# INTERPRETAÇÃO DE TIPOLOGIAS QUÍMICAS ATRAVÉS DA UTILIZAÇÃO DE ANÁLISE DE CORRESPONDÊNCIAS

F. Pacheco <sup>1</sup>, M.R. Portugal Ferreira <sup>2</sup>

<sup>1</sup>Secção de Geologia, Universidade de Trás-os Montes e Alto Douro, 5000 Vila Real Instituto de Investigação da Água, 3000 Coimbra

#### Abstract

Based on the interpretation of factors, defined by the method of Correspondence Analysis, it was possible to distinguish: 1) waters whose chemistry is dominated by pollution from waters whose chemistry is controlled by the weathering reactions of silicate minerals, biotite muscovite and quartz; 2) waters with chemistries derived from different weathering reactions.

#### Localização da Área de Estudo

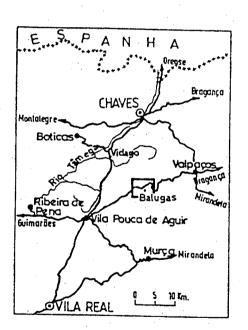


Figura 1: Localização da área de estudo (Balugas - Vila Pouca de Aguiar).

A zona estudada compreende o sector da Serra da Padrela entre Tinhela de Baixo e Lagoa (Vila Pouca de Aguiar), e representa-se por um quadrado com 5Km de lado, que se estende pelas folhas Nº 74 e 75 da Carta Topográfica Militar à escala 1/25000; as coordenadas Gauss dos cantos inferior esquerdo e superior direito desse quadrado são, respectivamente, (M,P) = (245,505)Km e (M,P)=(250,510)Km.

O principal acesso à região é a estrada que liga Vila Pouca de Aguiar a Valpaços (EN206); a zona estudada localiza-se entre os kilómetros 129 e 136. Na Figura 1 mostra-se a localização da área de estudo no território nacional.

### Enquadramento Geológico Regional

No contexto geotectónico, a área de estudo enquadra-se na Sub-Zona Galiza Média Trás-os-Montes, que corresponde a um sub-domínio da zona Centro Ibérica (Figura 2).

A geologia regional caracteriza-se.

A geologia regional caracteriza-se, fundamentalmente, por corpos graníticos, de várias fácies e idades, intruídos em formações metassedimentares pertencentes, principalmente, ao Complexo Xistoso do Grupo Peritransmontano definido por Ribeiro (1974). Importa referir, ainda, a ocorrência de depósitos cenozóicos relacionados com o acidente tectónico de Vila Real-Verin; são constituídos, essencialmente, por sedimentos arcósicos, arenosos, argilosos e cascalhentos, correspondentes a depósitos de origem lacustre, fluvial e de vertente. Em associação com a mega-estrutura de Vila Real-Verin, salienta-se a ocorrência de emergências de águas minerais, na região de Pedras Salgadas, Vidago, Chaves e Vilarelho da Raia (Sousa Oliveira. 1995).

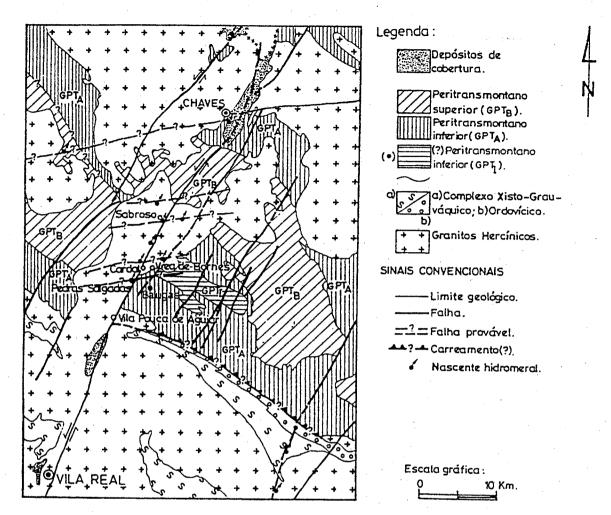


Figura 2: Enquadramento Geológico da zona de Balugas; adaptado de Sousa Oliveira (1995).

## Unidades Litológicas e Tipologias Químicas

As unidades metamórficas que afloram na área de estudo (Portugal Ferreira & Pacheco, 1993; Pacheco, 1995) podem agrupar-se, de acordo com as suas composições mineralógicas e características mecânicas, em (Figura 3):

**Filádios**: rochas pouco compactas, constituídas essencialmente por quartzo, moscovite e biotite;

Quartzitos: rochas muito compactas, constituídas, fundamentalmente, por quartzo, moscovite, clorite e biotite;

Xistos carbonosos: rochas compactas, formadas por quartzo, matéria carbonosa e escassa moscovite.

