UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS - UFAL INSTITUTO DE QUÍMICA E BIOTECNOLOGIA - IQB CURSO DE QUÍMICA LICENCIATURA

EDLLA TAYANE AFONSO DE AZEVEDO

Aplicação de análise exploratória em dados de monitoramento da qualidade de águas subterrâneas de Maceió entre os anos de 2003 e 2017

EDLLA TAYANE AFONSO DE AZEVEDO

Aplicação de análise exploratória em dados de monitoramento da qualidade de águas subterrâneas de Maceió entre os anos de 2003 e 2017

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Instituto de Química e Biotecnologia (IQB) da Universidade Federal de Alagoas (UFAL), como requisito parcial para obtenção de grau de Licenciado em Química.

Prof.^a Dr.^a Andréa Pires Fernandes Orientadora

Catalogação na Fonte Universidade Federal de Alagoas Biblioteca Central Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto - CRB-4 - 1767

A994a Azevedo, Edlla Tayane Afonso de.

Aplicação de análise exploratória em dados de monitoramento da qualidade de águas subterrâneas de Maceió entre os anos de 2003 e 2017 / Edlla Tayane Afonso de Azevedo. – 2022.

32 f.: il.

Orientadora: Andréa Pires Fernandes.

Monografía (Trabalho de Conclusão de Curso em Química: Licenciatura) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Química e Biotecnologia. Maceió, 2022.

Bibliografia: f. 30-32.

1. Quimiometria. 2. Análise exploratória de dados. 3. Análise de componentes principais. 4. Análise por agrupamento. 5. Poços tubulares. 6. Águas subterrâneas. I. Título.

CDU: 543.5



Universidade Federal de Alagoas (UFAL)



Instituto de Química e Biotecnologia (IQB)
Av. Lourival de Melo Mota, s/n, Campus A.C. Simões,
Macció-AL, 57072-970, Brasil. www.iqb,ufal,br // Tel; (82) 3214-1384/1189

ATA	DE APRESENT	ACÃ	O E DEFESA DE TCC - IO	OR

1. Data da apresentação do TCC: 27/07/2022							
2. Aluno / matrícula: EDLLA TAYANE AFONSO DE AZEVEDO / 11113460							
3. Orientador(es) / Unidade Acadêmica: Profa. Dra. Andréa Pires Fernandes / IQB							
4. Banca Examinadora (nome / Unidade Acadêmica): Profa. Dra. Andréa Pires Fernandes (Presidente) Nota: 10 Prof. Dr. José Edmundo Accioly de Souza (1º avaliador) Nota: 10 Prof. Dr. Wander Gustavo Botero (2º avaliador) Nota: 10							
5. Título do Trabalho: Aplicação de análise exploratória em dados de monitoramento da qualidade de águas subterrâneas de Maceió entre os anos de 2003 e 2017.							
6. Local: sala virtual Googlemeet							
7. Apresentação: Horário início: 19:00 h Horário final: 19:32 h Arguição: Horário início: 19:35 h Horário final: 20:20 h							
8. Nota final: 10 (dez inteiros)							
9. Justificativa da nota. Em caso de APROVAÇÃO COM RESTRIÇÕES, indicar as principais alterações que devem ser efetuadas no trabalho para que o mesmo venha a ser aprovado.							
Em sessão pública, após exposição do seu trabalho de TCC por cerca de 32 minutos, o candidato foi arguido oralmente pelos membros da banca por 45 minutos, tendo como resultado:							
(X) APROVADO () APROVADO COM RESTRIÇÕES – mediante modificações no trabalho que foram sugeridas pela banca como condicional para aprovação. () NÃO APROVADO.							

DEDICATÓRIA A Ricardo Afonso de Azevedo

(in memoriam)

AGRADECIMENTOS

À minha família. Minha mãe Simone, meus irmãos Melquizedeque e Mariane, pelo aconchego, apoio e incentivo em todos os momentos;

À minha orientadora, professora Andrea Pires Fernandes, pela professora e pessoa incrível e humana, obrigada pela paciência, persistência e orientação;

A todos os professores do IQB pelo aprendizado sem tamanho nas tantas e tantas horas de convívio, foram fundamentais para meu cresciemnto profissional e pessoal;

À Companhia de Saneamento de Alagoas, pelos dados cedidos;

Ao professor Abel Tenório Cavalcante (in memoriam) pela delicadeza no trato, pelos ensinamentos sobre hidrogeologia, sobre literatura e sobre a vida;

Aos meus amigos, por estarem comigo ao longo de todo esse caminho;

Aos profissionais de saúde que estiveram junto a mim em tempos difíceis, permitindo que eu estivesse sã, física e mentalmente.

Meu eterno agradecimento!

RESUMO

Águas subterrâneas são amplamente utilizadas como fonte para abastecimento humano ao longo da História. A qualidade, viabilidade técnica e econômica e disponibilidade do recurso em solo brasileiro são atrativas para as empresas do setor. Em Maceió - Alagoas, parte do fornecimento de água tratada distribuída pela Companhia de Saneamento de Alagoas (CASAL,2019) provém de poços artesianos construídos para esse fim, sobretudo na região da parte alta da cidade. Logo, é licito supor que para compensar a crescente expansão populacional da região metropolitana, essa captação de água subterrânea tenha aumentado até chegar ao volume alcançado atualmente. Por tratar-se de um recurso não renovável é necessário um monitoramento a fim de avaliar alterações ao longo do tempo devido principalmente às atividades antrópicas. O presente trabalho visa analisar o comportamento de 34 poços na região da parte alta de Maceió, durante os anos de 2003 a 2017, onde se observou aumento da densidade populacional que acompanha a demanda crescente de água potável. Nesse sentido, foram analisados dados da qualidade da água em pontos de captação de poços na cidade de Maceió ao longo de quinze anos, no que se refere às suas características físico químicas, observando a manutenção da qualidade com as variações decorrentes de fatores externos, para isto fez-se uso da quimiometria, onde através de análise multivariada temse todos os parâmetros conhecidos funcionando como um conjunto no sentido de caracterizar a água naquele local comparando-a com seu histórico e com outros pontos relacionados, e de onde pode-se extrair o máximo de informações relevantes. Com os resultados, observou-se a tendência da maioria os poços se comportarem como um conjunto coeso sem muita diferenciação, com exceção dos poços mais próximos a zona litorânea, que mostram características diversas do restante das amostras. De forma geral, foi observado que os poços têm características físico-químicas similares e que mantiveram suas características ao longo dos anos de explotação.

Palavras-chaves: quimiometria; análise exploratória de dados; PCA; HCA; poços tubulares; água subterrânea

ABSTRACT

Underground waters are widely used as human supply source along the History. The quality, technical and economic feasibility and availability of the resource on brazilian soil are attractive to companies in the sector. In Maceió -Alagoas, part of the treated water supply distributed by Companhia de Saneamento de Alagoas (CASAL,2019) comes from artesian wells built for this purpose, especially in the upper part of the city. Therefore, it is fair to assume that to compensate the increasing population expansion of the metropolitan region, this underground water abstraction has increased until reaching the current volume. As it is a non-renewable resource, it is necessary to monitor in order to assess changes over time, mainly due to human activities. The present work aims to analyze the behaviour of 34 wells in the upper part region of Maceió, during the years from 2003 to 2017, where an increase in population density was observed that accompanies the growing demand for drinking water. In this sense, water quality data were analyzed at points of capture of wells in the city of Maceió over fifteen years, regarding to their physicochemical characteristics, observing the maintenance of quality with variations resulting from external factors, to this was made use of chemometrics, where through multivariate analysis all the known parameters are found working as a set in order to characterize the water in that place comparing it with its historic and with other related points, from where it can be extracted the maximum of relevant information. With the results, it was observed the tendency of most of the wells to behave as a cohesive set without much differentiation, with the exception of the wells closer to the coastal zone, wich shows different characteristics from the rest of the samples. In general, it was observed that the wells have similar physicochemical characteristics and that they have maintained their characteristics over the years of exploitation.

