com a direção N125-155 (Figura 106) e boa com a direção N90-115 (Figura 107). Para comprimentos menores que 5 Km, a direção N22-45 é a que melhor coincide com o lineamento Rio das Antas (Figura 108). No sul-sudeste da área, o mapa de densidade com lineamentos de grande porte noroeste coincidem com o lineamento Bento Gonçalves no município de Gramado.

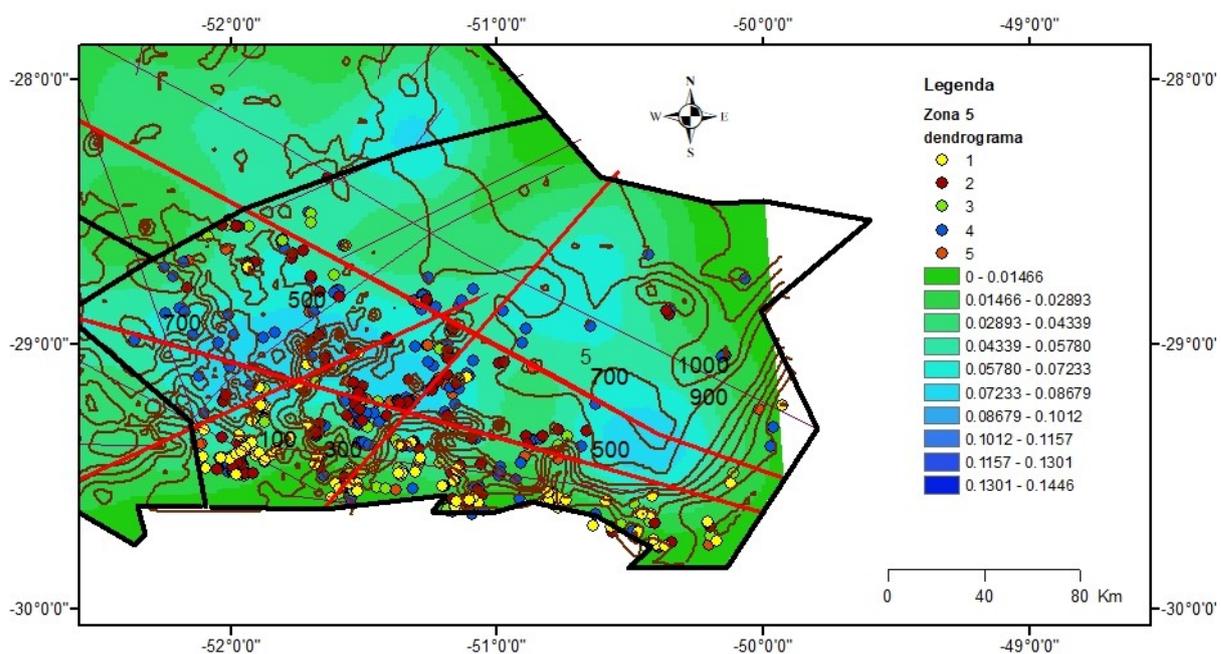


Figura 106 - Mapa de densidade de fraturas na zona 5 com comprimento maior que 5Km para a direção N125-155 com grupos de K-means e isolinhas potenciométricas do SASG na zona 5.

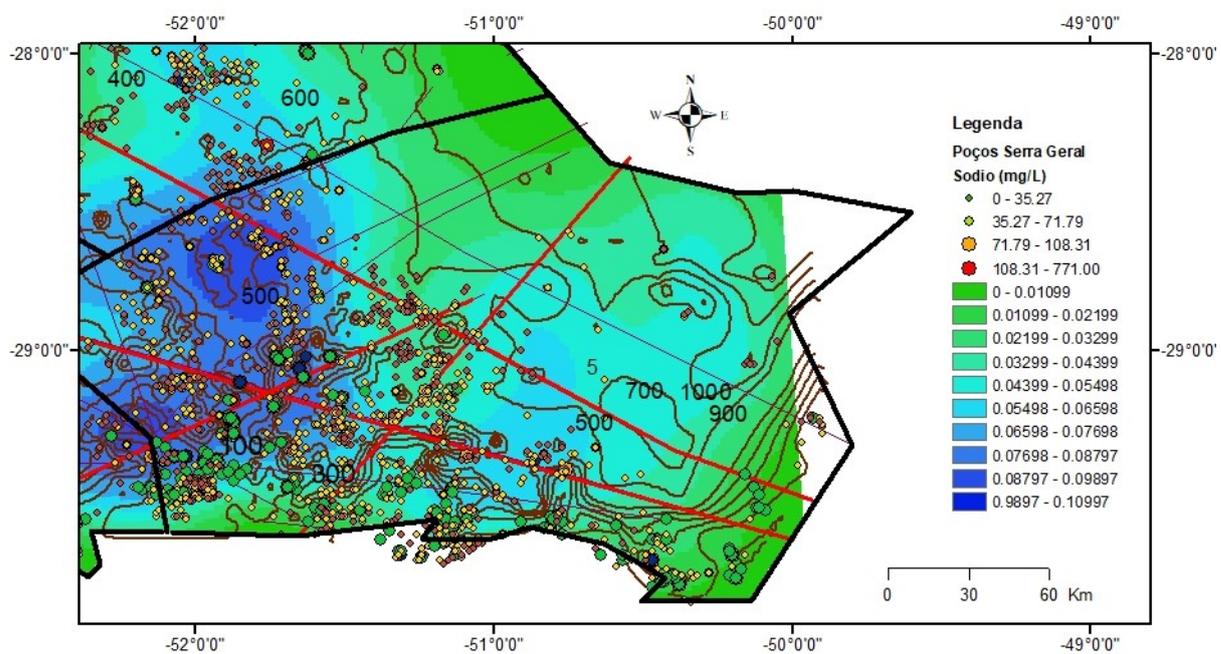


Figura 107 - Mapa de densidade de lineamentos para a direção 90-115 para comprimentos maiores que 5Km e malha amostral de sódio com isolinhas potenciométricas do SASG.

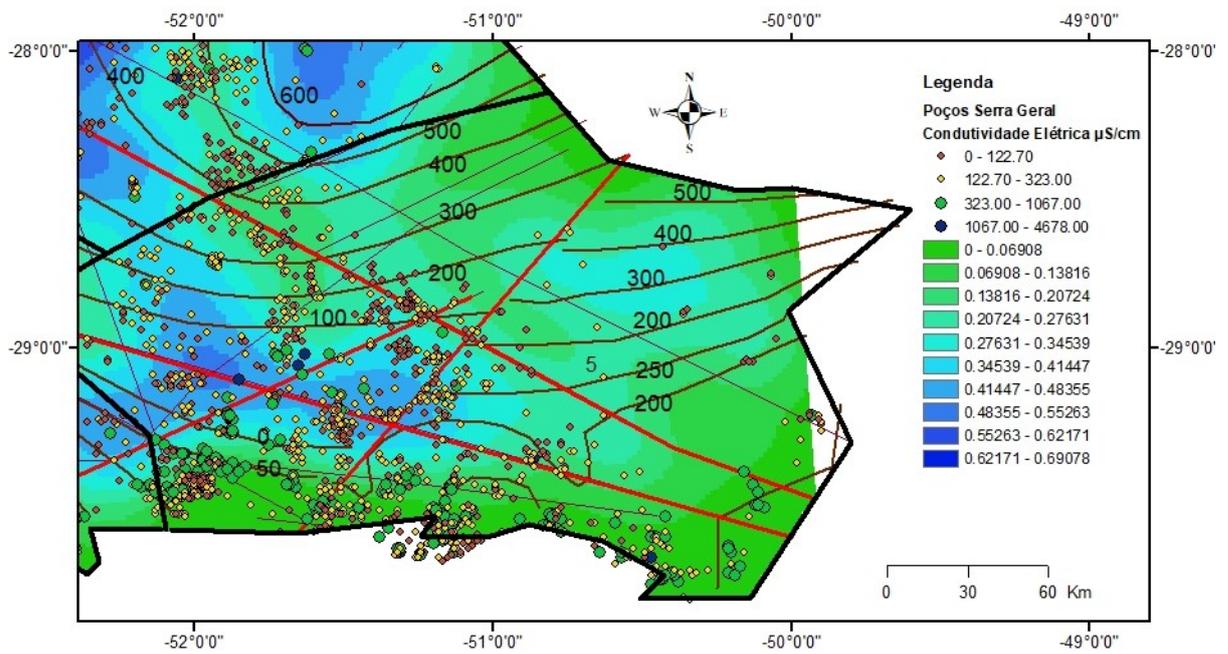


Figura 108 - Mapa de densidade de lineamentos para comprimentos menores que 5 Km na direção N22-45 com malha amostral de condutividade elétrica e curvas potenciométricas do SAG.

5. MANUSCRITO 1 - REVISÃO INTEGRATIVA DA LITERATURA

Structural, Hydrogeological and Hydrochemical Characterization of Aquifers in the Paraná Basin: Integrative Literature Review

Authors: Guilherme Vargas TEIXEIRA¹, Antonio Pedro VIERO² & Guilherme D'Ávila NUNES³

¹ Programa de Pós-Graduação em Geociências, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Av. Bento Gonçalves, 9500, CEP 91.540-000, Porto Alegre, RS, Brasil (teixeira_guilherme@yahoo.com.br)

² Instituto de Geociências, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Av. Bento Gonçalves, 9.500, CEP 91.540-000, Porto Alegre, RS, Brasil (antonio.viero@ufrgs.br)

³ Instituto de Geociências, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Av. Bento Gonçalves, 9.500, CEP 91.540-000, Porto Alegre, RS, Brasil (guilherme.dn@hotmail.com)

ABSTRACT

Objectives: 1) Analyze studies that address the structural, hydrogeological and hydrochemical characterization of aquifers in the Paraná Basin; 2) Highlight the main techniques used in the respective studies. Methodology: Integrative literature review, whose research question is: what is the national and international scientific production regarding the structural, hydrogeological and hydrochemical characterization of aquifers in the Paraná Basin, between 1999 and 2019? The search was performed in the databases: Georef, Scielo, Scopus, Web of Science and CAPES Journals, with descriptors according to the Integrative Review Protocol, on August 31, 2019, totaling 837 articles. With the application of the exclusion criteria, 49 studies were selected to be read in full. Results: the most common chemical types of groundwater that circulate in the sedimentary and volcanic units of the Paraná Basin, which include the Pirambóia, Irati, Rio Bonito, Botucatu and Serra Geral are calcium, calcium-magnesian bicarbonates, calcium-sodium bicarbonates and sodium-sulphate-chloride bicarbonates. Sodium-sulfated waters are not found in the Serra Geral Formation, except when they come from a large part of the sedimentary units. Sodium and sulfate are not expected ions in the basalt weathering, and therefore a greater understanding is needed on structural communication by means of faults that occur between the Serra Geral Aquifer System (SASG) and the Mesozoic and permian sedimentar aquifers and aquitards that contribute for unexpected ions in the SASG. The hydrogeological characterization is done by analyzing the flow data of the aquifers of the Paraná Basin and their capacity to store and promote water, whether in a fractured or porous environment. The main techniques used are petrographic characterization, remote sensing, satellite image tracing techniques, principal component analysis, sampling techniques for physical-chemical parameters. Conclusion: The Paraná basin is a reason for interest in geological studies in Brazil because of its link to several areas of interest in geosciences, which include hydrochemistry, stratigraphy, paleontology and hydrogeology.

Key words: Paraná Basin, Hydrochemistry, Structural geology.

1 INTRODUCTION

The valorization of groundwater occurs at a global level since they are essential for the maintenance of life. Groundwater is an important reserve because it is available at any time, in addition to having low storage costs, being an alternative to surface water, subject to more frequent changes in its natural quality. Groundwater is also a source supply in periods of drought for rivers and surface water sources such as springs, lakes and wetlands. In turn, the increase in industrialization, urbanization and population has created many problems. Overuse has been the cause of deteriorating water quality and is also responsible for chemical changes in the water. (Bonotto, 2012)

The Serra Geral Aquifer System (Fig.1) is one of the main hydro-stratigraphic units existing in southern Brazil, mainly due to the vast territory it covers and can be used as a source of groundwater supply in several municipalities and states (Scheibe & Hirata, 2006). The SGAS is a free aquifer and can, in rare places, develop a confined character. The hydraulic conductivity of the SASG is too variable and complex to evaluate and predict, mainly due to the fact that it is heterogeneous and anisotropic, with a background between 117.35 and 378.35 $\mu\text{S}/\text{cm}$, with values below 117.35 being detected in areas where recharge occurs exclusively due to rainfall (Tomasi & Roisenberg, 2019).

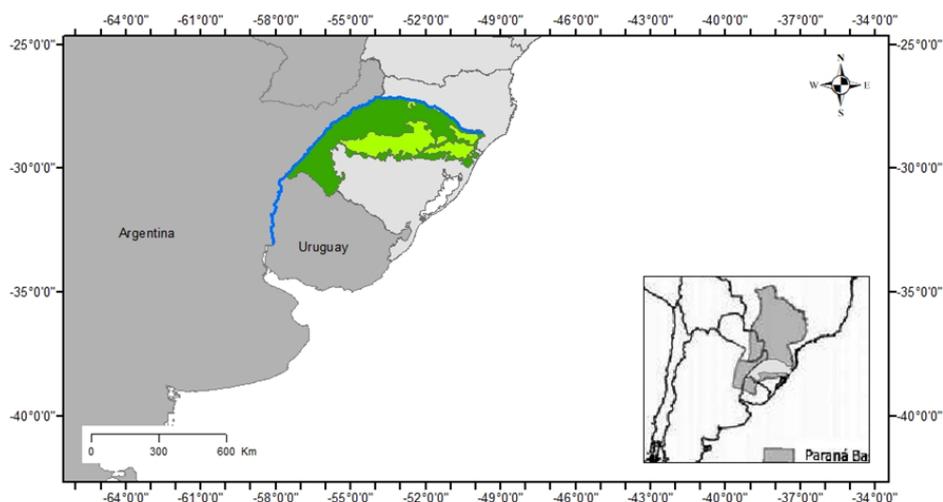


Figure 1 - SGAS study area in Rio Grande do Sul. A) location of volcanic rocks in the Serra Geral Formation in Rio Grande do Sul (modified from Scherer, 2002; Janasi et al., 2011) B) Location of the Paraná Basin (modified from Reis, 2013).

Basalts are good aquifers because they store water of excellent quality water generally characterized by low salinity, and the lateral and vertical extension allow a large storage capacity. Basaltic lavas have geological discontinuities that reflect the flow dynamics in these units (Gastmans *et al.* 2016). The structural anisotropy of the SGAS represents the atectonic records of the volcanic depositional environment (spills, pyroclastic flows, underwater flows in different degrees and scales of intensity), as well as tectonic structures related to the superimposed deformational events that occurred during the tectonic evolution of the Paraná (Milani, 2004).

The Paraná basin is located in three countries (Brazil, Argentina, Uruguay and Paraguay). Thus, it is an intracratonic basin covering about 1500000 km², developed between the Ordovician and the Cretaceous. The sedimentary sequence is 7.5 km thick and is composed of six supersequences: Rio Ivaí, Paraná, Gondwana I, II and III and Baurú (Milani *et al.* 2007). Its sedimentary filling comprises five large stratigraphic units, which make a total of 6000 meters in thickness. It is a flexural, polycyclic chronic basin, with deposition beginning in the Devonian. The Paraná basin is considered a single basin, although it has been subjected to disturbances of varying origin, which include: 1) vertical movements, 2) flexural subsidence from the margins of the plate during the Paleozoic. The basin rocks are essentially siliciclastic generated in the Paleozoic and Mesozoic, in addition to occurrences of sporadic carbonates in the Permian (Rostirolla *et al.* 2000). After the deposition of sedimentary units, the volcanism of Serra Geral occurred. Volcanism is associated with the generation of the Atlantic Ocean. (Frank *et al.* 2009; Turner *et al.* 1994) places volcanism between 137 and 127 Ma.

The tectonic structuring of the Paraná Basin has been the subject of many studies aimed mainly at prospecting for hydrocarbons, using remote sensing techniques, geophysical surveys and structural geology (Soares, 2008; Strieder *et al.* 2015). Through this tectonic structuring it is possible to infer preferential water and hydrocarbon paths and the volume of such resources which are directly related to the tectonic regimes that occurred in different periods of geological time and that followed the evolution of the Paraná Basin.

The Rio Bonito Formation is contained in sequence I of Paraná basin. Its history is linked to the subsidence of the Carboniferous, accompanied by the deposition of the Aquidauana-Itararé units, with records exceeding 1500 meters in thickness. Overlapping the Itararé group, there are sandstones, siltstones and layers

of coal from the Rio Bonito Formation. The deposition of the Itararé Group and the Rio Bonito Formation was influenced initially by the subsidence phase attributed to the overload of the continental glaciers, followed by the weight of the sediments deposited during the subsequent transgressive-regressive cycle. In Rio Grande do Sul the Rio Bonito Formation is closely associated with the Palermo Formation (Milani, 2007).

The Rio Bonito aquifer with a fine to medium sandstone composition has drinking water only at low depths. In some portions there may be intercalated layers of shales and coal that behave like aquitards with aquiferous sandstones. Average flow rates can reach up to 20 m³/h on average. In a study carried out in the municipality of São Gabriel, the specific capacities of the Rio Bonito wells are less than 0.5m³/hm and the salinity of the water varies between 800 and 1500 mg/L of total dissolved solids, and the waters are saline with total dissolved solids above 10,000 mg/L in large depths (Goffermann et al., 2015). Its transmissivity and storage capacity depends on local structural characteristics, mainly open faults. NE and NW faults are supposed to be the main open fault directions (Belletinni *et al.* 2019).

The Irati Formation, also in the Sequence I, documents a unique movement in the evolution of the basin: an effective restriction on the circulation of water between the synclisis and the Panthalassa Ocean culminated in the development of a hypersaline environment in the interior basin and the last marine incursion in the Paraná basin (Milani *et al.* 2007).

The Irati is classified as a permian equitard. The specific capacities of the wells that capture water from this system are usually low, less than 0.1m³ / h.m (Machado & Freitas, 2005). These units overlie the Rio Bonito aquifer and because they are essentially made of rocks fine sedimentary are considered as aquitards, and do not have groundwater transmission capabilities groundwater. However limestone lenses and flat layers of sandstones between the shales and fractures can promote the circulation of water in these units

The Gondwana III supersequence named Jurassic-Ecretaceous Sequence in the conception of Milani *et al.* (1994) comprises the interval of the stratigraphic record of the Paraná Basin in which the eolian sediments of the Botucatu Formation together with fluvial Pirambóia Formation and the magmatisms of the Serra Geral Formation are positioned.

The volcanic rocks of the Serra Geral correspond to the SGAS of fractured nature constituted by the discontinuities present in the volcanic rock. Such rocks emerge in practically the entire Paraná basin and are of great hydrogeological importance due to their high exploitation. Its waters are explored through tubular wells and public supply, with flow rates up to 220m³/h (Freitas *et al.* 2017).

The strategic importance of the SGAS is proportional to the exploratory difficulty. It should be noted that cases have been described in which two tubular wells that are less than ten meters apart have specific antagonistic capabilities (Athayde *et al.* 2012). Therefore, in recent years there has been an increase in the population's concern about the enormous potential of the Paraná sedimentary basin in South America, and a large number of issues related to the correct management of this resource have been raised.

The SGAS is characterized by its great storage capacity and circulation of water because of fractures and faults amplified by vesicular and tonsilloidal areas and horizontal discontinuities between lava flows. Such structures can store and transmit large volumes of groundwater. The SGAS confines large aquifers such as the GAS and even deeper units (Pre-GAS). The SGAS's recharge and interaction mechanism with the aquifers below depends on structures that connect them (Freitas *et al.* 2017).

Higher Ca, Na and sulfate values found in the GAS in relation to the SGAS indicate the dissolution of eodiagenetic calcite that fills the pores of the sandstones of the Botucatu formation. Waters richer in total dissolved solids and sodium indicate a mixture of GAS with overlapping aquifers. (Gastmans *et al.* 2010; Filho *et al.* 2006)

The clearest influence of the GAS and other sedimentary aquifers on the SGAS occurs in wells where the values of total dissolved solids range from 1000 to 2000 mg/L, with chloride and sulfate contents above bicarbonate and predominance of sodium over calcium (Filho *et al.* 2006).

When the amounts of salinity between the GAS and the SGAS are the same, there is a hydraulic connection between these two aquifers, with a vertical extension of 400-500 meters which allow the ascension of aquifer waters under the SGAS with mineralized waters originating from mixture (Scheibe and Hirata, 2008).

Therefore, the objectives of this integrative literature review are: 1) Analyze studies that address the structural, hydrogeological and hydrochemical

characterization of the aquifers in the Paraná Basin; 2) Highlight the main techniques used in the respective studies.

2 METHODOLOGY

An integrative literature review (ILR), which aims to summarize knowledge through a systematic and rigorous process and the conduct must be guided by the same principles recommended for methodological rigor in research development. The steps of this method are: 1) elaboration of the review question; 2) search and selection of primary studies; 3) extraction of study data; 4) critical evaluation of the primary studies included in the review; 5) summary of the results of the review and 6) presentation of the data (Mendes; Silveira; Galvão, 2019).

In the first stage the following research question was asked: What is the national and international scientific production about the structural aspects and the hydrogeological and hydrochemical characterization of the aquifers of the Paraná Basin, between 1999 and 2019?

In the second stage a search was carried out in the database, which consisted of: GeoScience World (Georef), Scientific Electronic Library Online (Scielo), Scopus and Web of Science. In addition, a search for CAPES journals was carried out, considering the possibility that some journals (and their respective articles) may not be indexed in Georef, Scielo, Scopus and Web of Science. The database search was performed with descriptors according to the developed Integrative Review Protocol, containing search strategies, organized in conjunction with the librarian, considering descriptors, and synonyms, resulting in the following syntax: (“Paraná Basin” OR “Paraná Basin Tectonica” OR “Aquifero Guarani System” OR OR “Serra Aquifero System” OR OR “Paraná Geological Basin” OR OR OR “Rio Bonito ”OR Palermo OR Botucatu OR “ Paraná Basin ”OR “ Paraná Basin Tectonics ”OR “ Guarani Aquifer System ”OR “ Paraná geological basin ”OR “ Paranaica basin ”) AND (Hydrochemistry OR “ Diagenesis of sedimentary aquifers ”OR “ Groundwater ”OR Aquifer OR “ Geological structure ”OR hydrogeological OR “Chemical composition of water” OR “Stable isotopes” OR “Interaction of water rock” OR “Fractured aquifer” OR “Fractured aquifer” OR “Stable isotopes” OR “Water-rock-interaction” OR “Cluster analyzes” OR Hydrogeochemistry OR Hydrogeological OR hydrochemical OR aquifer OR “Geological structure” OR diagenesis OR groundwater OR “Subterranean water”

OR “chemical composition of water” OR “groundwater esoz oicos ”)). The following were considered for the search on the Web of Science TS = title, abstract and keywords; in Scopus the title, abstract and keywords; in GeoRef All and advanced search and in Scielo and CAPES journals, all indexes.

The following criteria were established for inclusion of the researched studies: a) Studies published between 1999 and 2019 and that contain the established search terms. The exclusion criteria for studies were: a) Studies in the form of letters, reviews and editorials and theses and dissertations; b) Duplicate studies; c) Studies that do not contemplate the scope of the research; d) Studies not available in full.

In the third stage carried out on August 31, 2019, the databases were searched using the descriptors, finding 837 references. In the fourth stage, the selection of studies began by reading the title and abstract, totaling 339 articles. With the application of the exclusion criteria, 37 duplicate studies were detected, 221 studies that did not consider the scope of the research, 21 studies that were not available in full, resulting in 54 studies selected to be read in full. In addition, in the fourth stage, the selected studies were organized and analyzed using Microsoft Excel®. The fifth stage, discussion of the results and the sixth stage, presentation of the RIL will be addressed in the next sections of this article.

Table 1 - Chart of the methodological itinerary

	Artigos selecionados da Base de dados	Artigos selecionados com análise de título resumido	Artigos selecionados após aplicar os critérios de exclusão
Georref	87	22	1
Periódicos Capes	105	93	36
Scielo	28	14	4
Scopus	272	125	9
Web of Science	350	83	6
Total	839	329	56

Source: Prepared by the author, based on the database search on August 31, 2019.

3 RESULTS AND DISCUSSION

3.1 Techniques used for petrographic and hydrochemical characteristics of SGAS, GAS and pre-GAS

Petrography and analytical techniques are very important to detect the minerals that occur in each of the sedimentary units. Without certainty regarding the minerals that make up these units, it is impossible to analyze aquifers in their hydrochemical aspects and understand the evolution of water in the different percolation paths and in the water-rock interaction processes.

As the main method, Silva et al. (2017) used X-ray diffractometry (XRD) comprising the analysis of total rock that resulted in the division of two fractions, one above 2 μm and a fraction between 2 μm and less than 0.074 mm to evaluate which clays would be present in the outcrop in Aceguá city on the Rio Grande do Sul State.

To analyze diagenesis aspects of the Pirambóia Formation, Caetano-Chang and Wu (2003) used a microscopic analysis of 114 thin sections of points distributed throughout the study area, in addition to four wells in the Anhembi region. Among these samples, 30 are from surface samples while the remaining 84 are from subsurface samples. It is also worth mentioning the use of a scanning electron microscope to recognize and determine the clays that were mechanically infiltrated and identify the textural characteristics of the rocks that make up this which is the largest groundwater reservoir in the Guarani Aquifer in the State of São Paulo.

In an important paleoenvironment study of the Irati Formation Goldberg and Humayun (2016) carried out analyzes of ICP-MS, as well as the analysis of total organic carbon and sulfur (using the LECO C/S equipment Determinator, CS-244) plus carbon isotopes.

In general, biostratigraphy is another important tool for stratigraphy in general is biostratigraphy. Thus, there are not a few works carried out in the Paraná Basin that use this tool to define lithostratigraphic units. Mori & Souza (2010), identified the palynological content of 29 palynological slides corresponding to the Rio Bonito and Palermo Formations. In addition to this this method is also used in the work of Premaor et al. (2006) in samples from the Irati Formation.

An example of the use of conventional facies analysis techniques for the stratigraphic analysis of a given lithostratigraphic unit can be seen in the study by Canuto et al. (2001). These techniques identified lithologies, textures, sedimentary

structures and types of fossils, through interpretations of sedimentary processes and environments, and the treatment of systems and their respective limiting surface, enabled the proposition of a depositional model.

Carelli and Borghi (2011) used the petrographic analysis method on 34 samples as well as XRD analyses and Total Organic Carbon for the characterization of the microfacies of the Ponta Grossa Formation. According to them, such techniques confer information on mineralogy, microtexture, microtrama, microstructures (physical and biogenic), microfossils, particulate organic content, color and stratum variation in hand samples and thin sheets.

3.1.2 Studies of petrographic and hydrochemical characteristics of SGAS, GAS and pre-GAS

The petrographic characterization of aquifers is an important tool to understand about solubilization and solute transport and the evolution of groundwater chemistry since these waters acquire the composition according to the layer they pass through. Diagenesis processes related to groundwater flow affect the petrographic framework of aquifers because of changes in the original porosity and the generation of secondary porosity produced by the dissolution of mineral grains and cements, or the precipitation of new minerals that fill the existing pores. These processes are related to the interaction of water with the rock (quality/quantity) that percolates in this relationship. Understanding the characteristic of a sedimentary basin in combination with an understanding of geochemical processes can help in predicting the hydrochemical and hydrodynamic characteristics of an aquifer.

The mineralogy that constitutes the framework of an aquifer influences the chemical properties of groundwater. These relationships are difficult to determine because many compounds found in groundwater are not the direct product of altering minerals.

The Rio Bonito Formation which is an important hydrostratigraphic unit is composed of three members: named the Triunfo, Paraguaçu and Siderópolis members. The coal layers utilized in the coal-mining region occur in the Siderópolis Member.

The Siderópolis Member has three lithological associations: the lower (Bonito sequence as very fine-grained sandstones interspersed with siltstones and coal layers), the medium (Barro Branco sequence with medium to coarse-grained sandstones) and the superior (transgressive sands with fine to very fine quartz-

sandstones) associations. The Siderópolis Member in the coal-mining region is separated into three different layers: the basal sequence, the intermediate sequence and the upper sequence. The superior sequence is considered to be a sandstone aquifer of intergranular porosity which has been partially filled with a silica cement (Belletinni et al. 2019).

In the petrographic and mineralogical characteristics of the Rio Bonito formation, pyrite occurs in the form of irregular framboidal, microcrystalline or cubic concretions. Pyrites replace grains of quartz and calcite and fill large pores of sandstones without quartz growth. Calcites occur as cement that fills porous spaces which can eventually replace grains of quartz and feldspar and fragments of rock (Ketzer et al. 2003).

The sandstones of the Rio Bonito formation are subarkoses to quartzstone in composition. The main detrital constituents are monocrystalline quartz and alkaline feldspars, biotite, muscovite, heavy minerals, opaque minerals and glauconites. Cementation includes calcite, quartz and feldspars (Ketzer et al. 2009). Kuchle and Holz (2002) defined that Rio Bonito formation has both waves-dominated Depositional System facies and deltaic Depositional System facies. The deltaic system is dominated by coarse sandstones with tractive structures and is associated with levels of coal. Regarding the sandstones of the shallow ocean system dominated by waves, they are characterized by claystones and siltstones interlayered with sandstones forming wavy and linsen type structures, the sandstones have well selected quartz grains and layers with good potential for oil and gas reservoir, as well as water.

The water quality varies from areas in which it is outcropping close to recharge zones to regions where it is confined by the Permian aquitards. In the first case, there are the concentrations of main cations have the following proportions: $Ca^{+2} > Na^{+} > Mg^{+2} > K^{+}$. In the second, $Na^{+} > Ca^{+2} > Mg^{+2} > K^{+}$. Anions are predominantly bicarbonates $(HCO)_3^{-}$ and secondarily sulfates (SO_4^{-2}) which occur in significant concentrations when the Rio Bonito Aquifer is under the influence of aquitards.

These Irati and Palermo Formations represent Permian aquitards that have low specific capacities below 0.1 m³/h because they are formed of fine sedimentary rocks mainly shales. However, limestone lenses, sandstone layers, shale planes and fractures can promote water circulation in these units. The circulation restriction was much more efficient during the deposition of the Assistance Member, where a

hypersaline environment was generated. Many specific minerals were generated during this interval, such as gypsum, analcima, pyrite and barite. These minerals are deposited in situ and are capable of determining paleoenvironments (Holanda et al. 2019).

The Irati is a succession of (a) dark gray silty-clay not bituminous shales with thin conglomeratic layers of sandstone and mud (Taquaral Formation), (b) bituminous black clay shales, in some cases interlayered with beds of carbonate rocks (dolomitic marble) and thin centimeter lenses of nodular and few evaporated flint (Gypsite and anhydrite), covered by clayey-syric and clayey shale (Member Morro do Alto), and (c) carbonates (dolomites interspersed with sandstones at the base) and oil shale and clay, with or without intercalated carbonates. There is a layer of plaster and halite in Mesozoic.

Diagenetic mineral, like calcite, gypsum, barite, fluorite, pyrite and halite were registered by Kern et al. (2008) in betuminous shales. These minerals are likely the source of calcium, alkalinity, sulfate, barium, fluoride, chloride and sodium dissolved in groundwater (Teixeira & Viero, 2017). The siliciclastic sequence predominates in the eastern portion of the basin while the carbonatic sequence predominates in the northern portion.

The high presence of fluorite in the Irati Formation is directly linked to the presence of organic matter in the black clay. The composition of clays is composed of smectite and illite (Kern *et al.* 2008).

In the mineralogy of the fine shale fraction, the predominant mineral is smectite, followed by quartz. In the diffractogram of the fine fraction it was found that the peak of 15.1 Å verified in the test without treatment, expands to 17.0 Å with glycolation and collapses to 9.6 Å with calcination. This behavior identifies the clay as a smectite with this being the only mineral observed in the sample. The analysis of parameter b of smectite 1^a shows the peak 1500 Å which it identifies with smectite of the Montmorillonite type, dioctahedral saturated with Ca (Silva *et al.* 2017).

In the Irati Formation the main source of sulfate is organic matter and not pyrite. The sedimentary fabric which characterizes the layers rich in organic matter attests to anoxia. Anhydrite cementation is verified in most samples from drill cores (Goldberg *et al.* 2016). Poikilopic crystals involving several grains are common, but they still occur as smaller crystals filling intergranular spaces. In diagenetic terms in eodiagenesis calcite is the main constituent. In the Rio Bonito Formation pyrite

occurs in the form of irregular aggregates. Pyrite concretions can occur along layers of sandstone. They occur near sequence limits, close to layers of coal (Bocardi *et al.* 2006).

In the Santa Maria Formation from sequence II of the Paraná basin most of the grains that make up the lithology of this unit are composed of quartz, feldspar and clays. The clays are divided into infiltrated and autigenic clays. In the latter, there is an incipient diagenesis which includes a mixture of layers of Illite and Smectite (Pierini *et al.*, 2002). In addition to high fluoride, the sodium, sulfate and chloride content occurs in the deepest portion of the Santa Maria formation and represented 20% of the samples in a study by Marimon *et al.* (2013).

The Gondwana III supersequence is widely distributed throughout the Paraná Basin, and its continental sediments are predominantly representative of eolian facies. The entire Botucatu Formation is constituted by medium to fine sandstones of high sphericity and frosted aspect with tangential cross stratification from medium to coarse. This formation is part of a major desertification of Gondwana before the break and opening of the Atlantic Ocean, and this process was responsible for the presence of large dunes identified in the Paraná Basin. This unit is composed of well-selected sandstone grains, with cross-stratification with sporadic conglomerates, in addition to clay deposited in lakes.

The sandstones of the Pirambóia Formation which have a close association with the Botucatu Formation have clays that involve the grains and cementation of calcium carbonate, gypsum, iron oxide/hydroxide and silica at the time of deposition. Calcite occurs in the diagenetic phase. The occurrence of autigenic pyrites is localized and associated with the presence of oils. Its genesis is linked to the migration of hydrocarbons which is preceded by reducing and sulfuric acid solutions (Caetano & Tai, 2003) The Pirambóia formation is superimposed on the Rio do Rastro Formation. It consists of thin, silty, light gray friable sandstone in a bedding of about 20 meters thick. It has little topographic expression and has friable sandstones form cavities in contact with the Botucatu Formation constituting small caves (Camolezi *et al.* 2012). This formation has more clay and is quite fluvial in its origin in relation to Botucatu which is essentially desert (Meng *et al.* 1997a).

According to Reginato (2004) SGAS is characterized by a sequence of volcanic acidic and basic rocks streams arranged in nine main strokes. Basic rocks are represented by basalts and constitute six main lavas flows (the primary structure

consists of massive zones from vertical disjunction and by vesicular zones to tonsilloid intercalated by volcanic gaps). Acid rocks are characterized by the presence of riodacites, dacites, rhyolites and volcanic glasses and form three main lava flows in the study area (northern Rio Grande do Sul) (the primary structure is marked by basal zones, horizontal disjunction, vesicular zones to tonsilloid and volcanic breaches). In Serra Geral Formation in Rio Grande do Sul state there are dozens of acid and basic lava flows.

The predominant field of calcium or magnesian bicarbonated waters is in agreement with the chemical composition of the lithologies that host the fractured aquifer system. This relationship shows that the original source of Ca^{+2} , Na^{+1} and Mg^{+2} cations is associated with silicates that constitute the volcanic rocks of the region (basalts at the base of the sequence and riodacites at the top. (Reginato, 2009). In fact Reginato is not entirely right because the source of calcium comes mainly from calcites that fill tonsils in basalt. In this region, gypsum can also be a source of sulfate present in the tonsils. The water/rock interaction in the Serra Geral is restricted to the fracture walls and that is why there is not so much alteration of the basalts rhyolites and why sodium is not easily solubilized.

3.2 Paraná basin tectonics

Techniques used to study the tectonics of SGAS, GAS and pre-GAS

Techniques dealing with tectonic issues are often linked to satellite images and the tracking of structures in these images. Fieldworks identify these structures in more detail.

In Tomasi & Roisenberg (2019) the tectonic analysis around the Ijuí municipality in Rio Grande do Sul was developed through the treatment of shaded relief satellite images (MDT). These images were used to trace lineaments based on escarpments and valleys, as well as existing drainages. The lines were classified according to their length, in small (<2Km), medium (2-4Km) and large size (2-4Km).

Geoprocessing can be defined as a set of technologies aimed at the collection and treatment of spatial information for a specific purpose. Several types of data can be used in geoprocessing which can be grouped into five classes: Thematic, Cadastral, Networks, Numerical Terrain Models (MNT) and Images (Camara & Monteiro, 2001; Jacques *et al*, 2010).

Misuzaki *et al.* (2014) made the structural mapping in Santa Catarina and Rio Grande do Sul with detailed description of outcrop units, making columnar profiles, photographic documentation, measures of attitude and orientation of faults and fractures through fieldwork. The images of the digital models of the terrain allowed the interpretation of physiographic aspects such as drainage and interpretation of morphostructures. The satellite images were georeferenced in the UTM system (South American 1969, Datum 22 and 23).

Portela Filho (2005) analyzed magnetic structures in the Paraná State to summarize them in a magnetic-structural framework. In order to do this, the maps of total horizontal gradient, amplitude and phase of the analytical signal of orders zero and one of the tendencies in depth of the magnetic sources were interpreted, in addition to the features revealed by the MDT. The alignments observed to a single structure or dike, but to a sum of sources due to the height of data acquisition and the magnetization of bodies. The design of the relief alignments aims to assess the structures obtained through the magnetic method.

Reflection seismic has been successfully applied to investigate subsurface features for hydrocarbon exploration. In the last 15 years this method has been applied to solve several problems including engineering and environmental problems by advancing new processing techniques. A 82 km long section located near the Piratininga Dome was carried out in a project by Petrobrás and researchers from several universities. The acquired data correspond to a file in SEG pattern. The seismic section was processed according to the available data from the ANP. Processing was performed using a floating datum for topographic correction. The regional and detail seismic sections were inserted in the Kingdom program, where they underwent an interpretation stage with the objective of individualizing horizons and faults (CAMPOS *et al.* 2008).

Jacques *et al.* (2005) carried out studies on LANDSAT-5/TM and aerogeophysical (gamma-spectrometric and magnetometric) images in the region of the shear zones, using two ranges of scales (1: 50000) at 1: 10,000 and 1: 50000 at 1: 250000) and showed negative relief lines with four directions intervals. Bongiolo (2012) used traced lines to relate the factors found in the main components with preferred fracture directions.