As amostras de água, colhidas nas unidades acima referidas, apresentam concentrações de sílica e bicarbonato que permitem distinguir 5 grupos (Figura 4):

Grupo 1 (\*): as amostras deste grupo foram recolhidas nos xistos carbonosos;

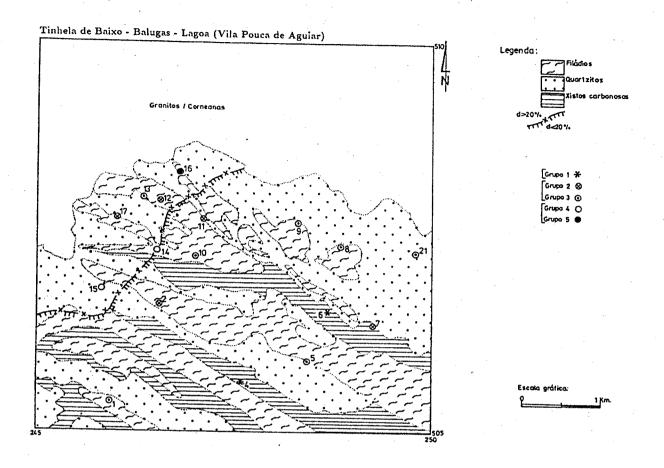


Figura 3: Mapa que agrupa as unidades geológicas existentes na zona de Balugas de acordo com as suas composições mineralógicas e características mecânicas. No mesmo mapa, projectam-se, com símbolos diferentes, as amostras de água colhidas em cada uma daquelas unidades. As amostras de água colhidas nos filádios dividem-se em dois grupos, um contém as amostras que se localizam nas zonas mais acidentadas, e o outro, aquelas que surgem nas zonas mais aplanadas.

Grupo 2 (⊗) e 3 (⊙): A Figura 3 põe em evidência uma associação com os filádios, estando as amostras do grupo 2 localizadas na vizinhança das zonas mais acidentadas (declive superior a 20%) e as do grupo 3 nas zonas mais aplanadas;

Grupo 4 (O): e 5 (●): relação provável com os quartzitos, mas associados a reacções de alteração diferentes.

### Análise de Correspondências

No Quadro 1 estão expressas as composições químicas de amostras de água colhidas na zona de Balugas. Esse conjunto de amostras foi estudado através da Análise de Correspondências (Benzecri, 1973), estando os resultados expressos nos Quadros 2, 3 e 4. O ião sulfato não foi incluído na análise por apresentar, em quase todas as amostras, valores iguais ou muito próximos de zero.

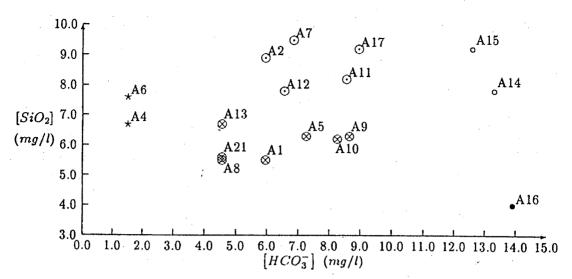


Figura 4: Distribuição das concentrações de sílica e bicarbonato em amostras de água colhidas na zona de Balugas. Esta distribuição permite descriminar visualmente 5 grupos: Grupo 1 (∗), Grupo 2 (⊗), Grupo 3 (⊙), Grupo 4 (O) e Grupo 5 (●).

Quadro 1: Composição química de 17 amostras de água colhidas na zona de Balugas; concentrações em *mg/l*; recolha feita em 5/8/94; análises efectuadas no Laboratório de Química da Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro, concluídas em 31/8/94.