Keywords: chemometrics; exploratory data analysis; PCA; HCA; tubular wells; underground water

LISTA DE FIGURAS

igura 1 – poços usados para abastecimento no Brasil12
Figura 2 – Gráficos de PC1 <i>versus</i> PC2 aplicado para loadings em amostras le poços19
Figura 3 – Gráficos de PC1 <i>versus</i> PC2 aplicado para scores das amostras de oços20
Figura 4 – HCA aplicado para diferenciação entre agrupamentos de todos os oços22
igura 5 – HCA aplicado para diferenciação entre agrupamentos das amostras lo grupo vermelho na Figura 223
Figura 6 (a) – ampliação da metade superior do dendograma da Figura 324
igura 6 (b) – ampliação da metade inferior do dendograma aplicado as mostras de poços da Figura 325
igura 7 – ampliaçãoo de PC1 <i>versu</i> s PC2 para os grupos a e b do gráfico da
igura 226
Figura 8 – gráfico de scores de PC1 versus PC2 para amostras dos poços acintinho27

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Métodos de determinação utilizados nas análises1	4
--	---

RELAÇÃO DE ABREVIATURAS

ABAS – Associação Brasileira de Águas Subterrâneas

ANA – Agência Nacional de Águas e Saneamento Básico

CONAMA – Conselho Nacional do Meio Ambiente

CASAL – Companhia de Saneamento de Alagoas

HCA – análise hierárquica por agrupamentos (do inglês: hierarchical cluster analysis)

IBGE – Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística

PCA – análise por componentes principais (do inglês: principal componente analysis)

SEMARH – Secretaria de Recursos Hídricos

PA – Poço Antares

PBB – Poço Benedito Bentes

PFA – Poço Farol

PHE – Poço Henrique Equelman

PJ - Poço Jacintinho

PJDL - Poço José Dubeaux Leão

PLSL - Poço Loteamento Santa Lúcia

POP – Poço Ouro Preto

PSL – Poço Salvador Lyra

PSR – Poço Santa Rita

PT – Poço Tabuleiro

SUMÁRIO

1.	Introdução	1
2.	Objetivos	3
	2.1. Geral	3
	2.2. Específicos	3
3.	Revisão bibliográfica	4
	3.1. Mananciais subterrâneos	5
	3.2. Abastecimento d água para consumo humano	6
	3.3. Quimiometria	7
	3.3.1. PCA	9
	3.3.2. HCA	9
	3.4. Estudos sobre água subterrânea em estados brasileiros	10
4.	Metodologia	13
	4.1. Parâmetros de monitoramento	14
	4.2. Quimiometria	18
5.	Resultados e discussões	19
6.	Conclusão	29
7.	Referências	30
	Anexos	32

1. INTRODUÇÃO

O uso da água está presente na base do desenvolvimento de uma sociedade. Grandes cidades têm sua origem em povoados que nasceram às margens de nascentes e rios, e desde então o homem amplia as possibilidades de uso manejando o curso das águas e explorando os aquíferos subterrâneos.

A depender da região geográfica a água subterrânea pode ser uma das fontes de captação mais utilizadas, devido a facilidade de extração e a filtração natural promovida pelo solo, os aquíferos subterrâneos apresentam a qualidade superior em relação aos componentes de monitoramento necessários à água destinada ao consumo humano, que dentre os usos previstos em legislação, apresenta os valores de parâmetros permitidos mais restritivos (CONAMA 294).

As águas subterrâneas na região de Maceió são largamente utilizadas com a finalidade de abastecimento da população (CASAL, 2019). Esse fato sinaliza a importância da reserva aquífera local e traz indícios que essas águas apresentam um bom padrão de qualidade de acordo com a legislação específica de potabilidade.

A região de Maceió, Alagoas, onde os poços tubulares envolvidos no estudo foram perfurados, encontram-se na chamada parte alta da cidade, onde a expansão populacional se acentuou nos últimos anos consequentemente elevando a demanda na distribuição de água potável.

Segundo a empresa concessionária de fornecimento de água em Maceió, Companhia de Saneamento de Alagoas, são aproximadamente duzentos poços tubulares perfurados na cidade que contribuem para o abastecimento da população local (CASAL, 2019).

Os poços foram construídos no domínio dos sistemas aquíferos Barreiras e Marituba (CAVALCANTE et al.,1975) que são os que recobrem grande parte da cidade sendo os mais usados na explotação de água subterrânea.

Diversos parâmetros de monitoramento devem ser analisados regularmente visando o controle da qualidade da água que é captada e distribuída à população, bem como a possível alteração no quantitativo desses componentes; a alteração desses parâmetros, quando acima dos limites estabelecidos pelo Ministério da Saúde, pode comprometer ou mesmo inutilizar a fonte, e ainda através do estudo de valores acentuados que por ventura contraste com o histórico da qualidade do poço, pode trazer indícios da fonte de contaminação do aquífero.

Os dados do acompanhamento da qualidade da água nos seus parâmetros físicos e químicos, realizado pela Companhia de Saneamento de Alagoas, CASAL, no período de 2003 a 2017 foram disponibilizados para 34 poços tubulares da parte alta de Maceió, nas localidades do Benedito Bentes, Ouro Preto, Antares, Dubeaux Leão, Farol, Henrique Equelman, Jacintinho, Salvador Lyra, Santa Lúcia, Santa Rita e Tabuleiro.

O presente trabalho foi realizado visando averiguar a evolução das características da água subterrânea ao longo dos anos de uso constante; para isso utilizando os parâmetros pH, cor, turbidez, condutividade, acidez, alcalinidade, dureza, cálcio, magnésio, cloretos, sílica, sulfato, amônia, nitrito, ferro, sódio, potássio, CO₂ e sólidos totais. Para tanto, buscou-se avaliar os componentes de forma multivariada fazendo uso da ferramenta quimiometria, com aplicação de análise de componentes principais e análise hierárquica de dados.

2. OBJETIVOS

2.1 Geral:

Empregar ferramentas quimiométricas na análise dos dados da qualidade da água proveniente de poços tubulares na cidade de Maceió ao longo de quinze anos (2003 a 2017) no que diz respeito às suas características físico-químicas, com o objetivo de verificar as possíveis similaridades e divergências entre os poços analisados.

2.2 Específicos:

- Coletar dados de parâmetros de monitoramento da qualidade da água dos poços da parte alta de Maceió entre os anos 2003 e 2017;
- Verificar a manutenção das características físico-químicas dos poços ao longo do tempo de explotação;
- Realizar análise de componentes principais (PCA) no conjunto de amostras dos poços e das variáveis que os discriminam, para ver o agrupamento natural dos poços;
- Analisar por agrupamento por métodos hierárquicos (HCA) a fim de verificar grau de similaridade entre os poços dos diversos bairros;
- Estudar a variação dos parâmetros de controle de qualidade e possível influência de contaminantes.

O presente trabalho tem como foco a aplicação de técnicas de análise multivariada em dados de análises físico-químicas de poços tubulares na região da parte alta de Maceió, visando estudar o comportamento das águas subterrâneas no que diz respeito a sua qualidade ao longo dos anos.

Devido a importância do seu papel, as águas subterrâneas devem ter uma gestão racional, contribuindo para manutenção do seu uso futuro em termos tanto de qualidade quanto de quantidade e com o uso longo do tempo da água de aquíferos subterrâneos extraída através de poços artesianos, inspira cuidados quanto a captação e preservação do recurso natural.

Para melhor compreensão das características das águas foi realizado inicialmente um levantamento dos aspectos hidrogeológico da região de estudo. Em seguida, os dados físico-químicos das amostras de água de 34 poços, no intervalo de 2003 à 2017, foram submetidos às técnicas de análise quimiométricas, com intenção de verificar o padrão de comportamento das águas com o passar dos anos, juntamente com a similaridade ou divergência das características entre os poços.

No presente trabalho, os dados deste monitoramento contínuo ao longo dos 15 anos foram submetidos a métodos de análise multivariada, para que o conjunto de dados pudesse ser interpretado e caracterizado quanto a qualidade dessa água extraída constantemente e possíveis contaminações externas. Objetivamos então comparar a qualidade da água dos poços artesianos em estudo ao longo do tempo, trabalhando seus múltiplos dados através da quimiometria, observando os que mantiveram ou alteraram a qualidade da água, e verificar a possibilidade de agentes externos contaminarem os mananciais.

3.1 Mananciais subterrâneos

Facilidade do uso, qualidade da água, domínio da técnica, permissibilidade legislativa e necessidade do uso de água para abastecimento populacional, no Brasil é uma alternativa comum o uso de água de mananciais subterrâneos. Segundo ANA (2022) 40% do abastecimento de água para consumo humano se dá por meio de aquíferos subterrâneos.

Devido ao crescimento populacional ocorre a natural procura por fontes de abastecimento de água, tanto em alternativas de mananciais superficiais quanto subterrâneos, temos então que a urbanização não planejada, uso inadequado do solo, descartes irregulares domésticos e industriais e falta da estrutura de saneamento, entre outros, pode levar a degradação dos mananciais usados para captação da água destinada ao abastecimento humano.

O desequilíbrio promovido com a explotação de água, somado às fontes contaminantes *versus* a capacidade de autodepuração dos sistemas aquíferos e seus leitos filtrantes podem promover a condenação daquela fonte de abastecimento, no tocante a sua qualidade.

O ciclo da água já é conhecido, e sabendo que se trata de um recurso finito, se faz necessário a vigilância que é realizada pelas Companhias de saneamento e pelos governos através dos seus Ministérios e Secretarias com a intenção de monitorar e preservar os mananciais, para isso sendo elaborados comitês e legislações específicas versando sobre a captação, uso e descarte.

A variabilidade química das águas subterrâneas é intrínseca ao solo da região. Em Maceió, onde os poços envolvidos no presente estudo foram perfurados encontra-se no domínio dos sistemas aquíferos Barreiras e Marituba, que fazem parte da formação hidrogeológica de Maceió e recobrem quase a totalidade da cidade, segundo Cavalcante et al. (1996), sendo os mais utilizados para explotação devido à sua localização geográfica e vazão disponível, constituindo os sistemas locais mais importantes na captação desse recurso hídrico. A depender da região a qualidade dessas águas podem ser superiores, variando a composição geoquímica e atividade antrópica anterior.

Mais próximo da superfície temos o sistema Barreiras, a uma maior profundidade encontram-se o sistema aquífero Marituba. É importante ressaltar que os sistemas se sobrepõem em algumas regiões, onde o sistema Barreiras serve de recarga aquífera ao sistema Marituba, sendo então conhecido como Sistema Barreias/Marituba (CAVALCANTE et al., 1994).

Hidrogeologicamente as formações Marituba (principal aquífero da bacia sedimentar) e Barreiras (que recobre quase toda a área) constituem um sistema aquífero de boa potencialidade que vem abastecendo a cidade de Maceió desde o ano de 1970 (COSTA et al.,2011).

As outras formações são pouco exploradas quanto a captação de águas subterrâneas, visto que seria necessária uma maior profundidade da construção dos poços tubulares, aumentando o custo de produção e manutenção (CAVALCANTE et al., 1994).

A contaminação dessa reserva pode ser pontual em decorrência de um evento passageiro, como uma chuva intensa que arrastou matéria orgânica para um manancial, ou permanente, como fossas assépticas com construção inadequada em local vinculado a um dos sistemas aquíferos, ou uso de agrotóxicos na produção agrícola com carreamento para os rios.

3.2 Abastecimento de água para consumo humano

O estudo foi realizado com base em informações de poços tubulares perfurados nas localidades de Benedito Bentes, Henrique Equelman, José Dubeaux Leão, Salvador Lyra, José Maria de Melo, Antares, Santa Lúcia, Tabuleiro, Farol, Ouro Preto, Santa Rita e Jacintinho, que são locais abastecidos exclusivamente ou parcialmente por poços tubulares. As localidades em estudos estão situadas na chamada parte alta de Maceió, estado de Alagoas, e são mais afastadas da região litorânea da cidade. Os bairros Jacintinho e Farol, juntamente com o Conjunto Santa Rita, ficam numa região de altitude mais baixa e mais próximo ao nível do mar, são bairros mais antigos em ocupação e atividade comercial, com os respectivos rejeitos; todos os outros bairros citados se encontram na parte mais próxima ao limite no município mais distante do litoral, como citado, na chamada parte alta de

Maceió, e são localidades em que houve a expansão populacional sem a estratégia de saneamento adequada.

O interesse pela região deve-se ao uso predominante dos mananciais subterrâneos para abastecimento populacional, onde na região delimitada houve aumento na densidade demográfica crescente nos anos mais recentes, com construção de novas áreas residenciais, o que evidencia importância do recurso, que influi diretamente na qualidade de vida da população, juntamente com o crescente volume de dejetos derivados do aumento populacional. Segundo IBGE (2022) o crescimento populacional passou de 932.748 habitantes em Maceió no ano de 2010 para 1.031.597 habitantes em 2021.

Uma parcela dos habitantes da cidade de Maceió é abastecida com cerca de 200 poços tubulares distribuídos entre os bairros, suprindo o abastecimento local na forma de sistema isolado de abastecimento, com um único poço, ou em sistema compartilhado, com uma bateria de poços, ou ainda em conjunto com água de mananciais de superfície, tratada em Estações de Tratamento de Água (CASAL, 2019).

Além do uso estrito para água potável destinada ao consumo, temos também a importante aplicação desse uso em escala industrial ou ainda para irrigação. E como citado, o crescimento populacional sem planejamento de saneamento comunitário, perfuração de fossas assépticas sem regras de construção, despejo de esgotos domésticos e industriais sem tratamento e fora de locais apropriados, lixo colocados em terrenos abandonados, uso de fertilizantes, vazamento de combustíveis fósseis para o solo, entre outros, são possíveis causas de agentes contaminantes do solo e por percolação consequentemente dos mananciais subterrâneos, alterando suas características de qualidade, que deve ser evidenciado no monitoramento do recurso.

Apesar de não estarem disponíveis para o presente estudo, dados de controle de qualidade de parâmetros bacteriológicos seriam importantes no sentido de acompanhar a evolução das características da qualidade da água subterrânea ao longo dos 15 anos de dados aqui estudados.

3.3 QUIMIOMETRIA

Quimiometria é definida como uma ferramenta que se utiliza da matemática e estatística (FERREIRA, 2015).

Utilizando técnicas de análise multivariada temos a possibilidade de reduzir o número de variáveis envolvidas em uma pesquisa, por exemplo, os parâmetros de monitoramento da qualidade de água, comparar suas correlações, visualizar agrupamento de amostras e ainda identificar as que não seguem o padrão e ficam dispersas do restante do grupo em estudo (BRITO et al., 2004).

Com o interesse de analisar o comportamento das águas subterrâneas dessas localidades ao longo dos anos em relação a sua qualidade, se apresentam características constantes em sua composição ou se fatores externos contaminantes contribuíram para alterações, os dados de análises físico-químicas disponíveis foram submetidos a técnicas de análise exploratória de dados.

A quimiometria tem a capacidade de reduzir um conjunto de dados com várias variáveis e com uma diversidade de informações que podem ser correlatas, em um menor número de variáveis, mas que expressem as mesmas informações sem perda significativa de elementos. As novas variáveis, chamadas loadings, que sintetizam as informações tornam mais fácil a visualização e tomada de decisão com base no conhecimento que a técnica disponibiliza (FERNANDES, 2006).

A grande quantidade de informações que são extraídas de um produto ou processo, com a variedade de técnicas hoje disponíveis aliadas ao poderio computacional, pode se tornar uma massa indistinta que dificulte ao pesquisador recolher o máximo necessário para sua tomada de decisão.

Como este grande número de dados vindos de um conjunto de amostras pode tornar impraticável separar as informações ali presentes, ressaltando as que apresentam maior relevância para um caso em estudo, é necessário o processo de escolher os dados que melhor expressam o problema em questão para tomada de decisões. As ferramentas da quimiometria atuam nesse

contexto, uma vez que trabalha nas análises com multiparâmetros, convertendo esse conjunto de dados em um número mais estreito de variáveis pela combinação destes conforme suas correlações, e de forma que ainda guarda as informações essenciais para a compreensão do problema real.

Por se tratar de dados variados que caracterizam localmente a água subterrânea, a quimiometria possibilita estudar e avaliar as várias propriedades da água de um poço como um conjunto. De outra forma, ao analisar parâmetros de forma individual, univariada, seria perdida a visão das correlações e variabilidade em função de outros parâmetros, principalmente quando as amostras possuem alto grau de similaridade.

A quimiometria é uma área que interliga química, matemática e estatística (FERREIRA, 2015) e que vem sendo aplicada em diversos ramos de estudo, com pesquisadores interessados na previsibilidade de seus processos com base em informações já adquiridas, química forense, ou ainda na catalogação de amostras diversas de um mesmo segmento e na adulteração de produtos.

3.3.1 Análise por Componentes Principais

A PCA torna mais fácil garimpar a informação relevante, pois é capaz de mostrar a informação redundante em um conjunto de novos vetores, ortogonais entre si, montados com base em variáveis altamente correlacionadas. Com a PCA temos uma visualização mais clara possibilitando a melhor interpretação dos dados, uma vez que a ferramenta coloca as amostras e variáveis em um número reduzido de dimensões denominadas componentes principais, preservando o máximo de informações originais. O resultado é mostrado na forma de gráficos bidimensionais ou tridimensionais, sendo uma poderosa ferramenta de visualização (FERNANDES, 2006).

3.3.2 Análise hierárquica de dados

Na HCA podemos visualizar agrupamentos de amostras ou variáveis, em um gráfico denominado dendograma, que é montado a partir de semelhanças e diferenças calculadas entre as amostras em um agrupamento natural, de modo que as amostras com características mais semelhantes estejam mais próximas uma das outras enquanto fiquem mais afastadas aquelas com menor grau de similaridade. O agrupamento de amostras revela as similaridades existentes entre as mesmas, enquanto que o agrupamento das variáveis dá uma ideia da correlação entre essas (FERNANDES, 2006).

3.4 Estudos sobre água subterrânea em estados brasileiros

Em um estudo feito na bacia do Araripe, no estado do Ceará, utilizou-se análise multivariada para investigar e propor o tipo de controle da gestão das águas. No estudo não foram encontradas variações significativas nos parâmetros monitorados entre os períodos secos e chuvosos (COSTA, 2020). O estudo sugere que a gestão hídrica pode ser beneficiada através do conhecimento das características de qualidade da água relacionadas à geografia onde estão inseridos, e a quimiometria pode auxiliar nesse processo uma vez que tem a possibilidade de diminuir a quantidade de variáveis a ser analisadas, facilitando o processo.

Também no Ceará, em Maracanaú, foi feito um estudo comparando a disponibilidade hídrica, reservas, *versus* o desenvolvimento e crescimento da população, sendo as águas subterrâneas ponto essencial para esse abastecimento. O estudo destaca que comunidades inteiras são abastecidas pela água de poços (LEMOS, 2018).

Por outro lado, a aplicação das ferramentas quimiométricas pode auxiliar no descobrimento de mananciais que foram degradados ao longo do tempo, através do acompanhamento dos parâmetros monitorados, como no caso dos rios Turvo, Preto e Grande no estado de São Paulo (CAMPANHA, M. B., et al. 2010). Neste estudo, identificam-se também os pontos com contaminação direta nos rios, como o caso dos efluentes domésticos e industriais lançados diretamente nos corpos d'água, assim como os não tão previsíveis, como o escoamento de resíduos agrícolas que acabam permeando o solo ou escoando e assim contaminando os mananciais superficiais. Fica evidenciado neste estudo, através das técnicas quimiométricas aplicadas em diversos pontos dos rios, os locais que mais sofreram contaminação após os pontos de lançamentos de efluentes nos corpos d'água.

Estudo semelhante também foi realizado em Belém – Pará, onde se buscou identificar a qualidade da água subterrânea em diversos pontos da cidade, inclusive locais com potencial risco para consumo humano, através de análise multivariada (CARVALHO, 2015), encontrando alguns parâmetros acima do permitido por legislação específica, e levantando possível ação antrópica que levou a contaminação.

O impacto da urbanização recente em um município, em especial sendo ele próximo a uma unidade de preservação ambiental, foi monitorado em Rio das Ostras – Rio de Janeiro, em um projeto visando verificar a preservação do aquífero subterrâneo. Foram levantados parâmetros físico-químicos das águas in natura que servem ao abastecimento humano na região, com a discriminação da importância de cada parâmetro e o porquê do seu monitoramento, mostrando quais pontos são mais sensíveis à contaminação antrópica e espera-se contrastar com futuros estudos para avaliar a qualidade futura dos mananciais (SILVA et al, 2021).

BRITO (2006) através da análise multivariada dividiu em três classes, cada uma sem mudanças apreciáveis na amostragem durante um ano, as águas da bacia hidrográfica do Salitre – Bahia. As classes foram definidas principalmente guiadas pelo fator de maior contribuição da salinidade, uma vez identificado esse como o fator de maior vulnerabilidade da água que pode torna-la imprópria para consumo humano.

No Rio Grande do Sul também temos um estudo de 2021 contrapondo parâmetros de pH e condutividade elétrica para as águas subterrâneas com as variações provocadas pela chuvas, volume de explotação, entre outros, visando identificar as possíveis mudanças no perfil físico-químico da água, o que de fato foi verificado para a condutividade, e de forma menos marcante para o pH (REGINATO, 2021), o que sugestivamente pode decorrer da extração da água para abastecimento ter volume constante enquanto o volume do aquífero pode variar sua recarga em tempo seco e tempo chuvoso, aumentando ou diminuindo as concentrações dos íons.

A preocupação versando sobre o tema se dá pelo aumento populacional global e local, que vem acompanhado da também crescente demanda de água

potável, que não cause prejuízos à saúde humana, bem como para todas as outras necessidades pessoais, industriais ou agrícolas. O Brasil apesar da sabida disponibilidade hídrica, traz a preocupação com o uso não racional em todas essas frentes, e ainda com a contaminação dos mananciais que hoje são utilizados, contaminação esta que pode vir simplesmente da intrusão salina com a explotação contínua, do efluente industrial lançado sem tratamento prévio, das fossas assépticas cavadas sem planejamento, ou do próprio lixo que acaba sendo lançado ou carreado para os mananciais. Na Figura 1 podemos visualizar a diversidade de poços usados para abastecimento humano em todos os estados brasileiros. A variedade de trabalhos que tratam do estudo dos aquíferos subterrâneos mostra a preocupação e importância social do tema, e os diversos parâmetros que são utilizados para a avaliação da qualidade dessas águas indicam a importância do monitoramento do conjunto de dados, para o que se faz útil a aplicação da análise multivariada.

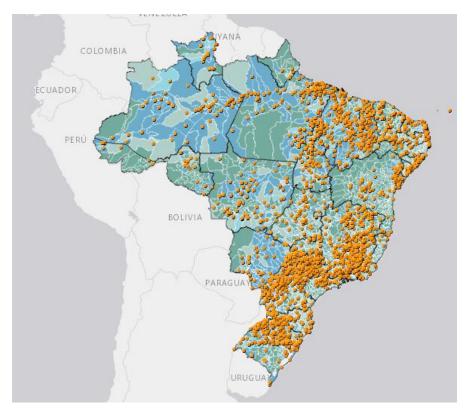


Figura 1 Os pontos em laranja representam poços usados para abastecimento

Fonte: Agência Nacional de Águas, 2022.

4. METODOLOGIA

A companhia de abastecimento de água responsável por Maceió realiza um controle periódico da qualidade da água captada, para isso analisando vários parâmetros que devem ser observados para analisar a integralidade da água, se há possíveis contaminações que alteram algum parâmetro de monitoramento que possa causar danos à saúde humana, ou que façam o público rejeitar o produto devido às características organolépticas.

O estudo foi desenvolvido a partir dos laudos das análises de água cedidos pela CASAL para os poços envolvidos durante um período de 15 anos, que apresentam dados referentes ao primeiro e segundo semestres, que foram submetidos à aplicação de analise multivariada de dados.

Relação dos poços envolvidos no estudo (os dois dígitos finais representam a numeração do poço):

- Poço Antares: PA-01, PA-02;
- Poço Benedito Bentes: PBB-05, PBB-10;
- Poco Farol: PFA-02, PFA-03, PFA-04, PFA-05;
- Poço Henrique Equelman: PHE-01, PHE-02;
- Jacintinho: PJ-02, PJ-03, PJ-04, PJ-05, PJ-10, PJ-12, PJ-15;
- José Dubeaux Leão: PJDL-01, PJDL-02;
- Ouro Preto: POP-01, POP-02;
- Salvador Lyra: PSL-02, PSL-03;
- Santa Lúcia: PLSL-01, PLSL-02, PLSL-03, PLSL-04, PLSL-05;
- Santa Rita (Farol): PSR-01;
- Tabuleiro: PT-03, PT-04, PT-05, PT-06, PT-07.

Para o presente trabalho foi usado um total de 34 poços, no intervalo de 15 anos (2003 a 2017), fazendo o total de 189 laudos físico-químicos de amostras.

4.1 PARÂMETROS DE MONITORAMENTO

Para o estudo foram usados os parâmetros: pH, cor, turbidez, condutância, acidez, alcalinidade, dureza, cálcio, magnésio, cloretos, sílica, sulfato, amônia, nitrito, ferro, CO₂ e sólidos totais.

A Tabela 1 traz as técnicas de análise através da qual foi determinado cada componente.

Tabela 1 Métodos de determinação utilizados nas análises

рН	Potenciometro Digital
Cor Aparente	Colorímetro Digital
Turbidez	Turbidímetro Digital
Condutividade	Condutivímetro Digital
Acidez	Titulometria
Alcalinidade HCO ₃ ⁻	Titulometria
Dureza Total	Titulometria
Dureza (carbonatos)	Titulometria
Dureza (n/carbonatos)	Titulometria
Cálcio	Titulometria
Magnésio	Titulometria
Cloretos	Titulometria
Sílica	Espectrofotômetro Digital
Sulfato	Espectrofotômetro Digital
Amônia	Espectrofotômetro Digital
Nitrito	Espectrofotômetro Digital
Ferro Total	Espectrofotômetro Digital
Sódio	Fotômetro de Chama
Potássio	Fotômetro de Chama
CO ₂ (graficamente)	Fórmula de Tillman
Sólidos Totais	Evaporação-Pesagem

Fonte: Laudo de análise de água da CASAL (adaptação).

O Ministério da Saúde tem a atribuição de dispor sobre a qualidade, o controle e a vigilância da água fornecida para consumo humano, atualmente através da Portaria nº 888, 04 de maio de 2021, anexo XX, que estabelece o padrão de potabilidade, conjunto de valores permitidos como parâmetros da qualidade da água para consumo humano, cujo objetivo é promover a

segurança quando do abastecimento de populações. A CASAL sendo a concessionária responsável pelo fornecimento de água pra Maceió, promove o acompanhamento dessa qualidade do produto.

Dentre esses parâmetros monitorados foram utilizados no presente trabalho:

4.1.1 pH

A concentração de íons hidrogênio em solução é definido como pH. O pH é um dos fatores controlados nas águas de abastecimento, e o Ministério da Saúde recomenda que seja mantido na faixa de 6,0 a 9,5 (FUNASA, 2009).

4.1.2 Cor aparente

A matéria orgânica dissolvida em água, bem como a presença de alguns metais e efluentes industriais, confere coloração à água. A cor em águas para abastecimento humano provoca rejeição, e é inviável em alguns processos industriais (FUNASA, 2009).

4.1.3 Turbidez

Para o consumo humano se faz necessário controlar a transparência da água. Materiais sólidos finamente divididos em suspensão na água confere turbidez, que podem derivar de matéria orgânica ou inorgânica. A presença de turbidez na água além de diminui sua transparência, facilita a presença de micro-organismos que ficam retidos nas partículas e formam aglomerados (FUNASA, 2009).

4.1.4 Condutividade

A condutividade de uma água dependerá da quantidade de substâncias dissolvidas e ionizadas e expressa numericamente a capacidade dessa água conduzir corrente elétrica (Standard Methods, 2018).

4.1.5 Acidez

A acidez na água é relativa a sua capacidade de reagir com uma base forte em determinado pH. A acidez na água pode ser interpretada com base na sua composição química, como por exemplo na presença de ácidos minerais

fortes, ácido carbônico ou sais hidrolisáveis. A acidez contribui para corrosão e influencia reações químicas elétricas (Standard Methods, 2018).

4.1.6 Alcalinidade

Em função do teor da alcalinidade são dosados produtos químicos durante o tratamento de água. A alcalinidade total é a somatória das concentrações de carbonatos, bicarbonatos e hidróxidos, e mede a capacidade da água em neutralizar os ácidos (FUNASA, 2009).

4.1.7 Dureza

A água considerada dura pode causar incrustações no sistema de encanamento de distribuição, além de ter a propriedade de ser resistência à ação dos sabões, o que pode inviabilizar o uso tanto doméstico quanto industrial. A dureza total é calculada principalmente através da presença de magnésio e cálcio, mas pode ter influência de outros cátions na água (FUNASA, 2009).

4.1.8 Cloretos

As concentrações de cloretos em águas têm grande variação dependendo de sua fonte. Os métodos convencionais de tratamento de água para abastecimento humano não removem cloretos, o que impossibilita o uso da água de algumas localidades, para isso é necessária a remoção com outras tecnologias mais recentes. A presença de cloretos em concentrações elevadas confere sabor à água, alterando suas características organolépticas e causando rejeição dos consumidores (FUNASA, 2009).

4.1.9 Sílica

Componente abundante na crosta terrestre, a sílica está naturalmente presente nas águas naturais em concentrações variadas. Para a indústria concentrações mais elevadas de sílica podem levar ao processo de incrustação nas instalações (Silva, 2001).

4.1.10 Sulfato

O sulfato pode ter ocorrência natural devido ao aspecto geológico de onde a água é encontrada, pode ser uma contaminação de rejeitos industriais

ou da agricultura, e também é um dos produtos químicos utilizados para tratar a água em Estações de Tratamento de água na etapa da coagulação de compostos em solução para posterior remoção. A legislação para a água potável atualmente limita a 250 mg/L SO₄²⁻, pois uma quantidade mais elevada altera características organolépticas da água, conferindo sabor, e concentrações muito maiores podem conferir efeito laxativo, bem como provocar incrustações da rede de distribuição (FUNASA, 2009).

4.1.11 Amônia

A amônia quando presente em água pode ser um indicador de contaminação por animais, visto que está presente no metabolismo de mamíferos. A amônia pode passar a nitrito comprometendo a segurança no consumo (FUNASA, 2007).

4.1.12 Nitrito

O nitrito é um estado intermediário no ciclo do nitrogênio, instável, raramente é encontrado em águas potáveis em maiores concentrações, visto que num prazo de 48 horas é convertido a nitrato. É um indicador da decomposição de matéria orgânica na água (SILVA, 2001).

4.1.13 Ferro total

Ferro pode ser um metal comum em água porque ele pode migrar do solo no caminho natural que a água faz. A presença de ferro pode conferir cor e gosto à água, bem como causar machas em tecidos, dependendo da concentração, o que causa rejeição para o consumo humano, além de tornar impróprio ao uso industrial em determinadas áreas (FUNASA, 2009).

4.1.14 Sólidos totais

Trata-se de matéria suspensa ou dissolvida em água, seu controle é necessário tanto para fins de controle bacteriológico, para aceitação por parte do consumidor, quanto por fins estéticos. Fica no recipiente após evaporação da amostra (Standart Methods, 2017).

4.2 Quimiometria

Os parâmetros foram tratados com escalonamento de dados devido à natureza variada das grandezas envolvidas nos laudos físico-químicos das amostras, para dar o mesmo peso a todos os parâmetros, buscando que eles pudessem ter a mesma contribuição no agrupamento das amostras, independente do seu valor numérico, já que a grandeza dos diferentes parâmetros tornaria não apreciável a contribuição de alguns destes.

As amostras foram analisadas pelas técnicas HCA e PCA utilizando o software Pirouette. Para a separação por HCA dos scores após os testes, o que apresentou melhor resultado foi o cálculo das similaridades por cálculo da distância incremental.

O parâmetro nitrato foi removido das simulações devido à ausência em muitos dos laudos, comprometendo a aplicação na quimiometria. Os parâmetros alcalinidades de carbonatos e hidróxidos também precisaram ser removidos por não apresentarem variação devido a característica das águas.

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Através da análise multivariada podemos identificar quais variáveis definem melhor os agrupamentos das amostras, evidenciando os grupos que se formam, visualizando aquelas com comportamento anômalo, e também temos a possibilidade de reduzir o número de variáveis que controlam o processo e ainda assim manter um máximo de informações (BRITO et al., 2004).

Foram utilizadas duas ferramentas para a análise exploratória dos dados: a análise de componentes principais e a análise hierárquica de agrupamentos, ambas possibilitam a visualização geral dos dados originais, a distribuição das amostras no gráfico evidenciando possíveis os agrupamentos por similaridades.

Os dados de todos os poços foram primeiramente submetidos à análise por PCA, método não supervisionado de análise multivariada, objetivando a visualização das tendências no comportamento do grupo de amostras e variáveis com mais alta correlação.

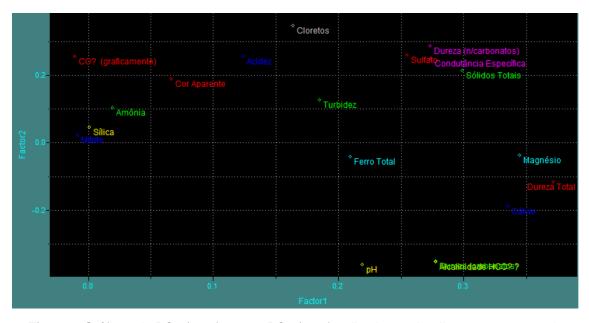


Figura 2 Gráficos de PC1 (36%) *versus* PC2 (16%) aplicado nos *loadings* em amostras de poços

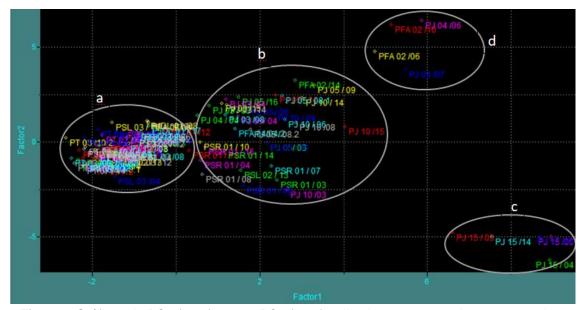


Figura 3 Gráficos de PC1 (36%) *versus* PC2 (16%) aplicado para *scores* das amostras de poços

Quando submetidos à análise por PCA as amostras se separaram em quatro grupos melhores diferenciados (Figura 3). A melhor separação de grupos foi verificada nos gráficos de PC1 *versus* PC2 explicando 52% da variabilidade total dos dados, sendo que a PC1 contribui com 36% e a PC2 com 16%. O primeiro grupo representado pela letra **a** compõem o agrupamento mais próximo do zero do fator 1(PC1) e do fator 2 (PC2). O segundo grupo representado por **b** é composto pelos poços Farol, Santa Rita e Jacintinho. Já o poço do Jacintinho 15 - PJ15 - identificado por grupo **c**, manteve-se afastado dos demais em todos os anos com dados do estudo, agrupado na região mais positiva em PC1 e mais negativa em PC2, o que corresponde no gráfico dos *loadings* (Figura 2) respectivamente às variáveis dureza, alcalinidade e pH, e em PC2 a alcalinidade. Para o grupo **d** há um agrupamento do poço PFA 02 nos anos 2006 e 2010 e do PJ 04 nos anos 2006 e 2007.

Para PC1 as variáveis que apresentaram maior influência foram dureza (0,366), magnésio (0,344), e cálcio (0,331) e para PC2 as que tiveram maiores pesos foram cloretos (0,380) e alcalinidade (-0,380).

O grupo **a** é o mais coeso, incorpora os vinte poços das seis localidades: Salvador Lyra, Santa Lúcia, Dubeaux Leão, Benedito Bentes, Antares, Henrique Equelman, Tabuleiro e Ouro Preto, ao longo dos 15 anos do escopo do estudo. Isto sugere que a água captada por estes poços tem características

físico-químicas muito semelhantes e que estas não se alteraram significativamente com o tempo de explotação.

O grupo **a** possui *loading* negativo em PC1, correspondente aos parâmetros nitrito, CO₂ e sílica no gráfico dos *scores* (Figura 2) e em PC2 as amostras estão agrupadas próximas ao zero, que corresponde às variáveis sílica, nitrito, amônia, ferro e magnésio.

O grupo **b** é um conjunto mais disperso que o primeiro, mas ainda assim mantém uma boa definição de agrupamento, e neste grupo estão os poços da área do Farol, Santa Rita e Jacintinho, o que era esperado levando em consideração a proximidade dos locais, os poços serem perfurados em um terreno com menos altitude que os do grupo **a** e estarem localizados, portanto, mais próximos ao mar se tratando Maceió de uma cidade litorânea.

Também concluímos que os poços da região do Farol e Jacintinho, localizados mais próximos a zona litorânea, contribuem para diferenciação junto aos demais que estão localizados na parte mais elevada da cidade. Além da natural menor altitude do terreno em relação ao nível do mar, pode-se, com maiores informações e posteriores estudos, verificar a eventual influência da mineração exercida ao longo dos anos que causou o afundamento do solo na região do bairro Pinheiro e adjacências, na intenção de verificar se pode ter contribuído para a distinção entre as características da água subterrânea nos bairro citados, sugestivamente pela intrusão de água salina, em contrapartida com os bairros do estudo da região mais alta de Maceió. Estes poços agrupam-se em características diferenciadas e constantes ao longo do tempo.

Um grupo específico chama atenção no gráfico por se destacar dos demais em toda a série histórica que é o grupo **c**, formado pelo poço PJ 15, com *loadings* altamente positivos em PC1, são amostras mais influenciadas pela dureza total e sólidos totais.

Na PC2 mais positivo para os *loadings* temos os poços PF 02 e PJ 04 nos anos de 2006, 2007 e 2010, com valores mais altamente positivos em PC2, onde para os *scores* temos como valores mais altamente positivos as variáveis cloretos e dureza, onde temos então que nesse tempo os poços do grupo

sofreram maior influência destes parâmetros, logo seguido por condutância, dureza e sulfato.

Para os *scores*, a variável com maior peso em PC1 foi a dureza – altamente correlacionada com cálcio e magnésio, como o esperado - seguida pelos sólidos totais. A mais negativa foi a amônia. Em PC2 a alcalinidade e pH apresentaram valores mais negativos, cloretos e condutância apresentaram os valores mais positivos.

As quatro primeiras PCs são responsáveis por explicar 70,86% da variância, sendo PC1 responsável por 36,20%, PC2 responsável por 16,45%, PC3 por 12% e PC4 por 6%.

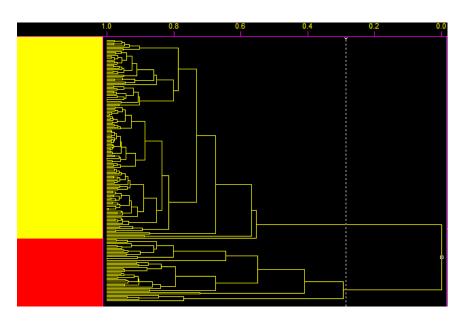


Figura 4 HCA aplicado para diferenciação entre agrupamentos de todos os poços

Para auxiliar a investigação dos dados foi feita uma análise hierárquica de agrupamentos mostrada na Figura 4. O dendograma obtido foi submetido a uma similaridade de 0,26, com cálculo de distância euclidiana, com o recurso de escalonamento de dados e cálculo da similaridade no modo incremental, indicou que o conjunto dos poços em estudo se divide em dois agrupamentos, um com maior similaridade e alocados na parte superior destacado em amarelo contendo a maior parte das amostras, e outro que se agrupou na parte inferior do gráfico, com destaque em vermelho.

O dendograma acima foi subdivido em três outros gráficos (Figuras 5, 6a e 6b), um referente ao agrupamento amarelo e outros dois ao agrupamento vermelho, e ampliados para melhor identificação das amostras.