Bortolin *et al.* (2014), made the structural characterization of Carlos Barbosa in Rio Grande do Sul using remote sensing products (radar images and aerial

photography) and digital models of the terrain. These products were used to identify the morphostructural lineaments existing in that region, and the interpretation of these lineaments was carried out in order to identify parameters such as orientation and density. Field activities were also carried out to identify the different types of structures and their geometric characteristics.

In the eastern board of Parana Basin in Santa Catarina state Sordi *et al.* (2017) mapped the flat-bottomed valleys occurred through TOPODATA SRTM data analysis, spatial resolution of 30 m treated by INPE band C in addition to LANDSAT images projected in high resolution from the study area in a 1: 10,000 scale obtained from the Santa Catarina Development Secretariat website. Jacques *et al.* (2010) elaborated lineaments in a 1: 500,000 and 1: 100,000 scale in both Landsat and SRTM images in three different geological provinces in Santa Catarina: the Santa Catarina shield the Serra Geral Formation in Santa Catarina and Gondwanic sequences from the Paraná Basin in that state. The outlines of the Serra Geral Formation reflected previous studies regarding the preferred directions being N45W and NE45. NW structures were reactivated by neotectonic efforts, while N45E structures were not. The lines drawn on the 1: 500000 scale are deeper and have a lower density than the lines drawn on the 1: 100000 scale.

3.2.2 Studies that discuss Tectonics of SGAS, GAS and pre-GAS

Hydro-stratigraphic units in the Paraná Basin are heavily controlled by diverse tectonic structures which include major faults and secondary faults associated with these larger ones. Many of these faults are reactivations of ancient basement weaknesses and faults below the first depositional sequences of the Paraná Basin.

In the Rio Grande do Sul state tectonic efforts were preferentially directional, which generated both extensional and transtensional tension fields. In a study in Serra Geral Formation, Reginato (2004) evidenced the presence of a strong tectonic field marked by the action of two main tension fields (the first tension field has a σ_1 horizontal compression direction of 082° and a horizontal σ_3 tension direction of 352° . The second field has a compression σ_1 equal to 174° and a tensile direction equal to 264° which were responsible for the generation of the existing tectonic structures in the area. The tectonic structures become the main conditioning factor of fractured aquifers, and the primary structures have a lesser degree of importance, since the conditions of circulation and storage of water storage are more restricted. It

also defined that the Caxias do Sul area in the eastern part of the Serra Geral in Rio Grande do Sul state has medium and small faults of a NE direction.

There are some structures that allow groundwater to flow horizontally and vertically. In the most recent work on the structure of aquifers in the Paraná Basin it is argued that Serra Geral must not be divided into not very extensive compartments, since some faults act to create heterogeneities within SGAS. Deep normal faults would be responsible for regulating the discharge and recharge of groundwater flow and allow geochemical differentiation (Kirchheim et al. 2019).

Soares et al. (2016) in a study in the Southern Region of Brazil, recognized the pattern of NW and NE directions, through a detailed study of LANDSAT images, gravimetry and magnetometry. They identified two bands of high concentration of N45 (45 +/- 15) W and N (45 +/- 15) E lineaments, and other less frequent lineaments directions for various reasons have low frequency both near NS and NNE and NNW. The Irati formation is strongly conditioned by these lineaments. In Misuzaki *et al.* (2014) in a study in the southeastern region of Santa Catarina these two fault families were also found. In one of the small groups there is a predominance of northeastern structures, and secondarily northwestern structures. The northwest structures have a longer range and have a few kilometers with good transmissivity and the traced lineaments in satellite image were verified and validated in all methods.

Strieder *et al* (2015) conducted a structural study in the Serra Geral in Rio Grande do Sul state. In this study he showed the wide predominance of transcurrent movement and adopted the Directional regime to distinguish the deformational phases of the Paraná Basin. The main criterion for distinguishing the deformational phases was to separate families with the same sense of movement. These procedures assumed that there were two tensors σ_1 and σ_3 acting horizontally with σ_2 vertical in addition to a rotation of movements due to the Gondwana rift. The various tectonic events verified can be summarized by: 1) Dn (Permian to the Lower Cretaceous). Deformational event prior to the rupture of Gondwana. NW oriented system (σ_3). 2) Dn + 1 (Upper Cretaceous). Basalt dikes with NW direction in the Ponta Grossa arch. NE direction basalt dikes oriented according to (σ_3). Dextral transcurrent movement. 3) Dn + 2 (Paleocene for the Eocene). Structural development of the Bauru Basin on the continental margin. Orientation according to NW (σ_3) with Sinister transcurrent movement.

The same author seeks to prove that a bidirectional tension regime was active during Jurassic (Botucatu Formation) and Kretaceous (Serra Geral Formation) eras and the regime was determined using techniques of local and regional structural elements that characterized the deformation phases. The stress ratio between σ_1 and σ_3 is 0.10-0.30 and this suggests a directional regime. Finally, the regime generated groups of conjugated faults with an orientation almost perpendicular to the main tensors therefore being NW oriented if σ_1 is NS oriented. In fact directional movements were very common in late Permian and early Mesozoic era in Rio Grande do Sul state but the late Mesozoic era was scenario for extensional regime only.

In the state of São Paulo this same pattern of directional regime was verified. These directional events generated hybrid conjugated faults and extension faults. Therefore there is a mixture of extension with directional movement resulting in an increase in the transmissivity of these faults. These main faults and secondary faults also can be filled with typical secondary minerals after basalt and rhyolite weathering. Cooling joints are easily filled with secondary minerals (Fernandes *et al.* 2016)

Rostirolla *et al.* (2000) indicates that researchers interpreted movements occurring in the basin as causing structural highs in the Phanerozoic sequences emphasizing that the movement of old faults is a fundamental process in determining the geometric arrangement and deformation pattern of the Paraná Basin. In the west of the state of Paraná, sinistral displacements of NW faults and distal NE faults occurred during basaltic flows at the end of the Kretaceous era.

According to Sordi *et al.* (2017) the NE and NW lineaments have their origin related to the Brasiliano period (750-650 Ma) and extended to the genesis of the Paraná sedimentary basin in Devonian period and suffered more pronounced reactivations after the separation between the South American and African plates. The E-W lineaments, as well as the more recent, newly formed N-S structures, are associated with the opening of the South Atlantic Ocean (130 Ma) and with the crustal flexure of the South American Plate. However, these lines have a secondary influence in the Paraná Basin, and rosette diagrams from several works show that the E-W and N-S directions are less frequent.

In Júnior *et al.* (2013) a family of secondary NE-SW planes ranging from N40E to N80E, with greater dispersion of NE fractures was found. One of the points of analysis marks the limit of the sandstones of the Ponta Grossa formation with the basalts of the Serra Geral Formation. The group of primary NW-SE fractures that

present a high dip angle between 80° and 90° which are concentrated in the same direction, with a well-defined trend around N40W. This is the preferred orientation along the Ivaí River.

Freitas *et al.* (2016) individualized 5 structural zones in Rio Grande do Sul State based on large tectonic structures. In Alto Uruguai Region at far West of RS e SC States the structural control is related to the Lancinha-Cubatão fault zone with N60E direction, the Chapecó River fault with N55E direction and E-W Uruguay River fault. Anomalous wells with high electrical conductivity are fitted in these directions. Secondly, there are N10W directions embedded along the Rio das Antas and the Rio da Várzea in the region of Frederico Westphalen and Ametista do Sul. The thickness of volcanic rocks in this area exceeds 1000 meters and the electrical conductivity is very high. There is also the Upper Uruguay/Midwest área which is limited by the Irani and Peixe rivers with N60E direction. The thickness here varies from 400 to 1000 meters and the electrical conductivity reaches a maximum value of 1200 $\mu\text{S}/\text{cm}$. It has the Taquari/Antas zone. This zone has very dissected relief and is closely associated with the tectonic structures present in the area. The structural control of the wells is associated with the Lajeado-Esteio fault system with N60W direction the Soledade fault zone (N65E), the canguçu back fault system (N40 E) and the Bento Gonçalves (E-W) fault.

The terrain is flat in the western border area. The major faults in this region is the Lancinha-Cubatão fault zone with NE direction and NW direction structures such as of the Jaguari-Mata fault system as well as the Santana do Livramento, São Francisco de Assis and Alegrete fault systems. This same zone has the largest gravimetric anomaly mapped with the Bouguier method with values ranging from -20 to 0 mGal, that correspond to more acidic rocks than basalts, such as andesites and riodacites while the other zones have less acidic rocks and therefore lower gravimetry values (Rolim & Xavier, 2012). The Missões/Northwest area of Rio Grande do Sul presents a little dissected relief. This system is limited by the Terra de Areia-Posadas system with direction N75W; Santo Ângelo fault System with direction N35W; and Lancinha Cubatão with N60E direction.

The cities of Foz do Iguaçu, Itaipulândia and Marechal Cândido Rondon have quota differences were -357 m, -631 m and -375 m, respectively. The difference in height between the first and the second city is 274 m, and between the second and third, it is 256 m. These increases are caused by regional uplifts represented by

major faults (Filho et al. 2006). Teixeira *et al.* (2019) concluded that there is a movement of blocks of up to 100 meters. The uplifted block, in the westernmost part of Rio Grande do Sul, is at quotas of 120 meters, while the quotas of the eastern part, are at quotas of 20 meters.

3.3 Hydrochemistry of SGAS, GAS and Pre-GAS

Techniques used for hydrochemical study of SGAS, GAS and pre-GAS

Multivariate statistical methods (PCA, Euclidean distance, Kmeans and Factorial methods) are the main tools for analyzing hydrochemical issues in the main aquifers in the Paraná Basin. Other non-multivariate statistical methods also occur, but do not provide a clear idea about the hydrochemical processes that take place in these aquifers.

In Freitas *et al.* (2016), the exploratory data analysis (AED) technique was adopted. This method was introduced by Tukey (1977) to analyze data that does not necessarily follow a normal distribution and has the advantage of not making many demands on the statistical distribution of data, as with other methods. EAD emphasizes the original exploration with the aim of simplifying the description of the data and obtaining a view of its nature.

Teixeira & Viero (2017) carried out a principal component analysis based on seven parameters: electrical conductivity, Ca^{+2} , Na^{+} , Cl^{-} , hardness and total alkalinity. Next, a multivariate statistical analysis of the hydrochemical data was performed to identify the existence of different chemical types in the groundwater of the western area of Rio Grande do Sul State. With the dendrogram analysis, the successive groups were individualized in only 4 according to the chosen distance.

Bortolin *et al.* (2016) determined the behavior of variables within the sample set through statistical analysis and non-parametric tests. In this research, the Kruskal-Wallis non-parametric statistical test was used at a significance level of 5% in order to assess differences between the points collected based on the analyzed hydrochemical parameters. This test was applied due to the small sample and the assumptions of normality required by the analysis of variance. A second analysis consisted of the analysis of clusters (cluster analysis) that uses the Euclidean distance to measure the similarity between individuals and to separate them in

homogeneous groups in terms of composition. The cutoff value in the tree (dendrogram) determines the number of groups. This cut-off value is at the discretion of the author, who determines the ideal number of groups. The author also used the statistical analysis of clustering to analyze the similarity between individuals in order to classify them hierarchically. The method for defining the distance between the groups was the euclidean distance and the cutoff point of the dendrogram occurred where the point of variance reached the greatest agglomeration.

The same factorial technique for analyzing a factorial set of data was used in Bongiolo (2011). The main component technique was applied to a set of 45 samples studied for nine variables: pH, STD, HCO_3^- , Cl^- , SiO_2 , Ca^{+2} , Mg^{+2} , Na^+ and K^+ . Three main components were obtained for each variable. STD and HCO_3^- were the main components, while for factors 2 and 3, the main components were Cl^- and K^+ and STD and Cl^- , respectively, with 3 new variables being generated from three factors. In Meng et al. (2002), parameters in the field were determined, such as temperature, pH, electrical conductivity and alkalinity. Samples for cation analysis were filtered in the field through a $0.45\mu\text{m}$ filter acidified with nitric acid at $\text{pH} < 2$. Analyzes for Ca, Mg, Na, K and Fe were performed using AAS. Analyzes for Cl and SO_4^{2-} were performed with ion chromatography, and for SiO_2 , by colorimetry.

Tomasi & Roisenberg (2019) also used factor analysis and hierarchical euclidean distance to separate different chemical groups. Factor 1 grouped Na^+ , pH, CO_3^- and F^- , typical of sodium bicarbonated Waters. Factor 2 grouped Ca^{+2} , Cl^- , Mg^{+2} and HCO_3^- typical of calcium-magnesian bicarbonated waters. The third factor had SO_4^{2-} e K^+ corresponding to magnesian calcium waters.

The quali-quantitative monitoring of groundwater is an important tool in the management of this resource. The values are represented by the charge of cations (Na^+ , K^+ , Ca^{+2} , Mg^{+2}) and anions (NO_3^- , Cl^- , SO_4^{2-} , HCO_3^-) present and can vary among several factors due to the geological material of origin penetrated into each well. Thus, the greater the amount of ions present dissolved in the water, the greater its electrical conductivity (Lobler et al. 2015).

Belletinni *et al.* (2019) separated Rio Bonito groundwater in Criciúma in Santa Catarina State in 4 groups mainly according to their sulfate, sodium, alkalinity, calcium, electrical conductivity and magnesium concentrations using EQ3 software to predict the saturation index of minerals and variables concentrations. This study was

carried out in samples collected in 9 Rio Bonito deep wells at six month intervals since 2008.

Studies that discuss the Hydrogeochemistry of SGAS, GAS and pre-GAS

The SGAS has a restricted variety of chemical types. However, when these chemical types mix with chemical types from other lower aquifers through upward recharge there is a great diversity that can cover more than six types found in SGAS wells.

Studying the Rio Bonito Aquifer in Candiota and Bagé city in Rio Grande do Sul State Goffermann *et al.* (2015) stated that the Palermo Formation, which is stratigraphically above the Rio Bonito Formation is considered an aquitard as it cannot store water. The Rio Bonito aquifer has greater salinity at great depths. Only in regions of small depths where salinity is lower the groundwater can be used for human consumption. The Rio Bonito aquifer may have an aquitard or aquiclude nature dependent of specific mineralogical composition. Most of the time Rio Bonito has direct contact with the basement and inherits its tectonic structures.

In the region of Criciúma Belletinni *et al.* (2019) pointed to the dissolution of gypsum as an important source of sulfate in the Rio Bonito aquifer. They also concluded that the sodium source whose contents are high in some wells resides in the cationic exchange with Ca and also in the dissolution of halite.

The SGAS groundwater is mainly calcium or magnesium bicarbonates representing the chemical composition of the volcanic rocks that correspond to the SGAS aquifer unit, and the original source of the elements calcium, magnesium and sodium is associated with changes in the silicates present on these rocks. The SGAS tends to present a relationship where $Ca > Mg > Na$ and an enrichment of calcium and magnesium at the top (acid rocks) in relationship to the base (basic rocks) of the volcanic rock bedding. Calcium bicarbonated waters are the typical waters of the SGAS with calcium being the most abundant cation resulting from the alteration of plagioclases and ferromagnesian minerals of basalt (Reginato *et al.* 2010). However, calcium is always related to bicarbonate which indicates its origin mainly from the hydrolysis of amygdala calcite, since the basalts feldspars have low solubility and no interaction with water.

Freitas & Roisenberg (2016) separated four classes of chemical waters in Serra Geral in Rio Grande do Sul state based on statistical analyses. They consider

normal values of electrical conductivity as those that are between 117.35 and 378.35 $\mu\text{S}/\text{cm}$. Values above and below these limits are considered anomalous. Four distinct zones in terms of electrical conductivity have been separated. One zone with values greater than 378 $\mu\text{S}/\text{cm}$, one with values between 221.75 and 378 $\mu\text{S}/\text{cm}$, one with values between 117.35 and 221.75 $\mu\text{S}/\text{cm}^3$ and one with values less below 117.35 $\mu\text{S}/\text{cm}/\text{cm}$. Class C1 is generally more alkaline and has high levels of sodium, sulfate, chlorides and fluorides. Class C2 has two well-defined hydrogeochemical types: calcium magnesium bicarbonated waters (65%) and sodium bicarbonated waters (34.4%). These are less saline waters than those in class C1, slightly alkaline, with a higher calcium content, low sulfate, greater hardness and low fluoride levels.

There is a correspondence between the total dissolved solids and the flows rates in the SGAS. STD values are higher in wells with GAS contribution. The flow rates and specific capacity of SGAS in western Paraná determine a spatial compartmentalization marked by the axis of the Ponta Grossa Arch where to the north of this structure the magnitudes of such variables are higher, in contrast to the southern portion. Areas with higher productivity in great detail scale, marked by compartments with NW-SE and NE-SW structures. The occurrence of anomalous values of specific capacity were found precisely on NW-SE directional alignments (Filho, 2005).

Filho *et al.* (2006) identified the following groups of groundwater of western Paraná State: sodium bicarbonate, calcium bicarbonate and sodium sulfate-chloride bicarbonates characteristic of the connection of GAS with underlying aquifers. In areas of high confinement, the pH is between 8.14 and 8.70 and the temperature is between 38 and 41°C. These groundwaters have high sodium content, which are higher than calcium and magnesium, and the concentration of bicarbonate is lower than that of sulfate and chloride. In mixed-type waters with reduced influence of the GAS on the SGAS the maximum pH is equal to 7.9, and fluoride concentrations below 0.1 mg/L and calcium predominates over sodium. In another study by the same author carried out in the north-central portion of Serra Geral in Paraná this same division was found (Filho *et al.* 2005). The high variability of the GAS does not indicate a single hydrochemical type and represents a composition of waters from different aquifers. In addition, there is no way to identify a clear spatial division between the different aquifers, since there is a lot of water dilution in any one of

them. There is a mixture of both rainwater and deep waters with intermediate deep waters (Bonotto, 2012).

According to Bittencourt (2003) higher levels of magnesium can be perfectly related to the SGAS. Waters that have GAS influences usually have an alkaline character. In Londrina region high sodium values coincide with the crossing of NE-SW structures with the São Jerônimo-Curiúva alignment, and further south at the intersection of an NE-SW mega structure with another E-W direction (Portela Filho *et al.* 2005).

The main hydrochemical studies of GAS were conducted in São Paulo initiated by the work of several authors (Meng, 2001; Sracek & Hirata, 2002) elaborated the hydrochemical evolution of these groundwaters for the NE portion of the aquifer in that state. The groundwaters seem to evolve from Ca-Mg-HCO₃ near the recharge area, where the aquifer is unconfined to Na-HCO₃ in confined portions until finally reaching portions with Cl-SO₄. Meng & Maynard (2001), through multivariate statistical studies, proposed a conceptual geochemical model to explain this zoning. Where the aquifer is unconfined and the waters have low pH, abundant CO₂ is dissolved and high concentrations of dissolved sílica occur in addition to the dissolution of feldspar and carbonate cement in the sandstones. In the confined zone, they suggest that carbonate cement dissolves and precipitate chalcedony cement.

In the state of São Paulo, Sracek & Hirata (2002) installed several piezometers that identified very heterogeneous pH values. The pH ranges were from 6.9 to 9 and because of that the Na is probably derived from the dissolution of albite or halite, related to evaporites from the Pirambóia Formation or surrounding aquitards. However, this process alone is not enough to explain all this Na input and cation exchange with Calcium is necessary. The Ca removed from solution by this process promotes more calcite dissolution and could explain the decrease in Ca with increased concentration of HCO₃ and Na along the evolutionary path. Eodiagenetic Smectite occurs in both Pirambóia and Botucatu in addition to the presence of mesodiagenetic bitumen and calcite cementation and the higher pH accompanies the chemical facies more enriched in sodium and sulfate (Sracek *et al.* 2011).

The diagenetic evolution of the Pirambóia Formation was more complex than the Botucatu Formation, not only due to its older age and greater sediment load, but also due to compositional differences and greater mineralogical variability linked to a

greater presence of clays and accessory metamorphic minerals (Hirata *et al.* 2011). In addition, water analysis identifies the presence of three types of groundwater: water rich in Ca-HCO₃ related to the recharge zone, with slightly acidic pH, water rich in Ca-HCO₃ in confined areas of the aquifer and a third type which evolves to Na-HCO₃ and subsequently has significant Cl and SO₄ contents with pH that can reach 10 in deeper areas. Deep waters indicate a transition between an oxide and suboxide environment above the sulfate reduction point.

Gastmans *et al.* (2010) concluded that $\delta^{13}\text{C}$ enrichment indicates dissolution of calcite in the Guarani aquifer. The high concentration of sodium and the high concentration of bicarbonate, associated with low concentration of calcium, suggest an exchange of these ions in clays. This exchange process prevents saturation of calcite and allows more calcite to be dissolved. Kirchheim *et al.* (2019).

The general classification of groundwater circulating through the SGAS was carried out based on samples from 116 tubular wells (samples selected from CORSAN and PAP) carried out by Reginato *et al.* (2013) The Piper diagram with the representation of SGAS groundwater in the region of Santa Teresa, Bento Gonçalves and Veranópolis municipalities shows three different types of water: calcium or magnesium bicarbonates, sodium bicarbonates and calcium or magnesium sulphates, this being last type of restricted occurrence. Meng & Maynard (2001) using the cluster analysis demonstrated that there are two main groups in a GAS study in São Paulo State. One compound of HCO₃-Mg-Ca-K-SiO₂ and the other of SO₄-Na-Cl-F, with smaller intermediate groups.

This same variation in the hydrochemical pattern was also identified by Machado and Freitas (2005) & Machado (2005). According to Reginato *et al.* (2013), GAS waters in regions with greater confinement tend to have higher electrical conductivity (270 to 686 $\mu\text{S}/\text{cm}$) and sodium and can evolve to sulfated or chlorinated waters and present higher values of pH (7.9 to 9.6). These characteristics may be related to a slower circulation which favors greater contact with the rock and a higher concentration of chemical elements. This could explain the occurrence of a high concentration of sodium, bicarbonates and carbonates, as well as chlorides and sulfates.

In Carlos Barbosa in the Rio Grande do Sul state the wells that had a higher amount of calcium, indicated a greater dissolution of calcite, resulting in a longer storage time. The amounts of carbonate and bicarbonate in the SGAS are lower than

in the GAS. There are small variations in the concentration of several ions with the exception of magnesium, sodium, chloride and sulfate. This difference is associated with different depths of water entrance Bortolin *et al.* (2014).

The field of sodium bicarbonated waters is not common in the SGAS so it could show two situations. The first would be related to the greater confinement of the SGAS, while the second is related to the possible existence of a connection between the GAS and the SGAS. Machado and Freitas (2000) suggest that this field may be related to a natural geochemistry evolution or may result from a connection between the two aquifer systems. Bittencourt *et al.* (2003) suggest that these waters come from aquifers underlying the SGAS, such as the GAS. For Mocellin and Ferreira (2009) SGAS waters that are not calcium or magnesium bicarbonate represent different rates of water mixtures from aquifers under the SGAS.

Athayde *et al.* (2014) identified numerous cases of wells that capture water in the SAG and SGAS in the western region of the state of Paraná. These cases demonstrate that there is a physical possibility of mixing water from the SGAS with the GAS due to favorable potentiometric isolines. The lowest potentiometric levels of the SGAS are recorded in the extreme west of the state of Paraná close to the Paraná River where there is a possibility of mixing.

In the state of Paraná, it is clear that the sulfated-chlorinated-sodium waters come from aquifer waters underlying the SAG, which connect to it through fractures. The total dissolved solids content is between 1650 and 2208 mg/L for this type of water and the temperatures are between 38° and 41° C. These waters are not suitable for human consumption, and the author suggests diluting these waters with less saline groundwaters (Filho *et al.* 2006).

4 CONCLUSIONS

Among the several important discussions it is importante to mention that when addressing tectonic issues it was found that the deep normal faults and diabases such as dikes and sills close to large tectonic structures in the Paraná Basin are responsible for regulating the discharge and recharge of their groundwater flow. There are two bands of high concentration of lineaments N45 (45 +/- 15) W and N (45 +/- 15) E and other directions for several reasons, and have low frequency, both near NS and NNE and NNW.

The structural analysis of the SGAS shows an important transcurrent movement that was adopted to characterize the deformational phases in the Paraná Basin. The main criterion for distinguishing the deformational phases was to separate fracture families with the same sense of movement. This method assumed that tensors σ_1 and σ_3 are horizontal and σ_2 vertical, in addition to a rotation of movements due to the Gondwana rift.

The NE and NW lineaments have their origin related to the Brasiliano period and are associated to the genesis of the Paraná basin (750-650 Ma). They suffered more pronounced reactivations after the separation of the South American and African plates. The E-W lineaments, as well as the more recent N-S structures are associated with the crustal flexure of the Gondwana Plate that promoted the opening of the South Atlantic Ocean (130 Ma). All these great brittle structures act as hydraulic connectors between the aquifers of the Paraná Basin from the base of Itararé Formation to the top of Serra Geral Formation.

Some of the studies that addressed hydrogeochemistry issues showed a type that is generally more alkaline and has high levels of sodium, sulfate, chlorides and fluorides. Another type has two well-defined hydrogeochemical types: calcium/magnesium bicarbonated waters and sodium bicarbonated waters. These are less saline waters than those in the alkaline type with a higher calcium content, low sulfate, greater hardness and low fluoride levels. More confined aquifers have higher pH values. Magnesium, sodium and sulfate are very diagnostic of the chemical type of water and the degree of mixing to which the SGAS is subjected

The groundwater of SGAS with reduced influence of GAS have maximum pH equal to 7.9, fluorides have concentrations below 0.1 mg/L and calcium predominates over sodium. The high variability of the SAG does not indicate a single hydrochemical type, and represents a composition of waters from different aquifers. Sodium is likely derived from the exchange process with Calcium and the dissolution of halite related to evaporites from the Pirambóia Formation or surrounding equitards. The cation exchange processes remove the Ca from the solution causing calcite dissolution and could explain the decrease in Ca with increased concentration of HCO_3^- and Na^+ along the evolutionary path.

Regarding the used techniques, structural mapping was one of the most used. The numerical model of the terrain, Landsat images combined with tracing

techniques in these images define preferential directions and the density of tectonic structures .

Petrography is an essential technique to identify the minerals that make up each of hydro-stratigraphic unit and the estimation of the ions that will be solubilized as a result of the water/rock interactions processes in the aquifer. Knowledge of the aquifer mineralogy is also necessary to propose conceptual and mathematical models of its hydrochemical evolution. The principal component analysis appears as a powerful tool which can be used to understand the chemical processes involved in terms of water-rock interaction, ion exchange in clays and types of minerals that occur in the different units.

REFERENCES

- Artur, P.C. & Soares, P.C. 2002. Paleoestruturas e petróleo na Bacia do paraná, Brasil. *Revista Brasileira de Geociências*, 32(4):433-448.
- Athayde, G.B; Athayde, C.V.M. & Filho, E.F.R. 2012. Compartimentação hidroestrutural e aptidões químicas do Sistema Aquífero Serra Geral no estado do Paraná. *Suppl 1*, 42:167-185.
- Athayde, G.B., Athayde, C.V.M., Filho, E.F.R. & Licht, O.A.B. 2014. Contribuição ao estudo de conectividade entre os Sistemas Aquíferos Serra Geral (SASG) e Guarani (SAG) no estado do Paraná. *Boletim paranaense de geociências*,71(1):36-45.
- Belletinni, A.S., Viero, A.P. & Neto, A.C.B. 2019. Hydrochemical and contamination evolution of Rio Bonito aquifer in the Carboniferous region, Paraná Basin, Brazil. *Environmental Earth Sciences*, 78:642.
- Bittencourt, A.V.L., Filho, E.F.R., Hindi, E.C. & Filho, A.C.B. 2003. A influência dos basaltos e de misturas com águas de aquíferos sotopostos nas águas subterrâneas do sistema aquífero Serra-Geral na Bacia do rio Piquiri, Paraná-BR. *Águas subterrâneas*,17:67-75.
- Bortolin, T.A., Reginato. P.A.R., Leão, M.I. & Schneider, V.E. Hidrogeologia e hidroquímica dos aquíferos fraturados associados às rochas vulcânicas ácidas no Município de carlos Barbosa (RS). *Revista Ambiente e Água*, 9(1), 2014.
- Bortolin, T.A., Reginato. P.A.R., Leão, M.I & Schneider, V.E. 2016. Relação entre padrões hidroquímicos e as profundidades de fraturas com entradas de água em rochas vulcânicas ácidas da formação Serra Geral. *Águas Subterrâneas*, 30(1):99-118.
- Caetano-Chang, M.R. & Wu, F. F. 2003. Diagênese de arenitos da Formação Pirambóia no centro-leste paulista. *Geociências*, 22: 33-47.

- Camolezi, A.C., Fortes, E. & Manieri, D.D. 2012. Controle estrutural da rede de drenagem com base na correlação de dados morfométricos e morfoestruturais: o caso da bacia do Ribeirão São Pedro-PR. *Revista Brasileira de Geomorfologia*, 13(2).
- Canuto, J.R., Santos, P.R., Rocha-Campos, A.C. 2017. Estratigrafia de Sequências do Subgrupo Itararé (Neopaleozóico) no leste da Bacia do Paraná, nas regiões sul do Paraná e norte de Santa Catarina. *Revista Brasileira de Geociências* 31(1): 107-116.
- Carelli, T.G. & Borghi, L. 2011. Caracterização de microfácies sedimentares em folhelhos da Formação Ponta Grossa (Devoniano) na borda leste da Bacia do Paraná. *Anuário do Instituto de Geociências*, 34(2): 84-104.
- Costa, O.L., Kionka, D.C.O., Périco, E. & Jasper, A. 2016. Identificação de carvão vegetal macroscópico no nível de roof do Afloramento Quitéria, Formação Rio Bonito, permiano inferior da Bacia do Paraná. *Geosul, Florianópolis*, 31(61): 133-154
- Fernandes, A.J., Maldaner, C.H., Negri, F. & Rouleau, A. 2016. Aspects of a conceptual groundwater flow modelo of the Serra Geral basalt aquifer (São Paulo, Brazil) from physical and structural geology data. *Hydrogeology Journal*, 24:1199-1212.
- Filho, C.V.P., Ferreira, F.J.F., Filho, E.F.R. & Rostirolla, S.P. 2005. Compartimentação magnética-estrutural do sistema aquífero Serra Geral e sua conectividade com o sistema aquífero Guarani na região central do arco de Ponta Grossa (Bacia do Paraná). *Revista brasileira de Geociências*, 35(3):369-381.
- Filho, E.F.R., Bittencourt, A.V.L., Hindi, E.C. & Bittencourt, A. 2006. Estudo sobre os tipos de águas e as condicionantes estruturais do Sistema Aquífero Guarani no extremo oeste do estado do Paraná. *Águas Subterrâneas*, 20(2): 39-48.
- Filho, E.F.R., Bittencourt, A.V.L., Hindi, E.C. & Aravena, R. 2005. Caracterização hidroquímica do aquífero Guarani na porção centro-norte do estado do Paraná, Brasil. *Águas Subterrâneas*, 19(1): 87-94.
- França, A. B. & Potter, P. E. 1988. Estratigrafia, ambiente deposicional e análise de reservatório do Grupo Itararé (Permo-Carbonífero), Bacia do Paraná. *Boletim de Geociências da PETROBRÁS*, 2:147-191.
- Freitas, M & Roisenberg, A. 2016. Análise exploratória de dados de condutividade elétrica nas águas do sistema aquífero Serra Geral no Rio Grande do Sul e Santa Catarina. *Águas Subterrâneas*, 31(1):1-17
- Gastmans, D., Chuang, H.K. & Hutcheon, I. 2010. Stables isotopes (2H, 18O and 13C) in groundwaters from the northwestern portion of the Guarani Aquifer System Brazil). *Hydrogeology Journal*, 18:1497-1513
- Gastmans, D., Hutcheon, I., Menegário, A.A. & Chang, H.K. 2016. Geochemical evolution of groundwater in a basaltic aquifer based on chemical and stable

- isotopic data: Case study from the Northeastern portion of Serra Geral Aquifer, São Paulo state (Brazil). *Journal of hydrogeology*, 535:598-611.
- Goldberg, K. & Humayan, M. 2016. Geochemical paleoredox indicators in organic rich shales of the Irati Formation, Permiano of the Paraná Basin, Southern Brazil. *Brazilian Journal of Geology*, 46(3): 377-393.
- Goffermann, M., Viero, A.P. & Silva, E.B. 2015. Caracterização hidrogeológica e hidroquímica das águas subterrâneas da região de São Gabriel, RS. *Pesquisa em geociências*, 42(3):239-261.
- Goldberg, K. & Humayun, M. 2016. Geochemical paleoredox indicators in organic-rich shales of the Irati Formation, Permian of the Paraná Basin, southern Brazil. *Brazilian Journal of Geology*, 46(3): 377-393.
- Hirata, R., Gesicki, A., Sracek, O., Bertolo, R., Giannini, P.C. & Aravena, R. 2011. Relation between sedimentary framework and hydrogeology in the Guarani Aquifer System in São Paulo state, Brazil. *Journal of South American Earth Sciences* 33, 444-456.
- Holanda, W., Santos, A.C., Bertolino, L.C., Bergamaschi, S., Rodrigues, R., Costa, D.F. & Jones, C.M. 2019. Paleoenvironmental, paleoclimatic and stratigraphical implications of the mineralogical content of the Irati Formation, Paraná Basin, Brazil. *Journal of South American Science*, 94.
- Jacques, P.D., Salvador, E.D., Machado, R., Grohmann, C.H. & Nummer, A.R. 2014. Application of morphometry in neotectonic studies at the eastern edge of the Paraná Basin, Santa Catarina State, Brazil. *Geomorphology*, 213:13-23.
- Júnior, M.D.S., Santos, M.L., Salamuni, E. & Stevaux, J.C. 2013. Análise morfotectônica da bacia hidrográfica do Rio Ivaí-PR, curso inferior. *Revista Brasileira de Geomorfologia*, 14(2):213-220.
- Lobler, C.A., Borba, W.F. & Silva, J.L.S. 2015. Relação entre pluviometria e a condutividade elétrica em zona de Afloramento do Sistema Aquífero Guarani. *Ciência e Natura*, 37(4): 115-121.
- Lobler, C.A., Borba, W.F. & Silva, J.L.S. 2015. Vulnerabilidade à contaminação das águas subterrâneas do município de Nova Palma, Rio Grande do Sul, Brasil. *Ambiente e água*, 10(1).
- Kern, M.L.; Vieiro, A.P. & Machado, G. 2008. The fluoride in the groundwater of Guarani Aquifer System: the origin associated with black shales of Paraná Basin. *Environmental Geology*, 55(6): 1219-1233.
- Ketzer, J.M., Holz, M., Morad, S. & Al-ASSM, I.S. 2003. Sequence stratigraphic distribution of diagenetic alterations in coal-bearings, parabolic sandstones: evidence from the Rio Bonito Formation (early Permian), southern Brazil. *Sedimentology*, 50:855-877.
- Ketzer, J.M., Iglesias, R., Einloft, S., Dullius, J., Ligabue, R. & Lima, V. 2009. Water-rock-CO₂ interactions in saline aquifers aimed for carbon dioxide storage: Experimental and numerical modeling studies of the Rio Bonito Formation (Permian), southern Brazil. *Applied Geochemistry*, 24:760-767.

- Kirchheim, R.E., Gastmans, D. & Chang, H.K. 2019. The use of isotopes in evolving groundwater circulation models of regional continental aquifers: The case of the Guarani Aquifer System. *Hidrological Processes*, 33:2266-2278.
- Marimon, M.P.C., Roisenberg, A., Suhogusoff, A.V. & Viero, A.P. 2013. Hydrogeochemistry and statistical analyses applied to understand fluorite provenance in the Guarani Aquifer System, Southern Brazil. *Environ Geochem Health*, 35:391-403.
- Meng, S. & Maynard, J.B. 2011. Use of statistical analysis to formulate conceptual models of geochemical Mesozoic: water chemical data from the Botucatu aquifer in São Paulo state, Brazil. *Journal of Hydrology*, 250: 78-97.
- Mendes, K.D.S., Silveira., R.C.C.P. & Galvão, M.C. 2019. Uso de gerenciador de referências bibliográficas na seleção dos estudos primários em revisão integrativa. *Texto & Contexto Enferm*, 28, e20170204. DOI: <https://doi.org/10.1590/1980-265X-TCE-2017-0204>
- Milani, E., Melo, J.H.G., Souza, P.A., Fernandes, L.F. & França, A.B. 1994. Bacia do Paraná. *Revista Brasileira de Geociências*, 15(2): 265-287.
- Mori, A.L.O. & Souza, P.A. 2010. Palinologia das formações Rio Bonito e Palermo (Permiano Inferior, Bacia do Paraná) em Candiota, Rio Grande do Sul, Brasil: novos dados e implicações bioestratigráficas. *Ameghiniana*, 47(1): 61-78.
- Pierini, C., Misuzaki, A.M., Scherer, C.M.S. & Alves, D.B. 2002. Integrated stratigraphic and geochemical study of the Santa Maria and Caturrita formations (Triassic of the Paraná Basin), Southern Brazil. *Journal of South American Earth Sciences*, 15:669-681.
- Premaor, E., Fischer, T. & Souza, P. 2006. Palinologia da Formação Irati (Permiano Inferior da Bacia do Paraná), em Montividiu, Goiás, Brasil. *Revista del Museo Argentino de Ciencias Naturales nueva serie*, 8(2): 221-230.
- Reginato, P.A.R. 2009. As águas subterrâneas associadas aos aquíferos da Formação Serra Geral e sua caracterização hidroquímica. *Águas Subterrâneas*. Congresso Internacional de Meio Ambiente Subterrâneo.
- Reginato, P.A.R., Ahlert, S. & Schneider, V.E. 2013. Caracterização hidroquímica do Sistema Aquífero Serra Geral na região nordeste do Rio Grande do Sul. *Águas subterrâneas*, v.27(1):65-78.
- Reginato, P.A.R. & Strieder, A.J. 2004. Caracterização hidrogeológica e potencialidades dos aquíferos fraturados da Formação Serra Geral na região nordeste do estado do Rio Grande do Sul. *Águas Subterrâneas*, In: XIII Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas, Cuiabá, Anais (CdRoom).
- Rostirolla, S.P., Assine, M.L., Fernandes, L.A. & Artur, P.C. 2000. Reativação de paleolineamentos durante a evolução da bacia do Paraná – o exemplo do alto estrutural de Quatiguá. *Revista Brasileira de Geociências*, v.30(4):639-648.
- Scheibe, L.F. & Hirata, R.C.A. 2006. O contexto tectônico dos sistemas aquíferos Guarani e Serra Geral em Santa Catarina: uma revisão. *Projeto SAG-projeto*

para a proteção ambiental e desenvolvimento sustentável do sistema aquífero guarani, 14p.

- Silva, A.F., Dani, N., Remus, M.V.D., Sommer, M.G. & Horn, B.L.D. 2017. Bentonitas da Formação Irati no setor sul da Bacia do Paraná. *Revista do Instituto de Geociências*, 17(1):75-88.
- Soares, A.P., Soares, P.C. & Holz, M. 2008 Heterogeneidades hidroestratigráficas no Sistema Aquífero Guarani. *Revista Brasileira de Geociências*. 38(4): 598-617.
- Sordi, M.V., Salgado, A.A.R., Paisani, J.C. & Pagotto, D. 2017. Controle estrutural no desenvolvimento de vales na área do rebordo da Bacia do Paraná no estado de Santa Catarina, Sul do Brasil. *Revista Brasileira de Geomorfologia*, 18(4): 671-687.
- Sracek, O. & Hirata, R. 2003. Geochemical and stable isotopic evolution of the Guarani Aquifer System in the state of São Paulo, Brazil. *Hydrogeology Journal*, 10:643-655.
- Strieder, A.J., Heeman, R., Reginato, P.A.R; Acauan, R.B., Amorim, V.A. & Remde, M.Z. 2015. Jurassic-cretaceous deformational phases in the Paraná intracratonic basin, Southern Brazil. *Solid Earth Discussions*, 7:1263-1314.
- Teixeira, G. & Viero, A.P. 2017. Evolução hidrogeoquímica dos aquíferos Mesozoicos da porção sul da Bacia do Paraná no Oeste do Rio Grande do Sul, Brasil. *Águas subterrâneas*, 31(1): 36-51.
- Teixeira, G.V. & Viero, A.P; Regginato, R. 2019. Caracterização estrutural das águas subterrâneas dos aquíferos juro-cretáceos do oeste do Rio Grande do Sul. *Gestão de Recursos Hídricos e sustentabilidade*, 11:126-134.
- Tomasi, L.C. & Roisenberg, A. 2019. Contexto Hidrogeológico e sua Relação com a Tectônica do Sistema Aquífero Serra Geral na Bacia Hidrográfica do Rio Ijuí, RS. *Anuário do Instituto de Geociências-UFRJ*, 42(2):40-49.

6 MANUSCRITO 2 - STRUCTURAL COMPARTMENT, HYDRAULIC CONNECTIVITY AND HYDROGEOCHEMICAL CHARACTERIZATION OF SERRA GERAL AND GUARANI AQUIFER SYSTEMS

Hydrochemical compartment, hydraulic connectivity and hydrogeochemical characterization of Serra Geral Aquifer System

Authors: Guilherme Vargas TEIXEIRA¹, Antonio Pedro VIERO², Diego Machado MARQUES³, Leonardo Azevedo Guerra Raposo PEREIRA⁴

¹ Programa de Pós-Graduação em Geociências, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Av. Bento Gonçalves, 9500, CEP 91.540-000, Porto Alegre, RS, Brasil (Teixeira_guilherme@yahoo.com.br)

² Instituto de Geociências, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Av. Bento Gonçalves, 9.500, CEP 91.540-000, Porto Alegre, RS, Brasil (antonio.viero@ufrgs.br)

³ Instituto de Geociências, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Av. Bento Gonçalves, 9.500, CEP 91.540-000, Porto Alegre, RS, Brasil (diegommarques@gmail.com)

⁴ Centro de Estudos de Recursos Naturais e Ambiente, Universidade de Lisboa. Av. Rovisco Pais, 1, CEP 1049-0001, Lisboa, Portugal, (leonardo.azevedo@tecnico.ulisboa)

ABSTRACT

The Serra Geral Aquifer System (SGAS) has great potential for exploring its waters. However, high salinity values are found in certain regions. This higher than expected salinity is due to the connection between hydrostratigraphic units under the SGAS, such as the Guarani aquifer system (GAS) and Permian aquitards and aquifers, such as Irati and Rio Bonito. The principal components analyses included, the K-means method and dendrogram analyzed together with a map of structural faults and simulation which resulted in the analysis of preferential directions for the flow of groundwater and which are the main faults that contribute to the decrease in potentiometry in the SGAS, which allow ions such as sodium and sulfate to rise to the SGAS from GAS and pre-GAS sedimentary units. The simulation helped to indicate the areas within the areas with the highest salinity and coincided with the major regional faults. The study area was divided into 5 zones, based on large regional faults. The objective is to characterize which regional faults are important for communication between these aquifers systems and which are the areas where the highest salinities occur, which are directly correlated with the potentiometry of SGAS and GAS that must match for high salinity values to occur. This communication is very evident through simulation techniques and the study of SGAS and GAS potentiometric isohypses. The analysis of the fracturing degree of minor faults associated with major faults also determines the places where the rise of saline waters is possible because these major faults lower the potentiometric levels of GAS.

Keywords: Parana Basin, Principal Component Analyses, Hydrochemistry, Simulation, Structural Geology

1 INTRODUCTION

1.1 General Aspects

The Paraná basin, in South America, is one of the widest intracratonic basins in the world. It is divided in Supersequence Rio Ivai, Supersequence Paraná, Supersequence Gondwana I, Supersequence Gondwana II, Supersequence Gondwana III and Supersequence Bauru and were deposited from Ordovician to Cretaceous (Milani, 2007). The volcanic rocks of the Serra Geral Formation belong to Supersequence III and correspond to the Serra Geral Aquifer System (SGAS), which is present in almost the entire Paraná basin and in Rio Grande do Sul state is present from center to the north (Fig.1) The volcanic and fractured SGAS has great potential regarding the supply the water needs to the population of Rio Grande do Sul (RS) in the coming decades due to the growing population demand. Such rocks from the SGAS are of great hydrogeological importance due to their high exploitation. The volcanism that generated these rocks is associated with the formation of the Atlantic Ocean. Turner *et al.* (1994) places the volcanism between 137 and 127 ma in the early Kretaceous. Their waters are explored through tubular wells and other sources with flow rates up to 220 m³/h (Freitas et al. 2017). The SASG provides higher volumes of water compared to sedimentary aquifers and with higher quality. The waters that circulate through these aquifers have varied characteristics and quality (Bortolin *et al.* 2016). The waters of the SGAS are basically calcium and magnesium bicarbonates (CPRM, 2005). Some waters of the SGAS record sodium bicarbonated composition, indicating mixtures with waters of the GAS and pre-GAS through faults (Teixeira and Viero, 2017). In order to use this resource better, it is necessary to study the chemical, hydrogeological and structural qualities of this aquifer and its relationship with sedimentary aquifers located below it.

This study was carried out with the objective of understanding the dynamics of mixing the SGAS with adjacent aquifer units through structural, simulation and hydrochemical studies using a database of more than 4500 wells from Companhia de Recursos Minerais (CPRM).

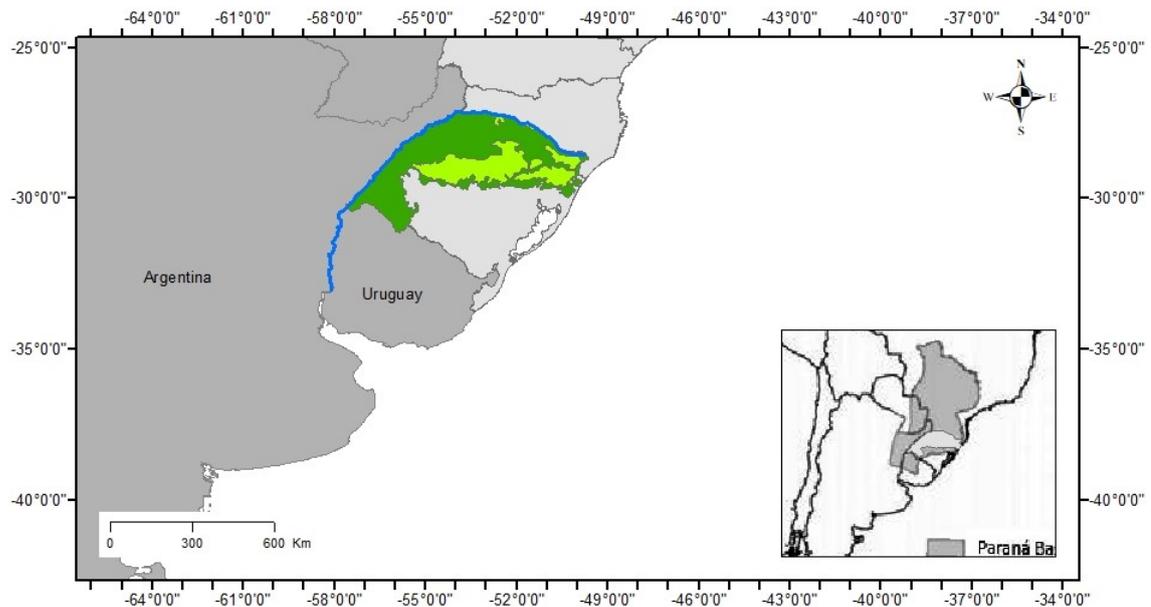


Figure 1 - SGAS study area in Rio Grande do Sul. A) location of volcanic rocks in the Serra Geral Formation in Rio Grande do Sul. Basic volcanic rocks is in dark green. Acidic volcanic rocks is in light green. Uruguai river (in blue color) is in the frontier of Brazil with Argentina and Uruguay (modified from Scherer, 2002; Janasi et al., 2011) B) Location of the Paraná Basin (modified from Reis, 2013).

1.2 Geology

The SGAS is a free aquifer and, in rare places, can develop a confined character. The hydraulic conductivity of the SASG, which is very variable and complex to evaluate and predict, mainly due to the fact that it is normally heterogeneous and anisotropic, with a background conductivity between 117.35 and 378.35 μ S / cm, with values below 117.35 μ S / cm they are detected in áreas, where the recharge occurs exclusively due to recharge (Tomasi & Roisenberg 2019).

According to Reginato *et al.* (2010) the waters of the SGAS are mainly calcium or magnesium bicarbonates representing the chemical composition of the volcanic rocks that form the aquifer system, and the original source of the elements calcium, magnesium and sodium is associated with changes in the silicates present on these rocks after being weathered. The SGAS tends to present a relationship where $Ca > Mg > Na$ and an enrichment of calcium and magnesium at the top (acid rocks) in relationship to the base (basic rocks) of the volcanic bedding. Calcium bicarbonated waters are the typical waters of the SGAS with calcium being the most

abundant cation, resulting from the alteration of plagioclases and ferromagnesian minerals of basalt.

The Guarani Aquifer System (GAS) is an aquifer system located immediately below the SGAS, it is very porous and permeable and composed of sedimentary units with similar characteristics; the Pirambóia, Botucatu, Guará and Sanga do Cabral Formation. The GAS deposition occurs throughout the Mesozoic and ends with the rise of volcanic lavas in the Cretaceous.

The GAS consists mainly of two sedimentary units: the basal Pirambóia Formation, which consists of silty-clayey sandstones of eolian and fluvial origin, and the Botucatu Formation, formed by eolian sands deposited in arid conditions between the Permo-Eo-Triassic discordance and the basaltic lavas of the Serra Geral Formation. The sandstones of the Pirambóia Formation present clays that involve the clasts and cementation of calcite, gypsum, iron oxide/hydroxide and silica at the time of deposition. Calcite also occurs as diagenetic phase. The occurrence of autigenic pyrite is located and associated with the presence of oils. Its origin is linked to hydrocarbon migration which is preceded by reducing sulfidric acid solutions (Caetano & Tai, 2003). The Pirambóia formation is superimposed on the Rio do Rastro Formation. It consists of light gray friable thin and silty sandstones in a package of about 20 meters thick. It has little topographic expression and its friable sandstones can form cavities in contact with the Botucatu Formation forming small caves (Camolezi *et al.* 2012). Still, it has more clay and is more fluvial in its origin in relation to Botucatu environment which is essentially desert (Meng *et al.*, 1997a).

Among the units that make up the GAS, Pirambóia is the most capable of supplying sulphate ions resulting from gypsum leaching and interferes in intermediate chemical groups between the calcium-magnesium bicarbonated typical of recharge zones and confined sodium-sulfated-chlorinated bicarbonates resulting from leaching of pre-GAS units.

Higher Ca values found in the GAS in relation to the SGAS indicate the dissolution of diagenetic calcite that fills the pores of the sandstones of the Botucatu formation. Waters richer in total dissolved solids and sodium indicate a mixture of GAS with underlying aquifers, including pre-GAS (Gastmans *et al.* 2010). The same conclusion occurs in Filho *et al.* (2006), where the high levels of anions and cations come from underlying aquifers to the SGAS.

In addition to transmitting high salinity values to the SGAS from pre-SAG layers, the GAS has diagenetic calcite capable of supplying Ca^{+2} to the SGAS and indicates the dissolution of eodiagenetic calcite that fills the pores of the sandstones of the Botucatu formation. Waters richer in total dissolved solids and sodium indicate a mixture of GAS with overlapping aquifers (Gastmans *et al.*, 2010; Filho *et al.*, 2006). Both SGAS and SAG belong to sequence I of Paraná basin.

The clearest influence of GAS and other units on SGAS occurs in wells that have total dissolved solids between 1000 and 2000 mg/L and sodium predominates over calcium (Filho *et al.* 2006).

Among the pre-GAS units, the Irati and Rio Bonito hydro-stratigraphic units are the ones that considerably contribute to the salinity source of the SGAS. These are the deepest stratigraphic units and contain high salinity. The Irati Formation appears in few areas of Rio Grande do Sul, but is almost always present covered by thick layers of sedimentary rocks and the SGAS. The Irati Formation is present throughout the entire state of Rio Grande do Sul. In addition, it is not considered an aquifer as it is not capable of transmitting water by primary porosity. Only when faults cut their layers does this salinity, represented by the leaching of its constituents, manage to ascend to shallower areas. The Irati Formation belongs to Gondwana I Sequence of Paraná basin and was deposited in the late Permian. It is divided in two members: Taquaral e Assitência. The Taquaral Member is composed of non bituminous dark gray clay beds with thin layers of sandstone and mudstone. The Assitência Member has bituminous black mudstones beds. In some cases it is interbedded with carbonate layers (dolomitic marl) and thin lenses of nodular flint and evaporites (gypsite and anhydrite) covered by siltite and shale. It also contains carbonates (dolomites interbedded with sandstones at the base) and bituminous shale and mudstone, with or without interbedded carbonates, sulfate and halite in the sequence. The gypsum is the source of sulfate, while halite is the source of sodium (Teixeira & Viero, 2017).

The mineralogy of this sedimentar unit is vast and includes several minerals that can be the source of salinity for other hydro-stratigraphic units. Among them we can highlight halite, (source of sodium) gypsum (source of sulfate), carbonates (source of calcium and magnesium) in addition to clays and organic matter. Clays can be important in the cation exchange process, which traps Ca^{+2} and releases the Na^{+} ion in solution.

The Rio Bonito Formation of carboniferous age also belongs to Sequence I of Paraná Basin and is considered a high quality aquifer. It is also capable of salinizing other units. Its content of total dissolved solids varies between 800 and 1500 mg/L of total dissolved solids, and in great depths the waters are saline with total dissolved solids above 10,000 mg/L Goffermann *et al.* (2015). Its transmissivity and storage capacity depends on local structural characteristics, mainly open faults. NE and NW faults are supposed to be the main open fault directions. (Belletinni et al. 2019). Dias (1995) informally subdivided the Siderópolis Member into three lithological associations: the lower (Bonito sequence as very fine-grained sandstones interspersed with siltstones and coal layers), medium (Barro Branco sequence with medium to coarse-grained sandstones) and superior (transgressive sands with fine to very fine quartz-sandstones) associations. Krebs (2004) separated the Siderópolis Member in the coal-mining region into three diferente layers: the basal sequence, the intermediate sequence and the upper sequence. The superior sequence is considered to be a sandstone aquifer of intergranular porosity which has been partially filled with a silica cement.

1.3 Objectives

For this study we intend to identify the most suitable structures for interconnection between Paraná basin units using the integrated data from simulation, structural geology, Principal Components Analyses (PCA), K-means and potentiometry. We intend to prove that SASG is heterogeneous. The heterogeneities in the study area are caused by different tectonic mechanisms that generated different fault directions that cut SGAS and other units and are reflected in the fluid dynamics. The potentiometry is directly related to higher salinities in SGAS and maps can show the match between potentiometry, structural analyses and simulation.

2 METHODOLOGY

2.1 Spatial Compartmentalization

The idea of dividing aquifers into tectonic domains is not a new one (Machado, 2006; Lisboa, 1996). Machado (2006) used major faults as a criterion to define four

tectonic compartments in GAS. The tectonic lineaments named Sistema de Falhas Jaguari/Mata, Sistema de Falhas Torres/Posadas e Sistema de Falhas Dorsal de Ganguçu are the limits of the aquifer compartments. According to Freitas *et al.* (2016), these faults represent old areas of weaknesses in the crystalline basement that were reactivated during the evolutionary process of the Paraná basin that affected all sequences on this basin.

In this study, the SGAS was divided into 5 zones with the main fault systems located close to the center of each one. This criterion was adopted because the large structures are considered as the main groundwater flow pathways that promote the upward recharge of the SGAS. Cluster analyzes reinforced the choice of this division.

Each of the zones were considered to be a stationary domain that has constant mean value and the correlations are invariant to translations reflected in the form of a well-structured variogram (Fig.2).

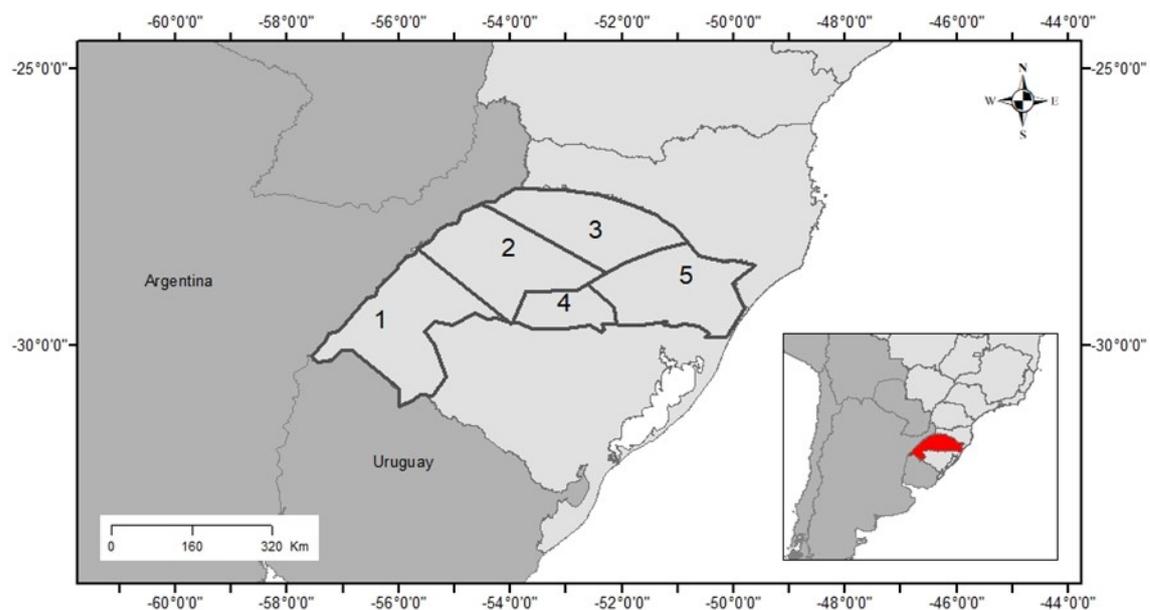


Figure 2 - A) Area division with the 5 zones in SASG in Rio Grande do Sul State; B) SASG within Rio Grande do Sul location in Brazil.

These regions were considered to be stationary domains, i.e., domains that are assumed to have a constant mean value and the correlations are invariable to translations, reflected in the form of a well-structured variogram. It is worth remembering that the limit of the zones goes a little beyond these faults because it is always necessary to evaluate the fault and its surroundings and it would be a waste to cut the zones just above the fault. From the fault and its surroundings it is

expected that the chemical analyzes from one compartment to another will be different, and this was verified.

2.2 Principal Components Analyses, K-Means and Dendrogram

Many studies are being done using clustering methods to analyze water quality. Identifying the quality and quantity of groundwater as one of the main sources of drinking water is essential (Mohammadrezapor et al. 2018). Multivariate statistics is an important tool in the manipulation and interpretation of data with many variables. By using this tool it is possible to group similar parameters, investigate the dependency between them, and relate these observed parameters in addition to generating hypothesis tests.

The principal component analysis aims to describe the data contained in a numeric individual-variable table: p variables will be measured with n individuals. This is considered a factorial method, since the reduction in the number of variables is not done by a simple selection of some variables, but by the construction of new synthetic variables, obtained by the linear combination of the initial variables through the factors. PCA is a multivariate mathematical technique that makes it possible to investigate a large number of available data.

K-means is a clustering method widely used in various scientific fields due to its ease of implementation, simplicity of handling and efficiency in application. Similar to other clustering methods, the K-means method uses a matrix of $n \times d$ where n is the number of data placed in a space d to create groups c , where each sample is placed within a group. The data are first grouped randomly and then the other data is grouped according to a closer center (Javadi et al. 2017).

2.3 Data Management

The original data from a CPRM database has 4677 water samples collected from wells drilled in Serra Geral Formation of Rio Grande do Sul State. The cluster method requires that samples without complete data be excluded from the analysis so that the number of samples has been greatly reduced from the original database. In zone 1 after taking samples with missing data 152 samples remained. In zone 2 there are 155. In zone 3 there are 199 samples. In zone 4 there are 95 samples and

in zone 5 543 samples. The variables chosen for the analysis were alkalinity, sodium, calcium, sulfate, chloride, conductivity and magnesium for their importance and meaning regarding the topic of this article which is the influence of SAG and pré-SAG on SASG.

It was agreed to call group 2 the one with the major sodium concentration, group 1 the one with intermediate sodium concentration, and group 3 the one with lower sodium concentration. This convention was used for zones 1,2,3 and 4. For zone 5 in which the Pears Euclidean distance method was used, groups 2 and 5 have high sodium, groups 4 and 3 have low sodium and group 1 has intermediate sodium.

The PCA analysis was proceeded with these parameters and subsequently, with the obtained scores, the analysis of K-means for zones 1,2,3,4 and dendrogram for zone 5 was performed. The ideal number of clusters for the method of K-means and dendrogram was 4 (Fig.3) although in all zones except zone 5 one of the groups had few samples and was excluded from the analysis, so that in zones 1,2,3 and 4, 3 groups remained.

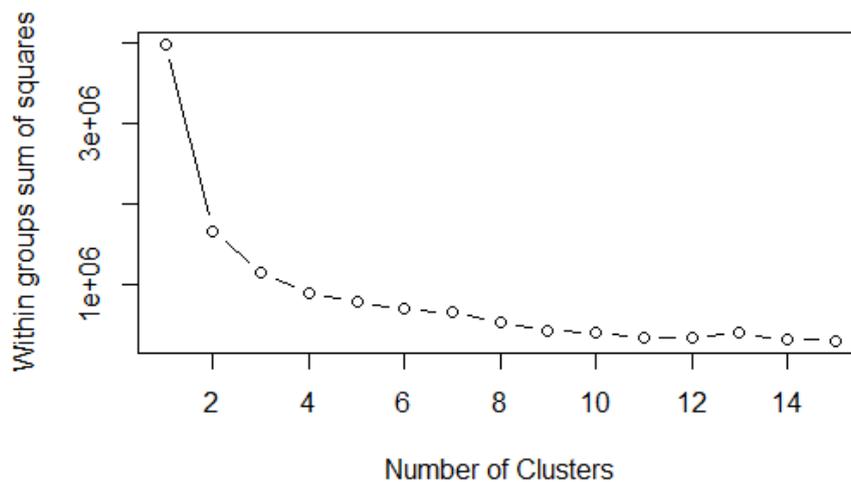


Figure 3 - Variance accumulated by the groups of K-means in zone 3. It is noted that from 4 groups, the variance no longer changes on a large scale and is close to 80%.

2.4 Tectonic Analyses

The tectonic analysis of the area was developed through the treatment of satellite images aiming to identify structural patterns of the terrain based on the

methods used in the works of Takahashi (1991). The activities involved the production of a shaded relief image that corresponds to the SGAS study area, available on the INPE website. A hydrography arcgis shape was used as a model for drawing geological-structural lines. These lineaments made it possible to prepare thematic maps of line density, rose diagrams, as well as filtering by azimuth and length lineaments in small (<5Km) and large size (> 5Km). 4.032 lineaments have more than 5 Km and 9.720 less than 5 Km. The density is done by the kernel method in the arcgis software. The counting technique is a numeric field that specifies the number of incidents at each location. This counting field is an area equivalent to a pixel square with square meter dimension. The Kernel option weighs values in the neighborhood by distance from the feature of interest and applies a kernel function to adjust a smoothly covered surface for each point. The kernel option, used for this study, was the same method in the work of Tomasi and Roisenberg (2019). The criterion was used only in the first two quadrants, and the directions of the other quadrants were incorporated into the quadrants with corresponding directions.

For this study, we chose to use an azimuthal notation ranging from N0 to N180 that encompasses the entire circumference since data in the third and fourth quadrant are incorporated in the first and second quadrant. This notation is very common in geostatistical softwares.

2.5 Simulations

Simulations are equiprobable realizations of the phenomenon, i.e., representations of reality are possible based on the available sampling. Each scenario is different from the others, but it has the characteristics of the natural phenomenon. For this study 50 simulations were performed for 4 parameters (alkalinity, conductivity, sodium and calcium) in each of the zones. Tests carried out at the stage of generating the simulations (mean of the means and variance of the means) showed that this number is sufficient to quantify the uncertainty of the phenomenon. First, the space to be simulated was discretized within the study polygon in different zones, with a cell size of 500 by 500 meters. The simulations are performed in multigaussian space and, therefore, have their values normalized. Subsequently, these simulated values are retro-transformed to the original space,

which is the same as the sample data. This same procedure was carried out in several studies. The simulations were performed using the algorithm known as turning bands.

The turning band algorithm within the simulation methods is chosen for its precision and computational efficiency. In short, this algorithm consists of drawing many lines in space, with random or preferably quasi-regular orientations, and simulating a one-dimensional random field along each line. When properly choosing the covariance function of such one-dimensional random fields, their superposition provides a multidimensional random field with the target covariance function, whose distribution is practically Gaussian due to the central limit theorem (Paravarzar, 2015).

This same method was also used in Marcotte (2015) who considered this method to be a computationally less demanding alternative. The simulations were performed conditionally, i.e., they were performed not only as covariance models (variogram), but also using the samples as a basis.

After the simulations were validated an average analysis of the 50 simulations (E-Type) and standard deviation (conditional variance) of the simulations was performed. These two analyses are showed instead of individual simulations. The E-Type is an average analyses of 50 simulations in each of the values used in variation and the conditional variance is the deviation of the simulated values from the mean of the 50 simulations.

3 RESULTS AND DISCUSSION

3.1 Tectonic- simulation and K-means- sample points correlation

The tectonic evaluation of the study area through remote sensing resulted in the mapping of Serra Geral Formation faults (Fig.4) and the simulation maps made based on sodium variography, alkalinity, calcium and conductivity allowed to identify the relationship between the tectonics that acts on SGAS, GAS and pre-GAS. These variables were chosen because they are importante in explaining the mixing dynamics of the aquifers. Sodium, electrical conductivity and alkalinity are directly associated with the rise of saline waters while calcium is not representative of this rise (Teixeira &Viero, 2017).

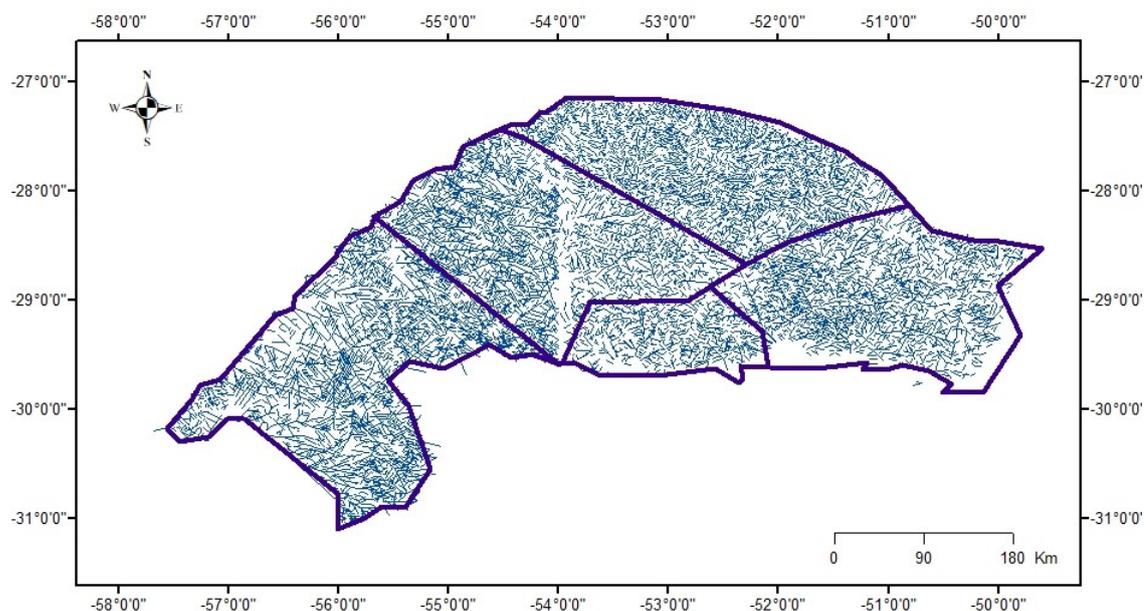


Figure 4 - Lineaments traced in satellite image in SASG at Rio Grande do Sul State.

In the fault density map the higher concentrations of direction of the rose diagram do not always reflect in the density directions with greater sodium concentration of group 2 in each zone, where there is the rise of deep waters of Rio Bonito, Irati and SAG. This ascension occurs because their potentiometric heights are greater than the GAS in some locations.

By analyzing the rose diagrams for lengths between 1 and 5 km (Fig.5) it is noted that with the exception of zone 4 all the others have 45N direction as one of the preferred. Zone 4 has the N135 direction as one of the preferred ones. The proportions change by analyzing directions over 5 km (Fig.6), since fewer directions have higher frequencies. All the zones with the exception of zone 5 have most of major faults in a NW direction. In zone 5 the major faults are oriented to the NE direction as already verified in several studies (Strieder, 2015; Soares, 1982).

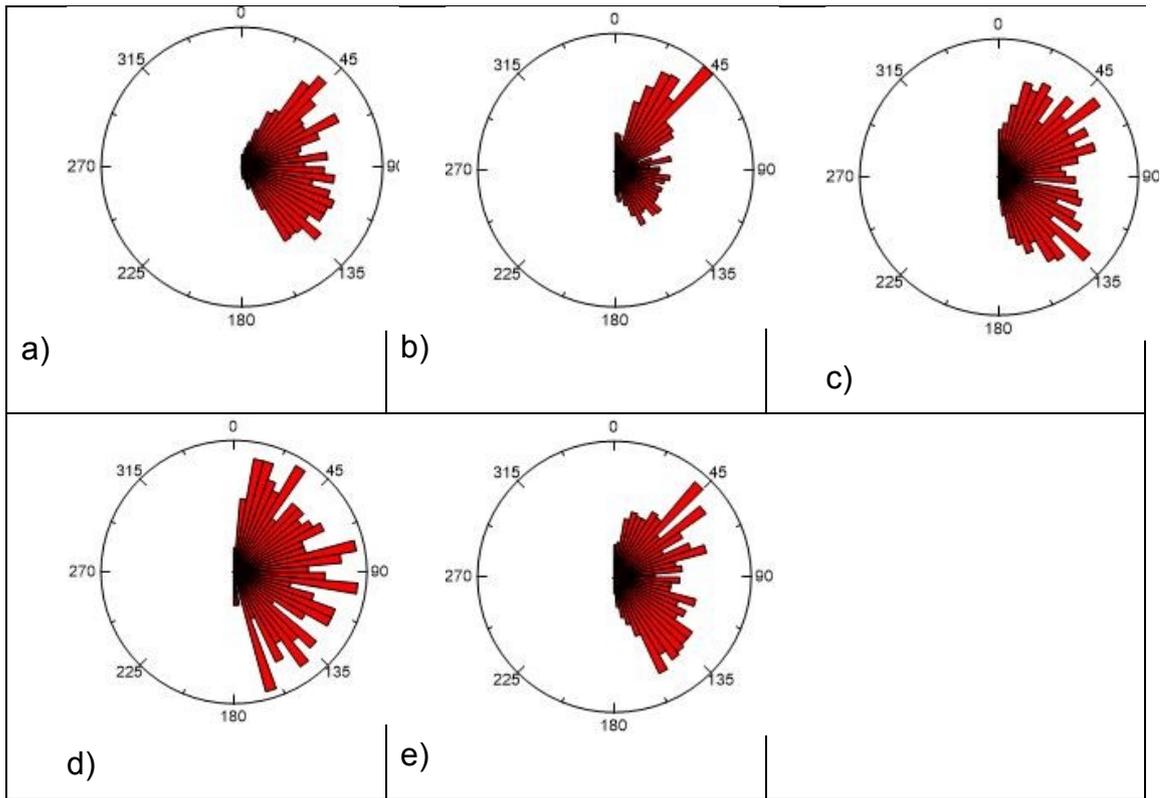


Figure 5 - Rosette diagrams for compartments 1(a),2(b),3(c),4(d) and 5(e) for lineaments smaller than 5 Km.

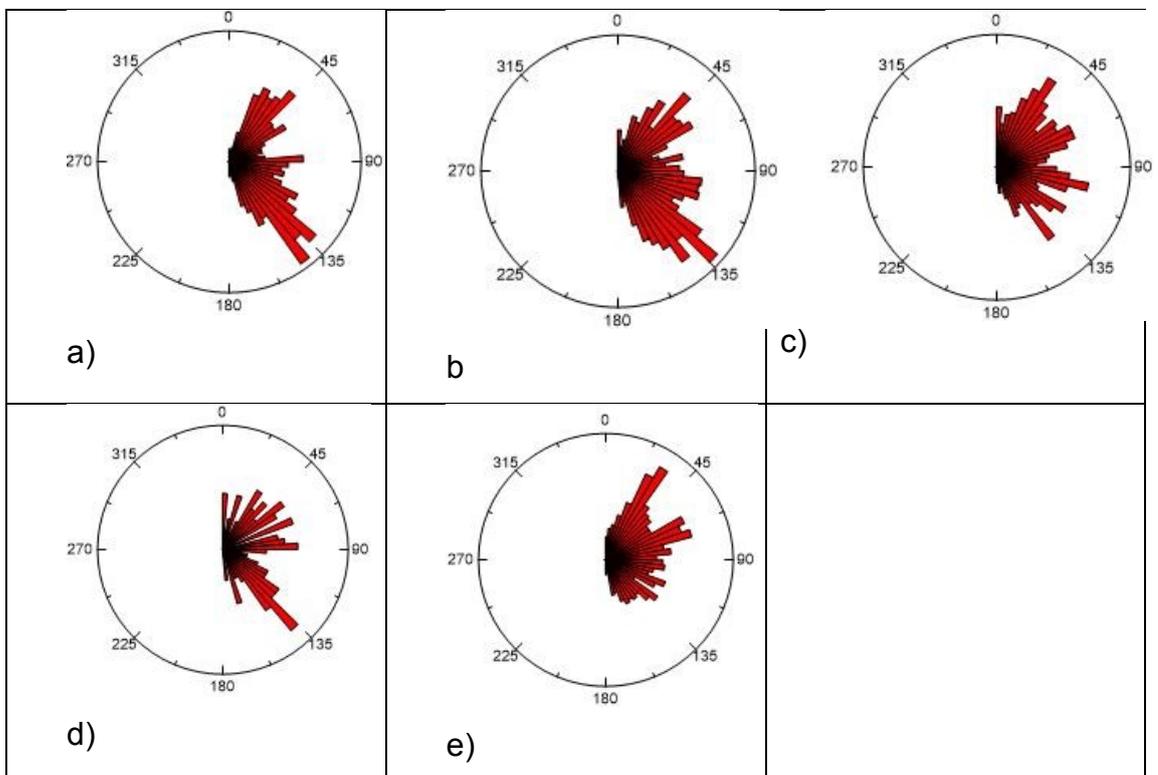


Figure 6 - Rose diagrams for zones 1(a),2(b),3(c),4(d) and 5(e) for lineaments greater than 5 km.

When comparing the GAS and SGAS potentiometric map (Fig.7) with the simulation maps there is a direct correlation between the high values of the mean and standard deviation of the simulation with the low potential curves of the GAS and catchment level on SGAS. Thus sodium concentrations are strongly related to low SGAS potentiometric values and where the GAS potentiometric isolines are equal to or exceeds the catchment quota of the SGAS, and this is a clear indication of ascending recharge and mixture. Northwest faults mainly influence to decrease potentiometric values (Fig.8), but in some cases NE faults such as Lancinha Cubatão fault and Rio das Antas can contribute to this purpose. The Fault System Terra de Areia- Posadas and the Fault of Rio das Antas-SC are good examples of NW structures.

In general, there are three factors that are important for the mix between SGAS and SAG to occur. Firstly, all there must be a large structure capable of communicating the adjacent units. Secondly, it is necessary that the smaller structures (Fig.9) that are around these regional faults distribute this salinity in the vicinity and thirdly the potentiometry of the SAG must be higher than the catchment level of the SGAS.

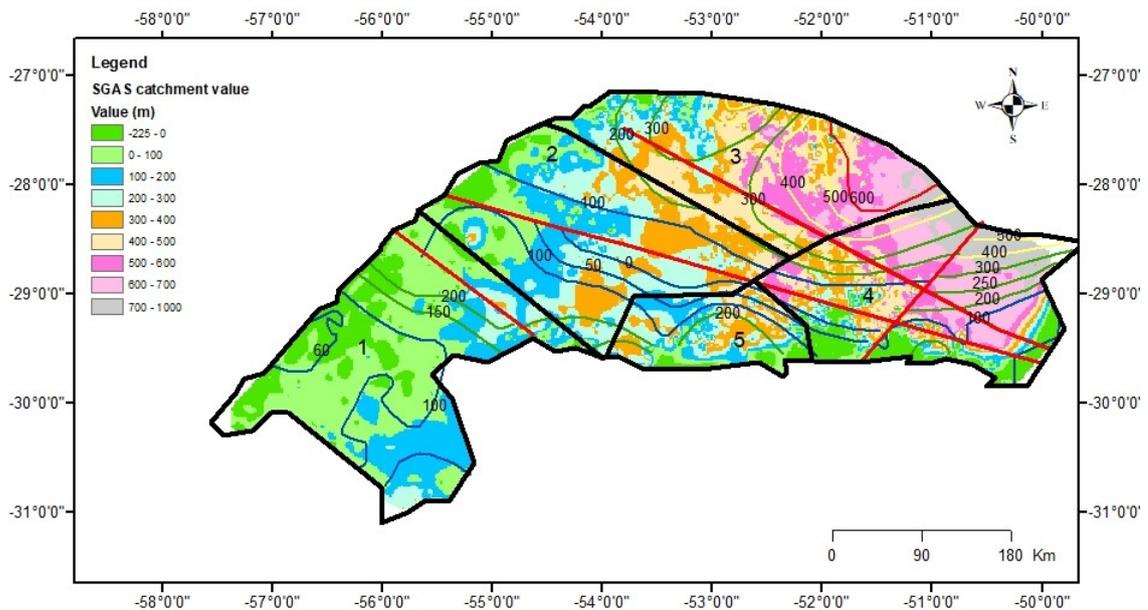


Figure 7 - GAS Potentiometric values and well catchment height (m) of SGAS in Rio Grande do Sul State. Potentiometric isohypses of GAS is represented by lines while SGAS catchment altimetric heights (m) is in filled in with colors. Low values of SGAS and GAS potentiometric values coincide with high salinized Waters. Red lines are important regional faults.

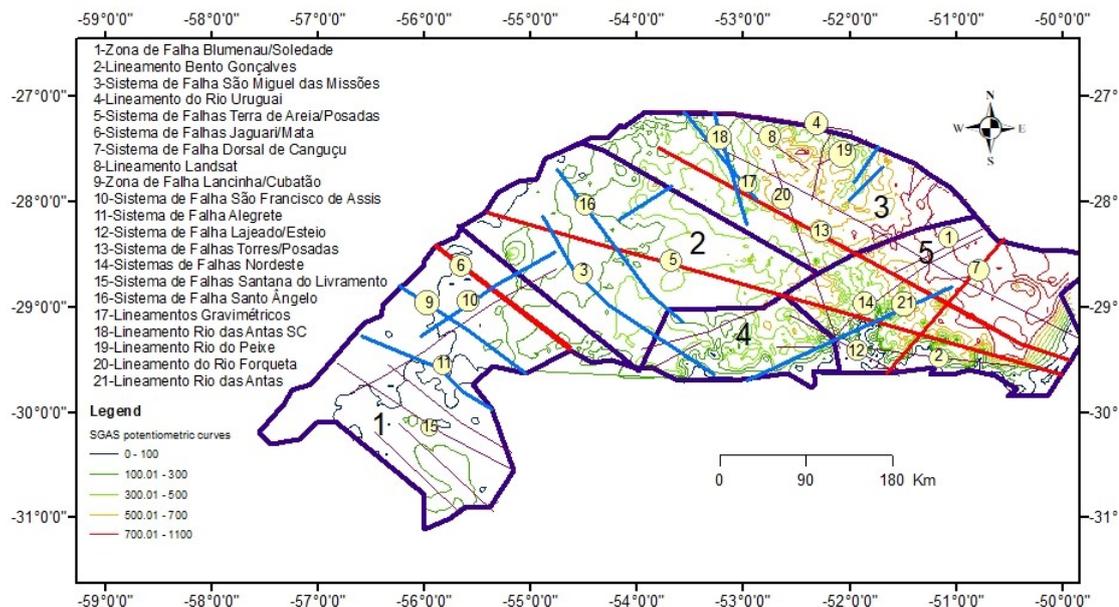


Figure 8 - SASG potentiometry. Larger numbers represent the zones and number in circles are the main faults. In red are the main faults used as reference for SASG compartmentalization. In blue are faults that affect potentiometry.

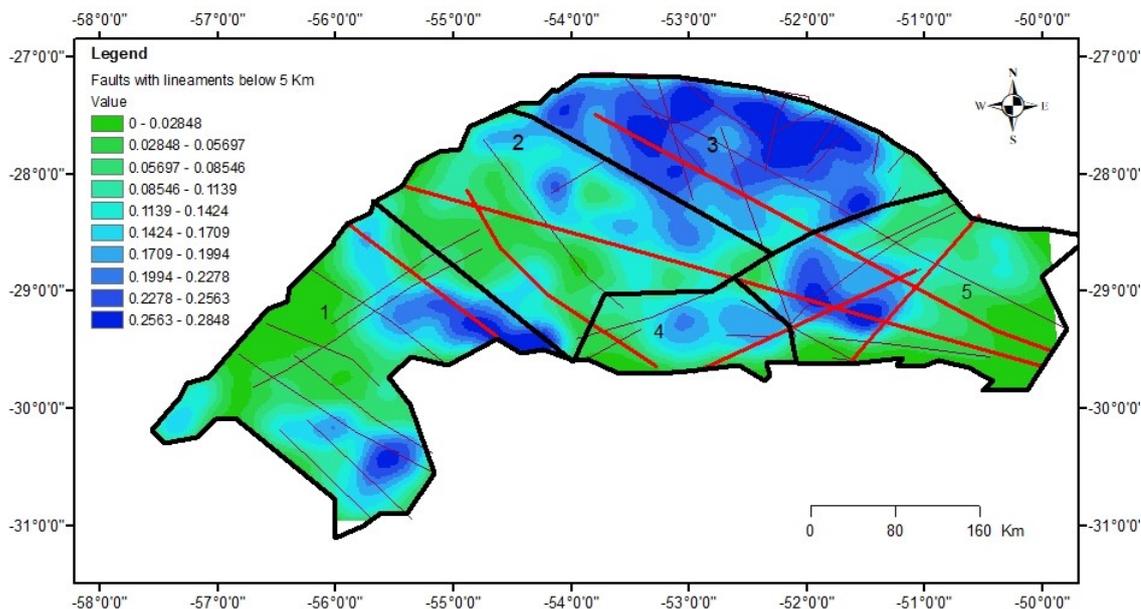


Figure 9 - Fault density map for faults below 5 km in all directions. The blue áreas represent strong fracturing.

In zone 1 there is a large presence of minor faults (Fig.10) with the predominance of the N60-85 interval direction in the extreme northeast and extreme east both under the influence of the Jaguari/Mata fault system. This indicates that small faults play a crucial role in enabling the rise of saline waters in conjunction with major faults. In the western part there is also great salinity, but it is not entirely clear

which structure is more importante for this salinization. Both the N95-125 interval direction and the N22-45 interval direction for lengths greater than 5 km (Fig.11) have high density of faults near the Uruguai River and could be the answer. As discussed in the methodology, group 2 in zones 1,2,3, 4 and 5 has the one with the highest sodium concentration (Table 1). Group 2 in zone 1 has a rare bicarbonate-calcium-magnesium-sodium-sulfate-chloride composition and are associated with pre-GAS units. Group 2 is preferentially aligned to northeast structures (Lancinha-Cubatão fault zone). K-means group 2 coincides with low SGAS potentiometric values near the Uruguai river. The exception to this being the part where the depth ratio of the SGAS wells is lower than the GAS, where the saline waters cannot enter the SGAS in the same way as when the level when the SGAS depth level is much higher than potentiometric level of GAS.

In zone 1, the greatest conditional variance of calcium simulation is concentrated around the Uruguay River and following the same directions as the Alegrete and Santana do Livramento faults. This is explained (lilac bands) because the faults tend to cause a very abrupt variation in neighboring samples and this causes a very high standard deviation. In areas that are less influenced by major faults, this variation is lower and blue levels are common. The conditional variance of sodium simulation (Fig.12) and E-Type of sodium simulation values show some dissimilarity and could represent uncertainty about the probability of occurrence in the simulated values in the vicinity of the samples. The E-Type of the simulation and the conditional variance of sodium simulation shows that the highest values are close to Argentina and follow this same structure (Lancinha-Cubatão) that reaches zone 2.

In practice, greater variability is associated with higher salinity values. Sodium presents high conditional variance throughout zone 1. The conditional variance of alkalinity and calcium simulation has the same behavior as sodium in this zone.

GAS potentiometric isohypses move away from the Uruguai River in a smooth way indicating a slightly inclined regional water flow.

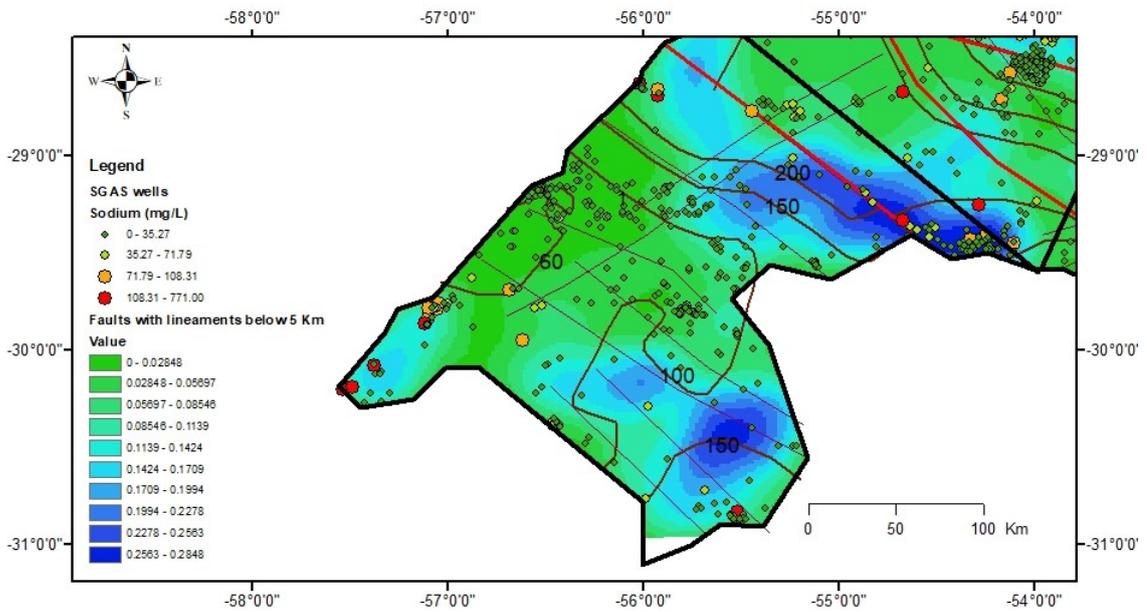


Figure 10 - Faults density map of all directions for lineaments below 5 Km, sodium sample concentration (mg/L) and GAS potentiometric isohypses in zone 1. Lineaments have the density multiplied by 10^3

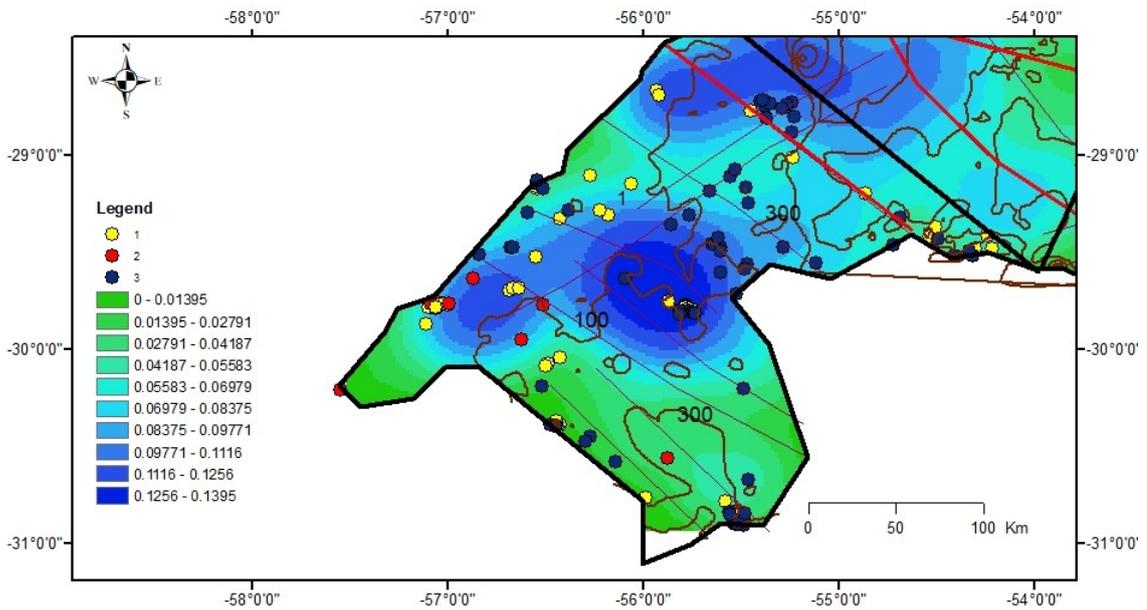


Figure 11 - Fault density map in the N22-45 interval direction for lengths greater than 5 Km with K-means groups in zone 1 and SASG potentiometric isohypses. Red dots are group 2, yellow dots are group 1 and blue dots are group 3. Lineaments have the density multiplied by 10^3

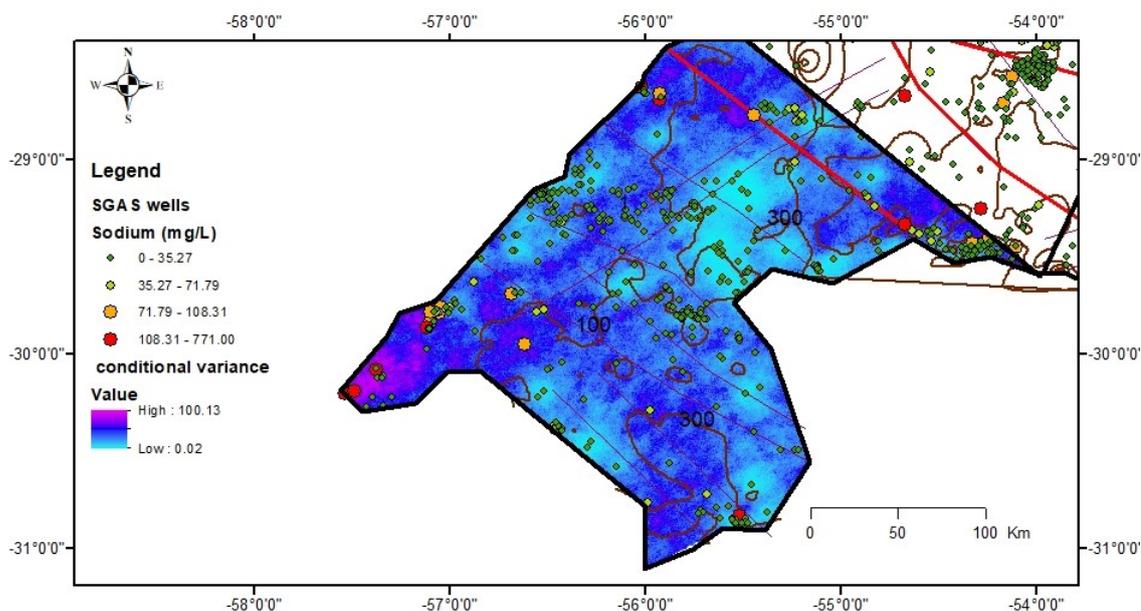


Figure 12 - Conditional variance of sodium simulation, sodium sample values and SGAS potentiometric isohypses for zone 1. Strong purple are the highest simulated values.

In zone 2 west of the Terra de Areia Posadas fault there is low salinity. Here the catchment height of the SGAS are even lower than the quotas of the GAS, which makes the rise of saline groundwaters impossible. The only exception is a little portion in the southwest, where the potentiometric lines of the SAG reach 300 meters probably under the influence of the Jaguari-Mata fault where wells with up to 700 mg/L of sodium concentrations are found. Above the Terra de Areia Posadas Fault System (TAPFS) the catchment heights of the SGAS are higher and allow the rise of the GAS. In this zone the density of minor faults (below 5 Km) in all directions occurs mainly in the center and northeast. These are the most salinized areas in this zone. The N95-125 interval direction (Fig.14) also has high density for lineaments below 5 Km and above 5 Km next to the Uruguai river close to zone 3.

The N22-45 interval direction for lineaments below 5 Km is more important in the center area where also some wells with high salinity are found. This direction is not in conformity with the N45 direction which appears as the preferred sodium direction in the south and central part of this zone in simulation maps such as conditional variance map (Fig.13) where the greatest variance of the simulation occurs precisely where the highest density of minor faults occur. This is confirmed by the fault density map which indicates that the central part is dominated by NE structures such as the Lancinha-Cubatão fault zone. Alkalinity E-Type is only high in

the northeastern portion and follows a NW direction which is the same as the fault density in the N95-125 interval direction (Fig.14), while calcium E-Type has high values throughout the eastern extent of the fault. Calcium E-Type also has high concentrations in the NE direction and align with the Lancinha-Cubatão fault zone even though the calcium variography indicated a N-S direction.

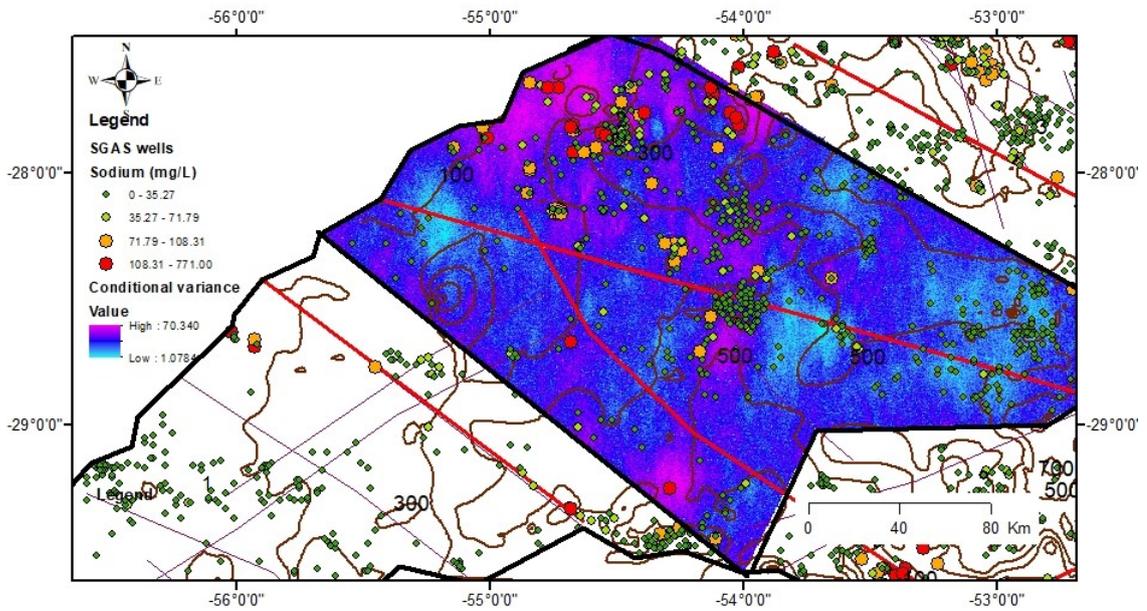


Figure 13 - Conditional variance of sodium simulation, sodium samples in zone 2. Red dots are high sodium concentrations.

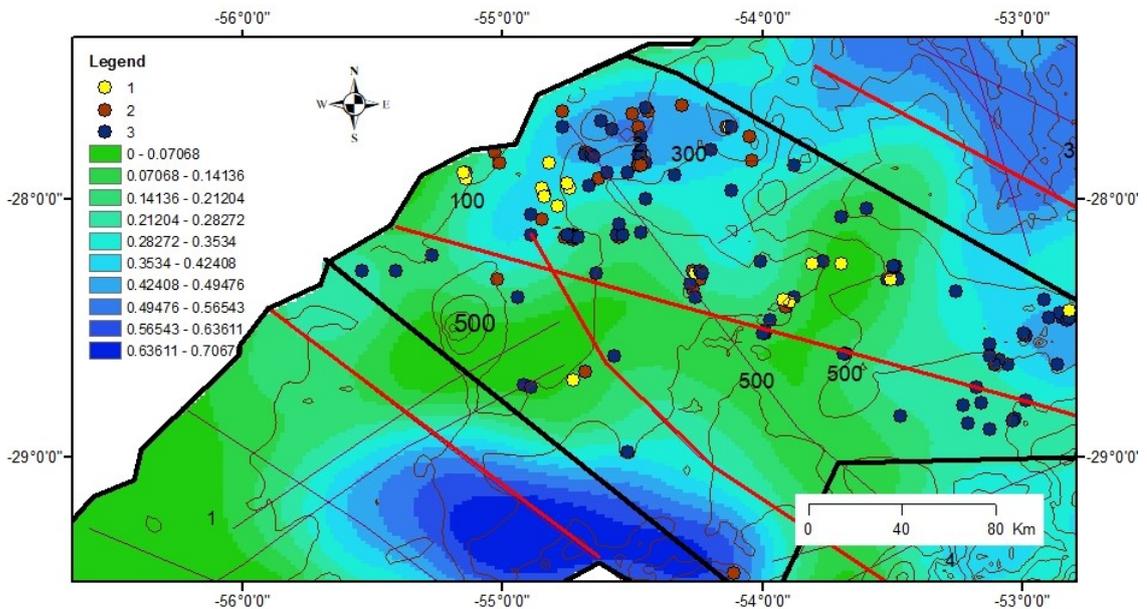


Figure 14 - Fault density map in the N90-125 interval direction for lengths below 5 Km with K-means groups in zone 2 and SGAS potentiometric isohypses. Group 2 is concentrated in the N90-125 interval direction. Red dots are group 2, yellow dots are group 1 and blue dots are group 3.

In zone 3 the gravimetric fault of N160 direction acts very strongly to reduce the potentiometry of both SAG and SASG. The lines clearly outline this structure, with high salinity values matching exactly this structure. The N95-125 interval direction (Fig.15) for lineaments below 5 Km is especially important around the gravimetric line and on the border with Santa Catarina near Frederico Westphalen city. In the east of this zone there is no high concentration of group 2 due to high SGAS potentiometric isohypses. In the E-Type sodium simulation (Fig.16) it is clear that there is a prolongation of the higher sodium concentrations along the Rio das Antas-Sc and Gravimetric faults. Alkalinity has the same behavior as sodium and follows the gravimetric fault and NE structures at the border with Santa Catarina state. Calcium simulation maps levels are strongly controlled by NE faults in the north. Both NE and NW structures are very present and NW predominate in the western part. SGAS potentiometric values above 500 m are found in the east and explain the lack of high sodium E-Type values there. Only calcium and alkalinity E-Type have high values in the east probably because these variables can also be solubilized after basalt weathering instead of ascending through faults alone. Alkalinity E-Type has a similar behavior to sodium but also has high values in the east.

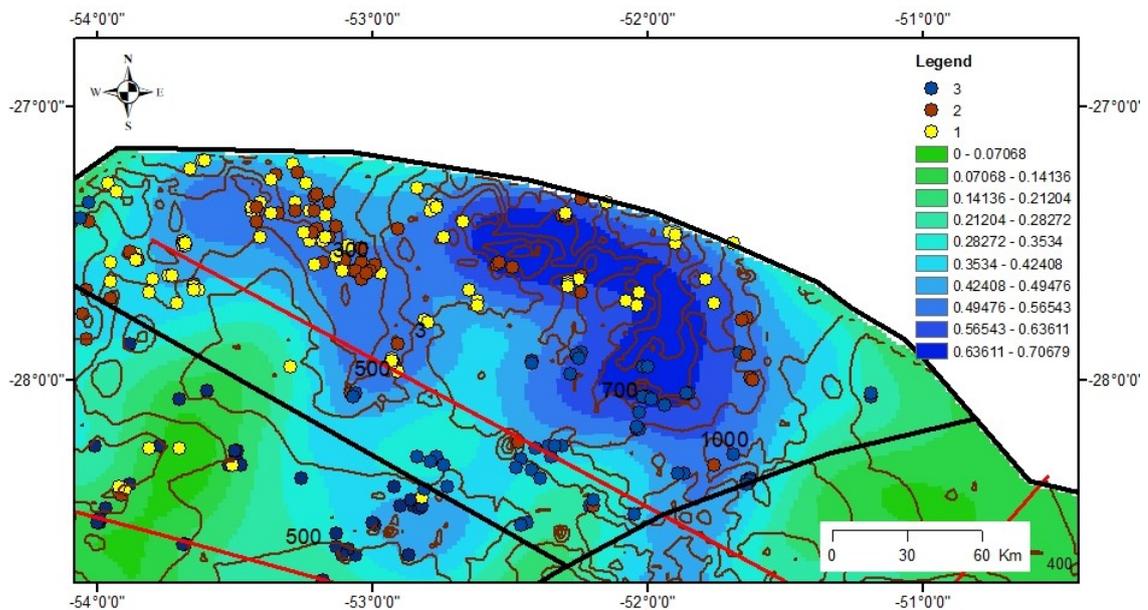


Figure 15 - Fault density map for zone in the N95-125 interval direction for lengths less than 5 km with K-means groups and SGAS potentiometric isohypses in zone 3. Group 2 and 3 are concentrated in the north along the main faults. Group 2 (red dots), group 1 (yellow dots) and group 3 (blue dots).

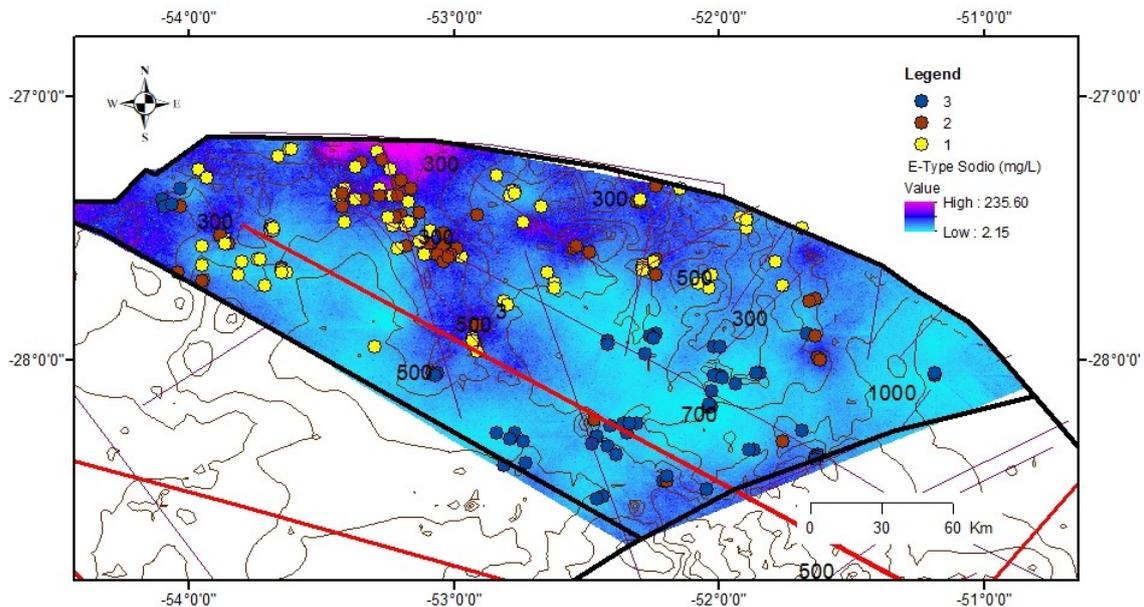


Figure 16 - E-Type of sodium with K-means groups and SGAS potentiometric isohypses in zone 3. Gravimetric fault is important for Rio das Antas-Sc Fault (fault) and Gravimetric fault (blue lines in the West) are important for mixing between SGAS and GAS. Red dots are group 2, yellow dots are group 1 and blue dots group 3.

The group 2 predominates in zone 4 in the west next to São Miguel das Missões Fault (Fig.17). The N125-145 interval density direction for lineaments directions above 5 Km are very present in the West and have the same direction of the main fault. Other group 2 samples are present around Rio das Antas Fault with N45 direction in the east of this zone and in the center where faults below 5 Km are abundant. This pattern of NE and NW faults was analysed in many works (Sordi *et al.* 2016, Strieder *et al.*, 2015, Rostirolla *et al.* 2000). The N50-80 interval direction is important in the east for lineaments below 5 Km. This trend is not followed in zone 5 where northwest structures are predominant in the western part of the area. The municipalities of Encantado and Lajeado represent this intriguing intersection of northwest and northeast structures. The E-Type of the sodium (Fig.18) simulation combined with the levels of sodium confirms that higher simulation concentrations are aligned with São Miguel das Missões fault and Rio das Antas fault. Calcium E-Type has high values in the center, west and east and is more spread than sodium E-Type.

The conditional variance of the calcium and alkalinity are very similar and point in the NE direction except for the central part where the conditional variance values

are low and show that the E-Type values of the simulation of both have a high probability of occurrence there

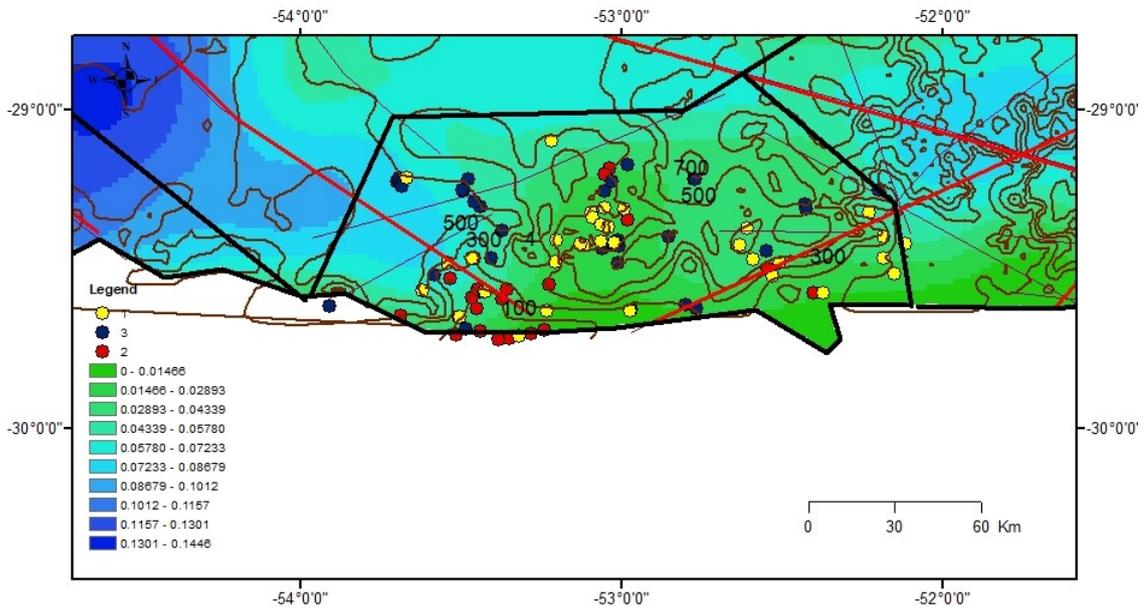


Figure 17 - Fault density map in the N125-140 interval direction with K-means groups and SGAS potentiometric isohypses in zone 4. Group 1 is yellow dots, group 2 is red dots and group 3 is blue dots. In red are the faults used as reference for hydrochemistry compartmentalization. Other faults are showed as weak brown lines.

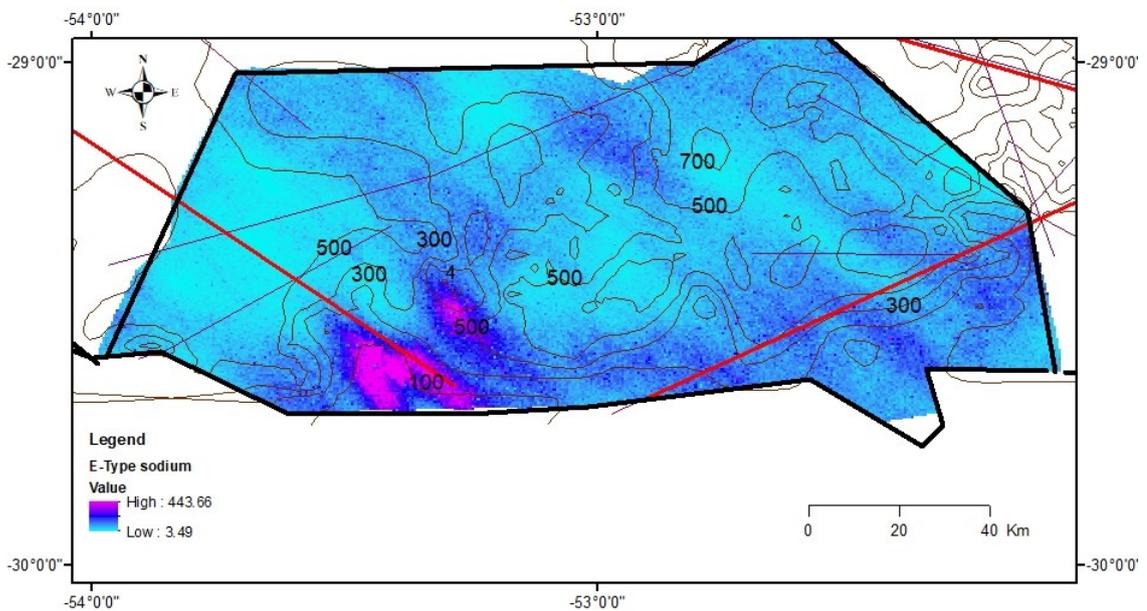


Figure 18 - E-Type for sodium and SGAS potentiometric isohypses in zone 4. High values (52.01), Low values (2.34)

In zone 5 where 5 dendrogram groups were generated and the group with the highest sodium concentration is present in the N90-115 fault density interval direction zone above 5Km in the western portion of the area. This interval direction coincides

with lower potentiometric values of the SGAS and GAS in zone 5, indicating that these structures actually decrease potentiometric values (Fig.19). Groups 2 and 4 seem to be aligned at the N90-115 fault density direction and moderately aligned in the N125-160 interval density direction. Calcium has the same behavior as sodium (higher concentrations along Rio das Antas fault) in the west of the area through the sample grid. As will be explained in the hydrochemistry section these two variables have an interdependent relation as they can be replaced by each other in some clays like montmorillonite. The sodium appears to be aligned with the Rio das Antas fault. The E-Type calcium simulation (Fig.20) are also strongly aligned with this structure. Group 1 which does not have as much average sodium (23 mg/L), but very high values of calcium average (43 mg/L) is very present in the south of the area.

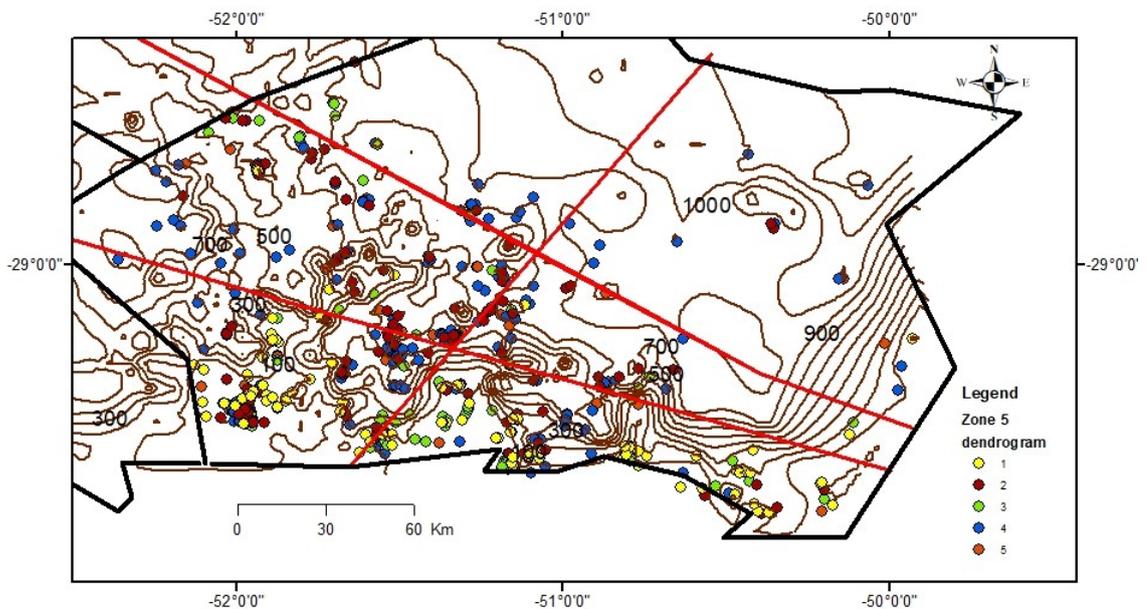


Figure 19 - Dendrogram groups and SGAS potentiometric isohypses indicating the relation between potentiometry and salinization. Group 2 has higher salinization

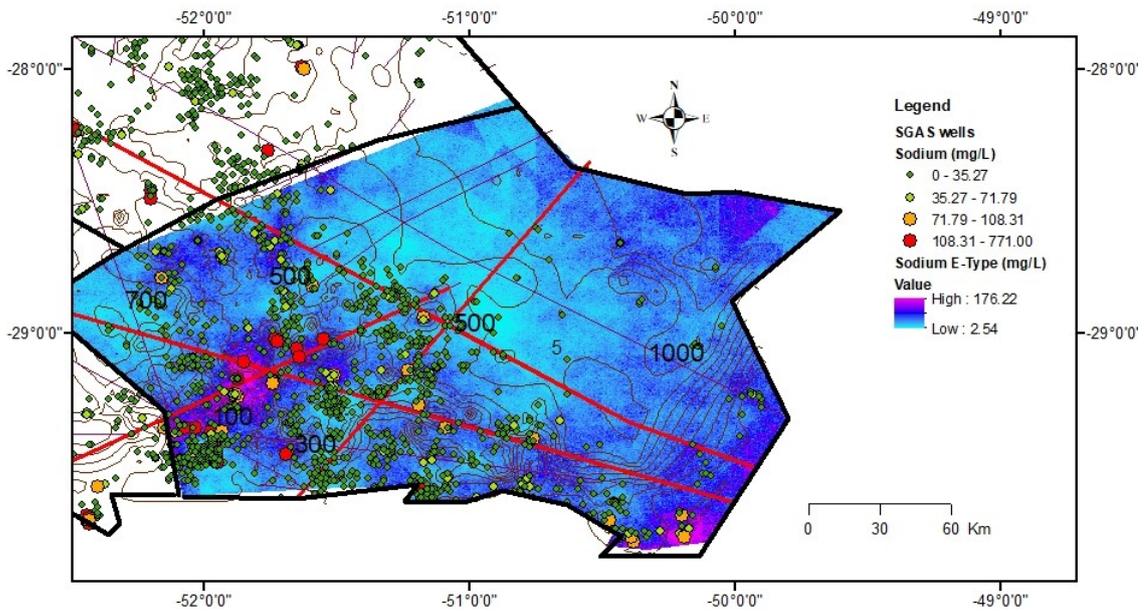


Figure 20 - E-Type for calcium in the SGAS of RS, calcium samples and SGAS potentiometric isohypses in zone 5. High dots represent high sodium concentrations. High values (176.22), Low values (2.54)

In zone 5, there is a high density of faults with N50-75, N20-45 and also N90-115 density interval directions. This demonstrates that there are different fault families with different orientation in this area with lengths less than 5 km. In the Rio das Antas region there is the influence of several smaller structures that are responsible for the formation of blocks. The lower blocks are not necessarily positioned in the river valleys reinforcing the performance of structural efforts (Matos, 2018).

3.2 Hydrochemistry

Dispersions diagrams and PCA values show the main hydrochemistry patterns and the relations between the variables. Group 2 is represented in the dispersion diagrams as a red square in all zones; group 1 is represented as yellow triangle in all zones and group 3 as a blue lozange in all zones. PCA analyses are indicative of behavior within each zone but are not able to predict the correlation within each K-means group since this correlation is diluted in all groups or concentrated in only one of the groups. Table 1 shows the averages for all groups in the 5 zones. The group 2 has high concentration of calcium only in zone 1 where the mean value is next to 56

mg/L. In the othes zones calcium presents contents lower than 24 mg/L in group 2in each zone.

The chemical composition of the aquifer is a function of the aquifer's mineralogy and the rate at which the aquifer moves through the system. In local flows, it is difficult for waters to have a different composition from more superficial waters, where the bicarbonate ion dominates following the sequence of Chebotarev:



This sequence will only be complete if minerals containing sulfate and chloride are present in the aquifer. This only happens in regional systems in basins that contain evaporites. The evolution of cations is more variable than that of anions due to exchange, precipitation and other processes.

The chemical composition of water in flows that percolate in multiple layers can be quite variable. The greatest variability occurs in sequences of sedimentary rocks (Kehew, 2000).

Table 1 - Means within each group in the K-means (zones 1,2,3,4) and dendrogram method (zone 5)

Zone		Ca (mg/L)	HCO ₃ (mg/L)	Na (mg/L)	Mg (mg/L)	SO ₄ (mg/L)	Cl (mg/L)
1	Group 1	36.0	180.8	38.8	11.4	13.5	14.1
	Group 2	55.5	255.7	59.6	28.3	51.7	54.4
	Group 3	11.2	49.0	10.3	3.9	3.9	8.9
2	Group 1	34.0	127.7	16.3	12.4	4.0	15.0
	Group 2	3.9	205.3	90.6	1.3	6.7	5.3
	Group 3	12.3	74.1	15.8	3.8	2.8	3.8
3	Group 1	17.2	86.5	20.3	4.7	8.7	5.1
	Group 2	3.4	157.6	80.6	1.0	17.5	3.9
	Group 3	15.7	75.8	13.1	5.3	4.2	3.8
4	Group 1	25.8	116.5	19.6	6.2	5.9	6.3
	Group 2	7.4	176.3	129.8	1.0	73.6	56.2
	Group 3	13.1	65.2	14.6	2.2	2.2	5.6
5	Group 1	43.4	162.2	27.0	11.0	31.8	11.3
	Group 2	23.3	102.0	41.5	3.2	24.8	11.2
	Group 3	22.7	102.1	11.0	11.0	7.1	7.1
	Group 4	11.5	61.3	11.6	3.1	4.2	4.6
	Group 5	24.9	56.2	44.0	9.1	54.2	37.5

From PCA diagram in zone 1 (Fig.21) it is clear that sodium and sulfate are contained in the same component in zone 1, while chloride is practically alone in one component and calcium, magnesium and alkalinity in another (Table 2). This relationship is quite different in other areas. In zone 3, 4 and 5 Ca and Mg are not so close while in zone 1 and 2 they are very closer in the diagram. The same occurs in the Chloride and sulfate relationship. In zone 1 and 2 they are more apart than in zones 3,4 and 5. Alkalinity is closer with Calcium and Magnesium in zones 1 and 5 while in zones 2,3 and 5 it is more associated with sodium sulfate and electrical conductivity. In zone 3 alkalinity and sodium are very close in the PCA diagram but K-means dispersion diagrams are in part contrary to this definition, since sodium and alkalinity are very close in only one of the K-means groups (group 2). In zone 4, alkalinity has little affinity for all variables and appears to be a separate component. In zone 4 Ca and Mg are less closer than in other areas but still have high scores in the same component (component 2). The other variables are grouped in the same component (component 1). In zone 5, magnesium is very close to calcium. Electrical conductivity appears to form a separate component, while the other variables are grouped into another component.

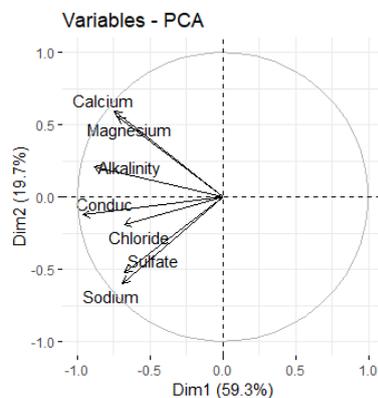


Figure 21 - PCA values for zone 1

	1	2	3
Ca	-0.36	0.5	-0.004
Na	-0.33	-0.51	-0.39
Sulfate	-0.33	-0.44	0.18
Cl	-0.33	-0.16	0.76
Mg	-0.35	0.46	0.15
Alk.	-0.43	0.17	-0.43
Conduc.	-0.47	-0.1	-0.099

Table 2 - PCA scores for zone 1

In zone 1, we have a similar behavior of the 7 variables in component 1. This may mean a common origin for these variables. In fact the group 2 has high values for all variables in zone 1 including sodium and magnesium and could be explained by component 1. This component explains 60% of the variability of the data and is therefore quite significant. In the component 2, magnesium has a score of 0.46, while calcium has 0.5. Sodium behaves similarly to sulfate, while chloride differs

somewhat from these two. The components 1,2 and 3 explain 85% of the original variability. This is a value considered satisfactory because it explains almost all the original variability of the data after the creation of independent variables. This result shows that sulfate, chloride and sodium have the same origin at deep sedimentary strata and cannot be explained by the weathering of basalt and acid rocks neither by secondary minerals filling amygdale and fractures. Sodium has a very low affinity for alkalinity (Fig. 22a) except for group 3. In the Ca + Na diagram versus alkalinity some correlation appears in group 2(0.53) indicating a probable exchange process that occurs (Fig.22b).

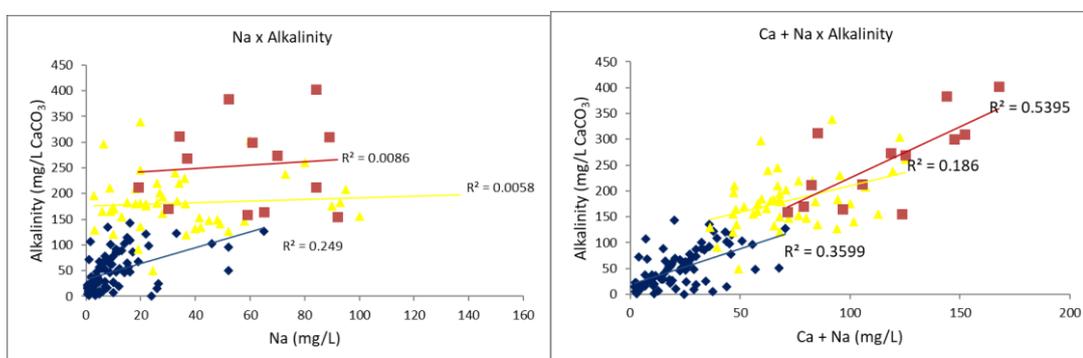


Figure 22 - a) Na x Alkalinity for zone 1; b) Ca + Na x Alkalinity in zone 1(b). Group 2 (red), group 3 (blue), group 1 (yellow).

Calcium solubility is closely linked to the presence of carbonic species such as: H_2CO_3^* , HCO_3^- and CO_3^{2-} (Bittencourt, 2003). Calcium concentration is directly related to the carbonate content of sedimentary units, since the dissolution of basalts rich in silicates in Serra Geral Formation is very low because of the limited water/rock interaction processes. Group 1 has a certain correlation between sodium and magnesium suggesting that the two elements came from GAS pre-GAS units, such as Pirambóia that is richer in salinity than Botucatu Formation, Rio Bonito and Irati Formations. Magnesium can be found both in the Rio Bonito Formation and in Irati Formations which have dolomites in their composition, while sodium is probably related to the cation exchange process with Ca and Mg. As the correlation of Ca with alkalinity is high especially in group 2 (Fig.23a) a high exchange process is not expected in this zone. Also group 2 has a lot of carbonate because calcium and magnesium are relatively high. There is also halite because the chloride is high too. The group 3 has probably 3 subgroups: one with an excellent correlation between

alkalinity and calcium (central trend). This group is related to circulation in the SGAS and dissolution of calcite in amygdales in Serra Geral Formation basalts. Another subgroup has high alkalinity and low calcium (lower trend) with unclear origin, but it may have association with dissolving CO₂ and dolomite. This subgroup is outside to the SASG. The last subgroup has high calcium and low alkalinity (samples without correlation). This subgroup (Fig.23b) may be related to the dissolution of gypsum (which occurs in basalt amygdales). It can also have dominant circulation in the SASG. Groups 1 and 2 have a higher sodium average concentration (38 and 59 mg/L of mean, respectively). Group 2 has the highest concentration of all variables including Mg and Ca. Ca has a good correlation with alkalinity compared to magnesium. In group 2 both calcium and sodium concentrations are high. The calcium supply in more saline waters can be explained by the presence of carbonates which are being weathered especially in the Teresina and Irati formations (Freitas, 2017).

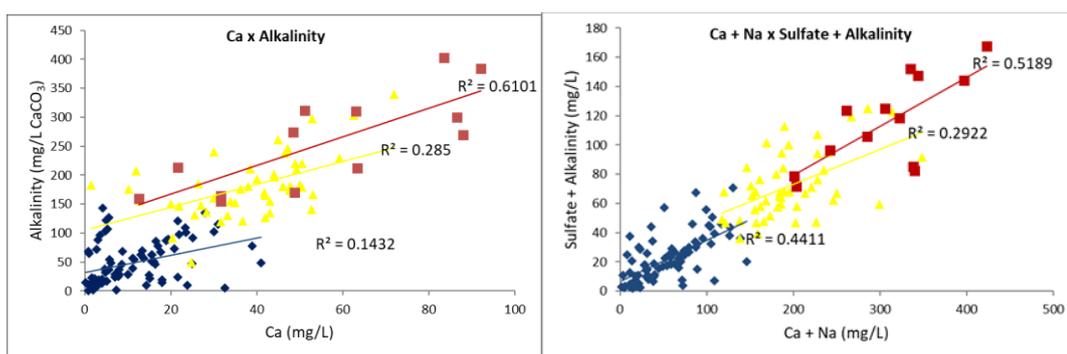


Figure 23 - a) Ca x Alkalinity for zone 1(a); b) Ca + Na x Sulfate + Alkalinity for zone 1(b). Group 2 (red), group 3 (blue), group 1 (yellow).

Zone 2 has the greatest hydrochemical diversity between the zones. Component 2 (Fig. 24) has similar scores for Ca, Mg and Cl and is representative of K-means group 1 (Table 3). Sodium, alkalinity and sulfate are very close and have their affinity proven by K-means of group 2. Component 1 has major variability (39%) and is the most important. Sodium is strongly represented in this component.

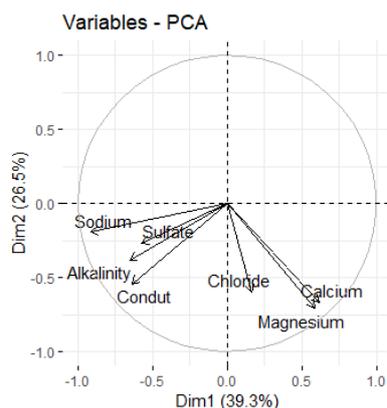


Figure 24 - PCA diagram for zone 2

	1	2	3
Ca	0.37	-0.49	0.072
Na	-0.55	-0.14	0.15
Sulfate	-0.34	-0.19	-0.7
Cl	0.1	-0.44	-0.17
Mg	0.35	-0.51	0.07
Alk.	-0.39	-0.27	0.64
Conduc.	-0.38	-0.39	-0.14

Table 3 - PCA scores for zone 2

The Group 1 has a correlation between Ca and Mg of 0.42 (Fig.25). Group 2 has 0.50 and group 3 has 0.25 in coefficient correlation. This low correlation in group 3 indicates that magnesium carbonates are not present in the SGAS compared to GAS and pre-GAS units. Group 2 has the highest correlation between calcium and magnesium, but the values for both are very low and probably reflect the low concentration of carbonates in the stratigraphic units (Rio Bonito and Irati Formations) through which the water percolated. In group 2 there is no correlation between calcium and alkalinity which also confirms that carbonate is not the main source of calcium in this group. The correlation of Calcium x alkalinity in group 1 is only 0.19 (Fig.26a) However in the sulfate + alkalinity x Ca dispersion diagram this correlation jumps to 0.57 (Fig.26b) indicating that is also an source of Calcium in group 1. This clearly indicates the influence of Irati and Pirambóia Formations in this group. Sulfate is expected to occur both in Irati and Pirambóia Formation but the deposition processes in each one is different. It is likely that gypsum is source of Ca for this zone besides carbonates present in sandstones cementation. In the group restricted to SGAS (group 3) there is no such high correlation in the sulfate + alkalinity x Ca (0.2) because sulfate is not very abundant since it is only found in SGAS amygdals.

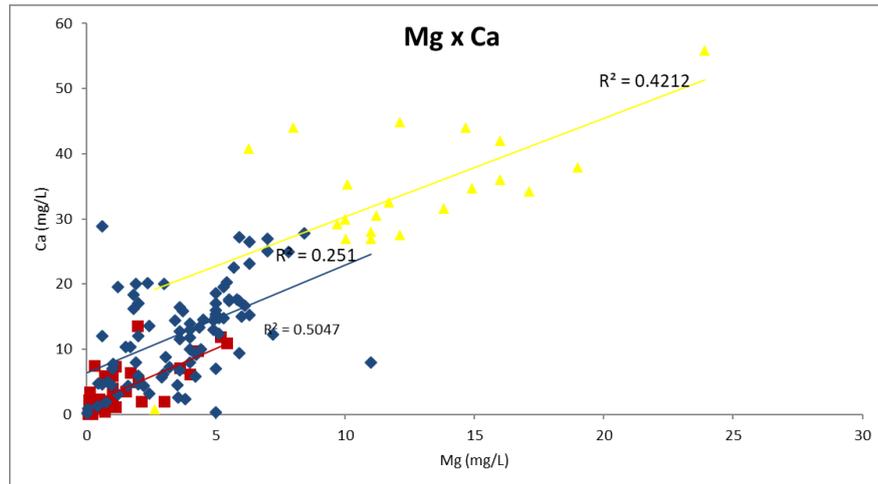


Figure 25 - Mg x Ca for zone 2. Group 2 (red), group 3 (blue), group 1 (yellow).

Sodium has no correlation with alkalinity (Fig.27a) in group 1 and low correlations in groups 2 and 3 (0.26 and 0.36, respectively). However there is 2 trends in group 3 maybe representing two subgroups. In the central trend there is high correlation between sodium and alkalinity. The other subgroup has lower sodium contents. Probably the central trend is not from SGAS. Group 1 in the same diagram has two apparent trends. One with low alkalinity and the other with high alkalinity. In the Ca + Na x alkalinity dispersion diagram (Fig.27b), group 2 does not change, while group 1 jumps from no correlation to 0.64 and group 3 jumps to 0.54 indicating that there are two populations in each of these groups. Therefore, it is concluded that group 1 has intermediate cation exchange in the clays while group 2 does not. Group 2 is probably derived from a unit rich in sodium and sulfate, but with no carbonates. Group 1 has high magnesium (12 mg/L) and calcium (34 mg/L) average concentrations.

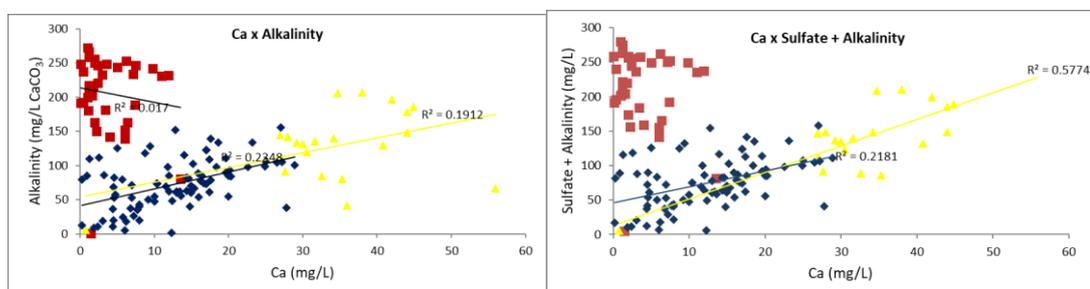


Figure 26. a) Ca x Alkalinity for zone 2; b) Ca x Sulfate + Alkalinity for zone 2. Group 2 (red), group 3 (blue), group 1 (yellow).

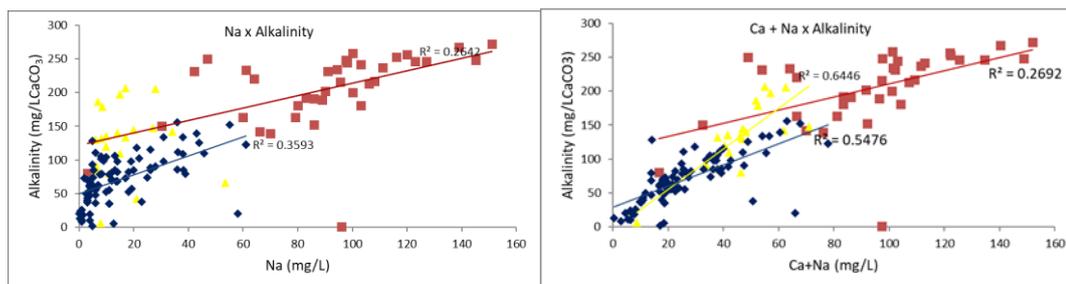


Figure 27 - a) Na x alkalinity for zone 2; b) Ca + Na x Alkalinity for zone 2. Group 2 (red), group 3 (blue), group 1 (yellow).

Group 2 comes from deeper waters as it has higher concentrations of sodium (90 mg/L). Chloride is more strongly present in group 1 with 15mg/L average concentrations.

In zone 3 the high correlation between sodium and alkalinity is reflected in PCA analyses (Fig.28) where sodium and alkalinity are very close and high in component 1. Group 1 in which sulfate, chloride, magnesium and calcium are high, explains in part the greater proximity of sulfate and chlorine in the second component, which explains 26.6% of the variability (Table 4).

In zone 3 group 2 has the highest correlation between sodium and alkalinity (0.63). Sulfate has some correlation with magnesium in groups 1 and 3 and none in group 2. Group 1 and 3 are very similar. Sulfate and chloride have poor correlation in all groups in the dispersion diagram even though they appear to be strongly correlated in the PCA diagram. Sulfate has some correlation with calcium in group 1(0.2) but none in groups 2 and 3.

What differentiates them is the amount of sulfate which in group 1 has twice the average of group 3 (8 and 4 mg/L respectively), while in group 2 this average is 17 mg/L. The lack of sodium in group 3 indicates that it is restricted to SGAS, while in group 1, sulfate and sodium concentrations indicate an intermediate member.

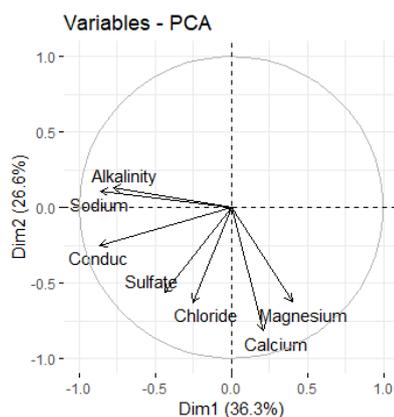


Figure 28 - PCA diagram for zone 3

	1	2	3
Ca	0.13	-0.59	-0.18
Na	-0.53	0.08	0.19
Sulfate	-0.27	-0.41	0.33
Cl	-0.15	-0.45	0.47
Mg	0.24	-0.45	-0.48
Alk.	-0.48	0.097	-0.51
Conduc.	-0.54	-0.18	-0.3

Table 4 - PCA scores for zone 3

Sodium and alkalinity have high correlation (Fig.29a) in group 2 (0,63) and the high presence of sulfate in this group with an average of 17 mg/L clearly indicates that it is a sodium-sulfated bicarbonated group. Sodium plus calcium have high correlation with alkalinity in all 3 groups (Fig.29b) and confirm the high exchange process that occurs in group 2. The correlation between Ca and alkalinity is 0.4 for group 3 and 0.3 for group 1, while in Group 2 it is null (Fig.30a) In group 2 calcium is low. Therefore, the sedimentary layers present at great depths are low in carbonate or there is some cation exchange process that makes it impossible for Ca to enter into solution. Groups 1 and 3 have low amounts of alkalinity, but higher values of Ca and Mg. Higher average of Mg concentrations in group 3 (5 mg/L) and in group 1 (4.5 mg/L) (Table 1). Group 3, which has little calcium and magnesium average concentrations (15 and 5 mg/L respectively) has a good correlation between both and probably indicates very shallow waters.

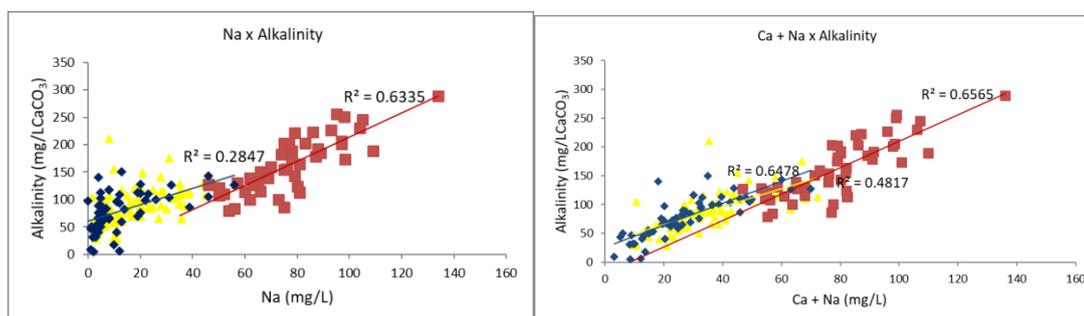


Figure 29 - a) Na x alkalinity for zone 3; b) Ca + Na x Alkalinity for zone 3. Group 2 (red), group 3 (blue), group 1 (yellow)

For Bittencourt *et al.* (2003) low and intermediate Mg and Ca values are not incompatible with SGAS, except for Na which is generally very low in concentrations.

Therefore, group 3 is therefore more restricted to SGAS than group 1. This is clear from zone 3 simulation maps where group 3 appears only in the east where SGAS potentiometric isohypses and does not allow mixtures processes while group 1 is in the same location of group 2 despite being compositionally different. Sulfate has some correlation with calcium in group 1. Thus, part of the Ca of this group comes from the dissolution of Ca sulfate (Fig.30b). GAS has calcite in its diagenetic cementation and is capable of supplying Ca for the solution. Smectite occurs due to eodiagenesis in both Pirambóia and Botucatu and is responsible for cations exchanges especially in group 1 and in lower amounts in group 2. In addition to the

presence of calcite cementation in the mesodiagenesis of both, higher pH accompanies chemical facies more enriched in sodium and sulfate (Hirata *et al.* 2011).

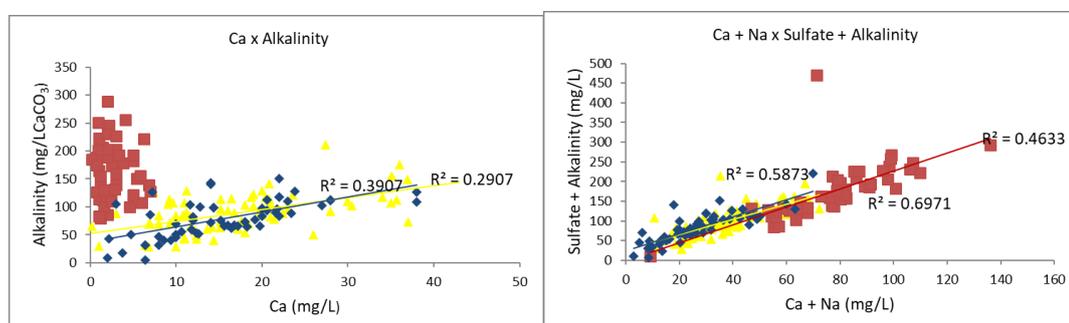


Figure 30 - a) Ca x alkalinity for zone 3; b) Ca + Na x Sulfate + Alkalinity for zone 3. Group 2 (red), group 3 (blue), group 1 (yellow).

For Freitas (2016) an equal molarity between Na and Cl indicates dissolution of halite. If the sodium is greater than the chloride, the source of sodium may be different, such as plagioclase weathering or cation exchange. Also, according to the author, the desert environment of deposition of Botucatu/Pirambóia sandstones led to the deposition of saline precipitates, including sulfates. The presence of sulfate above 5 mg/L in group 1 indicates that the Pirambóia formation is acting to supply this ion to this zone. In addition, in zone 1 the sulfate values for the intermediate group (group 1) indicate the strong presence of the Pirambóia formation. The sample pH values in this zone are also high, like in zone 2. The lowest calcium frequencies are present in this zone. There are few histogram values above 45 mg/L.

In zone 4 even though the PCA scores (Fig.31) have a high correlation between alkalinity, sodium, sulfate and chloride K-means groups 1 and 3 have a low correlation between sodium and alkalinity (Table 5). In this zone the sulfate content is quite low. The same group with high calcium concentrations (group 1) has high magnesium values. In this group it is possible to observe the greater influence of magnesium carbonates acting on the solubility of calcium and magnesium. Sodium has the same behavior as sulfate and has high and a few high values in all 3 groups but the highest E-Type values in Figure 17 are located at the same places as group 2 and the average is higher in group 2 as well.

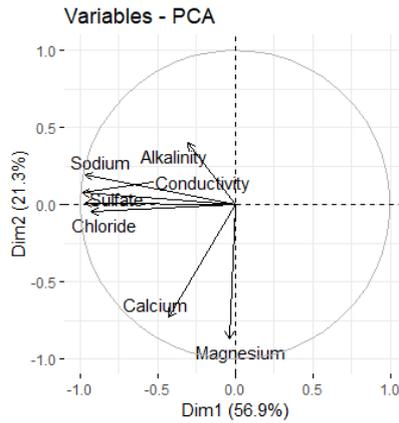


Figure 31 - PCA diagram for zone 4

	1	2	3
Ca	-0.21	-0.59	0.25
Na	-0.48	0.15	-0.07
Sulfate	-0.48	0.15	-0.07
Cl	-0.46	-0.039	-0.1
Mg	-0.019	-0.71	0.18
Alk	-0.15	0.32	0.91
Conduc.	-0.49	0.06	-0.035

Table 5 - PCA scores for zone 4

In zone 4 group 3 has a high correlation between calcium and alkalinity (0.73) (Fig.32a) and increasing when sodium is added to calcium (0.8) (Fig.32b). This group is restricted to the SGAS recharge zones and has no mixture with underlying aquifers. Group 1 has a greater amount of calcium and magnesium than group 2 (25 mg/L and 6.18 mg/L respectively) in average. However the correlation with alkalinity is not the same (0.18). In this group it is evident the upward recharge and the exchange of calcium for sodium as the correlation improves in the dispersion diagram. Sodium has a higher correlation with sulfate in group 2 (0.91) (Fig.33a). Calcium has null correlation with sulfate (Fig.33b). Chloride also has a higher correlation with conductivity (0.97) in this group. Group 2 is directly linked to halite dissolution from mainly Irati Formation. In zone 4 the alkalinity in group 2 is higher than in groups 2 and 5 in zone 5. This should indicate a high concentration of carbonates. Calcium and magnesium are totally trapped in clays in this area because the amount of calcium and magnesium is very low in this group.

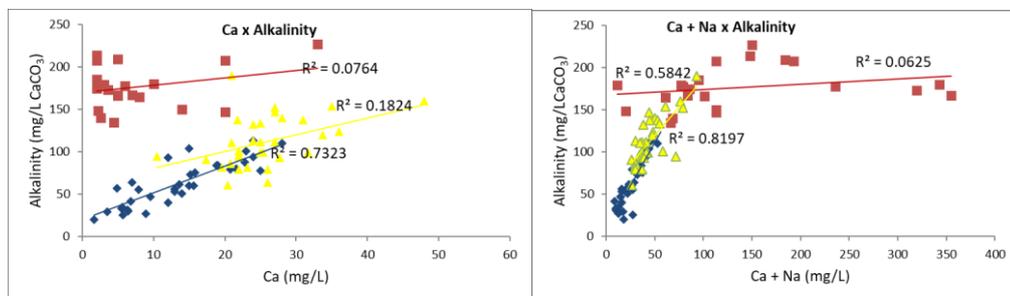


Figure 32 - a) Ca x alkalinity for zone 4(a); b) Ca + Na x Alkalinity for zone 4(b). Group 2 (red), group 3 (blue), group 1 (yellow).

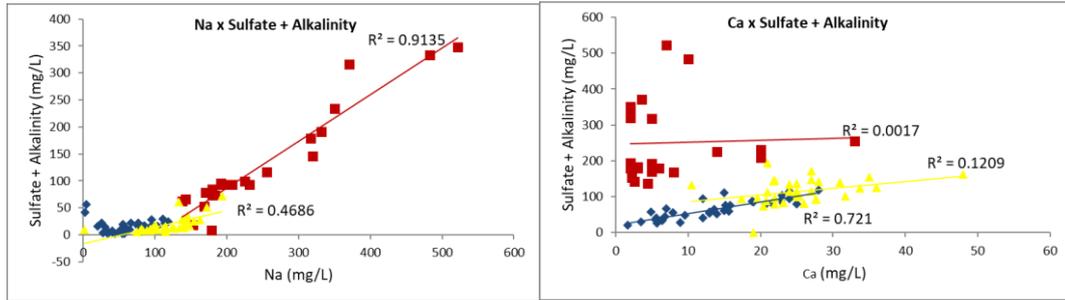


Figure 33 - a) Na x Sulfate + Alkalinity for zone 4; b) Ca x Sulfate + Alkalinity for zone 4(b). Group 2 (red), group 3 (blue), group 1 (yellow)

In zone 5, the PCA scores (Table 6) show that calcium, magnesium and alkalinity are very close and differentiate from sulfate, sodium and chloride in component 2 (Fig.34).

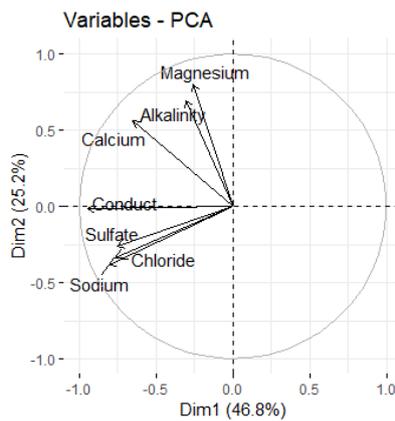


Figure 34 - PCA diagram for zone 5

	1	2	3
Ca	-0.35	0.42	0.32
Na	-0.44	-0.28	-0.35
Sulfate	-0.41	-0.19	0.43
Cl	-0.42	-0.25	0.006
Mg	-0.14	0.6	0.32
Alk.	-0.16	0.52	-0.67
Conduc.	-0.52	-0.014	-0.13

Table 6 - PCA scores for zone 5

In zone 5 there are 5 groups. Group 1 which has a average alkalinity of 161 mg/L is also the group with a higher calcium average (43.44 mg/L). The correlation between Ca + Na x sulfate + alkalinity (Fig.35a) is 0.42 while between Ca x sulfate + alkalinity is 0.23 (Fig.35b). The better correlation in Ca + Na x sulfate + alkalinity diagram occurs in group 2 (0.55). In group 4 the concentration of both alkalinity and calcium plus sodium (Fig.36a) is low and alkalinity does not have a good correlation neither with calcium (Fig.36b) nor with sodium in either group. The correlation of Calcium x alkalinity in group 3 is 0.2 and is the better correlation between these two variables among all groups. Group 3 has intermediate values of calcium and alkalinity but low chloride and sulfate. Group 5 has high values of sodium, sulfate and chloride, but lower concentration of alkalinity. This group is derived from deeper units since sodium average concentration (43 mg/L) and sulfate average concentration (54

mg/L) are very high and could be named a sulfated-chlorinated sodic group since alkalinity is very low. This clearly indicates that this group has a direct relationship with Irati. Part of the sodium comes from halite because the amount of chloride is very high. The remaining part of sodium comes from the exchange between calcium and sodium. Athayde et al (2012) reported the existence of such group in SGAS. Group 2 has sodium values that can reach more than 300 mg/L. Also, group 2 has a higher amount of alkalinity because of the dissolution of carbonates. As chloride is lower in this group, we can say that halite interferes less in this group compared to group 2 and the cation exchange process is more intense. In group 1 calcium has a good correlation with sulfate, which suggests that the source of calcium comes from sulfates (Irati and Pirambóia Formation). This group also has some cation exchange since sodium has intermediate values. Groups 1,3 and 5 have higher magnesium values, and group 3 has values that reach 30 mg/L. There only seems there seems to be enough potentiometry to raise more saline groundwaters along Rio das Antas Fault and closer to the Atlantic Ocean.

Calcium sulphated bicarbonated waters are found in the valley of Rio das Antas and Rio do Prata where the thickness of volcanic rocks is lower. In Veranópolis chlorinated sulfated sodium waters are found, but with smaller amounts of bicarbonate. In addition, calcium or magnesian bicarbonated waters are found in the topographically higher areas, while chlorinated, sulfated waters are found close to the Das Antas and Rio Carreiro valleys (Tomasi, 2020).

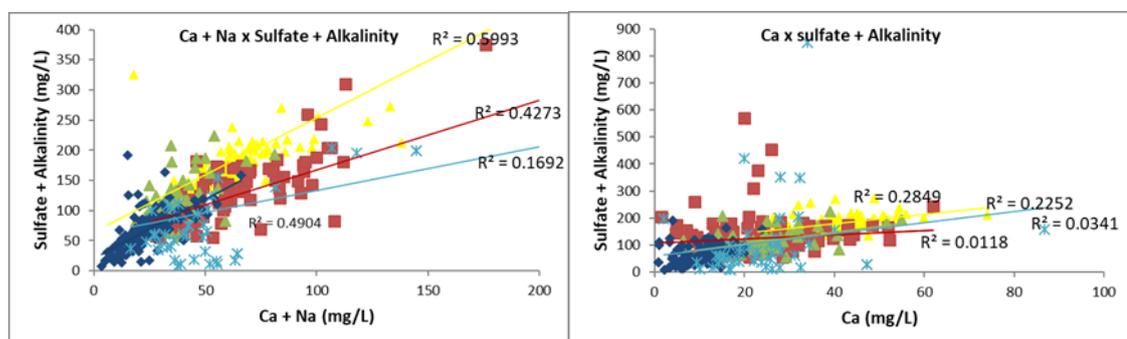


Figure 35 - a) Ca + Na x Sulfate + Alkalinity for zone 5. Group 3 has 0.49 correlation. Group 4 has 0.43. b) Ca x Sulfate + Alkalinity for zone 5. Group 1(yellow) has 0.22; group 4 (blue) has 0.28 correlation; group 5 has 0.03 correlation and group 2 has 0.01 correlation. Group 4 has 0.28 correlation

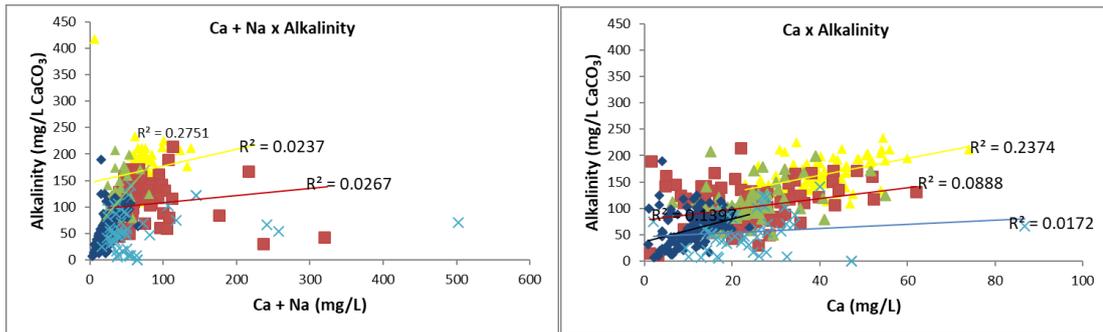


Figure 36 - a) Ca + Na x Alkalinity for zone 5. Correlation of 0.27 for group 3 and 0.41 for group 4. b) Ca x Alkalinity for zone 5. Correlation of 0.13 for group 4. Group 2 (red), Group 3 (green), Group 1 (yellow), group 4 (blue) and Group 5 (soft blue)

4 CONCLUSIONS

It seems clear that major faults interfere with salinity and decrease potentiometric levels for both GAS and SGAS. The fracture rate of the rock is decisive for the flow within the aquifers. Therefore it is very difficult to have high salinity where the fracture rate is low and where there is no major regional fault that crosses all units and has minor fractures associated with them. In some places there seems to be a downward rather than an upward flow. This is the case for zones 1 and 2 where the very low potentiometry of the SGAS in some points prevents the rise of the GAS waters. Groundwater ascension is only possible when GAS and SGAS are really close.

NW and NE structures are interspersed in all zones, while the Uruguai River is embedded in structures that potentialize salinization in NE and E-W directions.

The density of faults in zone 1 for lengths above 5 Km (N22-45 interval direction) are more or less coincident with group 2 especially in the west close to the argentinian border. The conditional variance and E-Type of sodium simulation have higher concentrations along this direction. For zone 2 this same pattern is maintained from the center to the north next to the Uruguai river even though smaller structures have a NW direction. In zone 3, NW fault density is pronounced for faults below 5 Km in the N90-125 interval direction in the western part of the zone while NE faults (N22-45 interval direction) are more prominent in the eastern part especially for faults below 5 Km and are confirmed by sodium E-Type simulation. In zone 4, the western part has density faults in NW (90-120°) which are important, while in the eastern part the NE density are pronounced. In zone 5, the Rio das Antas Fault is very important for waters salinity but the major lineament density above 5 Km is in the N125-160

interval direction. E-Type sodium simulation falls exactly in Rio das Antas fault and it is assumed that this structure is very important for SGAS salinization.

Sodium is preferably controlled by larger structures in zone 1 and 4 while smaller structures seem to influence other zones more. The K-means method was more effective in spatially separating the chemical groups with the exception of zone 5 where the pearson method represented in the dendrogram was more effective. The ideal number of clusters is 4 according to the variance of the data but in most zones 3 main groups were more appropriate since one of these groups had fewer samples. Sulfate, chloride and sodium are always together in the components except in zone 2 where chloride is closer to calcium and magnesium. Alkalinity is closer to calcium and magnesium in zones 1 and 5. The zones showed different hydrochemical processes. Electrical conductivity has a very high correlation with sodium and sulfate in zone 4 but also has good correlations in other zones. Magnesium has a high correlation with calcium in all zones, with the exception of zone 4.

When the chloride concentration is high and close to the sodium concentration the presence of halite is expected. The cation exchange process only happens when the difference between sodium is higher than chloride and alkalinity is has affinity with sodium. In zone 1 the cation exchange is not so great. This also occur in group 5, in zone 5. The salinized groups in other zones have greater exchange in groups 2 and 1 between sodium and calcium when calcium is traded by sodium and trapped in clays like smectites.

The Rio Bonito and Irati formations are the main source of salinity for SAG and SASG. Sulfate, chloride and sodium are provided by these units. The Pirambóia Formation is also capable of supplying sulfate but neither sodium nor chloride. The exchange of calcium for sodium occurs in these units, which have clays in their composition capable of carrying out this exchange, such as smectites. The Pirambóia Formation is also capable of adding some salinity, but in reduced quantities in relation to Irati and Rio Bonito

The group 2 is well correlated with Large NE faults in zone 1 and zone 2. In zone 3 small NW structures are important as well as in the west of zone 5. In zone 4, there are small NE structures in the eastern part of the zone and NW in the western part of the zone showing a clear division.

Where the heights (m) of the SASG uptake are closer to the potentiometric levels of the SAG there is an increase in saline waters from GAS to SGAS. Upward recharge occurs mainly due to the influence of some faults that allow saline water to rise. In zone 1 the upward recharge appears to be located along NE faults. In zone 2 upward recharge is also preferred in this direction mainly from the center to the north. In zone 3 the upward recharge occurs along the gravity faults and in Rio das Antas-Sc Potentiometric lines of 100 to 300 m are around these faults and are prolonged because of them. In zone 4 recharge occurs preferably in the west with NW directions and to the east with NE directions showing the truncation of both directions. The potentiometric lines of the SASG and SAG mainly coincide in these areas. In zone 5 the upward recharge occurs mainly along the fault line of the Rio das Antas with NE direction where the potentiometric lines of level 0 to 300 m from the SASG intercept the potentiometric lines from 0 to 100 m of the SAG. This flaw surrounds several cities and is therefore of great relevance. Dorsal de Canguçu seems to have no influence on this upward recharge. The top-up refill is identified mainly by the high values of the sodium simulation (E-type of the sodium simulation).

5 ACKNOWLEDGMENT

I would like to thank my supervisor Antonio Pedro Viero, my co-supervisor Diego Marques and the Pós-Graduate Program at the Federal University of Rio Grande do Sul. I would like to thank CAPES for the financial assistance.

REFERENCES

- Bittencourt, A.V.L., Filho, E.F.R., Hindi, E.C. & Filho, A.C.B. 2003. A influência dos basaltos e de misturas com águas de aquíferos sotopostos nas águas subterrâneas do sistema aquífero Serra-Geral na Bacia do rio Piquiri, Paraná-BR. *Águas subterrâneas*, 17: 67-75.
- Belletinni, A.S., Viero, A.P. & Neto, A.C.B. 2019. Hydrochemical and contamination evolution of Rio Bonito aquifer in the Carboniferous region, Paraná Basin, Brazil. *Environmental Earth Sciences*, 78: 642.
- Bortolin, T.A., Reginato, P.A.R., Leão, M.I. & Schneider, V.E. 2014. Hidrogeologia e hidroquímica dos aquíferos fraturados associados às rochas vulcânicas ácidas no Município de Carlos Barbosa(RS). *Revista Ambiente e Água*, 9.

- Dias, A. 1995 Geologia do Município de Criciúma. Programa de Informações Básicas de Santa Catarina—PROJESC. Porto Alegre: Serviço Geológico do Brasil—CPRM. Séries Cartas Temáticas, 23.
- Freitas, M. & Roisenberg, A. 2017. Análise exploratória de dados de condutividade elétrica nas águas do sistema aquífero Serra Geral no Rio Grande do Sul e Santa Catarina. *Águas Subterrâneas*, 31: 1-17.
- Freitas, M. 2016. *Hidrogeoquímica e isotopia de águas com alta salinidade do Sistema Aquífero Serra Geral na região do Alto rio Uruguai, Brasil*. Tese de doutoramento. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS. Porto Alegre. 195 p.
- Hirata, R., Gesicki, A., Sracek, O., Bertolo, R., Giannini, P.C. & Aravena R. 2011. Relation between sedimentar framework and hydrogeology in the Guarani Aquifer System in São Paulo state, Brazil. *Journal of South American Earth Sciences*, 31: 444-456.
- Javadi, S., Hashemy, S.M., Mohammadi, K., Howard, K.W.F. & Neshat, A. 2017. Classification of aquifer vulnerability using K-means cluster analyses. *Journal of hydrogeology*, 549: 27-37.
- Kehew, A.E. 2000. *Applied Chemical Hydrogeology*. Prentice Hall. Upper Saddle River, New Jersey. 368 p.
- Krebs, A.S.J. (2004) *Contribuição ao conhecimento dos recursos hídricos subterrâneos da bacia hidrográfica do rio Araranguá, SC*. Doctoral thesis, Universidade Federal de Santa Catarina. <http://rigeo.cprm.gov.br/jspui/handle/doc/284>. Accessed 30 Apr 2018
- Machado, J.L.F. 2005. *Compartimentação espacial e arcabouço hidroestratigráfico do sistema aquífero Guarani no Rio Grande do Sul*. Tese de doutoramento. Universidade do Vale do Rio dos Sinos, UNISINOS. São Leopoldo. 254 p.
- Marcotte, D. 2016. Spatial turning bands simulation of anisotropic non-linear models of coregionalization with symmetric cross-variances. *Computers and Geosciences*, 89: 232-238
- Marques, D.M. 2010. *Desenvolvimento de um algoritmo para simular a variabilidade do minério em pilhas de homogeneização*. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas (PPGEM). Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre. 130p.
- Matos A.B., Reginato A.R.R., & Athayde G.B. 2018. Compartimentação hidrogeológica do Sistema Aquífero Guarani na escarpa da serra geral no nordeste do RS. *Águas Subterrâneas*, 32: 130-139.
- Meng, S. & Maynard, J.B. 2001. Use of statistical analysis to formulate conceptual models of geochemical behavior: water chemical data from the Botucatu aquifer in São Paulo state, Brazil. *Journal of Hydrology*, 250: 78-97.
- Milani E.J., Melo J.H.G., Souza P.A., Fernandes L.A., & França A.B. 2007. Bacia do Paraná. *Revista Brasileira de Geociências*, 15(2): 265-287.

- Mohammadrezapour, O., Kisi, O. & Pourahmad, F. 2018. Fuzzy c-means and K-means clustering with genetic algorithm for identification of homogeneous regions of groundwater quality. *Neural computing and applications*, 32:3763-3775
- Paravarzar, S., Emery, X. & Madani, N. 2015. Comparing sequential Gaussian and turning bands algorithms for cosimulating grades in multi-element deposits. *Comptus Rendus Geosciences*, 347: 84-93.
- Rocha, M. & Ferreira, P.G. 2007. *Análise e exploração de dados com R. Editora de informática*. Lisboa, Portugal.
- Takahashi, H.A. 1991. *Caracterização morfoestrutural e hidrogeológica de aquíferos em meio fraturado através de técnicas de sensoriamento remoto e análise estatística, em setor de planalto meridional – RS*. Programa de pós-graduação em engenharia civil/Recursos Hídricos e Saneamento, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Dissertação de Mestrado, 126p.
- Teixeira, G.V. & Viero, A.P. 2017. Evolução hidrogeoquímica dos aquíferos mesozóicos da porção sul da Bacia do Paraná no Oeste do Rio Grande do Sul, Brasil. *Águas subterrâneas*, 31: 36-51.
- Tomasi, L.C. & Roisenberg, A. 2019. Contexto Hidrogeológico e sua relação com a tectônica do Sistema Aquífero Serra Geral na Bacia Hidrográfica do Rio Ijuí, RS. *Anuário do Instituto de Geociências – UFRJ*, 42.
- Turner, S., Regelous, M., Kelley, S., Hawkesworth, C.J. & Mantovani, M.S.M. 1994. Magmatism and continental break-up in the South Atlantic: high precision ^{40}Ar - ^{39}Ar geochronology. *Earth and Planetary Science Letters*, 121: 333-348.

7 MANUSCRITO 3 - ESTOCASTIC SIMULATION OF THE SERRA GERAL AQUIFER IN THE STATE OF RIO GRANDE DO SUL

Estocastic Simulation of the Serra Geral Aquifer in the State of Rio Grande do Sul

Authors: Guilherme Vargas TEIXEIRA¹, Antonio Pedro VIERO², Diego Machado MARQUES³

¹ Programa de Pós-Graduação em Geociências, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, departamento de Mineralogia e Petrografia Av.Bento Gonçalves, 9500, CEP 91.540-000, Porto Alegre, RS, Brasil (Teixeira_guilherme@yahoo.com.br)

² Instituto de Geociências, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Departamento de Mineralogia e Petrografia. Av.Bento Gonçalves, 9.500, CEP 91.540-000, Porto Alegre, RS, Brasil (antonio.viero@ufrgs.br)

³ Instituto de Geociências. Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Departamento de Geologia Estrutural. Av.Bento Gonçalves, 9.500, CEP 91.540-000, Porto Alegre, RS, Brasil (diego.marques@ufrgs.br)

ABSTRACT

The Paraná basin has a rich diversity of aquifer systems and sedimentary aquitards, such as the Rio Bonito and the Guarani aquifer system and volcanic aquifers, known as the Serra Geral Aquifer System. Establishing connection criteria between these aquifers through faults is one of the most relevant topics in hydrogeology. As an alternative to try to better understand the communication between these aquifers, it is proposed to use geostatistical methods, such as kriging and simulation, which help to understand the dynamics of the distribution of chemical elements, which cross regional faults from the sedimentary layers to reach the Serra Geral Aquifer System. In this study the interaction of sedimentary aquifers in the Paraná basin with the Serra Geral Aquifer System, which also belongs to this basin, there is interest in the extreme values, so that the geostatistical simulation method was chosen to achieve it, considering the variables sodium, calcium, conductivity and alkalinity. The study area which covers the entire Serra Geral Aquifer System in Rio Grande do Sul was divided into 5 zones, according to a structural criterion based on large faults. Each zone has its own variography and the four elements in each of these zones performed differently. Zone 3 and 5 have a very high nugget effect, while zones 1,2 and 4 have a more homogeneous behavior of the four variables.

Key-words: Simulation, Hydrochemistry, Paraná Basin, Hydrogeology.

1 INTRODUCTION

The Paraná basin is an intracratonic basin, covering 1.500.000 km² in Brazil, Argentina, Uruguay and Paraguay, developed between the Ordovician and the Cretaceous periods. The sedimentary sequence is 7.5 km thick and is composed of six supersequences: Rio Ivaí, Paraná, Gondwana I, II, III and Bauru (Millani 1997;

Frank et al. 2009). The volcanic rocks of Serra Geral Formation arose at the opening of the Atlantic Ocean at the end of the Cretaceous period. Turner et al. (1994) places the volcanism between 137 and 127 Ma.

The Paraná Basin has a polycyclic chronic deposition with flexural deformation caused during Andean formation. In Rio Grande do Sul State a strike slip transpressive tectonic regime was performed by this collision which affected the extension, direction and nature of regional and local faults that covers the sedimentary strata and the volcanic sequence that covers it (Strieder 2015).

The volcanic rocks of the Serra Geral Formation, which are the object of this work, correspond to the fissural Serra Geral Aquifer System (SGAS) whose porosity and permeability are due to tectonic and cooling fractures present in the volcanic rock. Such rocks emerge in practically the entire Paraná basin and have a great hydrogeological importance due to their high exploitation. This aquifer is formed by basalts (85%), rhyolites and dacites (10%) and covers approximately 50% of Rio Grande do Sul State from the center to the north. Its waters are exploited in more than 15,000 wells with flow rates up to 220m³/h (Freitas & Roisenberg 2017).

The mineralogical composition of basalts essentially are comprised of plagioclase and pyroxene, with smaller proportions of magnetite. Micrographic intergrowth, interstitial glass, quartz and apatite are minor components. Zeolites, copper minerals, quartz in their varieties and clay minerals are recorded in amigdaloid cavities (Bongiolo 2011).

The SGAS of Rio Grande do Sul also has acidic rocks that came in the last lava flows of Serra Geral Formation. These rocks are mainly composed of aphyric crystals and may contain up to 5% phenocrystals (> 1.0 mm) and microphenocrystals (0.2 to 1.0 mm) of plagioclase (An₆₅₋₄₀), augite (Wo₃₇₋₃₂), pigeonite (Wo₁₀₋₉), titanium-magnetite and rare apatite and orthopyroxene (Wo₄₋₃). Green uralitic hornblende is registered as a reaction product of clinopyroxene with residual liquids in the most crystalline volcanic types (granófiros), in which the matrix consisting of a complex and fine micrographic intergrowth of quartz and sanidine is abundant and characteristic (Or₇₂₋₅₂) to which plagioclase microlites, pyroxene, metallic minerals and hornblende are added. (Holz & De Ros 2000).

The SGAS is characterized by the capacity of storage and circulation of water related to the joints and fractures however there are other ways to generate the accumulation and transmission of water as vesicular and amigdaloid zones on the

top of volcanic units and the limits of lava flow. The SGAS confines large hydrostratigraphic units such as Guarani Aquifer System (GAS), located immediately below, and the deeper Rio Bonito Aquifer, also known as pré-GAS. The SGAS's recharge and interaction mechanism with the Aquifers below depends on structures that connect them (Freitas et al. 2017).

The GAS consists mainly of two sedimentary units: the basal Pirambóia Formation, which consists of silty-clayey sandstones of eolian and fluvial origin, and the Botucatu Formation, formed by eolian sands deposited in arid conditions between the Permo-Eo-Triassic discordance and the basaltic lavas of the Serra Geral Formation. The sandstones of the Pirambóia Formation present clays that involve the clasts and cementation of calcite, gypsum, iron oxide/hydroxide and silica at the time of deposition. Calcite occurs also as diagenetic phase. The occurrence of autigenic pyrite is located and associated with the presence of oils. Its genesis is linked to hydrocarbon migration which is preceded by reducing sulfidric acid solutions (Caetano & Tai 2003). The Pirambóia formation is superimposed on the Rio do Rastro Formation. It consists of light gray friable thin and silty sandstones in a layer of about 20 meters thick. It has little topographic expression and its friable sandstones can form cavities in contact with the Botucatu Formation forming small caves (Camolezi et al. 2012). In addition it has more clay and is more fluvial in its origin in relation to the Botucatu environment which is essentially desert (Meng et al 1997a).

Higher Ca values found in the GAS in relation to the SGAS indicate the dissolution of diagenetic calcite that fills the pores of the sandstones of the Botucatu formation. Waters richer in total dissolved solids and sodium indicate a mixture of GAS with underlying aquifers, including pré-GAS (Gastmans et al 2010). The same conclusion occurs in Filho et al. (2006) where the high levels of anions and cations come from underlying aquifers to the SGAS.

Among the deepest stratigraphic units (Pre-GAS) that contain high salinity one can mention the Irati Formation and the Rio Bonito Formation. The Irati Formation belongs to Gondwana I Sequence and is divided in two members: Taquaral e Assistência. Taquaral Member is composed of non bituminous dark gray clay beds with thin layers of sandstone and mudstone. The Assistência Member has bituminous black mudstones beds. In some cases it occurs interbedded with carbonate layers (dolomitic marl) and thin lenses of nodular flint and evaporites

(gypsite and anhydrite) covered by siltite and shale. It also contains carbonates (dolomites interbedded with sandstones at the base) and bituminous shale and mudstone, with or without interbedded carbonates, sulfate and halite in the sequence. The gypsum is the source of sulfate, while halite is the source of sodium (Teixeira & Viero 2017).

The Rio Bonito Formation also belongs to Gondwana I Sequence. Its history is linked to the Carboniferous subsidence which was followed by deposition of the Aquidauana-Itararé units that are recorded as greater than 1500 meters in thickness. Overlapping the Itararé group, there are sandstones, siltstones and layers of coal from the Rio Bonito Formation. The deposition of the Itararé Group and the Rio Bonito Formation was initially influenced initially by the subsidence phase attributed to the overload of the continental glaciers followed by the weight of the sediments deposited during the subsequent transgressive-regressive cycle. In Rio Grande do Sul, the Rio Bonito Formation is closely associated with the Palermo Formation (Milani et al. 2007).

The tectonic of the Paraná Basin has been the subject of many studies aimed mainly at prospecting for hydrocarbons, using remote sensing and geophysical techniques and structural geology (Asmus, 1975; Soares, 1982; Soares, 2008; Strieder *et al.* 2015). Magnetic and relief lineaments are important as they have a direct relationship with the migration of fluids within an aquifer. Larger structures are related to regional flow cells with deep or intermediate structures responsible for large volumes of migration. The same authors point to the fault zones of Lancinha, Guaxupé and Jacutinga (NE direction) and the Rio Piquiri and Cândido de Abreu lines (NW direction) in the south of the state of Santa Catarina and north of RS as an example of this situation.

The clearest influence of GAS and pre-GAS on SGAS occurs in wells where the values of total dissolved solids range from 1000 to 2000 mg/L, with levels of chloride and sulfate higher than bicarbonate and predominance of sodium over calcium (Filho *et al.* 2006). When the salinity of the GAS and the SGAS are the same there is a hydraulic connection between these two aquifers, with a vertical extension of 400-500 meters, which allow the ascension of aquifer waters under the SGAS, containing mineralized waters, originating from mixture (Scheibe and Hirata 2008).

In the Paraná Basin potentiometric levels have a key role in the rise of saline waters from GAS and Pre-GAS to SGAS. Zones with higher GAS potentiometry are

the most suitable for upward recharge and mixtures with the SGAS. Traditionally interpolation techniques are used to estimate parameters which have the advantage of estimating information in non-sampled areas. There are many ways to do it. In the past, most interpolation ways to deal with geographic variations for same parameters were non-geostatistical methods (square of distances, moving average, etc.) and sometimes geostatistics (kriging and simulation). More and more studies are using geostatistical methods, especially simulation because it gives a more realistic visualization of the phenomena. Kriging and simulation rely on a variographic model to estimate spatial continuity between samples in order to determine preferential structures of water percolation.

The purpose of using geostatistics is to reconstruct and understand a phenomenon based on the values observed in a limited number of points. Simulation maps are a good example of interpolation that creates a good visualization of the phenomena because it creates interpolated points from the original samples. To evaluate the behavior of the sodium variable in the SASG the geostatistical simulation method known as Turning Bands was carried out.

The simulation method provides an innovative and modern view of hydrogeological studies in Brazil and worldwide. SGAS in Rio Grande do Sul State has no geostatistical work of this nature. There are only works based on EAD techniques, hydrochemistry and principal components analyses (Freitas & Roisenberg 2017; Scheibe 2006; Teixeira & Viero, 2017). Stochastic simulation was the solution found by geostatistical professionals to reproduce first and second order statistics of natural phenomena (histogram and variogram) avoiding kriging smoothing in addition to allowing the analysis of uncertainties. Stochastic simulation is the solution adopted to model the uncertainty associated with the estimate, since the kriging variance was recognized only as an index of spatial configuration of the neighboring points and tends to ignore extreme values, which are really important. (Yamamoto & Landim 2013). The models of stochastic simulation essentially aim to reproduce images of reality, the variability of the sample set and the spatial continuity, which is represented by the variograms (Soares 2006).

The simulation reproduces the dispersion of the histograms and variograms in a slightly different way for each execution. Thus with 50 simulations it gives 50 different images of the phenomena. Histograms and variograms are reproduced in each realization. This reproduction is known in Geostatistics as global precision

(Yamamoto & Landim 2013). A set of achievements provides an imprecise idea about the phenomenon itself, but its uncertainty is calculated by the ergotic variations of the simulations.

Regarding the simulation by turning bands the idea is to derive a value from a distribution based on the theory associated with the multigaussian random functions. The conditional distribution of local accumulated frequency is estimated using simple kriging which defines the mean and variance of the distribution. As distributions rarely follow a uniform distribution it is necessary to transform the original data into normal space. The post-processing stage of the simulation, by means of the average and standard deviation of the simulated values, results in a great uncertainty regarding the zones.

The study area covers the entire extension of the Serra Geral Aquifer System (SGAS) in Rio Grande do Sul State (Fig. 1). The objective of this study is to identify how SGAS communicates with other aquifers by means of simulated average mean maps, simulated variance maps and real concentration values interpolated by the analysis. An analysis of the relationship between the media map and regional structures will be made in later works.

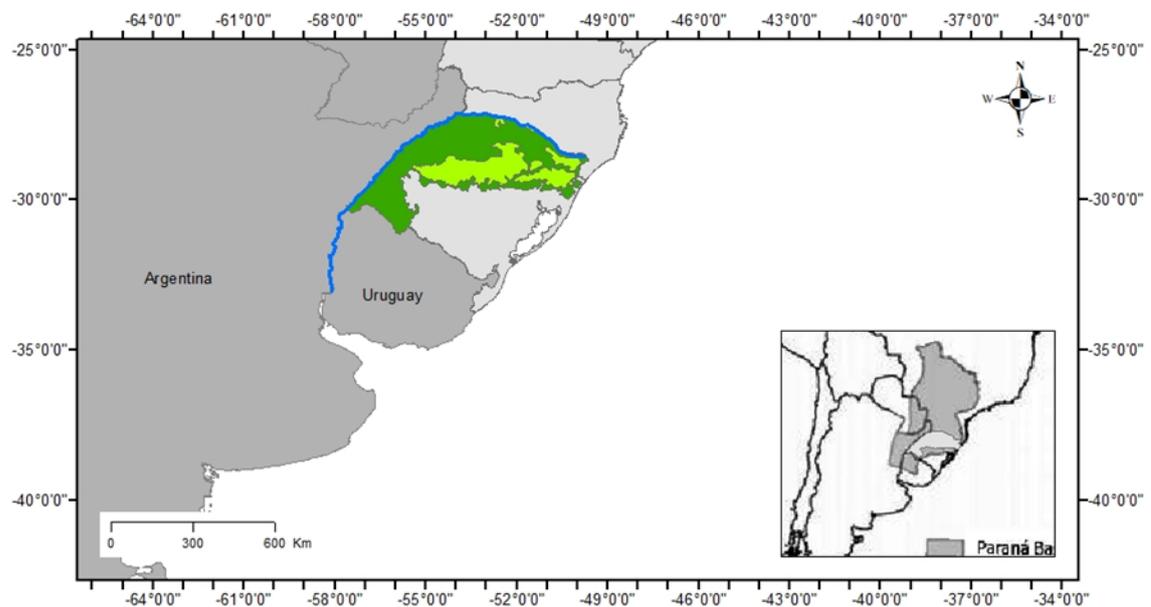


Figure 1. Study area of the SGAS in Rio Grande do Sul State. A) Basic volcanic rocks is in dark green. Acidic volcanic rocks is in light green. Uruguai river (in blue color) is in the frontier of Brazil with Argentina and Uruguay (modified from Scherer, 2002; Janasi et al., 2011) B) Location of the Paraná Basin (modified from Reis, 2013).

2 METHODOLOGY

2.1 Area division

The idea of dividing aquifers into tectonic domains is not a new (Machado 2006; Lisboa 1996). Machado (2006) used criterion of major faults to define four tectonic compartments in GAS. The tectonic lineaments named Sistema de Falhas Jaguari/Mata, Sistema de Falhas Torres/Posadas e Sistema de Falhas Dorsal de Ganguçu are the limits of the aquifer compartments. According to Freitas et al. (2016) these faults represent old areas of weaknesses in the crystalline basement that were reactivated during the evolutionary process of the Paraná basin that affected all sequences on this basin.

In this study, the SGAS was divided into 5 zones with the main fault systems located close to the center of each one (Fig. 2). This criterion was adopted because that large structures are considered as the main groundwater flow pathways that promote the upward recharge of the SGAS. Cluster analyzes reinforced the choice of this division.

Each of the zones were considered to be a stationary domain that has constant mean value and the correlations are invariant to translations being reflected in the form of a well-structured variogram.

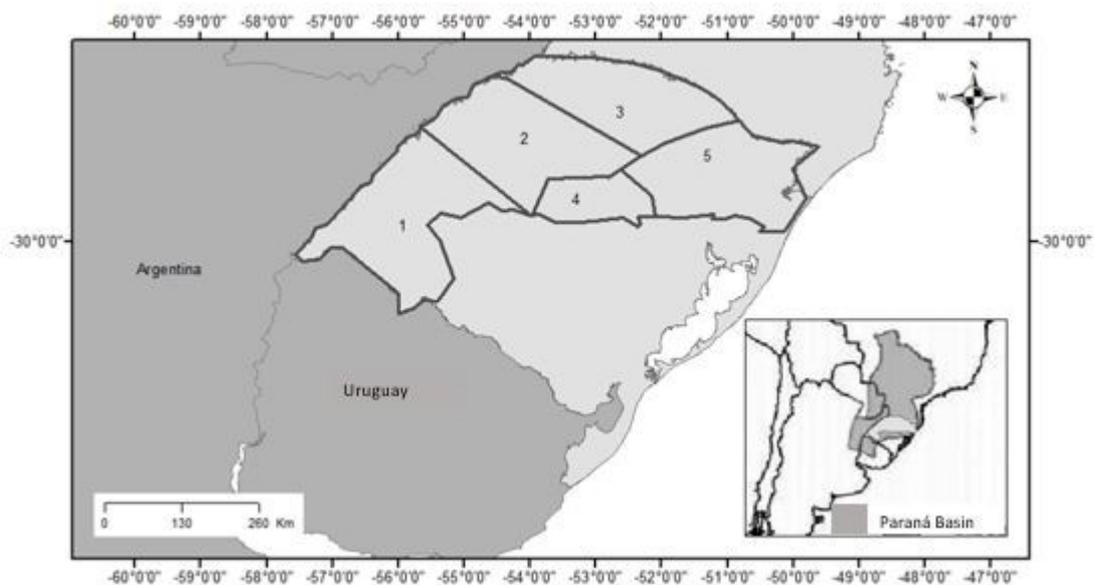


Figure 2 - A) Area division with the 5 zones in SASG in Rio Grande do Sul State; B) Paraná Basin (dark grey) within SASG (light grey) inside Rio Grande do Sul located in Brazil.

2.2 Statistical Analyses

Statistical analysis corresponds to data assessment and involves understanding as well as organizing the set. The ultimate goal of evaluating exploratory data is to better understand the phenomenon and thereby improve the quality of the numerical model. Part of this stage is the recognition of data errors, understanding the interrelationships between the variables of interest, recognizing any systematic spatial variation of variables, identifying and understanding the extreme values (outliers), etc.

Statistical analyzes were carried out for all the zones mentioned above. Table 1 presents the results of the basic statistics of the samples by zone.

As the study area is large, there is often a mixture of populations within stationary domains or only anomalous values, the vast majority of which are only a few points separated from the statistical population, but randomly distributed in space. These points are commonly called extreme values or “outliers”. According to Barnett and Lewis (1984), an outlier in a data set can be defined as a value (or subset of values) that appears to be inconsistent in relation to the rest of the observed values. Several ways have been studied regarding for how to treat these values as it is not correct to remove these values from the distribution without any analysis, as they may be the most interesting part of the data (Kitanidis 1997). In this study, the extreme values were maintained, because they represent the anomalies that are being sought, where there is an upward recharge, i.e it is precisely these high values that help to identify the anomalous salinity zones. When the results of the simulations are presented, the regions with great variability will be associated with the regions where these values appeared.

2.3 Spatial Analyses

Geostatistical methods incorporate the characteristics of the phenomenon to be characterized in different ways, the main tool being the analysis of spatial continuity, often called only variographic analysis (although there are other tools besides the variogram).

Among all the variables available in the database, it was chosen to perform an analysis of spatial analyses of sodium, calcium, alkalinity and electric conductivity

due to their importance in relation to the characterization of the aquifer salinity. In order to change the form of frequency distribution an analysis of spatial continuity was performed with the original data and with the normalized data where exists some alteration in mean and variance of the original distribution exists in order to change the form of frequency distribution. A transformed Gaussian is based on the theoretical Gaussian curve and is an important step for performing stochastic simulations (Yamamoto 2009).

In this study, it is noticed that the 4 variables have anisotropic behavior, and therefore there is a difference in the spatial continuity of the phenomenon in different directions. This clearly shows that there is a control mechanism in the spatial distribution of the variables, which is probably a structural control. The graphs of the variograms shown in figure 4 show variability as a function of distance, very close samples must be similar and as the distance increases, they start to become more different from each other. As the sample variograms are made with normalized sample data, the variogram sill is equal to one. The sill and the nugget effect are also normalized. Therefore, the measure of sample variance plus the nugget effect must add up to one. The sample variance is distributed in the two structures of the phenomenon. Each structure has its intrinsic variability.

The variograms are nothing more than the plot of the separation between n pairs of points and the square difference of n pairs. This is called a "raw" variogram. When this "raw" variogram is performed, the separation axis of the n pairs of points is divided into intervals as for histograms. Increasing this range decreases the variogram fluctuation, but it can have a smoothing effect on the curve. The sill level is reached when there is no longer an increase in variance between samples, and it is the maximum variogram distance.

Then a model is chosen that best fits the "raw" variogram. The ideal is that the chosen model is well adjusted and close to the origin because the reliability of the variogram over long distances decreases (Kitanidis 1997). The curve level is reached when there is no longer an increase in variance between samples, and it is the maximum distance of the variogram (Yamamoto & Landim 2015).

For this study, it was decided to perform the sodium, calcium, alkalinity and electrical conductivity variography due to the importance of these variables and the quality of the variography, since sulfate, chlorine, magnesium and pH have low spatial continuity over short and long distances.

The sample data of sodium data was normalized. All transformations alter the mean and variance of the original distribution, but the transformation aims to change the form of frequency distribution. The Gaussian transform is based on the theoretical Gaussian curve. Only data with normal or negative distribution do not need be normalized. (Yamamoto 2009).

After the normalization of the sample data, the next step consists of analyzing their spatial continuity using variograms

The variograms were made based on these normalized data and these variograms were later used in the Turning Band simulation, which requires transformed data. The variograms were adjusted by the spherical model, which has a better fit over short distances. Variograms must be adjusted in the direction of maximum and minimum spatial continuity. Two structures was used because the first structure has better correlation at short distances and the second structure a better correlation in long distances.

Variographic maps help to determine the preferred directions and which variography intervals should be tested. Variographic maps indicate the direction of maximum and minimum continuity and help to build more reliable variograms.

In this study, the N0, N23, N45, N67, N90, N113, N135 and N157 directions were tested and the tolerance angle was 22 between them. For this reason, part of the scanning angle in one direction overlaps with the scanning angle in the other direction.

2.4 Simulations

Simulations are equiprobable realizations of the phenomenon that are representations of reality which are possible based on the available sampling. Each scenario is different from the others, but it has the characteristics of the studied natural phenomenon. For this study, 50 simulations were performed for the sodium in each of the zones. This number was considered to be ideal and representative of the phenomena. First the space to be simulated was discretized within the study polygon in different zones, with a cell size of 500 by 500 meters. The simulations are performed in multigaussian space and therefore have their values are normalized. Subsequently these simulated values are retro-transformed to the original space, which is the same as the sample data. This same procedure was carried out in

several studies. The simulations were performed using the algorithm known as turning bands. The principle of the method is to add a large number of defined independent simulations defined in the scan line of the plane. The value to be simulated at point x (x, y) in a plane, is the sum of the values obtained from the projection from point x to the simulated line in a dimension, according to the “equation” (1). (Marques 2011)

$$(1) Z(x) = 1/\sqrt{N} \sum Z_{1,n}(x_{1,n})$$

Where:

$Z^*(x)$: simulated value at a point x ;

N : number of lines that divide the plane;

$Z_{1,n}$: value simulated at location $x_{1,n}$.

$x_{1,n}$: location of the x_1 projection on the last line that divides the plane

Then the simulations mean of the means (E-Type) and simulations variance of the means (conditional variance) analyses were performed with the 50 simulations. Using E-Type and conditional variance of the simulations is much more productive in terms of phenomena representation because there are 50 different scenarios in each of the 50 simulations and making the average and variance of these 50 simulations is a way to have an integrated view of these 50 simulations

The simulations were performed conditionally, so that they were performed not only as covariance models (variogram), but also using the samples as a basis. For that a search radius was used in the conditional part of 60000 meters for zone 1 and 50000 meters for the other zones. As there are few samples in some areas of each zone it was necessary to have a high value for the entire area to be filled.

3 RESULTS AND DISCUSSION

The area division was based on structural criteria, but it was also based on statistical and geostatistical criteria, such as variance, mean and variography. It is clear that there is heterogeneity of the SGAS based mainly on sedimentary layers that vary compositionally but mainly because of the tectonics which acts and causes

na uplift of blocks by means of faults of different orientation that cross all the hydrostratigraphic units causing differential erosion and kind of water flow in each zone.

From observing table 1 it is quite apparent that each zone has a very heterogeneous statistical distribution. This heterogeneous distribution is reflected in the domains in the form of variances and distinct means.

From analyzing figures 3 and 4 the sodium spatial continuity behavior varies in each zone. In zone 1 the variographic map (Fig.3a) indicates the direction N45E as the main direction which is also indicated by the variogram (Fig.3b) as the direction of maximum continuity over short and long distances. In zone 2 the variographic map (Fig.3c) indicates the direction N160 while the variogram (Fig.3d) has NS as the direction of maximum continuity over short and long distances. Zone 3 indicates the direction N113 (Fig.3e) which is also indicated by the variogram (Fig.3f) as the direction of maximum continuity over short and long distances. In zone 4 the variographic map (Fig.4a) indicates the direction N135 as the main direction indicated by the variogram (Fig.4b) as the direction of maximum continuity over short distances. In zone 5 the variographic map (Fig.4c) indicates the direction N100 while the variogram (Fig.4d) indicates N90 as the direction of maximum continuity over short and long distances.

Table 1 - Hydrochemical statistical table for SASG in Rio Grande do Sul for zones 1,2,3,4 and 5

Zone		Alkalinity (mg/L)	Ca (mg/L)	Na (mg/L)	SO ₄ (mg/L)	elec.con d.µS/cm	pH	Cl (mg/L)	Mg (mg/L)
1	mean	106.1	20.9	26.3	14.2	258.5	6.9	13.9	7.5
	variance	6619.6	324.6	1465.5	1217.8	34429.6	0.7	419.2	80.8
	m.value	402.3	92.0	291.0	399.0	1448.0	9.7	145.0	77.0
	s.quartile	157.0	31.0	28.0	12.0	349.0	7.5	16.7	9.0
	l.quartile	32.0	5.1	5.0	1.2	125.6	6.5	2.9	2.0
	median	97.7	17.5	11.3	3.7	227.0	6.9	7.5	5.0
2	mean	104.3	13.0	29.9	9.8	208.4	7.5	6.0	5.9
	variance	6335.4	131.0	1464.0	1109.0	28713.9	1.0	46.5	13.5
	M.value	642.4	102.0	219.0	401.0	1900.7	10.6	48.8	23.9
	s.quartile	132.0	18.1	38.6	6580.0	263.8	8.1	7.8	5.8
	l.quartile	52.3	4.6	5.0	1.1	110.1	6.9	2.0	1.2
	median	86.0	11.0	13.0	2.4	166.0	7.4	4.0	4.0
3	mean	91.9	15.6	33.0	24.4	223.6	7.8	8.4	4.1
	variance	3021.0	460.6	2800.0	871.7	86124.0	1.0	1681.0	13.2
	m.value	575.0	369.0	771.0	937.0	4678.0	10.7	901.0	21.8
	s.quartile	113.5	20.0	44.0	7.2	235.0	8.4	6.0	21.8
	l.quartile	60.0	6.0	6.7	1.2	126.7	7.1	2.0	1.1
	median	87.0	12.4	16.0	3.2	180.2	7.6	3.0	3.2
4	mean	94.3	16.5	36.0	23.3	252.0	7.3	14.6	3.5
	variance	106462.0	108.3	6755.0	8851.0	106462.0	0.7	2834.5	7.9
	m.value	227.0	78.0	832.0	992.0	4208.0	9.4	678.0	16.3
	s.quartile	122.3	23.0	26.0	6.5	264.0	7.8	8.0	4.8
	l.quartile	60.0	9.0	8.0	1.6	134.2	6.8	2.0	1.6
	median	87.5	15.0	13.5	3.0	191.7	7.2	3.7	3.0
5	mean	88.4	20.5	20.5	14.7	217.8	7.2	8.9	5.6
	variance	2188.4	211.4	995.8	3187.6	32113.0	0.5	378.5	23.4
	m.value	418.0	182.0	470.0	779.0	2450.0	11.9	364.0	54.0
	s.quartile	114.0	26.2	21.0	6.5	256.5	7.6	9.1	8.0
	l.quartile	57.0	12.0	8.0	1.3	130.2	6.7	2.7	2.2
	median	81.3	17.2	12.0	3.0	179.8	7.1	5.0	4.1

In figures 3 and 4 the blue color indicates high correlation and is generally restricted to the parts close to the origin. As the distance increases, the tendency is for lower correlation values to occur (red color). There is the axis of maximum spatial continuity and the axis of minimum spatial continuity. Both are 90 degree away from each other. Variographic maps help to determine the preferred directions as well as which variography intervals should be tested.

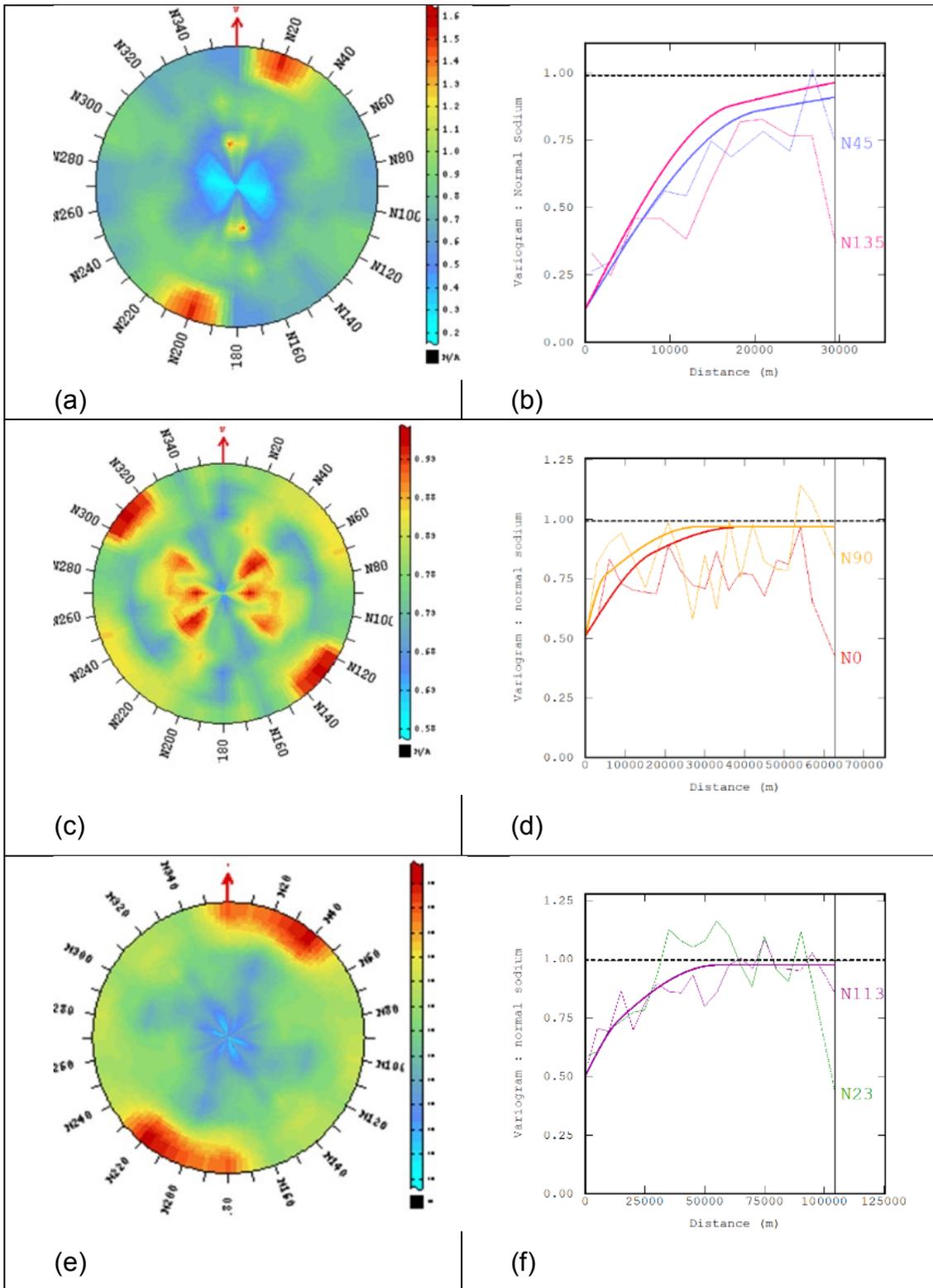


Fig 3 - (a,b) Variographic map and variogram for sodium in zone 1; (c,d) Variographic map and variogram for sodium in zone 2; (e,f) Variographic map and variogram for sodium in zone 3.

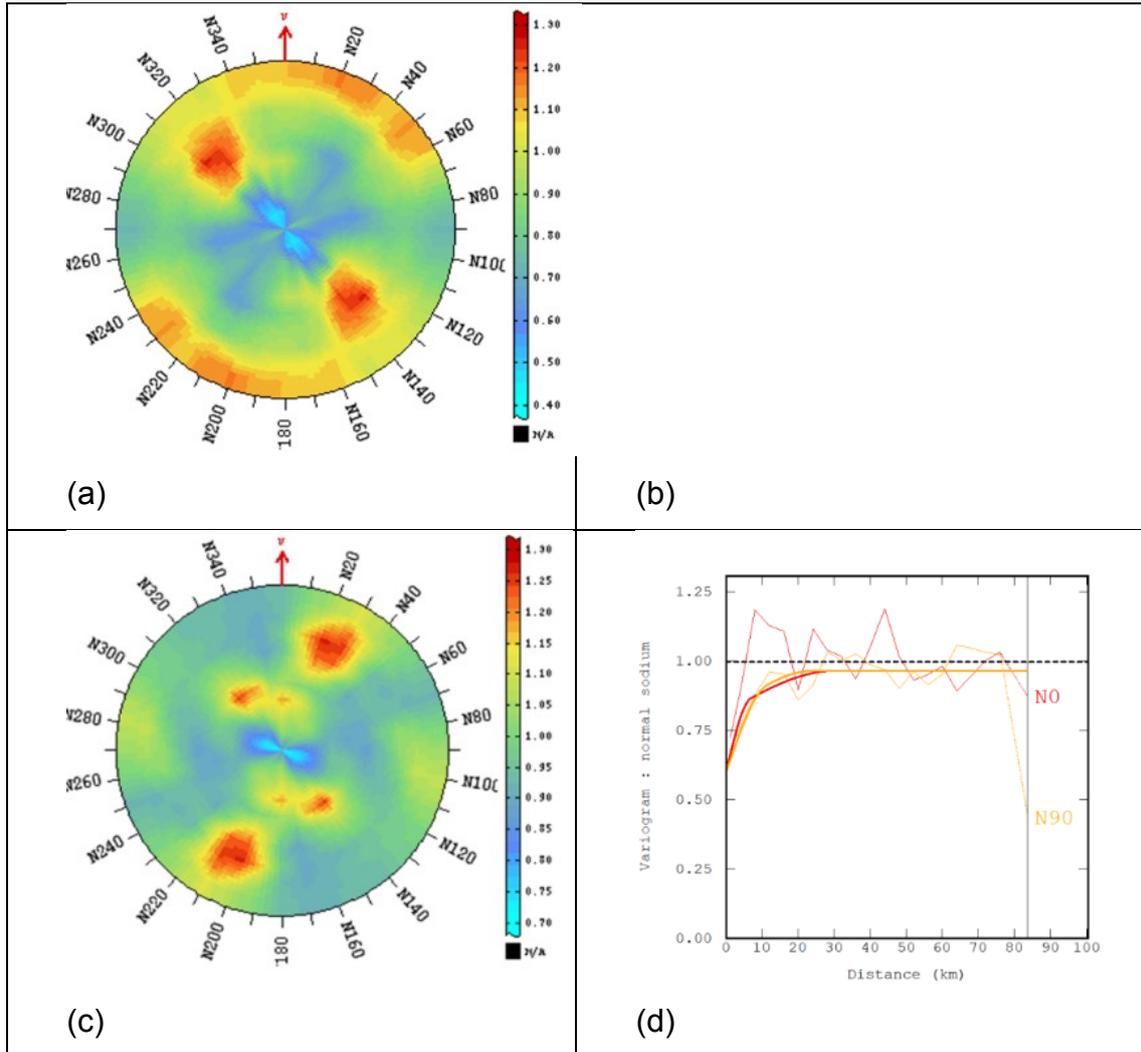


Fig.4 - (a,b)Variographic map and variogram for sodium in zone 4; (c,d) Variographic map and variogram for the sodium in zone 5(c,d).

By analyzing the table of variograms (Table 2), it was noticed that alkalinity varies in the 5 zones, but the preferential direction N113 occurs in 3. Electrical Conductivity also has direction of N113 in one of the zones (zone 5). Sodium shows the greatest variation in the variogram directions compared to other variables analyzed and has preferential direction of N45 in zone 1; N113 in zone 3; N90 in zone 5; N0 zone 2 and N135 in zone 4. Sodium, unlike calcium and alkalinity, is controlled by more regional faults and therefore it is expected that the direction of these faults in each zone will vary. The sodium range was greater in zone 1 and zone 3 (70000 and 55000 in the axes with greater spatial continuity, respectively). After this distance, there is no more spatial continuity between the samples. The same is seen for the other variables. Calcium and alkalinity are preferably controlled by minor

faults disseminated in the Serra Geral, but eventually, alkalinity may also be associated with sodium, especially at the highest values. Electrical Conductivity, like sodium, is also affected by highly pervasive faults that penetrate multiple sedimentary layers and Serra Geral. The nugget effect of zones 5 and 3 are quite high and are explained by the wide variability and heterogeneity of the system under study, since the criterion for dividing the area by means of large structures is not 100% correct. However in zones 1, 2 and 4 we see that the nugget effect is less. According to Karami *et al* (2018) in the case where the variograms have a nugget effect between 0, 25 and 0.75, there is moderate spatial continuity. Therefore, all SASG variograms in Rio Grande do Sul have moderate spatial continuity.

Table 2 - Variography of the 5 zones in SASG in Rio Grande do Sul. Conduc. is na abbreviation for electrical conductivity and alk. is na abbreviation for alkalinity

Zone	Variable	Major continuity direction	n.effect	1°structure of the variogram			2°structure of the variogram		
				sill	Minor continuity direction	Major continuity direction	sill	Minor continuity direction	Major continuity direction
1	conduc.	N90	0.35	0.29	23409	27864	0.32	33600	38000
	alk.	N144	0.33	0.35	6000	15979	0.31	33600	40000
	sodium	N45	0.1	0.7	12000	14000	0.3	50600	70000
	calcium	N0	0.45	0.27	8400	8400	0.27	15600	25600
2	alk.	N113	0.36	0.31	6000	15000	0.31	10000	28800
	sodium	N0	0.5	0.2	7828	26094	0.27	28384	39422
	calcium	N45	0.5	0.25	7200	10000	0.25	28800	40000
	conduc.	N135	0.35	0.22	3500	9000	0.43	9000	45000
3	conduc.	N45	0.41	0.29	50000	50000	0.29	40000	40000
	alk.	N113	0.49	0.15	29760	62000	0.32	29194	50685
	sodium	N113	0.5	0.1	14652	14652	0.37	55268	55268
	calcium	N0	0.47	0.31	6138	12985	0.2	26695	26695
4	alk.	N67	0.25	0.37	13000	13000	0.37	45000	45000
	sodium	N135	0.44	0.27	40000	30000	0.27	10000	35000
	calcium	N45	0.2	0.33	20000	20492	0.43	8000	16515
	conduc.	N0	0.34	0.43	17933	53800	0.28	2710000	112145
5	conduc.	N113	0.7	0.1	15000	4222	0.2	33579	43173
	alk.	N113	0.5	0.22553	22553	22553	0.245	19467	19467
	sodium	N90	0.6	0.21	9111	6833	0.15	20000	30000
	calcium	N113	0.6	0.22	6343	4757	0.15	20000	30000

For this study, 50 simulations were performed for the 4 variables in each of the zones. As the number of simulations to be used depends on its use and the structure

of the phenomenon used, it is necessary to verify whether this number is adequate to map the uncertainty of the phenomenon. Each simulation has reproduced its own generated variogram according to how the simulation proceeds. In the case of 50 simulations, 50 variograms are generated, which will later be compared with the normalized variogram that generated these same simulations.

Before interpreting the results, it is necessary to validate them, to ensure that our numerical models (simulations), have the characteristics of the phenomenon. For this, we validate the first and second statistical order are validated (histogram and spatial continuity model).

Another way to validate the simulation is by comparing the histograms of the phenomenon (Fig. 5a and Fig.5b) (obtained through the histogram of the sample population) with the histograms generated by the simulation (Fig.6a and Fig.6b). The two histograms should be similar, with the frequency of the blocks more or less identical. According to Folle (2002) perfect reproduction is rarely achieved (even undesirable) due to the existence of so-called ergotic fluctuations. The more data there is, the smaller this fluctuation will be.

Simulation number 20 was chosen to estimate sodium values for each of the zones. Each of the 50 simulations has similar but never identical images. Each value within the 500 by 500 meter cell is calculated based on the neighbors according to the law of probabilities in which the values were assumed. The simulation showed good agreement between the 5 zones, which is not fully verified in the averages map. The simulations are performed in multigaussian space and, therefore, have their values were normalized.

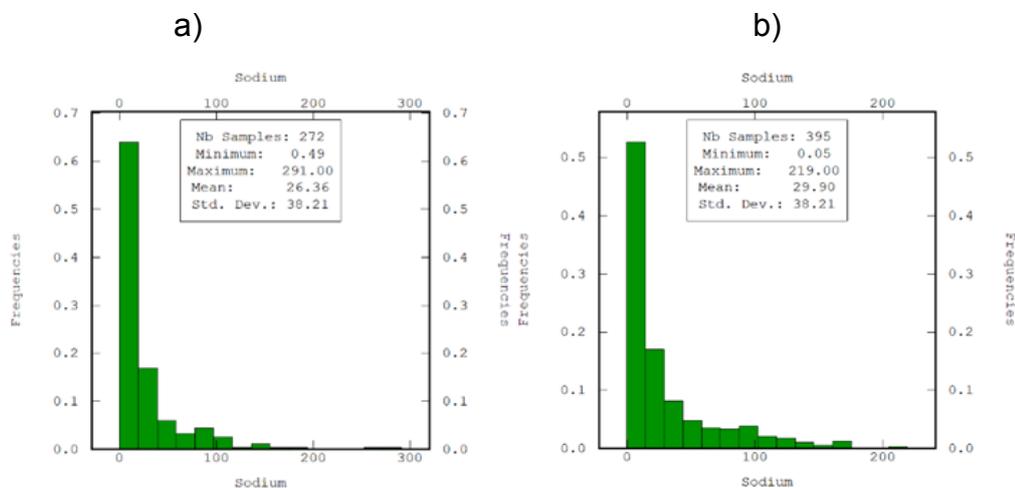


Fig.5 - a) Histogram of the sodium sample data in zones 1; b) Histogram of the sodium sample data in zone 2.

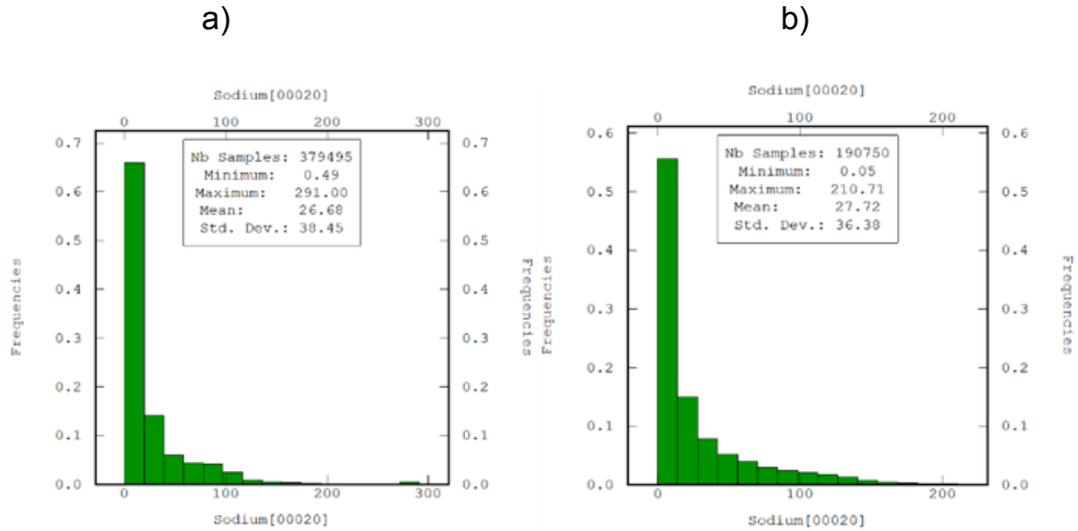


Fig.6 - a) Sodium histograms for sample data after reverse transformation in zone 1. b) Sodium histogram for sample data after transformations in zone 2. Simulation number 20 was chosen for demonstration in each zone.

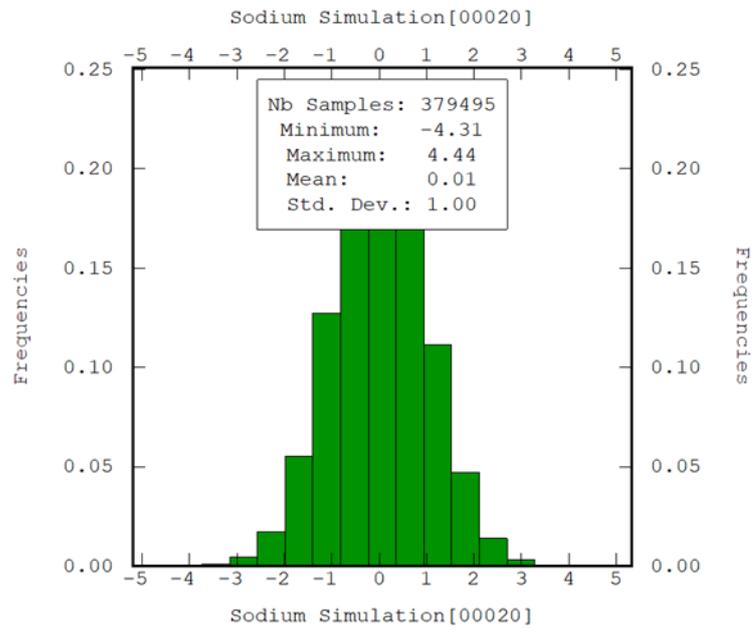


Fig.7 - Histogram of the normalized simulation for zone 1. Simulation number 20 was chosen for demonstration

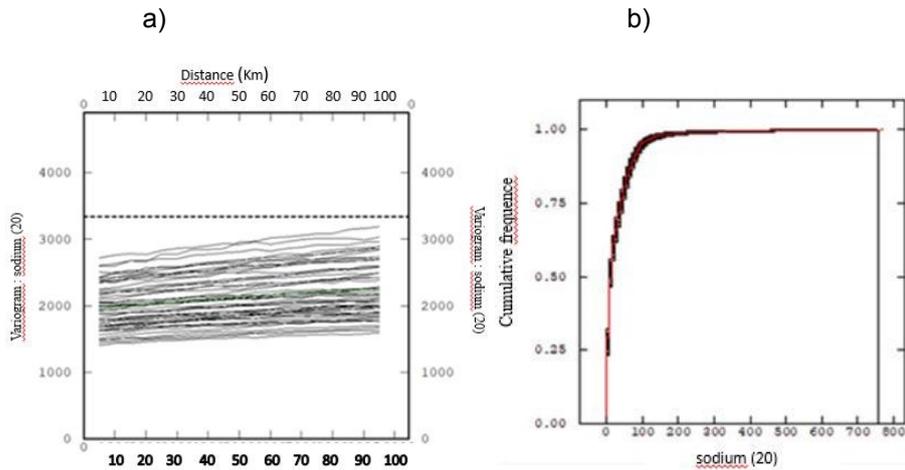


Fig.8 - a) Modeled variogram and ergotic fluctuations of the simulations for the direction of maximum continuity; b) Cumulative frequency of the sodium variable in zone 3. The variogram is at the center of the oscillations, so the simulation is well validated.

The histograms of zone 1 and 2 have a more homogeneous distribution in the classes. There are high values, but the transition between high and low values is smoother compared to the high and low values of zones 3,4 and 5.

The histograms of fig.6a and fig.6b indicate that the simulations were well validated because the average of the sample data before the simulation and post simulation are close, with differences below 10% for zone 1 and slightly above 10% in zone 2, and the format of the classes is also very close.

It is possible to see in the histogram in figure 7 the values of the sample data transformed into a Gaussian distribution and the simulated values with Gaussian distribution, before being redesigned to simulated real values. Normalization ensures that the data have an average of 0 and variance of 1. The histogram of the simulated values in zone 1 differs slightly from the simulation map in zone 1 because at the moment the image was cut in the arcgis, the values that were outside the area of the polygon of zone 1 were removed and there was a small decrease in the values.

The Fig.8a shows the oscillations of the 50 simulations for zone 1. The high dispersion of the variograms of the retro-transformed data for the sample mesh space in relation to the experimental variogram modeled for the simulation. The width of the range of oscillations is due to the great heterogeneity of the analyzed area and its large size. The oscillation of the simulation variograms was narrower, due to the effect of data normalization.

After the validation of the results it is possible to visualize the spatial distribution of the variables. In the sodium simulation maps it is possible to identify the anisotropy of the direction of greater spatial continuity of the standardized variograms modeled for sodium. The direction of the N-S bands in zone 2 and N45 in zone 1 and N135 in zone 4 can be clearly identified. These higher-value bands represent the neighborhoods of the samples with the highest values of the sample grid, which served to fill the space with new simulated samples.

When comparing the potentiometric map (Fig.9) with the simulation maps (Fig.10 and Fig.11) there is a direct correlation between the highest values of the E-Type and the highest values of the conditional variance of the simulation with the low potential curves of the GAS and catchment height (m) at SGAS. Thus high levels of the sodium sample points are also strongly related to low potentiometric values. Northwest and NE faults mainly influence to decrease potentiometric values and increase SGAS salinization. The Alegrete Fault System and the lineament Rio das Antas-SC are good examples.

In figure 9 the values of the height (m) of the SGAS wells that go up to 300 meters are the areas that are suitable for the rise of saline waters. Some of the major faults coincide with low potentiometric heights (m) and these are the locations where there is the greatest uncertainty regarding the E-Type simulated values. Zone 2 also has some uncertainty in E-Type values close to Rio Uruguai River. In zone 5 only the western and the extreme east portions have low potentiometric SGAS curves between -200 -300 m thus the highest conditional variance values are concentrated there.

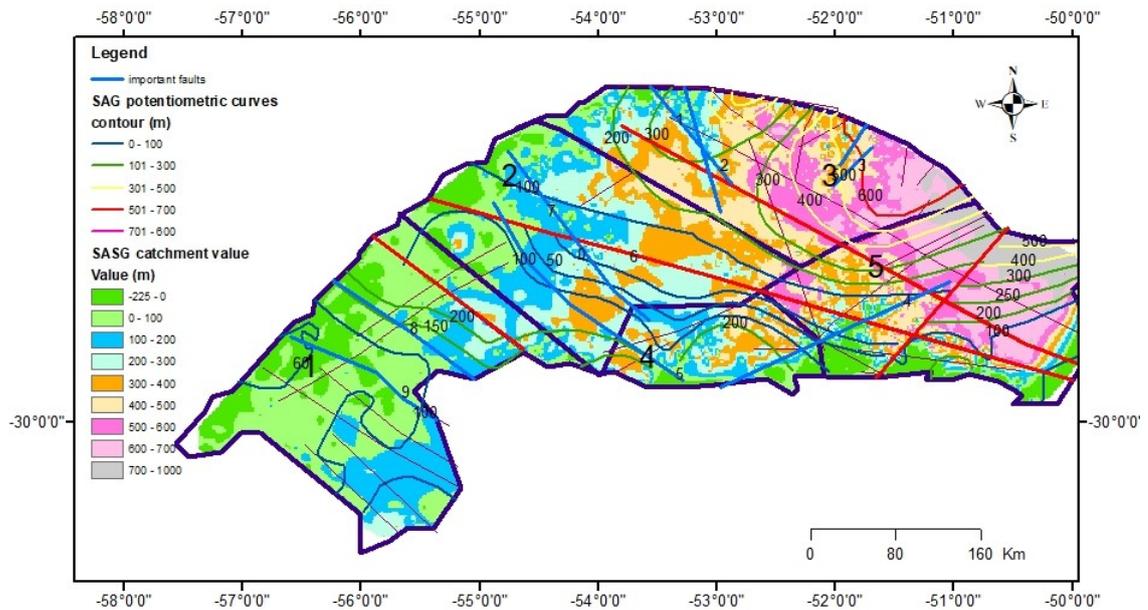


Fig. 9 - GAS Potentiometric values and well catchment height (m) of SGAS in Rio Grande do Sul State. Blue lines represent important faults that contribute to low potentiometric GAS and SGAS values. Fault 1(Gravimetric Fault), fault 2(Lineamento Rio das Antas-Sc, Falha 3 (unknown name), Fault 4(Lineamento Rio das Antas), Fault 5(Sistema de Falha São Miguel das Missões), Fault 6(Sistema de Falhas Terra de Areia/Posadas), Fault 7(Sistema de Falhas Santo Ângelo), Fault 8(Sistema de Falha São Francisco de Assis) and Fault 9 (Sistema de Falha Alegrete).

As each simulation is a possible representation of reality, evaluating only a few scenarios may not be very relevant or representative for this study. In this way the E-Type and conditional variance in each cell were generated. As each cell has 50 possible values for each simulation the central tendency is calculated. In regions of great uncertainty there should be a wide spread of values around the average and indicate upward recharge and salinization.

Sodium is very representative of upward recharge since deeper stratigraphic units such as Irati and Rio Bonito are richer. In Karami *et al* (2018) the regions with high conditional variance of the simulation is where there is the greatest uncertainty in E-Type values regarding the probability of occurrence of them. The major uncertainty is expected to coincide with the regional faults that cross each zone. SGAS potentiometric values below 200 should reflect areas with high fracture density. The E-Type of the 50 simulations for sodium in all zones (Fig.10) shows anisotropy. Zone 2 shows visible anisotropy in the N0 direction. Zone 3 has a salinity anomaly in the north of the area, close to the state of Santa Catarina and along a fault of N160 direction. Zone 1 has higher E-Type values around the municipality of Uruguaiana, while zone 4 has well-marked anomalies in the south of the area, where

there is probably also a high concentration of faults there. In zone 2, the anomaly is very present near the municipality of Santa Rosa. In the west of zone 5 an anomaly occurs because of an important fault (Lineamento Rio das Antas)

In the sodium conditional variance simulation map (fig. 11) there is a lot of similarity to the E-Type map. This means that the higher E-Type simulated values verified in all zones are not as reliable as lower values.

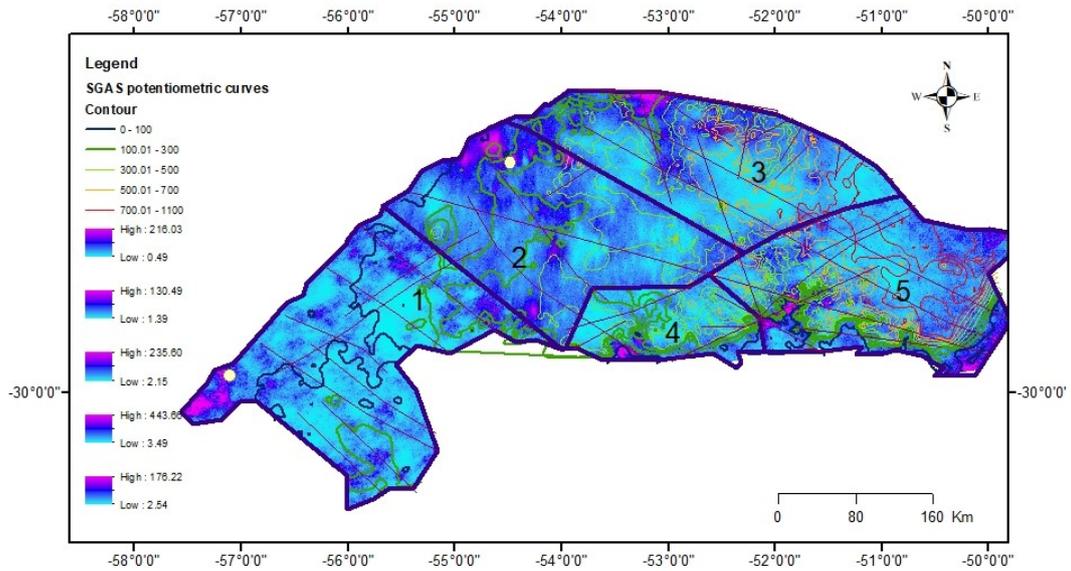


Fig. 10 - E-Type of sodium simulation for the state of RS with SGAS potentiometric curves (zones 1,2,3,4 and 5). Order of appearance for simulation legend from top to bottom (1,2,3,4,5). Uruguaiana (zone 1) and Santa Rosa (zone 2) are the orange circles

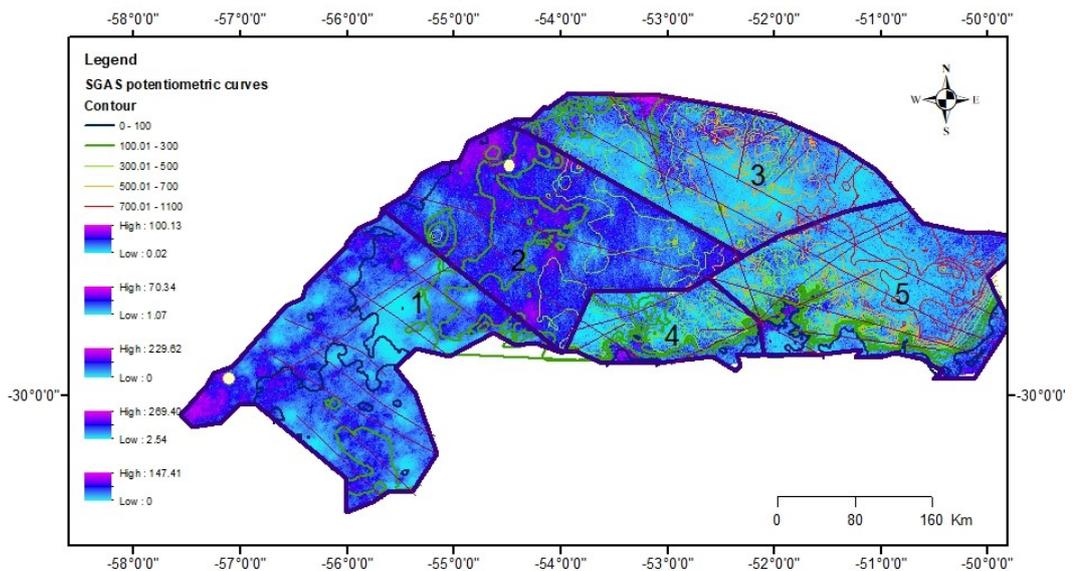


Fig. 11 - Conditional variance map of sodium simulation for the state of RS (zones 1,2,3,4 and 5). Order of appearance for simulation legend from top to bottom (1,2,3,4,5). Uruguaiana (zone 1) and Santa Rosa (zone 2) are the orange circles

4 CONCLUSIONS

All zones have a certain degree of anisotropy. All zones have high simulation average values in certain ranges, being characteristic of the zones that have higher fault density with upward recharge of hydro-stratigraphic units under the SGAS, such as the Guarani Aquifer System and the Irati and Rio Bonito. It is clear that the height (m) level of the well catchment in the SGAS and the potentiometry of the GAS are very important to define the preferred places for the rise of saline waters. The high sodium values in the simulation maps coincide with communication zones between the GAS and the SGAS, and it is hard to find salinized groundwater in zones where there is no connection between SGAS and GAS. Some of the major faults and their subsidiary faults assist in the communication between these aquifer systems and likely have influence on the potentiometry of these aquifers. In addition, there is a transition in the average values of 50 simulations between zones 3 and 5, while a transition between zones 4 and 5; and 2 and 3 is not continuous. This indicates that these zones have distinct geostatistical behavior. The simulations were all well validated and indicate that the turning bands simulation method is easier to handle and reproduces hydrogeological phenomena well. The variograms have a very sharp nugget effect. All zones, especially zones 3, 4 and 5, have a very high variability close to their origin, but do not lose their spatial correlation over long distances. Variograms were able to capture a good number of pairs in the main directions and are statistically representative. In general N45 directions are the most representative direction for sodium, and follow a pattern similar to that of the large NE faults that operate throughout the SGAS. The NW direction was observed only on zone 4 which is also important in the SGAS but does not appear to be as important as the NE structures for communication between aquifers. As the validations show a broadband, which shows a certain irregularity in the phenomenon. It can be inferred that large structures are not the only predominant ones for sodium high concentrations. Smaller structures are also important in this connection. Large faults directly interfere to reduce the potentiometry values of the SGAS. Zones 2, 3, 4 and 5 are consistent in terms of ascending ascension, because E-Type map and conditional variance map are similar on them. Zone 1 appears more erratic and zone 2 has a uniform high conditional variance because low potentiometric SGAS heights spread everywhere.

REFERENCES

- Arab, P.B., Perinotto, J.A.J. & Assine, M.L. 2009. Grupo Itararé (P-C da Bacia do Paraná) nas regiões de Limeira e Piracicaba-SP: contribuição ao estudo de litofácies. São Paulo, UNESP, *Geociências*, 28(4):501-521.
- Caetano-Chang, M.R. & Wu, F. F. 2003. Diagênese de arenitos da Formação Pirambóia no centro-leste paulista. *Geociências*, v. 22, p. 33-47.
- Folle, D. 2002. *Estudo Geoestatístico de sondagens SPT para geração de mapas auxiliares em obras de engenharia*. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais (PPGEM). Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre, 245 p.
- Frank, H.T., Boscato, M.E. & Formoso M.L.L. 2009. Review of the areal extent and the volume of the Serra Geral Formation, Paraná Basin, South America. *Pesquisas em Geociências*, 36 (1): 49-57.
- Freitas, M. & Roisenberg, A. 2016. Análise exploratória de dados de condutividade elétrica nas águas do sistema aquífero Serra Geral no Rio Grande do Sul e Santa Catarina. *Águas Subterrâneas*, 31(1): 1-17.
- Gambin F. 2003. *Aperfeiçoamento da estratégia de homogeneização de minérios utilizando simulação geoestatística*. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais (PPGEM). Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 111 p.
- Holz, M. & De Ros, L.F. 2000. Geologia do Rio Grande do Sul. Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS). 445 p.
- Lin, Y.P., Chen, Y.W., Chang, L.C., Yeh, M.S. & Huang, G.H. 2017. Groundwater Simulations and Uncertainty Analysis Using MODFLOW and Geostatistical Approach with Conditioning Multi-Aquifer Spatial Covariance. *Water*, 9(3):164
- Karami, S., Madani H., Katibeh, H. & Marj, A.F. 2018. Assesment and modeling of the groundwater hydrogeochemical quality parameters via geostatistical approaches. *Applied water Science*, 2018: 8-23
- Kitanidis, P.K. 1997. *Introduction to geostatistics: applications to hydrogeology*. Cambridge:University press.
- Koppe, V. 2005. *Análise de incerteza associada à determinação da velocidade de onda sônica em depósitos de carvão obtida por perfilagem geofísica*. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais (PPGEM). Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.
- Machado, J.L.F. 2006. *Compartimentação espacial e arcabouço hidroestratigráfico do sistema aquífero Guarani no Rio Grande do Sul*. Tese de doutoramento. Universidade do Vale do Rio dos Sinos, UNISINOS. São Leopoldo. 254 p.

- Marcotte, D. 2016. Spatial turning bands simulation of anisotropic non-linear models of coregionalization with symmetric cross-variances. *Computers and Geosciences*, 89: 232-238.
- Marques, D.M. 2010. *Desenvolvimento de um algoritmo para simular a variabilidade do minério em pilhas de homogeneização*. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais (PPGEM). Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre. 130 p.
- Milani, E.J., Melo, J.H.G., Souza, P.A., Fernandes, L.A. & França, A.B. 2007. Bacia do Paraná. *Revista Brasileira de Geociências*, 15(2): 265-287.
- Paravarzan, S., Emery, X. & Madani, N. 2015. Comparing sequential Gaussian and turning bands algorithms for cosimulating grades in multi-element deposits. *Comptes Rendus Geoscience*, 347:84-93.
- Rostirolla, S.P., Assine, M.L., Fernandes, L.A. & Artur, P.C. 2000. Reativação de paleolineamentos durante a evolução da bacia do Paraná – o exemplo do alto estrutural de Quatiguá. *Revista Brasileira de Geociências*, 30(4): 639-648.
- Scheibe, L.F. & Hirata R.C.A. 2006. *O contexto tectônico dos sistemas aquíferos Guarani e Serra Geral em Santa Catarina: uma revisão*. Projeto SAG-projeto para a proteção ambiental e desenvolvimento sustentável do sistema aquífero guarani. 14p.
- Soares, A. 2006. *Geoestatística para as ciências da terra e do ambiente*. Lisboa, IST Press.
- Soares, A.P., Soares, P.C., & Holz, M. 2008. Heterogeneidades hidroestratigráficas no Sistema Aquífero Guarani. *Revista Brasileira de Geociências*, 38(4): 598-617.
- Souza, L.F. 2002. *Estimativa de incertezas e sua aplicação na classificação de recursos minerais*. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais (PPGEM). Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.
- Strieder, A.J., Heeman, R., Reginato, P.A.R; Acauan, R.B., Amorim, V.A. & Remde, M.Z. 2015. Jurassic-cretaceous deformational phases in the Paraná intracratonic basin, Southern Brazil. *Solid Earth Discussions*, 7:1263-1314.
- Turner, S., Regelous, M., Kelley S., Hawkesworth C.J. & Mantovani, M.S.M. 1994. Magmatism and continental break-up in the South Atlantic: high precision ^{40}Ar - ^{39}Ar geochronology. *Earth and Planetary Science Letters*, 121: 333-348
- Yamamoto, J.K. 2013. *Geoestatística. Conceitos e aplicações*. São Paulo, Oficina de textos.

8 CONCLUSÃO

Parece claro que as grandes falhas interferem na salinidade e diminuem os níveis potenciométricos para o GAS e o SGAS. A densidade de fraturamento da rocha é decisiva para o fluxo dentro dos aquíferos. Portanto, é muito difícil ter alta salinidade onde a densidade de fratura é baixa e onde não há falha regional que atravesse todas as unidades e que tenha fraturas menores associadas a elas. É o caso das zonas 1 e 2 onde a cota de captação muito baixa do SASG e a baixa densidade de fraturamento em alguns pontos impede a ascensão das águas do SAG e pré-SAG. Somente quando a isolinha potenciométrica do SAG é superior à cota de captação do SASG, é possível a ascensão de águas salinizadas. Algumas dessas grandes estruturas são especialmente eficientes para a comunicação dos aquíferos. Dentre elas, podemos citar a o Sistema de Falha São Miguel das Missões que corta as zonas 2 e 4; o lineamento rio das Antas que atravessa as zonas 4 e 5; os lineamentos gravimétricos e rio das Antas-Sc que ocorre apenas na zona 3; o Sistema de Falha Jaguari-Mata, que está no limite da zona 1 com a zona 2; os lineamentos NE que atravessam Santa Catarina e o Rio Grande do Sul no leste da zona 3 e o Sistema de Falha Terra de Areia Posadas, que corta as zonas 2 e 5. Fora dessas grandes falhas e suas cercanias, poucas locais abrigam poços com salinidade alta.

Quando essas grandes falhas estão acompanhadas de estruturas menores que distribuem as águas salinizadas por distâncias maiores, esse aumento de salinidade é mais provável. Essas estruturas menores com alta densidade provavelmente tiveram sua gênese ligada a um evento direcional onde σ_1 é muito maior que σ_3 e neste caso o fraturamento se dá em todas as direções e de forma muito intensa.

A variografia da condutividade, sódio, alcalinidade e cálcio mostra certa anisotropia, que não é tão pronunciada visto que direções secundárias mostraram certa continuidade espacial, mesmo tendo um número menor de pares. Isso mais uma vez comprova que existe uma alta gama de direções (principalmente dos lineamentos menores que 5 Km) que nem sempre mostram uma direção homogênea. Existem, porém, direções preferenciais para a ascensão de águas salinizadas do SAG e pré-SAG para o SASG que se refletem nas estruturas maiores que 5 Km. As direções entre N90-120 se mostraram como as mais favoráveis para

esta ascensão e raramente temos direções NS nas variografias e nos diagramas de rosetas.

As estruturas menores têm orientação mais aleatória por serem associadas às grandes falhas. As estruturas maiores que 5 Km tem direções mais definidas, sendo que as direções entre 90-125 são as mais propícias para a transmissividade e conexão entre os sistemas aquíferos porque correspondem a zonas de maior salinidade nos mapas de densidade de lineamentos estruturais comparados com dados de sódio e condutividade elétrica. As estruturas menores possuem uma maior homogeneidade nas direções porque a sua gênese não está relacionada diretamente aos esforços principais, mas são resultado de fenômenos estruturais secundários que não segue a direção das estruturas principais.

O critério de compartimentação se mostrou eficaz em mostrar as diferenças que existem de uma zona para outra na medida em que as análises de componentes principais, K-means e dendrograma e estatística univariada e bivariada, além das análises estruturais e de simulação mostraram que o SASG é muito compartimentado e possui diferentes graus de comunicação no estado do Rio Grande do Sul. De fato, o SASG e o SAG não são homogêneos e qualquer tentativa de explicar a variabilidade dentro do Sistema aquífero deve levar em conta critérios de compartimentação. Os métodos de simulação foram importantes para definir as falhas que mais contribuem para a salinidade do SASG e os métodos estruturais mostraram as direções preferenciais de fraturas condutoras e as regiões onde acontece o maior fraturamento, que é essencial para a ascensão de águas salinizadas para o SASG. Os componentes principais mostraram que o grupo 2 de K-means está fortemente associado à regiões em que existe potenciometria favorável para a ascensão de águas salinizadas e nunca aparece onde não acontece a ascensão de águas do SAG e pré-SAG.

Na zona 1, os fraturamentos de direção N22-45, bem como a direção N95-125, de caráter mais localizado, de comprimento superior a 5 Km ao longo do Rio Uruguai são importantes para diminuir os valores potenciométricos do SASG e do SAG. As falhas na direção N125-145 que deveriam colaborar com valores mais altos de salinidade não parecem exercer grande influência na diminuição da potenciometria do SASG e do SAG. O alto índice de fraturamento de estruturas menores no extremo leste coincide com poços de alta salinidade. Já a direção N92-125 coincide com altos valores no extremo leste e ao longo do SFJM. O E-Type do

sódio, da alcalinidade e do cálcio acompanham tanto as falhas NW quanto as falhas NE que cortam esta zona, mas as falhas NW e L-O tem um efeito mais forte sobre os altos valores destes elementos principalmente ao longo das falhas Santana do Livramento e Alegrete, que têm orientação NW, e ao longo do SFJM de mesma orientação.

Na zona 2, o grupo 2, que é mais salinizado, está concentrado principalmente acima do Sistema de Falha Terra de Areia Posadas na fronteira com a Argentina. Tanto para comprimentos maiores (95-125) quanto para comprimentos menores que 5Km (95-125), os altos valores de salinidade acompanham estruturas de direção NW e L-O acima do SFTA/P no Nordeste desta zona. Em todas as zonas, nota-se um padrão nítido de falhas conjugadas típicos de regime transcorrente, sendo que existe a rotação dos eixos σ_1 e σ_3 mudando a direção das grandes falhas e falhas menores. Abaixo desta falha, pouca salinidade é verificada devido a valores muito baixos de captação do SASG. A variância condicional e o E-Type da simulação de sódio têm extensões mais fortes na faixa central, bem próximo a esta falha e no Nordeste, onde estruturas menores com direção preferencial NW favorecem a ascensão de águas salinizadas. Na zona 3, a densidade de falhas NW é pronunciada na direção NW (N90-125) abaixo de 5 Km, com um grande fraturamento de estruturas menores ao redor do lineamento gravimétrico e rio das Antas-Sc, que coincide com os valores de E-Type de sódio. A direção N120-145 é importante no Oeste desta zona em comprimentos maiores que 5Km, enquanto a direção N22-45 é importante no Leste desta zona. Estruturas NE (direção N50-75) são importantes em toda a zona 3 para falhas abaixo de 5 Km e são confirmados pelos valores de E-Type do cálcio, que tem valores altos no leste da zona, enquanto o E-Type do sódio não os possui. Na zona 4, a parte ocidental apresenta falhas de densidade na direção NW (N90-120), enquanto no Leste a densidade de NE é pronunciada e seguem a orientação do LRA. No centro desta zona também existe um grande fraturamento em formato ovalado que também permite poços salinizados. O E-Type da alcalinidade, do sódio e do cálcio igualmente acompanham a direção destas duas grandes falhas sendo altos no Oeste e no leste da zona. Na zona 5, a falha do Rio das Antas, de direção NE, é muito importante para a salinidade das águas, mas a maior densidade de lineamentos acima de 5 km está na direção noroeste (N125-160). As estruturas menores têm grande concentração ao redor desta falha. A simulação de sódio do tipo E cai exatamente na falha de Rio das

Antas e assume que essa estrutura é muito importante para a salinização do SGAS. A dorsal de Canguçu parece ser responsável apenas pelo aumento da vazão e não influi na salinidade dos poços.

Onde as cotas (m) da captação do SASG estão mais próximas dos níveis potenciométricos do SAG, ocorre o aumento das águas salinas do GAS para o SGAS. A recarga para cima ocorre principalmente devido à influência de algumas falhas que permitem que a água salina ascenda. Na zona 1, quando as cotas de captação do SASG são negativas, não acontece recarga ascendente. Nesta zona as cotas de captação do SASG e do SAG são baixas e estão ao redor de 100 metros em grande parte da zona. No sul da zona p fraturamento não é tão importante e não acontece mistura significativa. Na zona 2, as cotas potenciométricas de ambos de ambos os sistemas aquíferos são baixas e o que determina a mistura ou não entre eles é a cota negativa de captação do SASG ao Sul do Sistema de Falha Terra de Areia Posadas ou o quão alta é a potenciometria do SASG acima desta falha, visto que no leste da zona os valores de cota do SASG são mais altos que o SAG e não permitem mistura.

Na zona 3, a recarga ascendente ocorre ao longo das falhas de gravidade e no Rio das Antas-Sc. As linhas potenciométricas de 100 a 300 m contornam essas falhas e são prolongadas por causa delas. No leste da zona, as cotas de captação do SASG são muito mais altas que o SAG e impossibilitam qualquer mistura. Na zona 4, a recarga ocorre preferencialmente no Oeste com as direções NW e para o leste com as direções NE mostrando a importância de ambas as direções. As linhas potenciométricas do SASG e do SAG coincidem principalmente nestas áreas. Na zona 5, a recarga ascendente ocorre principalmente ao longo da falha do Rio das Antas com direção NE onde as linhas potenciométricas de cota 0 a 300 m do SASG interceptam as linhas potenciométricas de 0 a 100 m do SAG. Esta falha avizinha várias cidades e, portanto, tem grande relevância. A Dorsal de Canguçu parece não ter influência nessa recarga para cima. A recarga para cima é identificada principalmente pelos altos valores da simulação de sódio (média da simulação de sódio).

No caso do sódio, a direção NE parece ser a mais propícia para esta ascensão. Em 3 zonas (1,2 e 5) verifica-se que as manchas de maiores concentrações seguem uma direção NE. A simulação de sódio é bastante importante para determinar o efeito de mistura entre os aquíferos porque este

elemento não está presente em águas puras do SASG. Na zona 3, as altas concentrações de sódio acompanham a falha gravimétrica e Rio das Antas-Sc. Na zona 4, o lineamento São Miguel das Missões coincide com valores altos. Na zona 1, os altos teores acompanham o Rio Uruguai na direção N45. Na zona 5, o lineamento Rio das Antas coincide com altos valores, apesar dos mapas estruturais terem maior densidade na direção N115-135. Os menores lineamentos (menores que 5Km) foram mais coerentes para explicar as maiores concentrações do grupo 2, que é mais salinizado que os demais. O método de Kmeans mostrou-se mais eficaz que o método de dendrograma em todas as zonas, com exceção da zona 5. Os variogramas variaram majoritariamente entre a direção N45 e N135, mostrando justamente o quanto estas duas direções são as mais importantes. Valores baixos de potenciometria coincidem grandemente com os valores altos de simulação, principalmente de sódio, que é um dos maiores indicadores de mistura. Em geral, sulfato, cloro e sódio são bem relacionados, com exceção da zona 2, onde o cloro está mais alinhado com o cálcio e com o magnésio.

Os elementos com maior assimetria na estatística univariada são o sódio, o sulfato, a condutividade elétrica, os sólidos dissolvidos totais e o cloreto. O cálcio e o magnésio têm uma distribuição bastante mais homogênea, assim como a alcalinidade e o pH. O sódio tem maior correlação com a alcalinidade em águas de muita profundidade. Em águas subterrâneas superficiais a alcalinidade tem uma correlação maior com o cálcio. Na zona 1 existe muita variabilidade composicional e mesmo o cálcio e o magnésio vem junto com o sódio de águas profundas.

O cálcio tem uma distribuição mais homogênea em relação a outros elementos, não sendo tão dependente de falhas para ter valores elevados. Os outros elementos, como Na, SO₄, Cl são muito mais dependentes delas e tem valores anômalos ao redor das grandes falhas. A vazão acompanha algumas das grandes estruturas, mesmo aquelas que não interferem na salinidade, como a Dorsal de Canguçu. O teor de sódio é especialmente alto na zona 4, com média de 129 mg/L no grupo 2 de Kmeans, enquanto a alcalinidade (255 mg/L), o cálcio (55mg/L) e o magnésio (28 mg/L) são altos na zona 1 em águas profundas. Sulfato e cloro tem distribuição mais heterogênea e apresentam valores anômalos em poucos poços.

REFERÊNCIAS

- Arab, P.B., Perinotto, J.A.J. & Assine, M.L. 2009. Grupo Itararé (P-C da Bacia do Paraná) nas regiões de Limeira e Piracicaba-SP: contribuição ao estudo de litofácies. São Paulo, UNESP, *Geociências*, 28(4):501-521.
- Asmus, H. E. 1975. Controle estrutural da deposição mesozóica nas bacias da margem continental brasileira. *Revista Brasileira de Geociências*, São Paulo, 5 (3): 160-175
- Belletinni, A.S., Viero, A.P. & Neto, A.C.B. 2019. Hydrochemical and contamination evolution of Rio Bonito aquifer in the Carboniferous region, Paraná Basin, Brazil. *Environmental Earth Sciences*, 78: 642.
- Bittencourt, A.V.L., Filho, E.F.R.; Hindi, E.C. & Filho, A.C.B. 2003. A influência dos basaltos e de misturas com águas de aquíferos sotopostos nas águas subterrâneas do sistema aquífero Serra-Geral na Bacia do rio Piquiri, Paraná-BR. *Águas subterrâneas*, 17: 67-75
- Bortolin, T.A., Reginato, P.A.R., Leão, M.I. & Schneider, V.E. 2014. Hidrogeologia e hidroquímica dos aquíferos fraturados associados às rochas vulcânicas ácidas no Município de Carlos Barbosa (RS). *Revista Ambiente e Água*, 9.
- Caetano-Chang, M.R. & Wu, F. F. 2003. Diagênese de arenitos da Formação Pirambóia no centro-leste paulista. *Geociências*, 22: 33-47.
- Cherubin, M.R., Santi, A.L., Eitelwein, M.T., Amado, T.J.C., Simon, D.H. & Damian, J.M. 2015. Dimensão da malha amostral para caracterização da variabilidade espacial de fósforo e potássio em latossolo vermelho. *Pesquisa Agropecuária brasileira*, 50(2): 168-177.
- Correia, P.P. *Variograma experimental*. 2020.
<https://pt.wikipedia.org/wiki/Variograma#/media/Ficheiro:Variograma0.png>
- Custodio, E. & Silva Junior, G. C.. 2008. Conceptos básicos sobre o papel ambiental das águas subterrâneas e os efeitos da sua exploração. *Boletín Geológico y Minero*, 119: 93-106.
- Dias A. 1995. Geologia do Município de Criciúma. *Programa de Informações Básicas de Santa Catarina—PROJESC*. Porto Alegre: Serviço Geológico do Brasil—CPRM. Séries Cartas Temáticas, 23.
- Edward, H.I. & Srivastava R. M. 1989. *Introduction to Applied Geostatistics*. New York, Oxford University Press.
- Fetter, C.W. 2001. *Applied Hydrogeology*. Prentice Hall. Upper Saddle River, New Jersey.
- Filho, C.V.P., Ferreira, F.J.F., Filho, E.F.R. & Rostirolla, S.P. 2005. Compartimentação magnética-estrutural do sistema aquífero Serra Geral e sua conectividade com o sistema aquífero Guarani na região central do arco

- de Ponta Grossa (Bacia do Paraná). *Revista Brasileira de Geociências*, 35(3):369-381.
- Filho, E.F.R., Bittencourt, A.V.L., Hindi, E.C. & Bittencourt, A. 2006. Estudo sobre os tipos de águas e as condicionantes estruturais do Sistema Aquífero Guarani no extremo oeste do estado do Paraná. *Águas Subterrâneas*, 20(2):39-48,
- Filho, E.F.R., Bittencourt, A.V.L., Hindi, E.C. & Aravena, R. Caracterização hidroquímica do aquífero Guarani na porção centro-norte do estado do Paraná, Brasil. *Águas Subterrâneas*, v.19, n.1, p.87-94, 2005.
- Folle, D. 2002. *Estudo Geoestatístico de sondagens SPT para geração de mapas auxiliares em obras de engenharia*. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais (PPGEM). Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre, 245 p.
- Frank, H.T., Boscato, M.E. & Formoso M.L.L. 2009. Review of the areal extent and the volume of the Serra Geral Formation, Paraná Basin, South America. *Pesquisas em Geociências*, 36 (1): 49-57.
- Freitas, M. 2016. *Hidrogeoquímica e isotopia de águas com alta salinidade do Sistema Aquífero Serra Geral na região do Alto rio Uruguai, Brasil*. Tese de doutoramento. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS. Porto Alegre. 195 p.
- Freitas, M. & Roisenberg, A. 2016. Análise exploratória de dados de condutividade elétrica nas águas do sistema aquífero Serra Geral no Rio Grande do Sul e Santa Catarina. *Águas Subterrâneas*, 31(1): 1-17.
- Gastmans, D., Chuang, H.K & Hutcheon, I. 2010. Stable isotopes (2H , 18O and 13C) in groundwaters from the northwestern portion of the Guarani Aquifer System Brazil). *Hydrogeology Journal*, 18:1497-1513
- Goldberg, K. Humayun, M. 2016. Geochemical paleoredox indicators in organic-rich shales of the Irati Formation, Permian of the Paraná Basin, southern Brazil. *Brazilian Journal of Geology*, 46(3): 377-393.
- Goldberg, K. & Humayan, M. 2016. Geochemical paleoredox indicators in organic rich shales of the Irati Formation, Permiano f the Paraná Basin, Southern Brazil. *Brazilian Journal of Geology*. 46(3): 377-393.
- Goffermann, M., Viero, A.P. & Silva, E.B. 2015. Caracterização hidrogeológica e hidroquímica das águas subterrâneas da região de São Gabriel, RS. *Pesquisa em geociências*, 42(3): 239-261.
- Goovaert, P. *Geostatistics for natural resources evaluation*. 1997. New York: Oxford University Press.
- Hirata, R., Gesicki, A., Sracek, O., Bertolo, R., Giannini, P.C. & Aravena, R. 2011. Relation between sedimentary framework and hydrogeology in the Guarani Aquifer System in São Paulo state, Brazil. *Journal of South American Earth Sciences*, 33:444-456.

- Holz, M. & De Ros, L.F. 2000. *Geologia do Rio Grande do Sul*. Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS). 445 p.
- Holanda, W., Santos, A.C., Bertolino, L.C., Bergamaschi, S., Rodrigues, R., Costa, D.F. & Jones, C.M. 2019. Paleoenvironmental, paleoclimatic and stratigraphical implications of the mineralogical content of the Irati Formation, Paraná Basin, Brazil. *Journal of South American Science*, 94.
- Jacques, P.D., Salvador, E.D., Machado, R., Grohmann, C.H. & Nummer, A.R. 2014. Application of morphometry in neotectonic studies at the eastern edge of the Paraná Basin, Santa Catarina State, Brazil. *Geomorphology*, 213: 13-23.
- Javadi, S., Hashemy, S.M., Mohammadi, K., Howard, K.W.F. & Neshat, A. 2017. Classification of aquifer vulnerability using K-means cluster analyses. *Journal of hydrogeology*, 549: 27-37.
- Journel, A.G. & Huijbregts, J.C.H. 1978. Mining geostatistics. New York: Academic Press.
- Júnior, M.D.S., Santos, M.L., Salamuni, E. & Stevaux, J.C. 2013. Análise morfotectônica da bacia hidrográfica do Rio Ivaí-PR, curso inferior. *Revista Brasileira de Geomorfologia*. 14(2): 213-220.
- Karami, S., Madani H., Katibeh, H., & Marj, A.F. 2018. Assesment and modeling of the groundwater hydrogeochemical quality parameters via geostatistical approaches. *Applied water Science*, 8(23).
- Kehew, A.E. *Applied Chemical Hydrogeology*. 2000. Prentice Hall. Upper Saddle River, New Jersey.
- Ketzer, J.M., Holz, M., Morad, S. & Al-Assm, I.S. 2003. Sequence stratigraphic distribution of diagenetic alterations in coal-bearing, parabolic sandstones: evidence from the Rio Bonito Formation (early Permian), southern Brazil. *Sedimentology*, 50: 855-877.
- Ketzer, J.M., Iglesias, R., Einloft, S., Dullius, J., Ligabue, R. & Lima, V. 2009. Water-rock-CO₂ interactions in saline aquifers aimed for carbon dioxide storage: Experimental and numerical modeling studies of the Rio Bonito Formation (Permian), southern Brazil. *Applied Geochemistry*, 24:760-767.
- Kirchheim, R.E., Gastmans, D & Chang, H.K. 2019. The use of isotopes in evolving groundwater circulation models of regional continental aquifers: The case of the Guarani Aquifer System. *Hidrological Processes*, 33:2266-2278
- Kitanidis, P.K. 1997. *Introduction to geostatistics: applications to hydrogeology*. Cambridge: University press.
- Krebs, A.S.J. 2004. *Contribuição ao conhecimento dos recursos hídricos subterrâneos da bacia hidrográfica do rio Araranguá, SC*. Doctoral thesis, Universidade Federal de Santa Catarina. <http://rigeo.cprm.gov.br/jspui/handle/doc/284>. Accessed 30 Apr 2018
- Janasi, V.D.A., Freitas, V.A. & Heaman, L.H. 2011. The onset of flood basalt volcanism, Northern Paraná Basin, Brazil: a precise U-Pb baddeleyite/zircon

- age for a Chapecó-type dacite. *Earth and Planetary Science Letters*, 302(1):147-153,
- Lin, Y.P., Chen, Y.W., Chang, L.C., Yeh, M.S. & Huang, G.H. 2017. Groundwater Simulations and Uncertainty Analysis Using MODFLOW and Geostatistical Approach with Conditioning Multi-Aquifer Spatial Covariance. *Water*, 9(3):164
- Lobler, C.A., Borba, W.F. & Silva, J.L.S. 2015. Relação entre pluviometria e a condutividade elétrica em zona de Afloramento do Sistema Aquífero Guarani. *Ciência e Natura*, 37(4): 115-121.
- Lobler; C.A. & W.F; Silva, J.L.S. 2015. Vulnerabilidade à contaminação das águas subterrâneas do município de Nova Palma, Rio Grande do Sul, Brasil. *Ambiente e água*, 10(1).
- Machado, J.L.F. *Compartimentação espacial e arcabouço hidroestratigráfico do sistema aquífero Guarani no Rio Grande do Sul*. Tese de doutoramento. Universidade do Vale do Rio dos Sinos, UNISINOS. São Leopoldo. 254 p. 2005.
- Marimon, M.P.C., Roisenberg, A., Suhogusoff, A.V. & Viero, A.P. 2013. Hydrogeochemistry and statistical analyses applied to understand fluorite provenance in the Guarani Aquifer System, Southern Brazil. *Environ Geochem Health*, 35: 391-403.
- Marcotte, D. 2016. Spatial turning bands simulation of anisotropic non-linear models of coregionalization with symmetric cross-variances. *Computers and Geosciences*, 89: 232-238.
- Marques, D.M. 2010. *Desenvolvimento de um algoritmo para simular a variabilidade do minério em pilhas de homogeneização*. Dissertação de mestrado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul. 130 p.
- Matos, A.B., Reginato, A.R.R. & Athayde, G.B. 2018. Compartimentação hidrogeológica do Sistema Aquífero Guarani na escarpa da serra geral no nordeste do RS. *Águas Subterrâneas*, 32: 130-139.
- Meng, S. & Maynard, J.B. 2001. Use of statistical analysis to formulate conceptual models of geochemical esozoico: water chemical data from the Botucatu aquifer in São Paulo state, Brazil. *Journal of Hydrology*. 250: 78-97.
- Milani, E.J. 2004. Comentários sobre a origem e evolução tectônica da Bacia do Paraná. In: Mantesso, N.V., Bartorelli, A., Carneiro, C.D.R. & Brito, N.B.B. (Orgs), *Geologia do continente sul-americano: evolução da obra de Fernando Flávio Marques de Almeida*. São Paulo, Beca, p. 265-279.
- Milani, E., Faccini, U., Scherer, C., Araujo, L. & Cupertino, L. 1999. Sequences and stratigraphic hierarchy of the Paraná Basin (Ordovician to Cretaceous), southern Brazil, *Série Científica, Bol. IG USP, SP, Brazil* 29: 125-173.
- Milani, E.J., Melo, J.H.G., Souza, P.A., Fernandes, L.A. & França, A.B. 2007. Bacia do Paraná. *Revista Brasileira de Geociências*, 15(2): 265-287.

- Mohammadrezapour, O., Kisi, O. & Pourahmad, F. 2018. Fuzzy c-means and K-means clustering with genetic algorithm for identification of homogeneous regions of groundwater quality. *Neural Computing and Applications*,
- Olea, R.A. 2009. *A practical primer on geostatistics*. Open-File Report. U.S. Geological Survey, 346p.
- Oliveira, D.B., Moreno, R.S., Miranda, D.J., Ribeiro, C. S., Seoane, J.C.S. & Mello, C. L. *Elaboração de um mapa de lineamento estrutural e densidade de lineamento através de imagem SRTM, em uma área ao norte do rio Doce, ES*. In: XIV Simpósio Brasileiro de Sensoriamento Remoto, 2009, Natal - RN. ANAIS, 2009. p.4157-4163.
- Paravarzan, S., Emery, X. & Madani, N. 2015. Comparing sequential Gaussian and turning bands algorithms for cosimulating grades in multi-element deposits. *Comptes Rendus Geoscience*, 347:84-93.
- Pierini, C., Misuzaki, A.M., Scherer, C.M.S. & Alves, D.B. 2002. Integrated stratigraphic and geochemical study of the Santa Maria and Caturrita formations (Triassic of the Paraná Basin), *Southern Brazil*. 15:669-681.
- Reis, G.S., Mizusaki, A.M.P., Roisenberg, A. & Rubert, R.R. 2014. Formação Serra Geral (Cretáceo da Bacia do Paraná): um análogo para os reservatórios ígneo-básicos da margem continental brasileira. *Pesquisas em Geociências*, 41 (2): 155-168.
- Reginato, P.A.R., Ahlert, S. & Schneider, V.E. 2013. Caracterização hidroquímica do Sistema Aquífero Serra Geral na região nordeste do Rio Grande do Sul. *Revista brasileira de águas subterrâneas*. 27(1): 65-78
- Reginato, P.A.R. & Strieder, A.J. 2004. Caracterização hidrogeológica e potencialidades dos aquíferos fraturados da Formação Serra Geral na região nordeste do estado do Rio Grande do Sul. *Águas Subterrâneas*, In: XIII Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas, Cuiabá, Anais (CdRoom).
- Rocha, M., & Ferreira, P.G. 2017. *Análise e exploração de dados com R*. Data Science, Lisboa, 360 p.
- Rostirolla, S.P., Assine, M.L., Fernandes, L.A. & Artur, P.C. 2000. Reativação de paleolineamentos durante a evolução da bacia do Paraná – o exemplo do alto estrutural de Quatiguá. *Revista Brasileira de Geociências*, 30(4): 639-648.
- Scherer, C.M.S. 2002. Preservation of aeolian genetic units by lava flows in the Lower Cretaceous of the Paraná Basin, southern Brazil. *Sedimentology*, 49: 97-116.
- Soares, A. 2014. *Geoestatística para as ciências da Terra e do ambiente*. Editora Press.
- Soares, P.C., Barcelos, P.E., & Csordas, S.M. *Análise, interpretação e integração de lineamentos a partir de imagens (radar-Landsat) e suas relações com a tectônica da Bacia do Paraná*. São Paulo: Relatório RT-342/82-PAULIPETRO-Consórcio CESP/IPT, 1982.

- Soares, A. P., Soares, P. C., Bettu, D. F., & Holz, M. 2008. Compartimentação estrutural da Bacia do Paraná: a questão dos lineamentos e sua influência na distribuição do Sistema Aquífero Guarani. *Geociências*, 26: 297-311.
- Scheibe, L.F. & Hirata R.C.A. 2006. *O contexto tectônico dos sistemas aquíferos Guarani e Serra Geral em Santa Catarina: uma revisão*. Projeto SAG-projeto para a proteção ambiental e desenvolvimento sustentável do sistema aquífero guarani.
- Soares, A.P., Soares, P.C., & Holz, M. 2008. Heterogeneidades hidroestratigráficas no Sistema Aquífero Guarani. *Revista Brasileira de Geociências*, 38(4):598-617.
- Sordi, M.V., Salgado, A.A.R., Paisani, J.C. & Pagotto, D. 2017. Controle estrutural no desenvolvimento de vales na área do rebordo da Bacia do Paraná no estado de Santa Catarina, Sul do Brasil. *Revista Brasileira de Geomorfologia*. 18(4): 671-687.
- Souza, L.F. 2002. *Estimativa de incertezas e sua aplicação na classificação de recursos minerais*. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais (PPGEM). Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 189 p.
- Sracek, O., & Hirata, R. Geochemical and stable isotopic evolution of the Guarani Aquifer System in the state of São Paulo, Brazil. *Hydrogeology Journal*. 10: 643-655.
- Strieder, A.J; Heeman, R; Reginato, P.A.R; Acauan, R.B; Amorim, V.A. & Remde, M.Z. 2015. Jurassic-cretaceous deformational phases in the Paraná intracratonic basin, Southern Brazil. *Solid Earth Discussions*. 7:1263-1314.
- Takahashi, H.A. 1991. *Caracterização morfoestrutural e hidrogeológica de aquíferos em meio fraturado através de técnicas de sensoriamento remoto e análise estatística, em setor de planalto meridional – RS*. Programa de pós-graduação em engenharia civil/Recursos Hídricos e Saneamento, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Dissertação de Mestrado, 126p.
- Teixeira, G. & Viero, A.P. 2017. Evolução hidrogeoquímica dos aquíferos esozoicos da porção sul da Bacia do Paraná no Oeste do Rio Grande do Sul, Brasil. *Revista brasileira de águas subterrâneas*. 31(1): 36-51.
- Teixeira, G.V., Viero, A.P., & Reginato, R. 2019. Caracterização estrutural das águas subterrâneas dos aquíferos juro-cretáceos do oeste do Rio Grande do Sul. *Gestão de Recursos Hídricos e sustentabilidade*. 11: 126-134.
- Turner, S., Regelous, M., Kelley S., Hawkesworth C.J. & Mantovani, M.S.M. 1994. Magmatism and continental break-up in the South Atlantic: high precision ^{40}Ar - ^{39}Ar geochronology. *Earth and Planetary Science Letters*, 121: 333-348.
- Yamamoto, J.K. 2013. *Geoestatística. Conceitos e aplicações*. São Paulo, Oficina de textos, 216p.

ANEXOS

Anexo A - Submissão do Manuscrito 1

Journals Editorial Office WARM <em@editorialmanager.com>

16:52 (há 8 minutos) ☆ ↶ ⋮

para mim ▾

Dear Mr TEIXEIRA,

Thank you for submitting your article:

"STRUCTURAL, HYDROGEOLOGICAL AND HYDROCHEMICAL CHARACTERIZATION OF AQUIFERS IN THE PARANÁ BASIN: INTEGRATIVE LITERATURE REVIEW"

to "Water Resources Management".

During the review process, you can keep track of the status of your article by accessing the EM web site.

We have sent an e-mail to all co-authors of this submission asking them to confirm their co-authorship. You can see the status of co-authorship confirmations under "Author Status" in your author main menu. Please check with your co-authors in case somebody does not confirm within reasonable time. In case of acceptance, a paper might not be published with outstanding co-author confirmations.

Anexo B - Submissão do Manuscrito 2

SWAM-D-20-00161 - Submission Confirmation  Caixa de entrada x



Sustainable Water Resources Management (SWAM) <em@editorialmanager.com>

20 de jul. de 2020 11:26 (há 5 dias) ☆ ↶ ⋮

para mim ▾

 inglês ▾ > português ▾ Traduzir mensagem

Desativar para: inglês x

Dear Mr TEIXEIRA,

Thank you for submitting your manuscript, "Hydrochemical compartment, hydraulic connectivity and hydrogeochemical characterization of Serra Geral Aquifer System", to Sustainable Water Resources Management

The submission id is: SWAM-D-20-00161

Please refer to this number in any future correspondence.

During the review process, you can keep track of the status of your manuscript by accessing the journal's website.

Your username is: Guilherme

If you forgot your password, you can click the 'Send Login Details' link on the EM Login page at <https://www.editorialmanager.com/swam/>

With kind regards,
Springer Journals Editorial Office
Sustainable Water Resources Management

Anexo C - Submissão do Manuscrito 3



Environmental Earth Sciences (ENGE) <em@editorialmanager.com>
Para: Guilherme Vargas Teixeira

qua., 22 de abr. às 11:00 ★

Dear Mr Teixeira,

Your submission entitled "ESTOCASTIC SIMULATION OF THE SERRA GERAL AQUIFER IN THE STATE OF RIO GRANDE DO SUL" has been received by Environmental Earth Sciences.

The submission id is: ENGE-D-20-00869
Please refer to this number in any future correspondence.

Environmental Earth Sciences has continued to grow and now publishes 24 issues a year. Please be advised that the average number of days between the initial submission and the first decision may be up to 90 days.

Thank you for submitting your work to Environmental Earth Sciences. We look forward to the opportunity to publish your article.

Please note that there is no authorship change possible after submission.

Kind regards,

Springer Journals Editorial Office
Environmental Earth Sciences

ANEXO I

Título da Dissertação/Tese:

“ESTUDO HIDROGEOQUÍMICO DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS DO AQUIFERO SERRA GERAL E SUA RELAÇÃO COM AQUIFEROS SEDIMENTARES NO RIO GRANDE DO SUL”

Área de Concentração: Geoquímica

Autor: **Guilherme Vargas Teixeira**

Orientador: Prof. Dr. Rommulo Vieira Conceição

Examinador: Dra Cristina da Paixão Araújo

Data:

22/09/2020

Conceito: C

PARECER:

A tese avaliada é inovadora aborda a escassez de recursos hídricos que é um problema global e complexo que combina várias áreas do conhecimento como química, geologia, estatística para entender o fluxo da água e a composição química dos aquíferos.

A tese propõe uma metodologia para identificar regiões de ascensão de água a partir da construção dos modelos das variáveis sódio, alcalinidade, cálcio, magnésio e condutividade elétrica utilizando ferramentas geoestatística para entender o comportamento do aquífero. O banco de dados era domínio público disponível no site da Companhia de Pesquisa de Recursos Minerais (CPRM), ou seja, não houve custos para a coleta e aquisição de dados. A região investigada ela foi dividida em 5 zonas considerados domínios geológicos baseados nas falhas do aquífero, que foram subdivididas a partir do teor de sódio em 3 grupos. Para caracterizar o comportamento das zonas, foi realizado a análise de componentes principais (PCA). Para verificar a correlação entre as propriedades dentro de cada zona, foi utilizado o K-Means. As falhas foram utilizadas para determinar a continuidades espacial do fenômeno geológico e entender a distribuição das variáveis no espaço. E em seguida foram construídos os modelos das propriedades investigadas e o E-type e a variância condicional dos modelos foram calculados. A partir da análise destes mapas foram identificados as regiões de probabilidade ascensão de água. O método também possui eficiência computacional.

Sobre o estado da arte, foi identificado que a revisão bibliográfica sobre os trabalhos sobre ascensão de aquíferos que utilizam geoestatística em suas metodologias não foram abordados.

Conforme, colocado na ata de defesa, o texto possui problemas de forma, erros de português, repetição de citações, referências bibliográficas, algoritmos significativos portanto sugere-se uma revisão detalhada que atenda o Manual de Normalização de Trabalhos Acadêmicos da Universidade Federal do Rio Grande do Sul e as normas da ABNT Internas.

Assinatura:

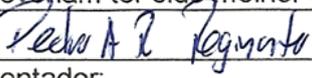
Cristina da Paixão Araújo

Data:

22/09/2020

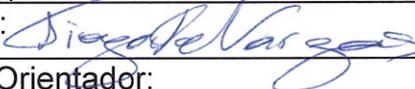
Ciente do Orientador:

Ciente do Aluno:

ANEXO I	
Título da Dissertação/Tese:	
“ESTUDO HIDROGEOQUÍMICO DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS DO AQUÍFERO SERRA GERAL E SUA RELAÇÃO COM AQUÍFEROS SEDIMENTARES NO RIO GRANDE DO SUL”	
Área de Concentração: Geoquímica	
Autor: Guilherme Vargas Teixeira	
Orientador: Prof. Dr. Rommulo Vieira Conceição	
Examinador: Prof. Dr. Pedro Antonio Roehe Reginato	
Data: 18/09/2020	
Conceito: C	
PARECER:	
<p>A proposta do trabalho tem mérito, sendo que o mesmo envolveu um tema de grande importância que é a entendimento dos processos responsáveis pela mistura de águas e padrões hidrogeoquímicos do Sistema Aquífero Serra Geral. Foram aplicadas diferentes metodologias (novas e tradicionais), sendo que os resultados obtidos forneceram resultados interessantes que ajudam na compreensão dos processos responsáveis pelo comportamento hidrogeoquímico das águas do SASG, bem como pela mistura de águas que ocorrem entre os dois sistemas aquíferos. No entanto a tese apresenta problemas relacionados com a estruturação e organização da mesma, bem como com a redação e formatação. Também há problema em alguns itens como o resumo, a metodologia (não está completa e faltam informações sobre dados e técnicas utilizadas) e uso equivocado de alguns conceitos. Os resultados apresentados são importantes e trazem uma contribuição científica relevante, no entanto, muitos desses resultados poderiam e deveriam ter sido melhor discutidos e explicados.</p>	
Assinatura: 	Data: 18/09/2020
Ciente do Orientador:	
Ciente do Aluno:	

ANEXO I	
Título da Dissertação/Tese:	
“ESTUDO HIDROGEOQUÍMICO DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS DO AQUÍFERO SERRA GERAL E SUA RELAÇÃO COM AQUÍFEROS SEDIMENTARES NO RIO GRANDE DO SUL”	
Área de Concentração: Geoquímica	
Autor: Guilherme Vargas Teixeira	
Orientador: Prof. Dr. Rommulo Vieira Conceição	
Examinador: Prof. Dr. Tiago de Vargas	
Data: 18/09/2020	
Conceito: C	
PARECER:	
<p>O trabalho intitulado acima apresenta relevante aplicação científica em abordagens de pequena escala (menor detalhe). Este estudo aplicou geoestatística, com simulação estocástica, utilizando uma seleção de parâmetros hidroquímicos observados no Sistema Aquífero Serra Geral (SASG), em todo o Estado do Rio Grande do Sul. As metodologias geoestatísticas aplicadas já são conhecidas do meio científico, no entanto, a execução delas em sistemas aquíferos fraturados, como o SASG, pode ser considerada inédita. No corpo da tese é observado o correto delineamento do assunto, apresentando a contextualização do tema e caracterização do problema, bem como os objetivos que devem ser atingidos com o estudo. O estado da arte está bem construído, demonstrando de forma apropriada a história hidrogeológica e hidrogeoquímica da área, assim como expõem adequadamente estudos com abordagens científicas relacionados a proposta desta tese. Porém, acredito que deveria ter abordado de forma mais profunda estudos geoestatísticos estocásticos desenvolvidos no Brasil e dentro da região estudada, mesmo que eles não tenham discorrido sobre o tópico simulação estocástica, já que os modelos matemáticos geoespaciais fornecem uma parte importante dos resultados desta tese. Também, seria adequado corrigir a informação equivocada sobre a ocorrência do El Niño (na introdução), para tanto sugiro consultar a tese de doutoramento de Maíra Suertegaray Rossato (Climas do Rio Grande do Sul: variabilidade, tendências e tipologia. UFRGS/PPGEA, 2011). A metodologia utilizada é complexa e a maioria dos métodos foram bem descritos, no entanto, observei alguns trechos metodológicos que necessitam detalhamento, tais como: a Análise de Componentes Principais (autovalores, processo rotacional da matriz e valor mínimo que deve ser considerado para correlação entre os elementos avaliados como pertencentes ao mesmo componente); a transformada Gaussiana; o E-Type. Acredito que os resultados desta tese são promissores e fornecem uma importante estimativa geoestatística que pode contribuir ao entendimento da relação da geologia estrutural com a ascendência das águas subterrâneas do Pré-SAG e SAG ao SASG, no estado do Rio Grande do Sul. Entretanto, acredito que seria adequado realizar uma profunda revisão na estrutura</p>	

do corpo da tese. Dentro desta revisão, seria interessante criar subitens para cada uma das Zonas analisadas, a fim de aumentar a clareza interpretativa dos resultados. Além disso, existe falta de formatação e, também, de padronização da representação de nomenclaturas no texto e nos títulos das figuras e tabelas. Por fim, considerando a arguição proferida pelo doutorando e as observações descritas sobre o corpo da tese, foi definido o conceito C como adequado.

Assinatura: 	Data: 18/09/2020
Ciente do Orientador:	
Ciente do Aluno:	