Química da Universidade de			ras-os-iv	iontes e A	AITO DOUTO	concluidas em 31/8/94.					
Amostra	Na⁺	Κ,	Mg <sup>2+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	HCO <sub>3</sub>	сг	SO₄²-	NO <sub>3</sub>	SiO₂		
A1	3.0	0.6	1.0	1.5	5.8	4.6	v	2.5	5.4		
A2	3.5	0.7	1.5	1:0	5.8	4.3	v	5.9	8.8		
A4	2.0	0.6	0.5	0.5	1.4	3.4	٧	0.3	6.6		
A5	3.5	0.2	1.0	1.5	7.1	4.4	0.6	1.5	6.2		
A6	2.5	0.5	0.5	0.5	1.4	3.6	1.9	0.3	7.5		
A7	3.0	1.1	1.5	2.0	6.7	3.3	9.4	0.1	9.4		
A8	2.5	1.0	1.0	1.5	4.4	4.0	0.1	1.6	5.4		
A9	3.0	0.5	1:0	2.0	8.5	4.1	٧	1.6	6.2		
A10	4.5	1.7	1.0	1.5	8.1	6.2	0.5	2.1	6.1		
A11	3.0	1.0	1.0	0.5	8.4	3.5	>	0.4	8.1		
AÌ2	3.0	1.2	1.0	0.5	6.4	3.8	٧	1.8	7.7		
A13	2.0	1.4	0.5	0.5	4.4	3.5	ν	2.2	6.6		
A14	3.5	1.4	1.5	1.5	132	4.5	٧	2.2	7.7		
A15	4.5	0.8	1.0	0.5	12.5	3.6	٧	2.2	9.1		
A16	3.5	1.8	1.0	2.0	13.8	3.3	V	2.2	3.9		
A17	3.5	1.8	1.0	0.5	8.8	4.3	٧	2.2	9.1		
A21	2.5	0.4	1.5	1.0	4.4	3.7	٧	2.2	5.5		

Quadro 2: Resultados da Análise de Correspondências - distribuição da variância pelos 2 primeiros factores

Factor	Valor próprio	Percentagem	Percentagem cumulativa
F1	0.090	58.8	58.8
F2	0.039	25.1	83.9

Quadro 3: Resultados da Análise de Correspondências - peso das variáveis (factor loadings) nos factores 1 e 2 multiplicados por 1000

	<del></del>		7 7 7 7	~~	1120101 1001	mys) nos lactores i e z, multip				
Factor	Na*	K	Mg <sup>2+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	HCO <sub>3</sub>	СГ	NO <sub>3</sub>	SiO <sub>2</sub>		
F1	-5.3	-78.5	37.6	158.3	-344.4	105.4	774.4	-41.6		
F2	39.5	-22.0	12.2	-130.1	-234.1	113.7	-245.2	250.4		

Quadro 4: Resultados da Análise de Correspondências - coordenadas das amostras (factor scores) nos factores 1 e 2, multiplicados por 1000

Factor	1	2	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	i	por 1000	
E1					<del></del>	<del> </del>	- <u>~</u>	<del> </del>	1.0	' '	12	13	14	15	16	17	21
F1	55.9	295.6	-27.4	-109.7	-27.2	-245.9	16.1	-150.3	-68.9	-324.9	-94.8	40.9	-236.5	-250.1	-281.9	420.2	
F2 .									<b>†</b>			<del> </del>		-230,1	-201.9	-138.2	81.5
[ FZ	-36.0	-16.2	547.1	-5.2	580.1	185.7	66.3	-95.2	-36.0	79.7	92.2	113.5	-180.4	-99.7	-414.7	35.0	49.7
L	1	1 10.2	347.1	1 -3.2	580.1	185.7	66.3	-95.2	-36.0	79.7	92.2	113.5	-180.4	-99.7	-414.7	35.0	

O Factor 1 (58.8%) da variância apresenta *loadings* positivos nos iões associados à poluição (cloreto e nitrato) e *loadings* negativos nos iões ligados à hidrólise de silicatos (bicarbonato e sílica). Tal facto sugere que as amostras com *score* positivo tenham composição química dominada pela poluição, e que nas amostras com *score* negativo o quimismo seja controlado pela hidrólise.

Pacheco & van der Weijden (1995) definem percentagem de poluição de uma amostra de água pela expressão (concentrações em equivalentes por litro)

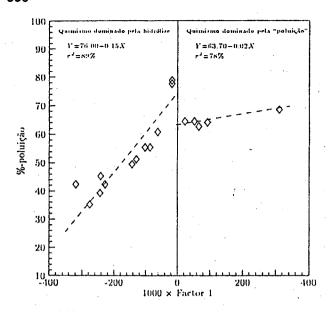
$$\% - poluição = \frac{[CI] + [so 4] + [NO3]}{[CI] + [so 4] + [NO3] + [HCO3]} x 100$$

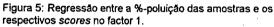
considerando poluídas as amostras que apresentem %-poluição superior a 50%.