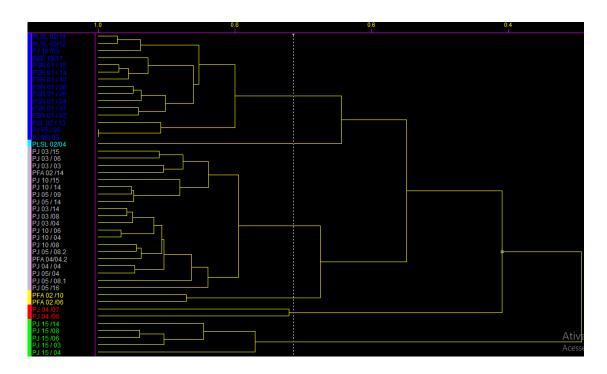


Figura 5 HCA aplicado para diferenciação entre agrupamentos das amostras do grupo vermelho na Figura 2

Na parte mais inferior no gráfico temos a parte do dendrograma indicando o agrupamento das amostras de todos os poços PJ 15 da série histórica (anos 2003, 2004, 2006, 2008 e 2014) ratificando o que foi visto primeiramente nas análises de PCA quando formaram o grupo **c** na Figura 3. Um pouco acima em destaque vermelho e amarelo no dendrograma temos poços PJ 04 e PFA 02 que tinham formado o grupo **d** na mesma figura com os limites bem próximos ao grupo **b** formado pelos poços da região Farol, Santa Rita e Jacintinho, aqui representados nas cores cinza e azul, que pode ser explicado pela semelhança no terreno de perfuração dos poços com menor altitude e proximidade com o nível do mar, a proximidade física entre as localidades e antiguidade do solo ocupada para residências, fazendo com que a característica da água explotada nesses pontos sejam semelhantes.

Observa-se também que o poço Santa Lúcia - PLSL 02 - está presente nesse grupo no canto mais superior do dendrograma para os anos 2014 e 2012

e em destaque azul claro para 2004, pertencente então a esta similaridade em todos os laudos disponíveis para o referido poço.

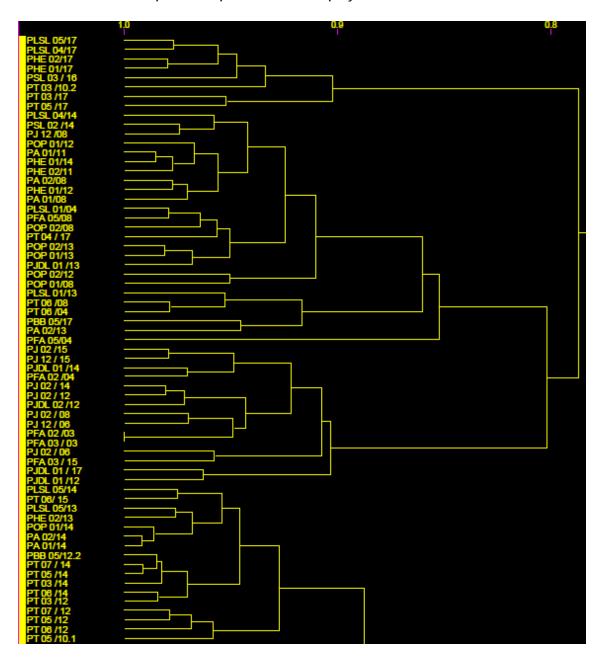


Figura 6 (a) ampliação da metade superior do dendograma da Figura 3

A parte do dendograma destacada em amarelo precisou ser sub dividida em outras duas para facilitar a visibilidade. Na Figura 6 (a) temos a parte mais superior do gráfico, onde vemos que há o agrupamento de todos os poços da parte mais alta e afastada do litoral: Santa Lúcia, Henrique Equelman, Tabuleiro, Salvador Lyra, Tabuleiro, Antares, Dubeaux Leão, Benedito Bentes e Ouro Preto. Em destaque, na similaridade mais alta do gráfico, na parte inferior da figura temos um agrupamento coeso dos poços Tabuleiro dos anos de 2010

a 2014. Na Figura 6 (b), a segunda metade do gráfico, podemos ver comportamento semelhante.

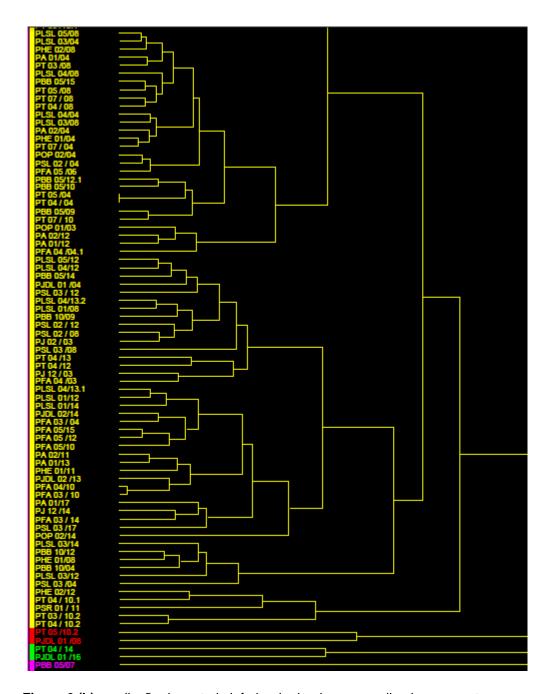


Figura 6 (b) ampliação da metade inferior do dendograma aplicado as amostras de poços da Figura 3

Temos então nas Figuras 6 (a) e (b) parte do dendrograma mostrado na Figura 4, evidenciando o conjunto de agrupamento de poços identificados na análise preliminar por PCA denominados grupo **a**, que se mostrou um grupo denso com características físico químicas das águas muito similares, o que sugere que o manancial subterrâneo no qual os poços foram escavados é o

mesmo, e que este está preservado ao longo do período de 15 anos estudado no que diz respeito aos parâmetros monitorados e as possíveis fontes de contaminação que contribuiriam para a elevação dessas variáveis.

Podemos observar também que na parte mais inferior apesar de pertencer ao agrupamento amarelo do dendograma original (Figura 4) os poços PT 05/2010, PT 04/2014, PBB 05/2007 e PJDL 01/2008 e 2016 possuem uma similaridade menor do que o restante do grupo e faz fronteira com a segunda metade do dendograma original, possuindo características da água mais similares a estes.

Também temos que alguns poços do Farol e Jacintinho se misturam no HCA aplicado às amostras do conjunto de poços e agrupam-se junto aos poços da região mais alta de Maceió.

Ambos os destaques citados podem ser previstos no gráfico da análise por PCA (Figura 3) visto que baseado no PC1, que tem como variáveis com mais peso a dureza e condutividade, os grupos **a** e **b** possuem ótima separação, mas no que diz respeito ao PC2, com variáveis mais representativas na alcalinidade, pH e cloretos, o grupo a está totalmente dentro do range de 2 a -2, mas uma parte do grupo **b** também se contra próximo ao zero da PC2, como podemos ver na ampliação, Figura 7.

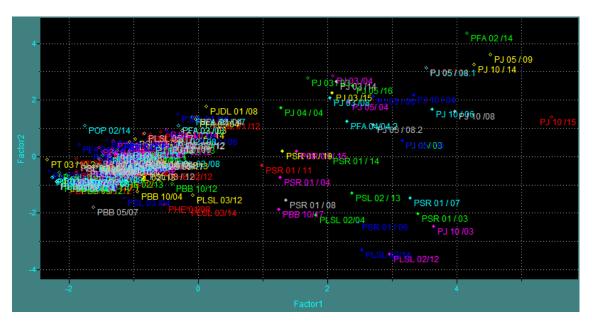


Figura 7 Ampliação de PC1 (36%) *versus* PC2 (16%) para os grupos a e b do gráfico da Figura 2

Temos também como resultado que, de acordo com os parâmetros avaliados, não houve alteração das características físico-químicas de forma significativa ao longo dos anos, como podemos ver nas Figura 7 e Figura 8, e também nos gráficos anteriores.

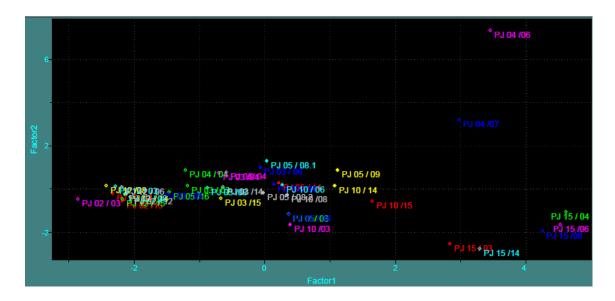


Figura 8 Gráfico de scores de PC1 (36%) versus PC2 (16%) para amostras dos poços Jacintinho

O gráfico mostra o agrupamento dos poços do Jacintinho de 2003 a 2016, com maior homogeneidade sobretudo em PC2.

Os poços não foram claramente separados através da análise multivariada de dados através de HCA e PCA no período compreendido no estudo, o que indica uma característica físico-química muito próxima de suas águas, e que talvez em um estudo com parâmetros mais refinados seria possível uma melhor distinção. Implica também, de acordo com os parâmetros contemplados neste trabalho, que não houve ao longo dos anos de estudo uma fonte de contaminação pontual ou difusa dos sistemas aquíferos nos quais os poços em estudo se encontram, que pudesse alterar de modo significante as variáveis acompanhadas.

Há fatores que poderiam levar a alterações dessas características, como por exemplo os mesmos se encontrarem nas proximidades de lixões, despejo de material industrial ou esgotos domésticos (fossas assépticas). No estudo

não ficou claro uma discrepância dos parâmetros que caracterize contaminação devido a estes fatores.

Grade parte da cidade de Maceió (CAVALCANTE et al. 1975) encontrase sobre o sistema aquífero Barreira/Marituba, o que pode explicar as características semelhantes na composição química da água dos poços em estudo.

Observamos que devido a lacunas na frequência de laudos de análise, não foi possível fazer a distinção das características dos poços entre o período seco e chuvoso.

O padrão encontrado para a maioria dos poços nos bairros do estudo, baseado nos parâmetros inclusos no presente trabalho, tendem a homogeneidade, indicando a manutenção de suas características; mesmo para os poços geograficamente mais afastados também apresentaram bom agrupamento, o que pode ter explicação no grande predomínio do sistema aquífero Barreiras/Marituba que permeia a região.

Inferimos que uma área maior de estudo talvez revelasse maiores diferenças na composição físico-química da água dos mananciais subterrâneos devido a influência também da salinidade envolvida para áreas mais costeiras, para tanto seriam necessários futuros estudos.

Não houve uma separação efetiva dos poços da parte mais alta da cidade (Tabuleiro, Antares, Henrique Equelman, Dubeaux Leão, Salvador Lira, Benedito Bentes, Santa Lúcia, Ouro Preto), comportando-se como um só conjunto de características muito próximas, sugerindo que provém de um mesmo aquífero; observa-se que os poços da região do Farol e do Jacintinho, que ficam mais próximos a zona litorânea da cidade e com mais baixa altitude, formam um agrupamento próprio também com características semelhantes. Conclui-se também que os poços não sofreram contaminação que alterasse os parâmetros físico-químicas estudados, o que era esperado, uma vez que esses poços continuam sendo usados com o fim de abastecimento populacional.

A comparação permitida auxilia na compreensão do funcionamento do aquífero no que diz respeito a manutenção de suas características, capacidade de recuperação do manancial ao sofrer explotação, bem como influência de atividades externas – residenciais, comerciais, agroindustriais - cujos efluentes possam estar sendo incorporados às águas subterrâneas.

Parâmetros indicadores bacteriológicos, bem como determinação de nitrato, poderiam contribuir para um melhor modelo de separação, evidenciando uma possível contaminação por contaminantes orgânicos, e discriminando cada poço em sua evolução.

Um estudo envolvendo um maior número de parâmetros poderia ampliar o conhecimento do comportamento da água dos poços tanto da sua manutenção de qualidade quando dos agrupamentos naturais entre os poços.

7. REFERÊNCIAS

AGÊNCIA NACIONAL DE ÁGUAS (ANA). Disponível em: https://portal1.snirh.gov.br/ana/apps/webappviewer/index.html?id=9533a92615 b84880b6a7263b6568708b . Acessado em: 07/07/2022.

AGÊNCIA NACIONAL DE ÁGUAS (ANA). Disponível em: <ana.gov.br/saneamento/> acessado em 11/07/2022.

BRITO, L. T. DE L., SILVA, A. de S., SRINIVASAN, V., S., GALVÃO, C. DE O., & GHEYI, H. R. Uso de análise multivariada na classificação das fontes superficiais da bacia hidrográfica do Salitre. Engenharia Agrícola. 2006

CAMPANHA, M., B., et al. Variabilidade espacial e temporal d parâmetros físico-químicos nos rios Turvo, Preto e Grande no estado de São Paulo, Brasil. Química Nova, 2010

CARVALHO, F., M., I., LEMOS, V., P., DANTAS FILHO, H., A., DANTAS, K., G., F. Avaliação da qualidade das águas subterrâneas de Belém a partir de parâmetros físico-químicos e níveis de elementos traços usando análise multivariada. Ver. Virtual Química, 2015.

COMPANHIA DE SANEAMENTO DE ALAGOAS (CASAL). Disponível em: https://www.casal.al.gov.br/ acessado em: 17/02/2019.

CAVALCANTE A., T. Contribuição ao conhecimento do aquíferos Terciário Barreiras-Marituba na área de Maceió. Anais do VII Simpósio de Geologia do Nordeste, SBG, Fortaleza – CE. 1975.

CAVALCANTE, A., T., BARROSO, C., M., R., WANDERLEY, P., R., Q. – **Estudo preliminar da potencialidade do aquífero Serraria na área sul do estado de Alagoas** – 8º congresso brasileiro de águas subterrâneas da ABAS. Recife,-PE. 1994.

COSTA, C. T. F., et al. Análise multivariada aplicada ao estudo hidroquímico das águas subterrâneas na bacia sedimentar do Araripe – CE. Águas subterrâneas, 2020.

FEIJÓ, F., J. – **Bacias de Sergipe e Alagoas** – B. Geoci. Petrobrás – Rio de Janeiro, 1994.

FERNANDES, A., P. Emprego de estratégias quimiométricas para a diferenciação de alimentos de acordo com as formas de produção. – São Carlos: UFSCar, 2007.

FERREIRA, M., M., C. **Quimiometria – conceitos, métodos e aplicações**. Campinas, SP: Editora da Unicamp, 2015.

FUNASA. **Manual prático de análise de água**. 3º ed. Ver. – Brasília: Fundação Nacional de Saúde, 2009.

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA (IBGE). Disponível em: https://cidades.ibge.gov.br/brasil/al/maceio/panorama. Acessado em 10/05/2022.

LEMOS, E., L. Análise das reservas, potencialidades e disponibilidade das águas subterrâneas em Maracanau-Ceará. Rev. IFES Ciência. 2018

MASSART D.L., et al. **Chemometrics: a textbook**. Data Handling in Science and technology. Vol 02. Editora Elsevier. 2001.

MONSORES, A., L., M., et al. Estudos hidrogeoquímicos e hidrogeológicos em aquíferos fraturados no noroeste fluminense: bacia superior do córrego do açude – Distrito do Raposo – Município de Itaperuna. Congresso brasileiro de águas subterrâneas – 2004.

NETO, J., V., F., et al. **Vulnerabilidade natural das águas subterrâneas em área do Tabuleiro do Martins – Maceió – Alagoas – BR**. 1st Join World Congresso on Groundwater

REGINATO, P., A., R. Análise da influência de fraturas, da precipitação e da produção de poços no pH e na condutividade elétrica (CE) das águas subterrâneas do Sistema Aquífero Serra Geral (SASG), na região nordeste do estado do Rio Grande do Sul. Pesquisas em Geociência, 48(2021) - UFRGS. 2021

SILVA, S. A., OLIVEIRA, R. – **Manual de análises físico-químicas de águas de abastecimento e residuárias**. – Campina Grande, Paraíba: O Autor, 2001

SILVA., R., F., SANTOS, J., V., V., PIRES, C., K. Análise dos parâmetros físico-químico das águas do bairro Enseada das Gaivotas (Rio das Ostras – Rio de Janeiro). Revista Brasileira do Meio Ambiente. Vol 9, nº 3 – 2021.