Na figura 5 estão projectadas as %-poluição das amostras contra os respectivos scores no factor 1; as amostras com score negativo definem uma recta de regressão e as amostras com score positivo uma recta de regressão diferente. Tal facto sugere que o factor 1 permite, de facto, distinguir amostras poluídas de amostras não poluídas; no entanto, não é o patamar de %-poluição=50% que permite estabelecer essa distinção, mas sim, o sinal (positivo ou negativo) dos scores.

Projectando as razões molares HCO3/SiO2 das amostras, em função dos scores no factor 2, obtém-se a distribuição expressa na Figura 6. É clara a separação entre as amostras que constituem os grupos definidos anteriormente.

A composição química das biotites e moscovites, presentes nas unidades metamórficas (Pacheco, 1995), permite definir relações molares HCO3/SiO2, típicas das alterações daqueles minerais em caulinite e gibsite. Essas relações estão representadas por linhas na Figura 6. A posição das amostras dos diferentes grupos, relativamente a essas linhas, sugere que: 1) a composição química do grupo 1 relaciona-se com a dissolução do quartzo, acompanhada pela hidrólise da moscovite com formação de gibsite. Tal associação é compatível com a mineralogia dos xistos carbonosos; 2) a composição química dos grupos 2 e 3 (filádios) relaciona-se com a hidrólise da biotite (fundamentalmente), havendo produção de uma mistura de caulinite e gibsite. O grupo 2 (zonas de maior declive) associa-se a estágios de alteração mais intensos, caracterizados pela produção de misturas mais ricas em gibsite; 3) a composição química do grupo 4 (quartzitos) relaciona-se com a alteração da biotite, sendo produzida uma mistura de caulinite e gibsite rica em caulinite (alteração menos intensa que a dos filádios, provavelmente relacionada com a maior resistência mecânica destas rochas).





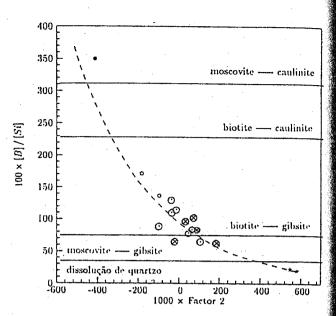


Figura 6: Regressão entre a razão molar HCO3/SiO2, na água, e os scores no factor 2. \* =Grupo 1 (xistos carbonosos); ⊗ =Grupo 2 e ⊙= Grupo 3 (filádios); O =Grupo 4 e •=Grupo 5 (quartzitos).

O ajuste das amostras a uma função exponencial denuncia as diferenças nas taxas de libertação de sílica, experimentadas pelas diferentes reacções de alteração: 1) as amostras do grupo 1 estão associadas a reações em que há libertação de sílica sem que haja libertação de bicarbonato (dissolução de quartzo); 2) a composição química das amostras dos grupos 2, 3 e 4 resultou da hidrólise da biotite, com produção de caulinite e gibsite, reacções que libertam sílica e bicarbonato; 3) embora não tenha sido associado a nenhum conjunto de reacções, a composição química do grupo 5 deverá estar relaciodada com reacções de alteração que ocorrem com consumo de sílica, ou reacções em que a taxa de libertação de sílica é consideravelmente inferior às das reacções referidas anteriormente.

#### Referências

Benzecri, J. P., 1973. L'analyse des donées. Volume II: L'analyse des correspondences. Dunod, Paris.

Pacheco, F. & van der Weijden, C.H., 1995. Contributions of water-mineral interactions to the composition of groundwater in areas with a sizeable anthropogenic input: II - a case study of the waters from the Fundão area (central Portugal). Submetido para publicação na revista Water Resources Research (WR95-036).

Pacheco, F., 1995. Interacção água-rocha em unidades do grupo peritransmontano (Serra da Padrela-Vila Pouca de Aguiar). Tese de Mestrado, Universidade de Coimbra.

Portugal Ferreira, M.R. & Pacheco, F., 1993. Hidrogeologia em quartzitos peritransmontanos carreados da Serra da Padrela: a recarga e a produtividade. In Seminário de Águas Subterrâneas e Ambiente, Associação Portuguesa de Recursos Hídricos (APRH).

Ribeiro, A., 1974. Contribuiton à l'étude tectonique de Trás-os-Montes Oriental Serviços Geológicos de Portugal (24).

Sousa Oliveira , A. , 1995. Hidrogeologia da região de Pedras Salgadas. Provas de Aptidão Pedagógica e Capacidade Científica, Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro.