

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS

**A Modelagem Implícita no Aprimoramento do
Modelo Conceitual de uma Área Contaminada**

FERNANDA SOUTO BARRETO

Número TF: 21/09

Orientador: Prof. Dr. Reginaldo Antonio Bertolo
Departamento de Geologia Sedimentar e Ambiental
Instituto de Geociências

Coorientador: MSc. Sasha Tom Hart
Centro de Pesquisas de Águas Subterrâneas (CEPAS)
Instituto de Geociências

São Paulo
2021

À minha mãe, Maria e minha avó, Elvira

Agradecimentos

Esse trabalho jamais teria sido possível sem a ajuda de tantas mãos que nele estiveram envolvidas, desde o início. O agradecimento é especial ao meu orientador Reginaldo Bertolo que me apresentou o projeto de doutoramento de Sasha Hart, do qual o presente trabalho de formatura faz parte, e me presenteando com um coorientador tão especial. Juntos, Reginaldo e Sasha me fizeram enxergar essa profissão com tanto amor e cuidado, me motivando, me apoiando, me aconselhando e proporcionando oportunidades únicas para o meu desenvolvimento. Muito obrigada por toda a confiança e oportunidades que me foram dadas.

Esse projeto também não seria possível sem o apoio financeiro da FUSP - Fundação de Apoio à Universidade de São Paulo e sem a parceria firmada com a Seequent, em especial nas figuras de Joyce Cruz Di Giovanni e Vinicius Figueiredo, que ofereceram suporte com a licença do *software* e apoio educacional com os treinamentos disponibilizados.

E para chegar até aqui foi preciso de muito suporte de minha mãe, Maria José e minha avó, Elvira Reis, que sempre estiveram comigo, apoiando minhas decisões, estimulando a educação e oferecendo todo o suporte necessário para o meu desenvolvimento. Agradeço ainda, toda a minha família, por todos os momentos de conversa, conselhos e apoio incondicional.

Chegar até a Universidade de São Paulo nunca foi mérito apenas meu e aproveito o momento para agradecer aos idealizadores e condutores do projeto Ampliando Talentos, que por meio de bolsa de estudos durante o ensino médio, fizeram desse um caminho possível, com especiais agradecimentos para a Roberta Parollo e Makoto Yokoyama que não desistiram de mim em nenhum momento e foram verdadeiros mentores.

Agradeço aos amigos feitos desde então, colegas de projeto e de colégio, que me acompanharam até aqui. Aos membros do "Panquecas Revolucionárias", Bruna Bimbatti que sempre esteve disponível para comemorar as vitórias e dar suporte para os dias ruins, Estela Guidini, com quem dividi as melhores viagens, panquecas e muito carinho, Henrique Zanarella, que sempre soube me ouvir e salvou a minha pele tantas vezes dos estragos causados pelas exatas, Guilherme Obeid, por sempre ter uma poesia na manga

junto com um fato aleatório, a Lais Cotrim, por ser sempre a voz sensata do grupo e o Gabriel Dante por sempre oferecer apoio moral, mesmo estando do outro lado do planeta.

Agradeço aos amigos feitos durante a graduação, por serem além de excelente companhia, pessoas com as quais aprendi muito sobre geologia e sobre o mundo. À Sara Souza por ter acompanhado a escrita desse trabalho e muito do que deu origem a ele, sempre com profunda paciência e cuidado com as revisões, ao Fábio Menescal, que sempre me lembra de ser forte, de respirar fundo e jamais abaixar a cabeça, aos meus "irmãos de orientação" João Zwarg e Leonardo Dias, com os quais compartilhei tantas aflições e momentos de escrita desse trabalho, Samara Aguiar e Ariane Landim por sempre terem um espaço de cuidado comigo, ao Eduardo Julião por sempre ter me ouvido, aconselhado, acompanhado com a maior paciência do universo.

Não poderia deixar de agradecer ao Matheus Romanetto por sempre preencher os meus dias com música e a sua excelente companhia, mesmo com um oceano de distância, aos companheiros de Café Geológico, Giovana, Geovana, Laíne e Felipe, por serem pacientes com esse momento de escrita e ao Caio Forcione por acompanhar parte dessa jornada.

Agradeço toda a equipe ORB e ORG de Meio Ambiente da Arcadis, em especial, Andreza Viotto, Willem Takiya, Leandro Oliveira, Felipe Muniz e Raoni Azevedo, que me ofereceram tantas oportunidades para desenvolvimento e foram extremamente compreensíveis com as minhas atividades acadêmicas. Aos amigos de estágio, Bianca Faria, Felipe Greff, Caroline Manastella, Cláudio Domingues e Matheus Lins por todas as ligações, palavras de apoio e por tornarem os meus dias melhores.

Finalmente, agradeço novamente aos amigos que opinaram diretamente na construção desse trabalho, com discussões, revisões e suporte técnico: Sara Souza, Matheus Lins e Henrique Zanarella.

RESUMO

Os modelos conceituais tridimensionais elaborados a partir da modelagem matemática por *softwares* de interpolação são ferramentas importantes para a integração e visualização de dados, mas são ainda subutilizados pelo setor de meio ambiente. São várias as razões para esse fato, como o alto custo, falta de profissionais capacitados, falta de ferramentas específicas para o setor, desconhecimento e dificuldades para acessar conteúdo para aprendizado.

Muitas vezes, os projetos de Gerenciamento de Áreas Contaminadas (GAC) possuem longa duração, com uma série de etapas e modelos conceituais gerados em cada uma delas. São escassos os casos em que são representados modelos integrados que consideram a evolução temporal de um projeto, considerando as atividades ambientais desenvolvidas, hidrologia, geologia, resultados analíticos de forma integrada e evolução da área.

No presente trabalho, foi utilizada uma das ferramentas de modelagem disponíveis no mercado: o Leapfrog Works® e a sua Extensão de Contaminantes para a elaboração de modelo conceitual tridimensional e temporal (quadrimensional) para uma área contaminada por organoclorados. Essa área e o seu entorno, tiveram ocupação industrial desde a década de 1920 e a contaminação está relacionada com atividades industriais que diminuíram de intensidade na década de 1990.

Ao longo de 20 anos, uma série de ações foram realizadas na área com o objetivo de investigar, remediar e monitorar as concentrações de contaminantes no solo e na água subterrânea. Os principais parâmetros de interesse identificados foram o 1,2-Dicloroetano e o Tetracloroetano, cujas plumas foram modeladas para sete campanhas distintas, considerando o histórico ambiental, detecções e toxicidade. Os modelos conceituais temporais produzidos evidenciam a evolução do conhecimento da área e do seu entorno, bem como o efeito das remediações na redução de concentrações e retração das plumas.

ABSTRACT

Three-dimensional conceptual models developed from mathematical modeling by interpolation software are important tools for data integration and visualization, but they are still underused by the environmental sector. There are several reasons for this fact, such as the high cost, lack of trained professionals, lack of specific tools for the sector and lack of knowledge and difficulties in accessing content for learning.

Often, Contaminated Area Management (CAM) projects have a long duration, with a series of stages and conceptual models generated in each one of them. There are few cases in which integrated models are represented that consider the temporal evolution of a project, the environmental activities developed, hydrology, geology, analytical results in an integrated manner and the evolution of the area.

In the present work, one of the modelling tools available on the market was used: Leapfrog Works ® and its Contaminant Extension for the elaboration of a three-dimensional and temporal (four-dimensional) conceptual model for an area contaminated by organochlorines. This area and its surroundings have been industrially occupied since the 1920s and the contamination is related to industrial activities that decreased in intensity in the 1990s

Over 20 years, a series of actions were carried out in the area with the objective to investigating, remediating and monitoring concentrations of contaminants in the soil and groundwater. The main parameters of interest identified were 1,2-Dichloroethane and Tetrachloroethene, whose plumes were modeled for seven different campaigns, considering the environmental history, detections and toxicity. The temporal conceptual models show the evolution of in the area and its surroundings, as well as the effect of remediation on the reduction of concentrations and retraction of plumes.

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	11
2.	JUSTIFICATIVA E OBJETIVOS	13
3.	FUNDAMENTAÇÃO BIBLIOGRÁFICA.....	15
	3.1.Modelos Conceituais de Área (MCA).....	15
	3.2.Leapfrog Works ® e Extensão de Contaminantes.....	18
	3.3.Variogramas.....	21
	3.3.1.Função variograma e variograma experimental.....	21
	3.3.2.Parâmetros do Variograma.....	22
	3.3.3.Distribuição espacial dos pontos amostrais	23
	3.3.4.Modelos Teóricos de Variograma.....	24
	3.4.Contexto Geológico e Hidrogeológico Regional	25
	3.5.Contexto Geológico e Hidrogeológico Local.....	30
	3.6.Histórico Ambiental da Área.....	34
4.	MATERIAIS E MÉTODOS	37
	4.1.Fluxo de Trabalho	37
	4.2.Dados de Entrada	39
	4.2.1.Topografia.....	39
	4.2.2.Definição de Escopo	39
	4.2.3.Resultados Analíticos	41
	4.2.4.Sondagens e Poços.....	41
	4.2.5.Dados adicionais	43
	4.3.Validação dos dados	43
	4.4.Elaboração do Modelo Digital de Elevação	45
	4.5.Modelagem Geológica	46
	4.6.Modelagem de superfície potenciométrica	48
	4.7.Modelagem de Plumas de Isoconcentração.....	49
5.	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	54

6. A Modelagem Implícita no Gerenciamento de Áreas Contaminadas: Uma avaliação temporal de uma pluma combinada de organoclorados	57
Resumo	57
Abstract	57
6.1.Introdução	58
6.2.Caracterização histórica da área de estudo	59
6.3.Contexto geológico e hidrogeológico	61
6.4.A modelagem implícita.....	63
6.5.Fluxo de Trabalho e Dados de Entrada	65
6.6.Modelagem tridimensional geológica	67
6.7.Modelagem implícita para plumas de contaminantes.....	70
6.8.Modelo Conceitual Temporal da Área de Interesse	73
6.9.Conclusões	78
6.10.Agradecimentos	79
6.11.Referências Bibliográficas	79

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1: EXEMPLO DE MODELO CONCEITUAL NO GERENCIAMENTO DE ÁREAS CONTAMINADAS. EXTRAÍDO DE (MARKER, 2008).	17
FIGURA 2: MODELO CONCEITUAL TEMPORAL DA ÁREA DE ESTUDO. MODIFICADO DE (HART ET AL., 2021) (1) MODELO CONCEITUAL ANTES DA OCUPAÇÃO INDUSTRIAL; (2) MODELO CONCEITUAL DURANTE A OCUPAÇÃO INDUSTRIAL E (3) MODELO CONCEITUAL APÓS AS ATIVIDADES DE REMEDIAÇÃO.....	18
FIGURA 3: PROPRIEDADES DO VARIOGRAMA. EXTRAÍDO DE GEOKRIGAGEM.COM.BR.....	22
FIGURA 4: ESQUEMA MOSTRANDO A PESQUISA DE PARES PARA CÁLCULO DE VARIOGRAMAS EXPERIMENTAIS NO CASO DE DISTRIBUIÇÃO IRREGULAR (A) CENTRADO NO PONTO 1 (B) CENTRADO NO PONTO 2. EXTRAÍDO DE GEOKRIGAGEM.COM.BR.....	23
FIGURA 5: QUADRO LITOESTRATIGRÁFICO E EVOLUÇÃO TECTONO-SEDIMENTAR DO SEGMENTO CENTRAL DO RCSB (RICCOMINI ET AL., 2004), ONDE P-LEQUES ALUVIAIS PROXIMAIS; M-D-LEQUES ALUVIAIS MEDIANOS A DISTAIS ASSOCIADOS À PLANÍCIE ALUVIAL DE RIOS ENTRELAÇADOS; T-DEPÓSITO DE TÁLUS; C-DEPÓSITOS COLUVIAIS; CA-DEPÓSITOS COLÚVIO ALUVIAIS; A-DEPÓSITOS ALUVIAIS. EXTRAÍDO DE (DA COSTA CASADO ET AL., 2011).....	28
FIGURA 6: PERFIL DE INTEMPERISMO PARA REGIÕES TROPICAIS. MODIFICADO DE VAZ (1996)	31
FIGURA 7: MAPAS POTENCIOMÉTRICOS HISTÓRICOS DA ÁREA DE ESTUDO REALIZADOS A PARTIR DOS DADOS DE CAMPANHAS DE MONITORAMENTO REALIZADAS NA ESTAÇÃO DE SECA (ENTRE ABRIL E SETEMBRO).	34
FIGURA 8: FLUXOGRAMA DE ATIVIDADES.	38
FIGURA 9: EXEMPLO DE REINTERPRETAÇÃO GEOLÓGICA DAS DESCRIÇÕES DE SONDAÇÃO EXECUTADAS.	42
FIGURA 10: SUPERFÍCIE TOPOGRÁFICA GERADA A PARTIR DOS PONTOS.	45
FIGURA 11: ELABORAÇÃO DO MODELO GEOLÓGICO.(A) SONDAGENS COM INFORMAÇÕES DE LITOLOGIA E IMAGEM AÉREA. (B) SUPERFÍCIES DE CONTATO GERADAS. (C) MODELO GEOLÓGICO TRIDIMENSIONAL.	47
FIGURA 12: ELABORAÇÃO DE SUPERFÍCIES POTENCIOMÉTRICAS.(A) CORTE NORTE-SUL COM VISADA PARA LESTE MOSTRANDO TENDÊNCIA DE MENORES POTENCIAIS AO SUL DA PLANTA. (B) VISADA DE NOROESTE PARA SUDESTE MOSTRANDO A DISPOSIÇÃO DAS SUPERFÍCIES POTENCIOMÉTRICAS E A GEOLOGIA MODELADA. FIGURA SEM EXAGERO VERTICAL.....	49
FIGURA 13: FERRAMENTA NOVA ESTIMATIVA DE CONTAMINANTE DA EXTENSÃO DE CONTAMINANTES (A) INTERFACE DA FERRAMENTA COM A DISTRIBUIÇÃO DOS VALORES EM HISTOGRAMA. (B) INTERFACE DA FERRAMENTA COM A VISUALIZAÇÃO DOS DADOS DENTRO DO DOMÍNIO ESCOLHIDO.....	50
FIGURA 14: CONSTRUÇÃO DO MODELO ESPACIAL (A) INTERFACE DA FERRAMENTA COM DIAGRAMA RADIAL E OS VARIOGRAMAS. (B) MAPA POTENCIOMÉTRICO DA ÁREA DE ESTUDO NO ANO DE 2016. (C) VISTA EM PLANTA DO PLANO PREFERENCIAL DETERMINADO COM BASE NO FLUXO DE ÁGUA SUBTERRÂNEA E (D) VISTA EM CORTE DO PLANO PREFERENCIAL ESCOLHIDO COM BASE NO FLUXO DE ÁGUA SUBTERRÂNEA.....	53
FIGURA 15: QUADRO LITOESTRATIGRÁFICO E EVOLUÇÃO TECTONO-SEDIMENTAR DO SEGMENTO CENTRAL DO RCSB (RICCOMINI ET AL, 2004 APUD CASADO ET AL. 2011). ONDE: P – LEQUES ALUVIAIS PROXIMAIS; M-D – LEQUES ALUVIAIS MEDIANOS A DISTAIS ASSOCIADOS À PLANÍCIE ALUVIAL DE RIOS ENTRELAÇADOS; T- DEPÓSITO DE TÁLUS; C-DEPÓSITOS COLUVIAIS; CA-DEPÓSITOS COLÚVIO ALUVIAIS; A-DEPÓSITOS ALUVIAIS. EXTRAÍDO DE DA COSTA CASADO (2011).	62
FIGURA 16: FLUXOGRAMA PARA ELABORAÇÃO DE MODELOS CONCEITUAIS NO LEAPFROG WORKS ®.	66

FIGURA 17: ELABORAÇÃO DO MODELO GEOLÓGICO. (A) VISTA DAS SONDAGENS COM INFORMAÇÃO DE LITOLOGIA; (B) SUPERFÍCIES DE CONTATO GERADAS A PARTIR DA INTERPOLAÇÃO DOS DADOS E (C) VOLUMES GERADOS A PARTIR DAS SUPERFÍCIES DE CONTATO. SEM EXAGERO VERTICAL.	68
FIGURA 18: AVALIAÇÃO DAS SUPERFÍCIES POTENCIOMÉTRICAS. (A) CORTE NORTE-SUL COM VISADA PARA LESTE COM INFORMAÇÃO DE LITOLOGIA E SUPERFÍCIES POTENCIOMÉTRICAS HISTÓRICAS E (B) CORTE NORTE-SUL COM VISADA PARA SUDESTE COM INFORMAÇÃO DE LITOLOGIA E SUPERFÍCIES POTENCIOMÉTRICAS HISTÓRICAS. SEM EXAGERO VERTICAL.	70
FIGURA 19: VARIOGRAFIA EXPERIMENTAL PARA ELABORAÇÃO DE PLUMAS DE CONTAMINANTES. (A) INTERFACE DA EXTENSÃO DE CONTAMINANTES COM DIAGRAMA RADIAL E OS VARIOGRAMAS PARA OS DADOS DE 1,2-DICLOROETANO PARA O ANO DE 2016; (B) MAPA POTENCIOMÉTRICO DA ÁREA DE ESTUDO NO ANO DE 2016 UTILIZADO PARA DETERMINAÇÃO DO PLANO PREFERENCIAL; (C) VISTA EM PLANTA DO PLANO PREFERENCIAL DETERMINADO A PARTIR DO MAPA POTENCIOMÉTRICO DO ANO DE 2016 E (D) VISTA EM PERSPECTIVA DO PLANO PREFERENCIAL DETERMINADO A PARTIR DO MAPA POTENCIOMÉTRICO DO ANO DE 2016.	73
FIGURA 20: VISTAS EM DIFERENTES PERSPECTIVAS DO MODELO CONCEITUAL TRIDIMENSIONAL COM INFORMAÇÕES DE LITOLOGIA E PLUMA DE 1,2-DICLOROETANO PARA A ÁREA DE ESTUDO. FIGURA SEM EXAGERO VERTICAL.	75
FIGURA 21: VISTAS EM DIFERENTES PERSPECTIVAS DO MODELO CONCEITUAL TRIDIMENSIONAL COM INFORMAÇÕES DE LITOLOGIA E PLUMA DE TETRACLOROETENO PARA A ÁREA DE ESTUDO. FIGURA SEM EXAGERO VERTICAL.	76
FIGURA 22: EVOLUÇÃO DO VOLUME EM M ³ DAS PLUMAS DE 1,2-DICLOROETANO E TETRACLOROETENO.	78

1. INTRODUÇÃO

Segundo levantamento realizado pela Companhia Ambiental do Estado de São Paulo ([CETESB, 2020](#)), atualmente são mais de 6400 áreas contaminadas cadastradas no Estado de São Paulo e esse número tende a ser ainda maior considerando as áreas ainda não identificadas e investigadas, bem como as áreas fora do Estado de São Paulo. Para assegurar a mitigação dos impactos gerados por esse crescente número de áreas contaminadas, é aplicado o Gerenciamento de Áreas Contaminadas (GAC). Conceito esse definido pela [CETESB \(2021\)](#) como “um conjunto de ações de identificação, caracterização e implementação de medidas de intervenção em Áreas Contaminadas localizadas em uma região de interesse, com o objetivo de viabilizar o uso seguro proposto ou implementado em cada uma delas, culminando na sua classificação como Área Reabilitada para o Uso Declarado (AR).”

É durante a Avaliação Preliminar que deve ser realizado o primeiro modelo conceitual da área (MCA), atualizado e revisado nas demais etapas. Esse modelo é definido pela [ASTM E1689-20 \(2020\)](#) como uma representação escrita ou pictórica de um sistema ambiental e os processos biológicos, físicos e químicos que determinam o transporte de contaminantes da fonte até os seus receptores ambientais. Em outras palavras, podemos dizer que o Modelo Conceitual de Área Contaminada é o cenário a partir do qual é possível contar a história de uma contaminação. Sendo assim, esse cenário deve conter as fontes principais, os meios de transporte e os principais receptores para o risco, bem como todas as demais informações que auxiliem no entendimento histórico e principais características da contaminação ([Kresic e Mikszewski, 2013](#)).

De forma geral, as principais empresas de consultoria ambiental brasileiras apresentam Modelos Conceituais de Área em forma de texto apoiado por figuras em duas dimensões (croquis), tabelas e/ou fluxogramas. É com base nessas informações que muitas decisões são tomadas, pois é a partir do Modelo Conceitual de Área que a equipe técnica é capaz de formular hipóteses e repensar a coleta de novas informações, visando sempre a redução da incerteza. Entretanto, nem sempre essa apresentação de informações é suficiente para avançar ou finalizar o gerenciamento da área.

Muitos dos casos envolvem uma grande complexidade que pode estar associada ao meio físico, como heterogeneidades, fraturas, falhas, lentes de materiais distintos e materiais em subsuperfície, ou associada a uma complexidade química, que pode envolver a mistura de contaminantes, degradação, atenuação natural, entre outros. Na tentativa de mitigar os impactos gerados em uma situação de contaminação, podem ser adotadas medidas de remediação, que ao longo do tempo podem alterar o fluxo das águas subterrâneas, mudar características físicas e biológicas do meio, gerar subprodutos e uma série de outras variáveis que podem ser relevantes para o entendimento do modelo conceitual como um todo. A utilização de modelos conceituais tradicionais muitas vezes deixa de considerar detalhes que podem representar importantes fatores para a construção do conhecimento.

Como uma forma de melhor caracterizar e apresentar as áreas e facilitar a comunicação entre as diversas partes, empresas de consultoria ambiental têm optado pela utilização de modelos tridimensionais, de maneira muito similar aos modelos já bastante utilizados na área de mineração, como aliados aos cálculos de jazidas. De forma a atender esse novo nicho de mercado, algumas empresas desenvolvedoras de *softwares* têm desenvolvido frentes de pesquisa específicas nesta área, visando atender as particularidades deste setor, como é o caso da Seequent, empresa desenvolvedora do Leapfrog Works ®.

No presente Trabalho de Formatura, serão utilizados o *software* Leapfrog Works ® e a sua Extensão de Contaminantes desenvolvidos pela Seequent para a elaboração de um Modelo Conceitual Tridimensional e Temporal de Área Contaminada.

Este Trabalho de Formatura está inserido no contexto e faz uso do Banco de Dados Histórico do Projeto do doutoramento de Sasha Tom Hart, pesquisador do programa de Recursos Minerais e Hidrogeologia. A estrutura foi dividida de forma a apresentar uma revisão bibliográfica acerca de modelos conceituais de área contaminada, uma breve descrição sobre o funcionamento do Leapfrog Works ® e sua Extensão de Contaminantes, incluindo uma revisão acerca da variografia bem como a contextualização geológica, hidrogeológica e ambiental da área de estudo. Seguida desta revisão, será apresentada a metodologia para a elaboração do modelo

conceitual tridimensional e temporal e os resultados serão apresentados e discutidos em formato de artigo científico ao final desta monografia.

2. JUSTIFICATIVA E OBJETIVOS

A elaboração de modelos conceituais informativos e compreensíveis representa uma parte crucial para o Gerenciamento de Áreas Contaminadas, servindo como base para a formulação e teste de hipóteses. Deve, portanto, ser elaborado de forma preliminar nas etapas iniciais de qualquer projeto e atualizado ao longo do avanço das etapas do GAC e com a entrada de novos dados.

Durante a etapa de Investigação Detalhada, a [CETESB \(2017\)](#) indica que, além do texto explicativo, a caracterização do meio físico deverá conter "plantas e seções estratigráficas e modelos tridimensionais representativos das rochas, sedimentos, solos e aterros identificados no local, especificando o tipo de porosidade (intergranular ou fratura) presente para cada material ou unidade hidroestratigráfica identificada".

Essa caracterização tridimensional do meio físico pode ser realizada por meio da modelagem tridimensional, metodologia comumente utilizada no setor de mineração, para dar suporte ao entendimento geológico e auxiliar nos trabalhos de avaliação de recursos minerais. Todavia, a modelagem tridimensional ainda é subutilizada nos projetos de meio ambiente relacionados ao gerenciamento de áreas contaminadas.

Dentre os principais motivos para a não utilização desse tipo de ferramenta estão a escassez de *softwares* específicos para a área de meio ambiente, alto custo, alta demanda de tempo, carência de profissionais capacitados para elaboração e análise crítica dos modelos gerados e a falta de disponibilidade de conteúdo para aprendizado de forma acessível.

O advento de novas tecnologias de investigação e aquisição de dados faz com que seja crescente o volume de dados gerados nestes projetos, que por sua vez, geram a necessidade de utilização de novas ferramentas para a síntese e visualização de informações. O Leapfrog Works® e a sua Extensão de Contaminantes, nesse sentido, podem ser empregados para integração dos dados, capazes de mesclar uma série de informações, facilitando a compreensão de possíveis correlações entre diferentes grupos de dados e reduzindo a incerteza do modelo como um todo.

Embora os modelos tridimensionais por modelagem matemática sejam cada vez mais necessários, ainda é escassa a quantidade de publicações científicas acerca do assunto aplicado ao Gerenciamento de Áreas Contaminadas, em especial, quando se considera a literatura em português. Esse número é ainda menor quando se busca por modelos conceituais temporais e tridimensionais, capazes de avaliar a evolução do modelo no tempo e não apenas como uma fotografia de um momento específico.

Considerando tudo isso, o presente Trabalho de Formatura tem como objetivo geral a elaboração de um Modelo Conceitual Tridimensional e Temporal (Quadrimensional) de Área Contaminada. O modelo será gerado através da modelagem implícita permitida pelo *software* Leapfrog Works ® e sua Extensão de Contaminantes, considerando o histórico ambiental, o contexto hidrogeológico e a evolução da geometria e transporte das plumas de contaminação.

3. FUNDAMENTAÇÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1. Modelos Conceituais de Área (MCA)

Um modelo conceitual de área contaminada (MCA) é definido pela Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos da América ([USEPA, 1996](#)) como uma imagem tridimensional das condições da área de estudo, capaz de ilustrar a distribuição de contaminantes, mecanismos de liberação, vias de exposição, rotas de migração e potenciais receptores. A diretriz norte americana [ASTM E1689-20 \(2020\)](#), por sua vez, reinterpreta o modelo conceitual de área de forma mais abrangente, como uma representação escrita ou pictórica de um sistema ambiental e os processos biológicos, físicos e químicos que determinam o transporte de contaminantes da fonte até os seus receptores ambientais.

No Brasil, a Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB), referência em todo o país, apresenta as etapas do Gerenciamento de Áreas Contaminadas em um manual elaborado em 2001 ([CETESB, 2001](#)) e reavaliado no ano de 2021 ([CETESB, 2021](#)) bem como define todos os componentes necessários para cada etapa na Decisão de Diretoria nº 38 ([CETESB, 2017](#)). Nesses documentos, a elaboração de um Modelo Conceitual de Área está contida na etapa de Avaliação Preliminar, segunda etapa do Gerenciamento de Áreas Contaminadas. Esse modelo deve ser revisado e atualizado nas demais etapas e, portanto, não é estático, deve sempre considerar a entrada de novos dados, permitindo assim, uma melhor visualização das informações disponíveis e possibilitando a tomada de decisões com redução de incertezas.

Nesse contexto, diversas diretrizes foram elaboradas com a finalidade de auxiliar no desenvolvimento dos modelos conceituais de áreas contaminadas desde então ([USEPA, 1996](#); [ASTM E1689-20, 2020](#); [CETESB, 2017](#); [ABNT/NBR, 2013](#)). De forma geral, as principais empresas de consultoria ambiental atuantes no Brasil seguem as orientações determinadas na Decisão de Diretoria número 38 ([CETESB, 2017](#)) e na norma ABNT 16210 ([ABNT/NBR, 2013](#)). Sendo assim, apresentam Modelos Conceituais de Área em forma de texto apoiado por figuras em duas dimensões

(croquis, mapas, seções), tabelas, blocos-diagramas e/ou fluxogramas. Um exemplo de modelo conceitual aplicado ao GAC é apresentado na Figura 1.

Em todos esses modelos produzidos, busca-se caracterizar a área com base nas seguintes etapas:

- (i) Caracterização da Área de Estudo - Qual é o limite da minha área e quais são as atividades desenvolvidas atual e historicamente?
- (ii) Caracterização de Fontes de Contaminação - Qual é a natureza da(s) fonte(s)? Quais são as substâncias de interesse? Qual sua extensão?
- (iii) Caracterização do meio físico - Quais são as características do meio? Qual é a direção do fluxo?
- (iv) Identificação e Mapeamento de Possíveis Receptores
- (v) Transporte e Destino dos Contaminantes - Para onde vai esse contaminante? Qual a sua velocidade? Qual o tempo que levará até atingir o receptor? Em qual concentração irá chegar ao receptor?

Todas essas questões devem permear a elaboração de um Modelo Conceitual de Área Contaminada ([Kresic e Mikszewski, 2013](#)) e é com base nessas informações que muitas decisões são tomadas, uma vez que os dados são apresentados de forma a auxiliar a equipe técnica no entendimento das condições da área para que então seja possível formular hipóteses e planejar a coleta de novas informações visando sempre a redução da incerteza.

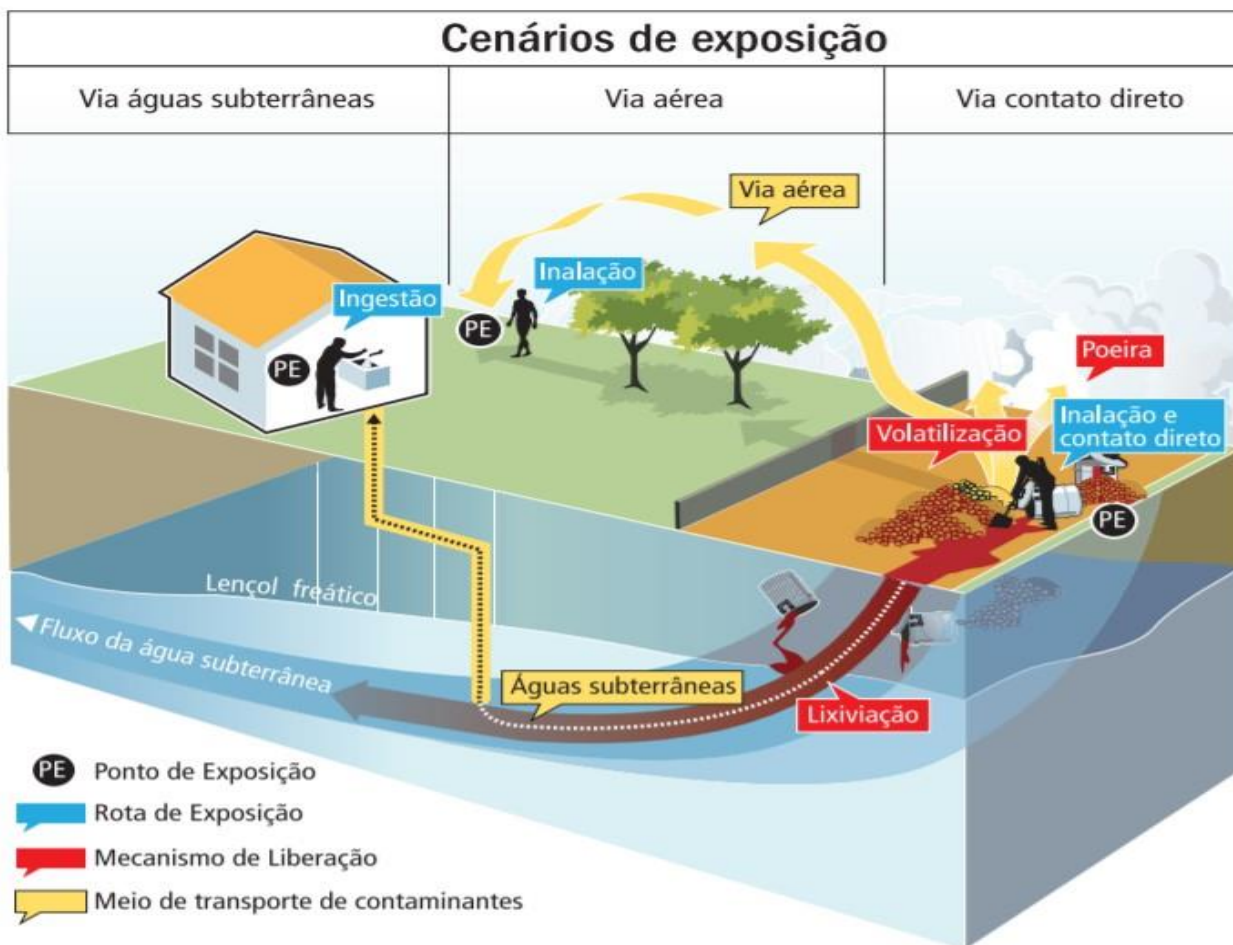


Figura 1: Exemplo de Modelo Conceitual no Gerenciamento de Áreas Contaminadas. Extraído de (Marker, 2008).

Para a área de estudo, foram elaborados diversos modelos conceituais em formato de texto, tabelas, mapas e seções durante as atividades ambientais realizadas pelas consultorias ambientais, buscando atender todos os questionamentos acima listados. Esses modelos foram constantemente atualizados com a entrada de novos dados possibilitando novas interpretações para o cenário. Modelos conceituais temporais são definidos por [Hart et al. \(2021\)](#) como uma representação sequencial ou combinada de modelos individuais no tempo. Os mesmos autores apresentam um exemplo, considerando três cenários principais: antes da ocupação industrial, durante o uso industrial e no contexto de uso industrial após a realização de atividades de remediação ambiental ([Figura 2](#)). Evidencia-se neste MCA a presença de mais de uma fonte possível para a contaminação, combinadas conforme a dinâmica hidrogeológica da área e suas alterações no tempo.

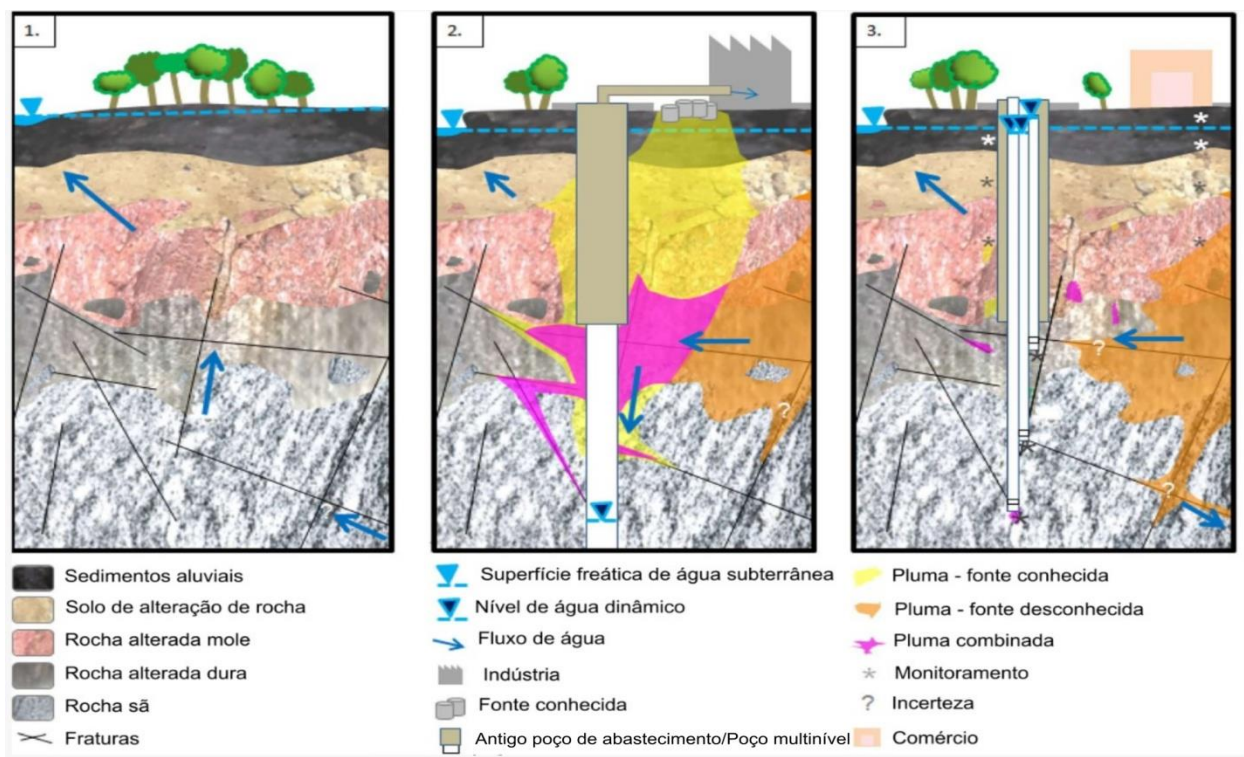


Figura 2: Modelo Conceitual Temporal da Área de Estudo. Modificado de (Hart et al., 2021) (1) Modelo conceitual antes da ocupação industrial; (2) Modelo conceitual durante a ocupação industrial e (3) Modelo conceitual após as atividades de remediação.

3.2. Leapfrog Works ® e Extensão de Contaminantes

O Leapfrog Works ® é um *software* desenvolvido pela empresa Seequent voltada para os setores de Engenharia Civil e Meio Ambiente para modelagem e visualização tridimensional dinâmica de parâmetros categóricos e numéricos (Seequent, 2017). Para a realização da modelagem, o Leapfrog permite a utilização de uma série de algoritmos convencionais como a krigagem (simples e ordinária), vizinhos mais próximos e o inverso da distância, no entanto, destaca-se o uso do algoritmo Fast Radial Base Function (Fast RBF™), patenteado pela Seequent.

Esse algoritmo é semelhante a um tipo específico de krigagem, conhecida como krigagem dupla (Cowan et al., 2003) capaz de realizar a interpolação dos dados de forma automatizada a partir dos dados, diferentemente da modelagem explícita em que, tradicionalmente, as superfícies são criadas a partir de linhas e polígonos, derivados de interpretações do modelador. Para a aplicação desse algoritmo, há a utilização de funções de interpolação que definem a importância de cada amostra com base na distância com o ponto a ser interpolado.

Em síntese, esse algoritmo consiste em uma série de funções que envolvem um conjunto de dados e, a partir de então, é escolhido um conjunto de funções básicas de forma que a sua combinação linear satisfaça as condições de interpolação. Conforme é apresentado por [Caumon et al. \(2012\)](#):

$$f(x) = \sum_{i=1}^L c_i \cdot p_i(x) + \sum_{n=1}^N \lambda_n \cdot \Phi(|x - x_n|)$$

Onde:

$p_i(x)$: São funções polinomiais de base;

c_i : Coeficientes de *drift*;

L : Total de termos polinomiais;

N : Número de pontos de dados;

$\Phi(|x - x_n|)$: É uma função de covariância entre um ponto de dado (x_n) e um ponto desconhecido (x);

λ_n : são os coeficientes de interpolação desconhecidos

Para encontrar os coeficientes, é necessário resolver o seguinte sistema linear:

$$\begin{bmatrix} \Phi & P \\ P^T & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \lambda \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ 0 \end{bmatrix}$$

Onde:

$$\Phi = \begin{bmatrix} \phi(0) & \cdots & \phi(|x_1 - x_N|) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi(|x_N - x_1|) & \cdots & \phi(0) \end{bmatrix}$$

$$P = \begin{bmatrix} p_1(x_1) & \cdots & p_L(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ p_1(x_N) & \cdots & p_L(x_N) \end{bmatrix}$$

De modo geral, esse conjunto de funções matemáticas possui dois objetivos principais. O primeiro, consiste em satisfazer as condições de interpolação, envolvendo os parâmetros Φ , P , λ e f . O segundo objetivo é a otimização dos processos, envolvendo os parâmetros P^T , e c . Esse conjunto de equações torna a

modelagem a partir desse algoritmo bastante rápida quando comparada com os algoritmos tradicionais.

É classificada pela [Seequent \(2020a\)](#) como um método de interpolação global que, assim como a krigagem possui covariograma de controle de dados e a sua extrapolação pode ser a partir de uma média especificada ou realizada de forma automática.

A utilização do Fast RBF™ possui uma série de vantagens conforme levantado por [Cowan et al. \(2003\)](#) e incluem uma capacidade de modelar uma geologia complexa com variadas formas, capacidade de gerar superfícies diretamente a partir dos dados das sondagens, capacidade de processar dados esparsos ou densos, não necessitar de digitalização manual, entre outras.

Destaca-se a entre as vantagens a possibilidade de entrada de uma série de dados em variados formatos como grids de elevação, informações georreferenciadas (linhas, pontos, imagens, mapas), arquivos tipo *Computer Aided Design* (CAD) (.dgn, .dwg e .dxf), modelos de fluxo (FEFLOW®, MODFLOW®). Além disso, são vários os tipos de arquivo de saída possíveis como superfícies e volumes, planejamento de sondagens, tabelas, seções, imagens, vídeos, *stereonets*, informações georreferenciadas (linhas, pontos, polígonos) e modelos para impressão tridimensional ([Seequent, 2017](#)).

A Extensão de Contaminação, por sua vez, é uma ferramenta específica para a modelagem de plumas de contaminação a partir dos dados de monitoramento de uma rede de poços recentemente lançada pela Seequent. Essa extensão permite a elaboração de plumas e a realização de estimativa de volume a partir dos algoritmos convencionais bem como pelo Fast RBF™. Para isso, são apresentadas ao usuário informações estatísticas sobre os parâmetros numéricos modelados e sobre a distribuição dos dados em um determinado domínio. A variografia experimental para ajuste aos modelos teóricos é realizada dentro da interface da extensão, de forma a permitir alteração dos parâmetros e ajustes necessários para a elaboração dos volumes finais. Para a utilização da krigagem, essa extensão permite também a validação cruzada dos resultados obtidos e a determinação dos volumes gerados ([Seequent, 2020b](#)).

3.3. Variogramas

Os variogramas descrevem a continuidade espacial entre variáveis regionalizadas, plotando assim a variância versus a distância (Huijbregts, 1975). São três os tipos de variogramas apresentados por Guerra (1988): variograma observado (ou experimental), o verdadeiro, que representa a situação real, e o teórico (o qual será ajustado de forma a melhor representar a situação real).

3.3.1. Função variograma e variograma experimental

A função variograma é uma função matemática que permite o cálculo do variograma experimental, a partir do qual são realizadas todas as inferências necessárias para a realização de uma estimativa.

A função variograma é apresentada por Matheron (1963):

$$2\gamma(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [Z(x+h) - Z(x)]^2$$

E a função semivariograma é dada por:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n [Z(x+h) - Z(x)]^2$$

Onde:

$2\gamma(h)$ é a função variograma;

$\gamma(h)$ é a função semivariograma;

n é número de pares de pontos;

$Z(x+h)$ é o valor da variável no ponto $(x+h)$; e

$Z(x)$ é o valor da variável no ponto (x)

Segundo Yamamoto e Landim (2015), há confusão terminológica na literatura em relação a utilização do prefixo *semi*. Esse prefixo é utilizado para se referir à divisão da média das diferenças ao quadrado por dois, gerando assim, a função

semivariograma, que é utilizada nos cálculos e muitas vezes chamada simplesmente de variograma.

A resolução das funções dará origem aos variogramas e semivariogramas experimentais, representado de forma gráfica relacionando a variância espacial e a distância (h).

3.3.2. Parâmetros do Variograma

Os variogramas podem ser com ou sem patamares, conforme é apontado por Yamamoto e Landim (2015). Os variogramas com patamar (Figura 3) seis propriedades principais descritas a seguir:

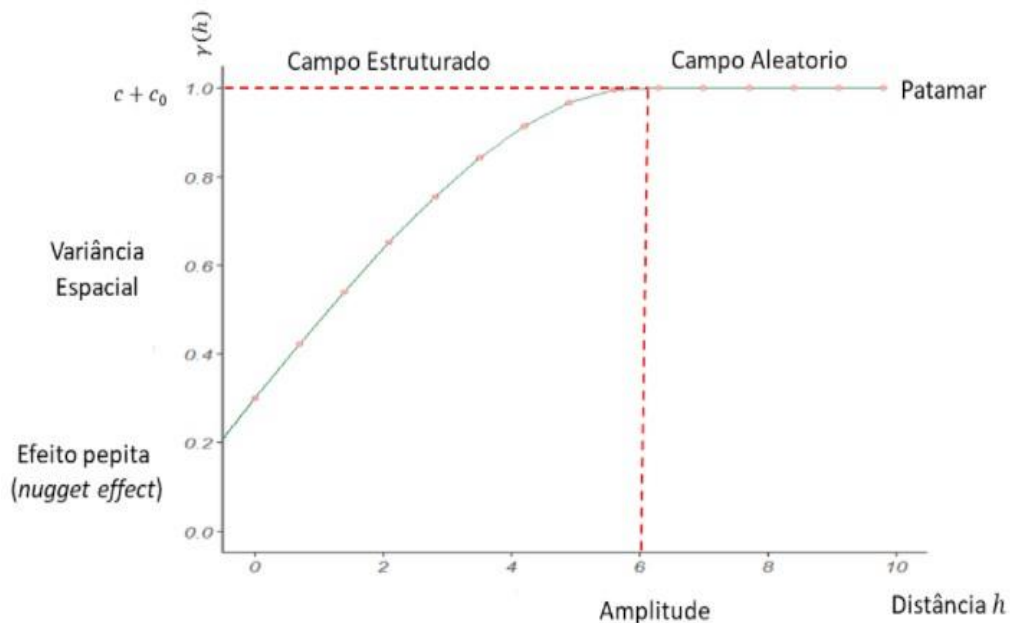


Figura 3: Propriedades do Variograma. Extraído de geokrigagem.com.br

- (i) Amplitude: É a distância máxima em que existe dependência espacial entre as amostras. Separa no eixo da distância (abscissas) os campos estruturado e aleatório. Como consequência, define os Campos Estruturado (Região do gráfico em que há dependência espacial entre as amostras. Nota-se que a variância aumenta com a distância) e Aleatório (Região do gráfico em que não é possível identificar dependência espacial entre as amostras. Nesse campo, pode existir

uma tendência de estabilização da amplitude ainda que a distância seja aumentada)

- (ii) Patamar: É o valor máximo da variância espacial e é atingido a partir da amplitude;
- (iii) Variância Espacial: É a medida de dissimilaridade entre dois pontos a uma dada distância; e
- (iv) Efeito Pepita (*nugget effect*): É uma descontinuidade próxima à origem do variograma.

3.3.3. Distribuição espacial dos pontos amostrais

A distribuição espacial dos pontos amostrais define se o variograma pode ou não ser calculado diretamente com base nos pontos amostrais (Yamamoto e Landim, 2015). Em linhas gerais, quando a amostragem se dá através de uma distribuição em malha regular, pode-se traçar direções para busca dos pares de pontos a serem plotados no variograma. No entanto, quando se tem uma malha irregular de amostragem, não se pode calcular o variograma de forma direta, deve-se definir parâmetros adicionais, como a tolerância angular e de passo (Figura 4).

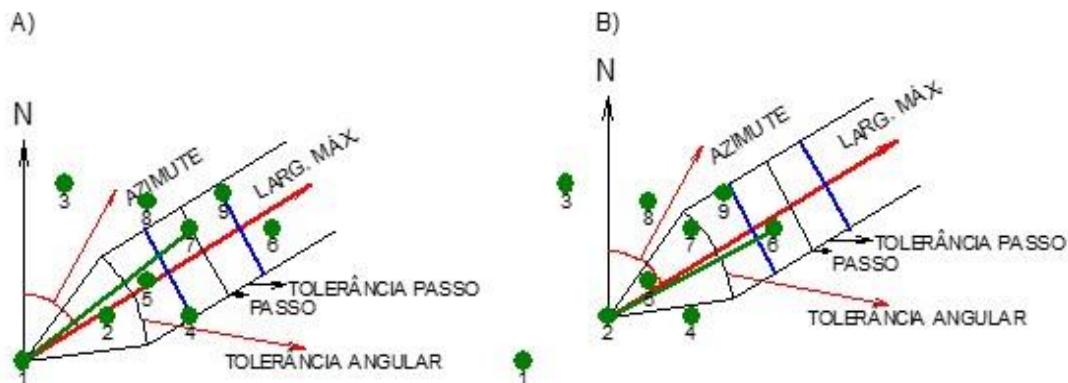


Figura 4: Esquema mostrando a pesquisa de pares para cálculo de variogramas experimentais no caso de distribuição irregular (A) Centrado no ponto 1 (B) Centrado no ponto 2. Extraído de geokrigagem.com.br

Para a maior parte dos projetos relacionados ao Gerenciamento de Áreas Contaminadas, a malha de coleta de amostras é irregular. Esse fato se deve a vários

motivos que incluem o objetivo das sondagens realizadas, obstruções por edificações e acidentes geográficos de terreno.

O cálculo de variogramas em diferentes direções pode resultar em domínios isotrópicos, em que as diferenças entre as direções são pouco significativas e situações anisotrópicas, em que essas diferenças possuem maior relevância.

Os três principais tipos de anisotropia são (Yamamoto e Landim, 2015):

- (i) Geométrica: Variograma em diferentes direções apresenta mesmo patamar e diferentes amplitudes;
- (ii) Zonal: Variogramas de diferentes direções apresentam mesma amplitude e diferentes patamares;
- (iii) Mista: Variogramas de diferentes direções apresentam patamares e amplitudes diferentes.

3.3.4. Modelos Teóricos de Variograma

São funções matemáticas contínuas que representam o fenômeno espacial analisado (Guerra, 1988). Os principais modelos teóricos utilizado pelo Leapfrog Works® e sua Extensão de Contaminantes são os modelos esférico, exponencial e gaussiano. Nos modelos apresentados a seguir temos que:

C_0 é o efeito pepita (*nugget effect*);

C é a variância espacial;

a é a amplitude; e

h é a distância.

Os modelos apresentados a seguir estão apresentados em Druck (2002).

Modelo Esférico (Matheron): possui origem aproximadamente linear, e é dado por:

Se $0 < h < a$:

$$\gamma(h) = C_0 + C \left[\frac{3h}{2a} - \frac{1}{2} \left(\frac{h}{a} \right)^3 \right]$$

Se $h \geq a$:

$$\gamma(h) = C_o + C$$

Se $h = 0$:

$$\gamma(h) = 0$$

Modelo Exponencial (Formery): Linear próximo à origem com crescimento mais acentuado que o apresentado pelo modelo esférico. Suas equações são dadas por:

Se $0 < h < a$:

$$\gamma(h) = C_o + C \left[1 - e^{-\frac{h}{a}} \right]$$

Se $h \geq a$:

$$\gamma(h) = C_o + C$$

Se $h = 0$:

$$\gamma(h) = 0$$

Modelo Gaussiano: Possui formato parabólico próximo à origem. É dado por:

Se $0 < h < a$:

$$\gamma(h) = C_o + C \left[1 - e^{-\frac{h^2}{a^2}} \right]$$

Se $h \geq a$:

$$\gamma(h) = C_o + C$$

Se $h = 0$:

$$\gamma(h) = 0$$

Para que os modelos representem os fenômenos espaciais a serem analisados, é realizado o ajuste iterativo por meio da interface da Extensão de Contaminantes do Leapfrog Works®. O ajuste dos modelos é exemplificado no capítulo 4.7.

3.4. Contexto Geológico e Hidrogeológico Regional

Segundo [Hasui \(1975\)](#), a Região Metropolitana de São Paulo (RMSP) tem como arcabouço geológico os terrenos policíclicos do Cinturão de Dobramentos Ribeira, conhecido como Faixa Ribeira, que consiste em um orógeno acrescionário colisional

brasiliiano desenvolvido durante a amalgamação do Continente Gondwana. A Faixa Ribeira possui uma série de interpretações e denominações de seus blocos e agrupamentos litológicos e, para o presente trabalho, será utilizada a compartimentação em cinco unidades distintas, utilizada por autores como, [Trouw et al. \(2000\)](#) e [Heilbron et al. \(2004\)](#): Terrenos Ocidental, Oriental, Paraíba do Sul, Cabo Frio e Embu.

Os mesmos autores acima citados subdividem a Faixa Ribeira em oito domínios estruturais: Domínios Andrelândia, Juiz de Fora, São Roque, Costeiro, Socorro, Complexo Embu, Grupo Paraíba do Sul e Intrusivas Granitoides. A área de estudo, encontra-se sobre o Complexo Embu. Esse Complexo foi subdividido em sete unidades por [Perrota et al. \(2005\)](#) conforme:

- (i) milonítica: presença de granada-biotita-muscovita xisto intercalado com biotita xisto, metacórseo, biotita quartzito e sericita filito.
- (ii) sericita xisto: caracterizado por metarenito, sericita filito, filito carbonoso e sericita xisto.
- (iii) quartzítica: com quartzito, xisto e filito.
- (iv) paragnáissica: com a presença de muscovita-granada-sillimanita-biotita gnaiss, biotita gnaiss tonalítico a granodiorítico e xisto gnáissico.
- (v) gnaisses bandados: biotita gnaiss granodiorítico e granítico intercalado com biotita gnaiss monzodiorítico, biotita-hornblenda-granada gnaiss, anfibolito e quartzito.
- (vi) xistos localmente migmatíticos: muscovita-biotita-quartzo xistos com cianita, granada, estauroлита e sillimanita, quartzo xisto com muscovita, granada, biotita e plagioclásio, lentes calcissilicáticas, anfibolitos e rochas metaultramáficas.
- (vii) ortognáissica: biotita gnaiss homogêneo, granodiorítico a tonalítico.

Em síntese, esse Complexo é formado por rochas ortognáissicas polimigmatizadas e polideformadas; rochas metassedimentares de alto grau como gnaisses e xistos na fácies anfibolito além de sericita xistos e filitos de baixo grau metamórfico.

É ainda na Faixa Ribeira, onde está instalado o *Rift* Continental do Sudeste do Brasil, na direção ENE-WSW. Esse *rift* possui seus limites interpretados de distintas formas a depender dos autores, pode se estender sobre os estados do Paraná, São Paulo e Rio de Janeiro (Riccomini, 1989) e consiste em uma série de depressões por vezes com preenchimento sedimentar cenozoico. Riccomini et al. (2004) divide o *Rift* em três segmentos: Ocidental, na região de Curitiba, Oriental, englobando as Bacias do Macacu, Itaboraí e o Gráben de São João e o segmento Central que engloba as Bacias de São Paulo, Taubaté, Resende e Volta Redonda (Figura 5).

A Bacia Sedimentar de São Paulo, preenchida por sedimentos Paleógenos do Grupo Taubaté cobertos por depósitos aluvionares recentes de idade Quaternária, é composta por rochas sedimentares das seguintes Formações, descritas por Riccomini (1989):

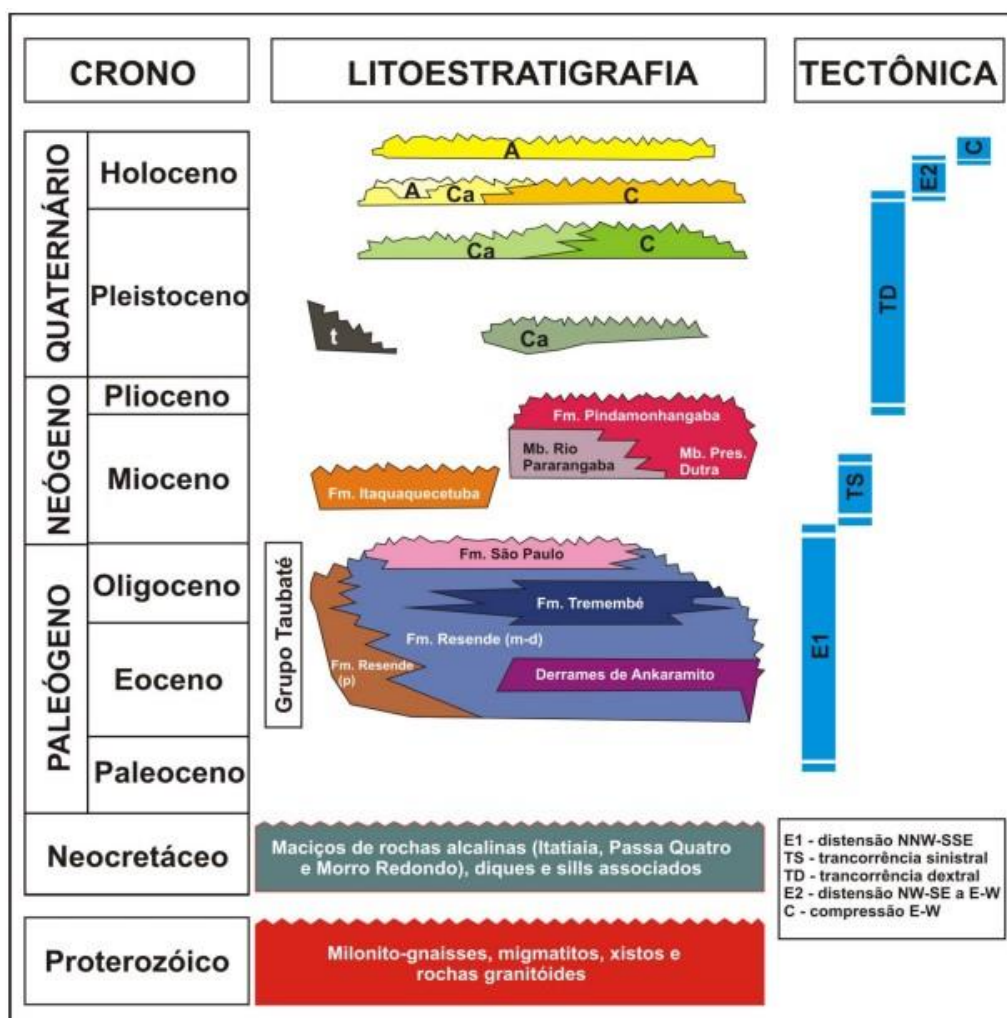


Figura 5: Quadro Litoestratigráfico e evolução tectono-sedimentar do segmento central do RCSB (Riccomini et al., 2004), onde p-leques aluviais proximais; m-d-leques aluviais medianos a distais associados à planície aluvial de rios entrelaçados; t-depósito de tálus; c-depósitos colúvio aluviais; a-depósitos aluviais. Extraído de (da Costa Casado et al., 2011).

- (i) Formação Resende: caracterizada por ser a unidade basal e lateral do Grupo Taubaté é caracterizada por duas litofácies, sendo a de contato com o embasamento composta por conglomerados polimíticos, interdigitados com arenitos e lamitos arenosos de leques aluviais proximais e a outra litofácies é formada por arenitos intercalados com lamitos correspondendo a leques aluviais distais.
- (ii) Formação Tremembé: está interdigitada lateralmente e verticalmente com os depósitos da Formação Resende com gênese em ambiente lacustre do tipo

playa lake, formada por camadas tabulares de argilitos verdes maciços intercalados com argilitos cinza escuro a preto com matéria orgânica.

- (iii) Formação São Paulo: é a unidade de topo do Grupo Taubaté com sua formação através de sistema fluvial meandrante composta por fácies sedimentares de arenitos grossos a conglomeráticos com base erosiva e com presença de clastos argilosos, siltitos e argilitos laminados, arenitos médios a grossos gradando para sedimentos mais finos rítmicos e laminados.

Essa cobertura sedimentar da Bacia de São Paulo está no contexto da Unidade Hidrográfica de Gerenciamento de Recursos Hídricos do Alto Tietê (UGHRI 06) (IGC, 2014). Essa unidade possui uma área de 5.868 km² e abrange 34 municípios, e os sistemas aquíferos Sedimentar (SAS) e Cristalino (SAC) (FABHAT, 2018).

O Sistema Aquífero Sedimentar, denominado Aquífero São Paulo na área de estudo, é constituído pelas Formações Resende, Tremembé e São Paulo e ocupa uma área de aproximadamente 1.000 km². A disposição de camadas argilosas com lentes arenosas de forma irregular faz com que seja considerado um aquífero livre a semiconfinado, com porosidade primária predominante e espessura média de 100 m. É o aquífero mais intensamente explorado da Bacia do Alto Tietê uma vez que ocorre em região de alto adensamento populacional. Devido à disposição irregular de camadas e materiais geológicos, as vazões medidas nesse aquífero variam entre 10 e 40 m³/h.

Por sua vez, o Sistema Aquífero Cristalino, também chamado de Aquífero Pré-Cambriano, é formado pelas rochas do embasamento que possuem baixa porosidade primária. Essas rochas são submetidas à ação tectônica e do intemperismo químico, gerando sistemas de falhas e fraturadas por onde se dá o principal fluxo e armazenamento de águas subterrâneas. O potencial hídrico desse Sistema varia conforme a abertura e densidade das zonas favoráveis o que faz com que exista uma grande variação nas vazões possíveis, variando entre 0 e 50 m³/h.

3.5. Contexto Geológico e Hidrogeológico Local

Para o projeto em questão, a geologia local, definida a partir das sondagens realizadas na área de estudo, foi reinterpretada com base no Perfil de Intemperismo para Regiões Tropicais (Vaz, 1996), comumente utilizada nos projetos de Meio Ambiente e Geologia de Engenharia (Figura 6). Para essa classificação de rochas e solos são levados em consideração os processos atuantes, métodos de escavação ou perfuração e o comportamento do material, seja ele solo ou rocha. A seguir, será apresentada a contextualização geológica local conforme Vaz (1996).

A primeira classificação distingue Rocha e Solo Residual. Partindo do material mais basal, têm-se os materiais classificados como Rocha, subdivididos em três categorias:

- (i) Rocha Sã (RS): apresenta pouco ou nenhum processo intempérico ou pedológico, de comportamento variado a depender da rocha e com método de perfuração possível com sondagem rotativa;
- (ii) Rocha Alterada Dura (RAD): apresenta processos de intemperismo físico, de comportamento variado a depender da rocha e com método de perfuração possível com sondagem rotativa, a diferenciação para a rocha sã se dá pela mineralogia uma vez que podem apresentar minerais com cores e resistências originais afetadas, produtos de alteração química; e
- (iii) Rocha Alterada Mole (RAM): presente em perfis de intemperismo mais evoluídos, possui processos de intemperismo químico acentuado, que faz com que os minerais se apresentem alterados e descoloridos. Pode ser escavado com escarificador ou perfurado à percussão com lavagem. Seu comportamento também irá variar conforme o tipo de rocha. Possui contato irregular com o Solo de Alteração (SA).

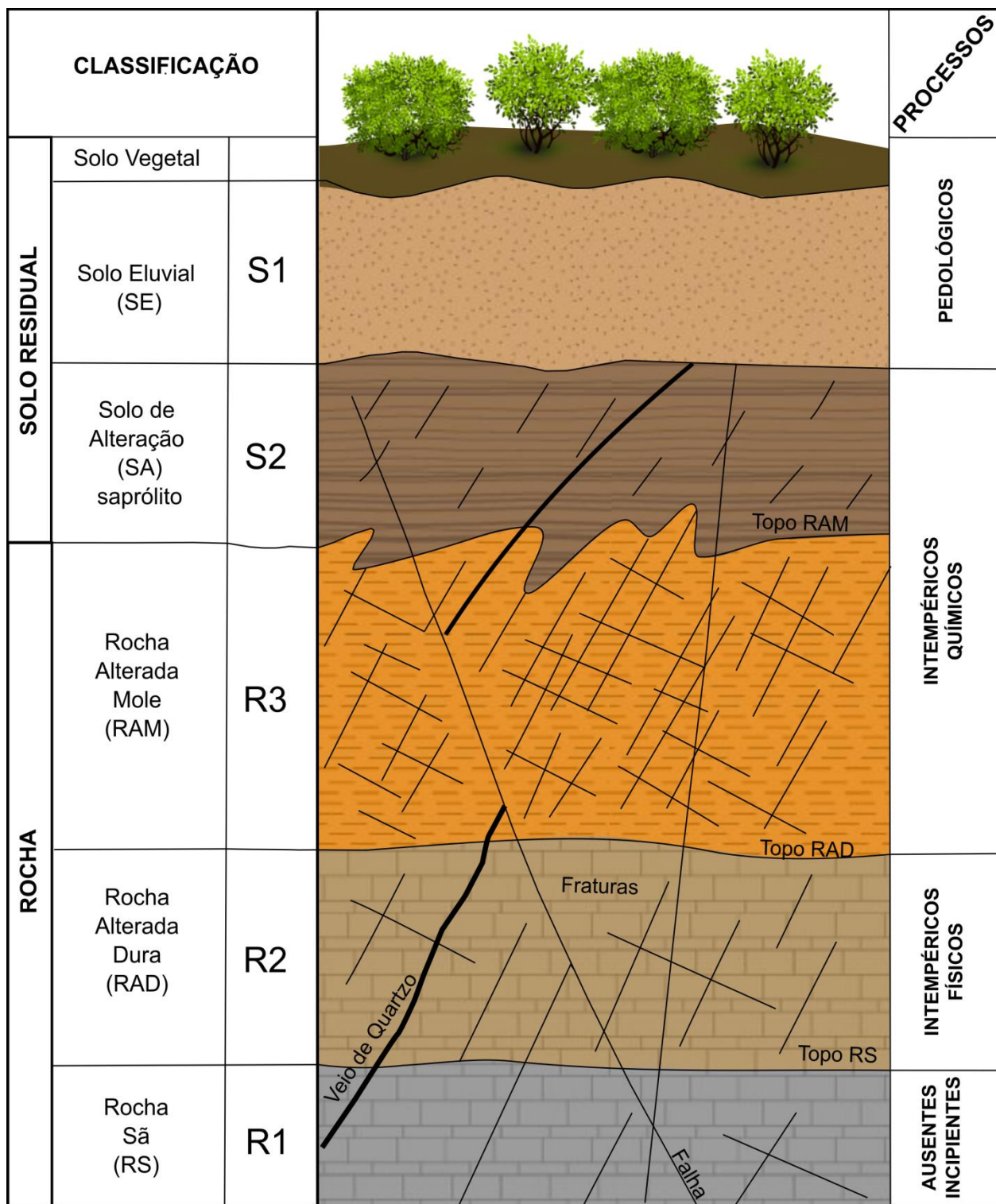


Figura 6: Perfil de Intemperismo para Regiões Tropicais. Modificado de Vaz (1996)

O Solo Residual, por sua vez, é dividido em outras três categorias:

- (i) Solo de Alteração (SA): Material em alteração intempérica, com pouca influência dos processos pedogenéticos, possui comportamento heterogêneo, muitas vezes preservando estruturas originais da rocha como xistosidades, estratificações, fraturas, dobras e contatos. Comumente encontra-se com coloração variegada, marca de sua heterogeneidade que também pode ser vista na textura e composição mineralógica deste solo. Pode ser perfurado à percussão com trado ou lavagem.
- (ii) Solo Eluvial (SE): Possui comportamento de material homogêneo em relação à cor, textura e mineralogia, não apresenta estruturas reliquias. Possui grande influência de processos pedológicos e pode ser perfurado à percussão com trado ou lavagem.
- (iii) Solo Vegetal: Solo mais superficial, com presença de raízes e restos vegetais. Facilmente escavado com lâmina de aço ou perfurado com o trado manual.

São apresentados ainda, os solos transportados, categorizados conforme o agente de transporte principal atuante:

- (i) Via Fluvial: Gera os depósitos de aluvião, erodidos e retrabalhados, depositados no leito e margens de rios, lagoas e lagos.
- (ii) Via Gravitacional: pode gerar coluvião, sem blocos de rocha, gerados por rastejos ou escorregamentos; e tálus, com blocos de rocha e em encostas.
- (iii) Via Marinha: Deposição de sedimentos em praias (sedimentos arenosos) e manguezais (sedimentos argilosos) pela ação de regressão e transgressão marinha.
- (iv) Via eólica: Deposição de solos eólicos, normalmente areias finas, podem formar campos de dunas.

Com base na classificação proposta por Vaz (1996), foi apresentada por Hart et al. (2021) uma classificação específica para os materiais encontrados na área. Nesse contexto, além das classificações para rocha e solo, também são apresentadas mais duas categorias específicas para a área de estudo e compreendem:

- Sedimentos Aluviais Cenozoicos da Bacia de São Paulo: apresenta grande heterogeneidade vertical e horizontal, tipicamente com lentes de argila orgânica no topo, observado na área com espessuras de até 8m.
- Materiais de Aterro: presente em porções limitadas da área, caracteriza-se pela presença de materiais de construção, com destaque para cascalhos e fragmentos de tijolos envoltos em matriz de sedimentos diversos. Possui espessura variada com valor máximo de 4 m.

Segundo Hart et al. (2021), a área está inserida no contexto de duas principais unidades aquíferas:

- Depósitos Sedimentares Cenozoicos: com porosidade primária e vazão de 0,48 m³/h/m e;
- Aquífero cristalino: com vazão de 0,91 m³/h/m e subdividido em:
 - Rocha alterada, com porosidade dupla; e
 - Rocha sã, com porosidade de fraturas, fortemente anisotrópico e heterogêneo.

Para a unidade aquífera de Depósitos Sedimentares Cenozoicos, foram elaborados mapas potenciométricos históricos para a avaliação do fluxo de água subterrânea (Figura 7) a partir do Banco de Dados Histórico do Projeto.

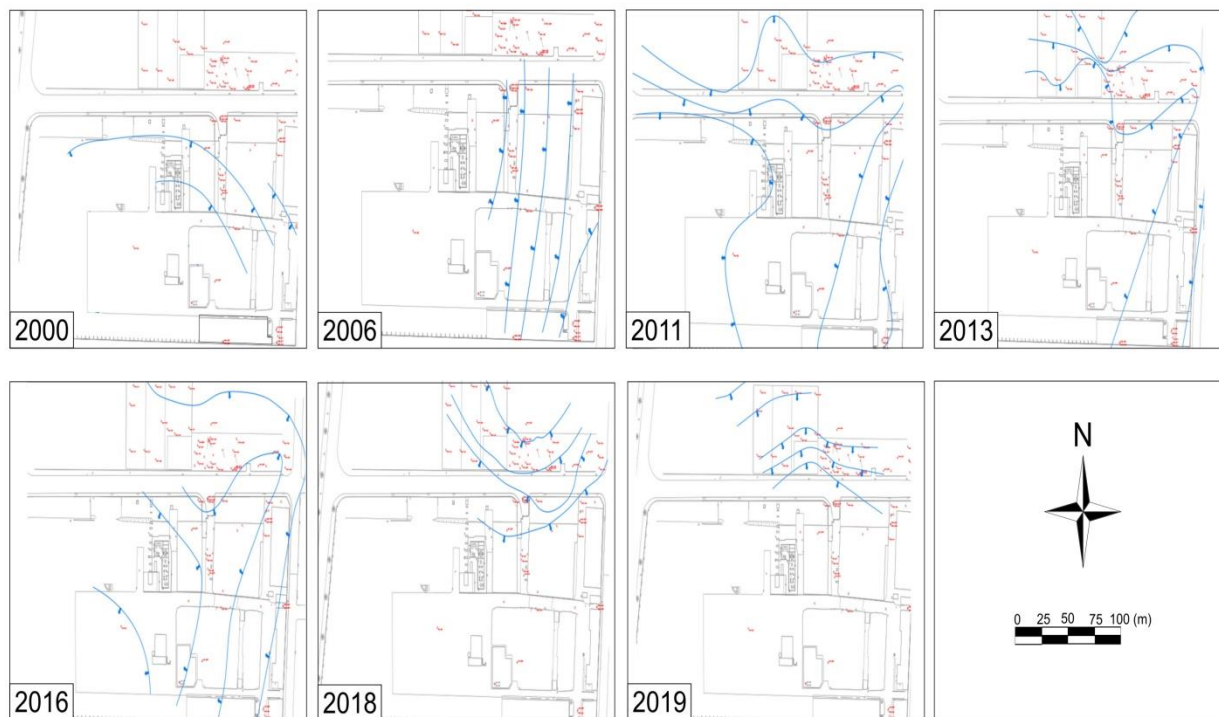


Figura 7: Mapas potenciométricos históricos da área de estudo realizados a partir dos dados de campanhas de monitoramento realizadas na estação de seca (entre abril e setembro).

A análise dos mapas permite verificar variações, que podem estar relacionados com alterações nas condições climáticas de recarga, alteração nos pontos de monitoramento disponíveis ou influência de sistemas de bombeamentos. De forma geral note-se variação da tendências de sentido de fluxo com predomínio de norte para sul e/ou de leste para oeste.

3.6. Histórico Ambiental da Área

A área de estudo está localizada na Região Metropolitana de São Paulo e apresenta histórico de atividades industriais registrado desde a década de 1920. Dentre as atividades relacionadas com a contaminação histórica da principal área de estudo está a produção de compostos químicos realizada entre os anos de 1960 e 1990. Desde então, a área de estudo e seu entorno passaram por uma série de mudanças de ocupação.

Os primeiros estudos ambientais foram desenvolvidos em 1999 com o objetivo de avaliar áreas potencialmente contaminadas e identificar quais eram os principais

compostos de interesse. Nessa época, a área foi subdividida em duas regiões com base nas atividades desenvolvidas e as principais substâncias manipuladas. Nessas regiões foram executadas sondagens exploratórias e a instalação de poços de monitoramento para avaliar a qualidade do solo e água subterrânea. A primeira região era utilizada para armazenamento de produtos e onde foram detectadas concentrações de organoclorados, níquel e mercúrio no solo e água subterrânea. A segunda região, por sua vez, abrigava uma área de produção onde foram detectados compostos aromáticos, sulfato, cromo, bifenilas policloradas (PCB), fenol, chumbo, cromo e mercúrio no solo e água subterrânea acima dos valores orientadores adotados na época. Os impactos foram identificados nas porções mais rasas como também no aquífero cristalino fraturado.

Desde então, foram adotadas medidas de contenção e remediação das áreas entre os anos de 2002 e 2014 foram removidas aproximadamente 60 mil toneladas de solo impactados e ocorreu a instalação de um sistema de remediação conhecido como Extração Multifásica (MPE), método de remediação *in situ* de extração de fase livre, dissolvida e vapor de compostos orgânicos voláteis (VOC) por meio de uma combinação de técnicas de bioventilação e remoção de massa à vácuo ([Simon et al., 1999](#)). Entre os anos de 2006 e 2008 essa técnica de remediação foi melhorada e adotada em conjunto com a técnica de *air sparging*, método em que é injetado ar comprimido com o objetivo de estimular a volatilização dos contaminantes ([USEPA, 2004](#)). Um outro esforço para a degradação dos contaminantes ocorreu em 2009 quando foi instalado um Sistema de Oxidação Química, que tem como objetivo estimular reações de oxirredução por meio de um agente oxidante adicionado ao subsolo transformando os contaminantes em água e gás carbônico ([Silva and Aldeia, 2013](#)).

As investigações e remediações também foram desenvolvidas no aquífero cristalino fraturado. Em 2002, foi instalado um sistema de bombeamento e tratamento em que a água impactada é bombeada e enviada para tratamento externo. Esse sistema foi ampliado em 2006, de forma a incorporar o aquífero de alteração de rocha e encerrado em 2014 quando obteve como resultado a remoção de significativa massa de contaminantes.

Entre os anos de 2012 e 2013 as investigações conduzidas tiveram como foco uma camada de argila orgânica, que por sua menor permeabilidade, promoveu a retenção de contaminantes que, posteriormente, atuaram como uma fonte secundária. Novas medidas de remediação foram adotadas no ano de 2016: sistemas de remediação térmica e biorremediação. Essas medidas alcançaram os objetivos propostos na remoção de contaminantes na camada de argila orgânica. Desde então, foram realizados monitoramentos para encerramento até o ano de 2019. Nos anos de 2016 e 2019 também foram realizadas investigações de fontes de contaminação utilizando a análise isotópica de compostos específicos (CSIA). Um modelo conceitual temporal da área de estudo é apresentado em [Hart et al. \(2021\)](#). Atualmente, a área é classificada como Área Reabilitada para o uso declarado pela CETESB no ano de 2019.

4. MATERIAIS E MÉTODOS

4.1. Fluxo de Trabalho

Com base no Manual do Leapfrog Works ® proposto pela [Seequent \(2017\)](#), foi gerado um fluxograma de trabalho considerando as principais etapas para a elaboração de modelo conceitual tridimensional na interface do Leapfrog Works ® ([Figura 8](#)). Esse fluxograma apresenta as principais entradas, etapas de validação e procedimentos para a modelagem de topografia, superfície potenciométrica, geologia e plumas de isoconcentração de contaminantes. Cada uma dessas etapas será descrita nos itens a seguir.

Destaca-se que o Leapfrog Works ® possui uma série de formatos de saída, como as superfícies e volumes em 3D, planejamento de sondagens, tabelas, arquivos *Building Information Models* (BIM), seções, imagens, vídeos, stereonets, linhas georreferenciadas, pontos, modelos de fluxo, *grids* de elevação etc.

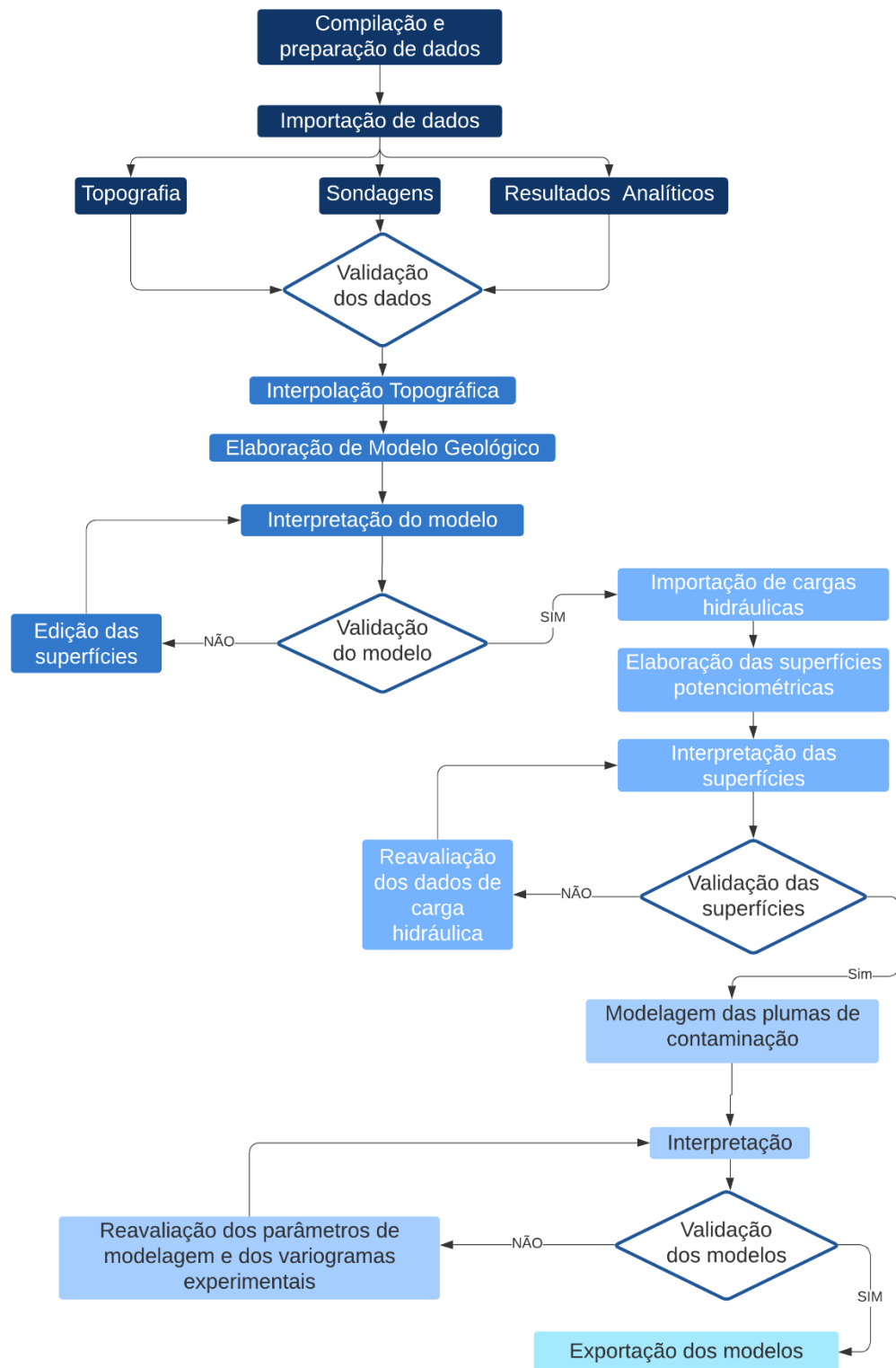


Figura 8: Fluxograma de atividades.

4.2. Dados de Entrada

A primeira e uma das mais cruciais etapas para a construção de modelos conceituais tridimensionais no gerenciamento de áreas contaminadas consiste na compilação e preparação de dados do projeto. É importante ressaltar que a qualidade dos dados inseridos irá definir a qualidade do modelo conceitual elaborado. Os dados utilizados fazem parte do Banco de Dados Histórico do Projeto e serão listados a seguir:

4.2.1. Topografia

Os dados topográficos foram obtidos através de levantamentos realizados durante o gerenciamento de áreas contaminadas. São reunidas informações de coordenadas Leste (X), Norte (Y), Cota de Terreno (Z) para os poços instalados e sondagens executadas bem como a Cota de Tubo (Ztubo), utilizada para os cálculos de carga hidráulica para a definição da superfície potenciométrica.

Os dados estão em sistema de coordenadas Universal Transversa de Mercator (UTM), no Sistema de Referência Geocêntrico para as Américas (Sirgas 2000) e zona 23S para cada ponto inserido no Leapfrog Works®. Um modelo de entrada dos dados de topografia, chamado de planilha “collar” na interface do *software* é apresentado na Tabela 1:

Tabela 4: Modelo de entrada dos dados de topografia (Tabela *collar*).

HoleID	X	Y	Zterreno	Ztubo	Profundidade
--------	---	---	----------	-------	--------------

Legenda: Hole ID: Nome do ponto; X: Coordenadas leste; Y: Coordenadas norte; Zterreno: Cota do terreno; Ztubo: Cota da boca do tubo; Profundidade: profundidade da sondagem.

4.2.2. Definição de Escopo

Para a elaboração de um modelo conceitual temporal, foi determinado um escopo incluindo a geologia e resultados analíticos ao longo do tempo. Além disso, foram escolhidos sete cenários (campanhas/anos) para a representação tridimensional conforme o histórico ambiental da área. A escolha destes cenários foi baseada na

disponibilidade de dados e importância para o entendimento da evolução do contexto da contaminação e é apresentada na Tabela 2.

Tabela 2: Escopo de cenários (anos) e contexto relacionado.

ANO	CONTEXTO
2000	Primeiro ano com campanha de amostragem com distribuição significativa de análises de compostos orgânicos voláteis. Anterior aos trabalhos de remediação.
2006	Extensão do sistema de bombeamento e tratamento instalado em 2002. Alcance das camadas de solo de alteração de rocha.
2011	Campanha entre a extensão do sistema de bombeamento e tratamento e a redução da profundidade do poço profundo (PP-05).
2013	Amostragem após a redução da profundidade do poço profundo (PP-05)
2016	Campanha após o desligamento do sistema de bombeamento e tratamento e logo antes da realização das atividades de biorremediação e remediação termal.
2018	Últimas atividades de biorremediação.
2019	Ano de encerramento do monitoramento semestral pós atividade de remediação.

Além disso, foram escolhidas substâncias químicas de interesse que serão modeladas para os cenários definidos anteriormente. Essas substâncias, apresentadas na Tabela 3 foram escolhidas com base na ocorrência, série de degradação e toxicidade.

Tabela 3: Escopo de substâncias químicas de interesse.

Substância química
Tetracloroetano
Tricloroetano
cis-1,2-dicloroetano
Cloreto de Vinila
Clorofórmio
1,1-dicloroetano
1,2-dicloroetano
1,1,2-tricloroetano

Conforme discutido em [Hart et al. \(2021\)](#), as oito substâncias acima estão predominantemente presentes no histórico ambiental da área e os compostos Tetracloroetano e 1,2-dicloroetano foram considerados como compostos iniciais uma vez que a maioria dos outros são seus produtos de degradação. Desta forma, essas duas substâncias foram selecionadas para serem modeladas no presente projeto.

4.2.3. Resultados Analíticos

Uma vez definido o escopo de cenários e substâncias a serem modeladas, foram reunidos os resultados analíticos para água subterrânea históricos da área, compilados em uma planilha única e com uniformização das unidades de medidas. Todos os resultados são apresentados em microgramas por litro.

Os resultados foram organizados por cenário de forma a incluir o nome do ponto (ID), profundidade inicial e final da seção filtrante, nome da amostra, data de coleta e resultados analíticos. Um modelo de entrada dos dados de topografia, chamado de planilha “Intervals” na interface do *software* é apresentado na Tabela 4:

Tabela 4: Modelo de entrada dos dados de resultados analíticos (Tabela *intervals*).

HoleID	SampleID	Sample_Date	From	To	1.2-DCA	PCE
--------	----------	-------------	------	----	---------	-----

Legenda: Hole ID: Nome do ponto; SampleID: Nome da amostra; Sample_Date: Data de coleta; From: profundidade inicial da amostra (a partir do topo); To: profundidade final da amostra (a partir do topo), 1.2-DCA: concentração de 1,2-Dicloroetano e PCE: concentração de Tetracloroetano.

4.2.4. Sondagens e Poços

Para a elaboração do modelo geológico, foram reunidas 248 sondagens nas quais foram instalados poços (monitoramento, injeção ou observação) durante o gerenciamento de áreas contaminadas. A descrição geológica das sondagens foi realizada ao longo dos anos e por uma série de empresas de consultoria ambiental, o que faz com que haja uma grande heterogeneidade de resolução e descrição dos materiais.

Os perfis de sondagem com suas respectivas descrições geológicas foram reinterpretados e reagrupados com base em Vaz (1996) previamente e serviram de suporte para Hart et al. (2021). As simplificações adotadas para a elaboração do modelo geológico no Leapfrog Works® consideraram o comportamento dos materiais e seus principais aspectos hidrogeológicos (Figura 9). Ressalta-se que para o presente projeto, todo o gerenciamento de áreas contaminadas já foi executado, sendo assim, as simplificações adotadas para a descrição geológica não interferem na qualidade do modelo.

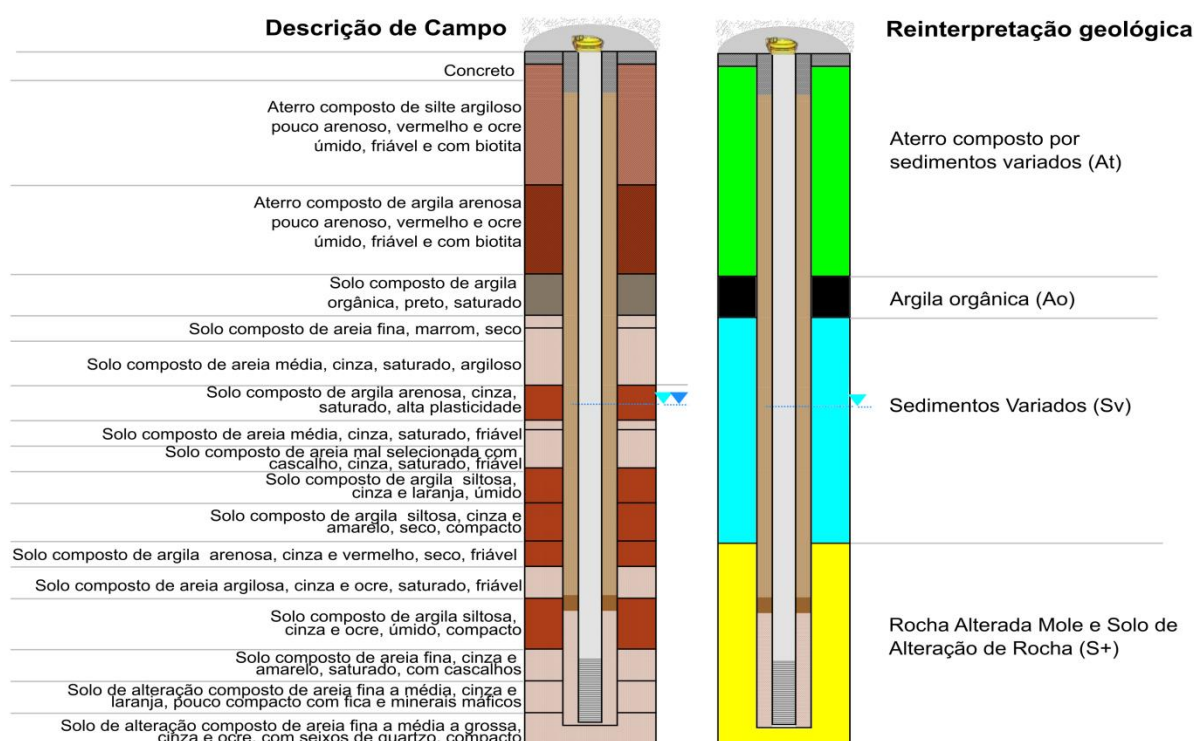


Figura 9: Exemplo de reinterpretação geológica das descrições de sondagem executadas.

Um modelo de entrada dos dados de topografia, chamado de planilha “lith” na interface do *software* é apresentado na Tabela 5:

Tabela 5: Modelo de entrada dos dados de litologia (Tabela *lith*).

HoleID	From	To	Lith
--------	------	----	------

Legenda: Hole ID: Nome do ponto; From: profundidade inicial da unidade (a partir do topo); To: profundidade final da unidade (a partir do topo) e Lith: descrição litológica da unidade.

4.2.5. Dados adicionais

Dados adicionais foram inseridos no *software* para auxiliarem na elaboração do modelo conceitual. São eles:

- (i) Imagem aérea: Foi extraído um recorte da imagem de satélite da área através do Google Earth Pro. Essa imagem foi georreferenciada através da própria interface do Leapfrog Works® com base em pontos de coordenadas conhecidas. Essa imagem é apresentada sobre a topografia gerada pelo *software*
- (ii) Planta da área: Em formato (.dwg) o arquivo *Computer Aided Design* (CAD) foi inserido no Leapfrog Works® para compor as visualizações produzidas.
- (iii) Dados de nível de água: Foram primeiramente transformados em carga hidráulica quando subtraídos da Cota de Tubo (Ztubo) e inseridos no Leapfrog Works® como uma nuvem de pontos por cenário. Essas nuvens de pontos deram origem às superfícies potenciométricas geradas considerando a separação adequada por unidades hidrogeológicas.

4.3. Validação dos dados

A validação do banco de dados foi realizada para os arquivos com as informações de litologia (planilha “*lith*”) e de contaminantes (planilhas “*intervals*”). Essa validação ocorre na interface do próprio *software*, com a ferramenta “*Fix Errors*”. Essa ferramenta identifica erros no banco de dados, como sobreposição de informações, discordâncias, ausência de valores e valores inválidos, bem como advertências, como avisos de valores ou intervalos faltantes dentro do banco de dados. Os erros, quando identificados e enquanto não forem revisados, não permitem a execução de qualquer modelagem. Por sua vez, a presença de advertências não impede que a modelagem seja realizada, apenas sinaliza ao usuário atenção na interpretação dos resultados gerados.

Uma vez que os dados de litologia já foram utilizados anteriormente para a elaboração de modelo geológico preliminar, não foram identificados erros com o banco de dados geológico. Os avisos sobre esse banco de dados consistem em pontos que

tiveram suas coordenadas inseridas no *software* (tabela “*collar*”) e não apresentam informações litológicas em intervalos ou em toda a sondagem. No banco de dados utilizado, não há informação de litologia para alguns pontos cujos perfis de sondagem não estão disponíveis e, portanto, não serão utilizados para a modelagem geológica da área de estudo. No entanto, esses dados foram aproveitados para a elaboração do modelo digital de elevação.

É válido ressaltar que, após inserir as informações de litologia presentes nas sondagens no *software*, foi possível identificar imprecisão na descrição dos testemunhos de sondagem em campo. Isso porque a descrição de uma mesma unidade pode variar de acordo com os critérios adotados e executor da descrição geológica. Esse tipo de erro ocorreu quatro vezes no banco de dados e a correção foi realizada nas planilhas de base.

Por sua vez, os dados de resultados analíticos por apresentarem diversas campanhas e resultados disponíveis, tiveram erros identificados pela ferramenta “*Fix Errors*” para as tabelas de resultados analíticos (“*intervals*”) inseridas no *software*. Houve um tipo de erro chamado de “*Overlapping segments*”. Esse tipo de erro aponta duas ou mais informações de um mesmo parâmetro em um mesmo intervalo. Sendo assim, amostras duplicatas e amostras coletadas em mais de uma campanha em um mesmo cenário (ano) são marcadas como erros. Nesse caso, de forma conservadora, foram escolhidas as amostras que apresentavam a maior concentração das substâncias químicas de interesse.

Dentre as advertências pontuadas pelo *software* estavam a ausência de informações para pontos presentes na tabela de “*collar*” e a presença de valores inválidos, que consistem em valores não numéricos, especialmente os dados reportados pelos laboratórios como valores abaixo dos limites de quantificação. Para fins de simplificação da modelagem, esses dados foram substituídos por zero microgramas por litro, auxiliando na delimitação das plumas.

A escolha pela substituição dos valores abaixo do limite de quantificação do laboratório por zero se deu com base nas equações utilizadas pelo Leapfrog Works® para a realização da Modelagem Implícita. O ato de forçar que a função tenha valor

zero nos pontos substituídos faz com que os efeitos de borda sejam minimizados e a delimitação das plumas ocorram tanto vertical quanto horizontalmente. É válido ressaltar que os limites de quantificação para as substâncias do escopo (Tetracloroetano e 1,2-dicloroetano) são valores muito pequenos, entre 1 e 2 μL .

4.4. Elaboração do Modelo Digital de Elevação

Os dados topográficos entram no *software* como uma nuvem de pontos que é interpolada para a geração de superfície com as cotas altimétricas. O resultado dessa operação resultou em uma superfície topográfica com as informações de elevação em metros (Figura 12).

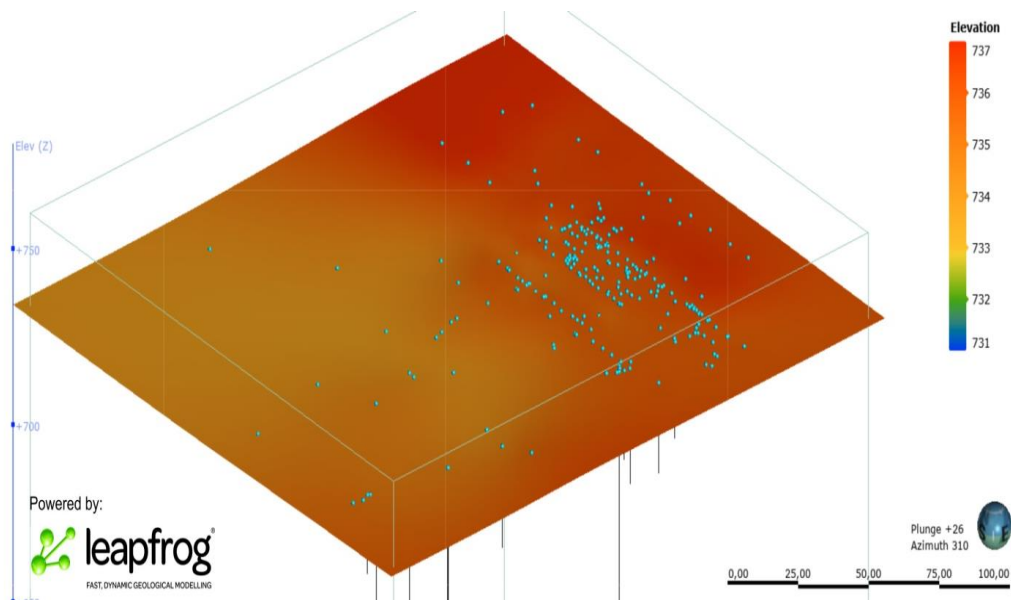


Figura 10: Superfície topográfica gerada a partir dos pontos.

Nesse contexto, as cotas topográficas variam entre 733,88 e 737,14 metros, sendo que as menores cotas estão presentes na região sul da área de estudo, com menor densidade de pontos. Ainda que exista uma notável diferença na densidade de pontos utilizados para a elaboração da topografia, a tendência de cotas mais baixas na região sudoeste é observada em campo e concordante com os modelos elaborados anteriormente.

4.5. Modelagem Geológica

A elaboração do modelo geológico tridimensional da área seguiu as etapas apresentadas na Figura 13. Após a validação dos dados de litologia foram elaboradas as superfícies de contato entre os materiais com o algoritmo Fast RBF™ para depósitos. Esse algoritmo é uma variação do Fast RBF™ utilizado para camadas de depósitos sedimentares, sem grandes ângulos, intrusões ou superfícies erosivas. Essa escolha se deu a partir do conhecimento prévio da disposição das camadas geológicas na área

Uma vez criadas as superfícies de contato geológico, foi realizada a validação das mesmas. Para isso, foi verificada a correspondência das superfícies com os intervalos presentes nas sondagens. Uma vez validadas as superfícies de contato, foram gerados os volumes finais.

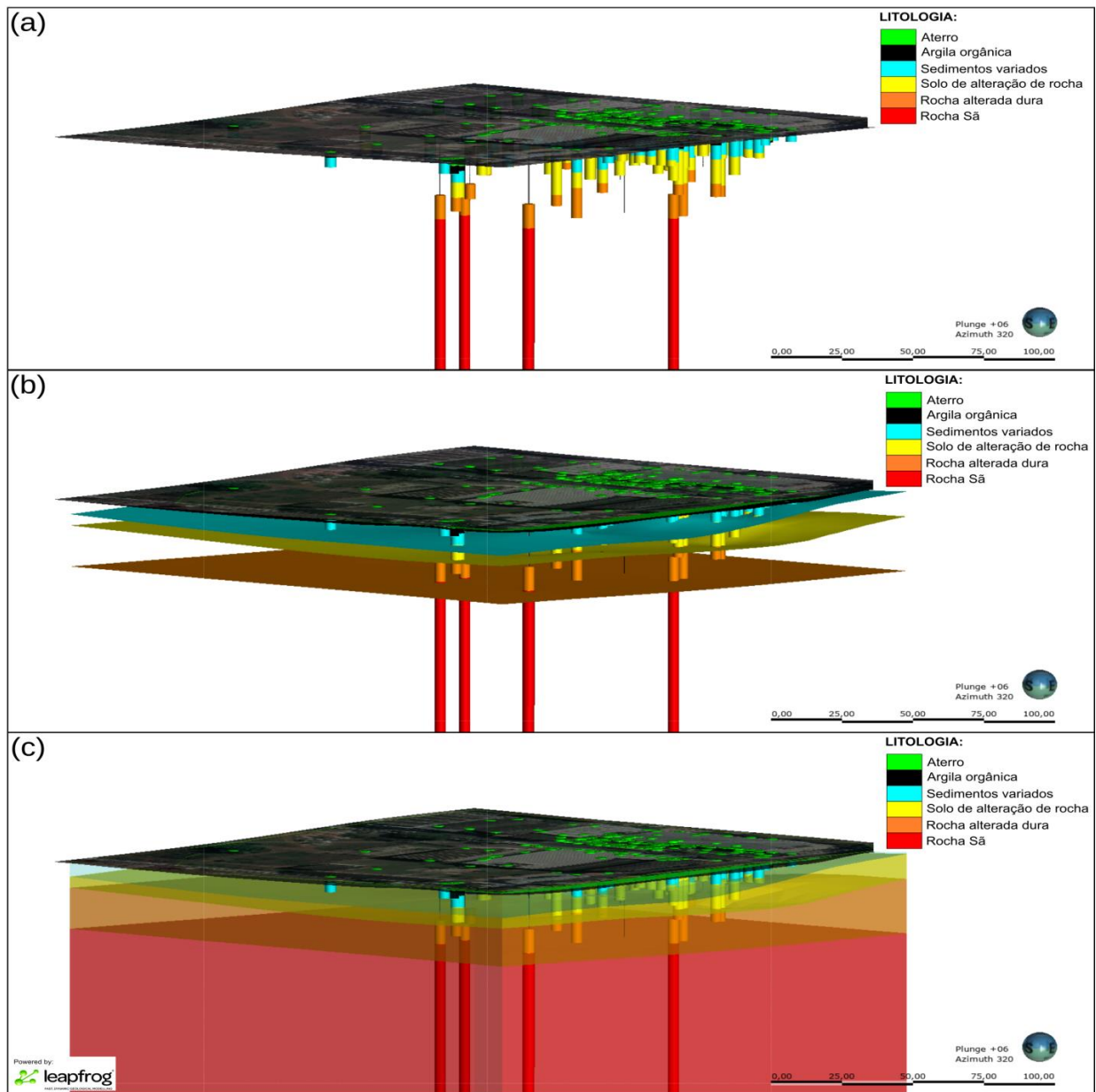


Figura 11: Elaboração do Modelo Geológico. (a) Sondagens com informações de litologia e imagem aérea. (b) Superfícies de contato geradas. (c) Modelo geológico tridimensional.

Ressalta-se que para o presente trabalho não foram inseridas no *software* informações sobre a localização, tamanho e orientação de fraturas e falhas presentes no modelo conceitual, em especial, no âmbito da rocha sã, em que a porosidade é secundária. Esse tipo de porosidade principal é formado pelas estruturas geológicas presentes na rocha e não pelos espaços intergranulares, comuns em solos, sedimentos e algumas rochas sedimentares. Essa limitação do modelo faz com que o

fluxo de água subterrâneo nesta unidade hidroestratigráfica seja entendido com a mesma dinâmica apresentada pelas demais unidades de porosidade primária ou dupla.

Além disso, a região sudoeste da planta industrial, em que existe uma baixa densidade de sondagens e poços instalados apresenta-se com uma incerteza superior às demais áreas. Essa incerteza não traz prejuízos ao modelo conceitual, uma vez que se trata de uma área sem histórico de contaminação.

4.6. Modelagem de superfície potenciométrica

A modelagem de superfícies potenciométricas foi realizado por cenário a partir dos níveis de água medidos durante a amostragem de água subterrânea. Assim, calcula-se a carga hidráulica considerando as informações topográficas de cota. Nessa etapa, é importante que as cargas hidráulicas utilizadas para a construção das superfícies potenciométricas pertençam à mesma unidade hidroestratigráfica, para que não haja erros conceituais nesta etapa. Sendo assim, as superfícies geradas e apresentadas no modelo a seguir referem-se aos potenciais hidráulicos das camadas sedimentares.

As informações de nome do ponto (ID) e carga hidráulica foram inseridas no Leapfrog Works ® como nuvem de pontos, a partir da qual foi gerada uma superfície potenciométrica para cada cenário.

As sete superfícies potenciométricas geradas apresentaram pouca variação espacial, conforme mostra a Figura 14. As cargas hidráulicas variam entre 728,97 metros e 735,5 metros com os menores valores localizados nas regiões sul e sudeste da planta.

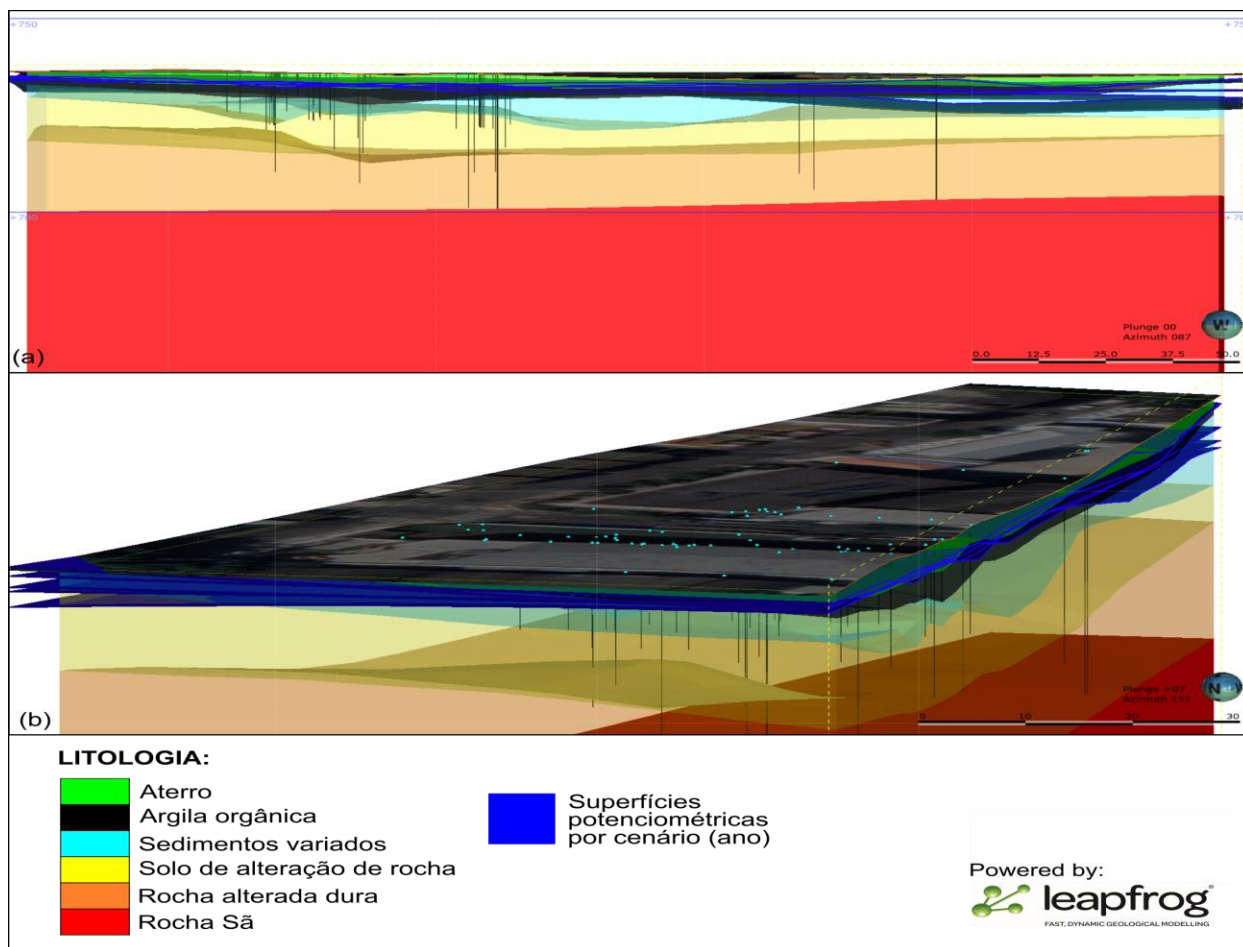


Figura 12: Elaboração de Superfícies Potenciométricas. (a) Corte Norte-Sul com visada para Leste mostrando tendência de menores potenciais ao Sul da Planta. (b) Visada de noroeste para sudeste mostrando a disposição das superfícies potenciométricas e a geologia modelada. Figura sem exagero vertical.

4.7. Modelagem de Plumas de Isoconcentração

A modelagem das plumas de isoconcentração foi realizada a partir da Extensão de Contaminantes do Leapfrog Works®. Para isso, foram realizadas modelagens individuais por contaminantes (1,2-dicloroetano e tetracloroetano) bem como por cenários (2000, 2006, 2011, 2013, 2016, 2018 e 2019), totalizando 14 modelagens distintas no presente trabalho.

Dentro da extensão de contaminantes, cada modelagem foi iniciada com o módulo "Nova estimativa de contaminante" (Figura 15). Nessa ferramenta, são fornecidas ao *software* as principais informações que serão utilizadas para a realização da modelagem.

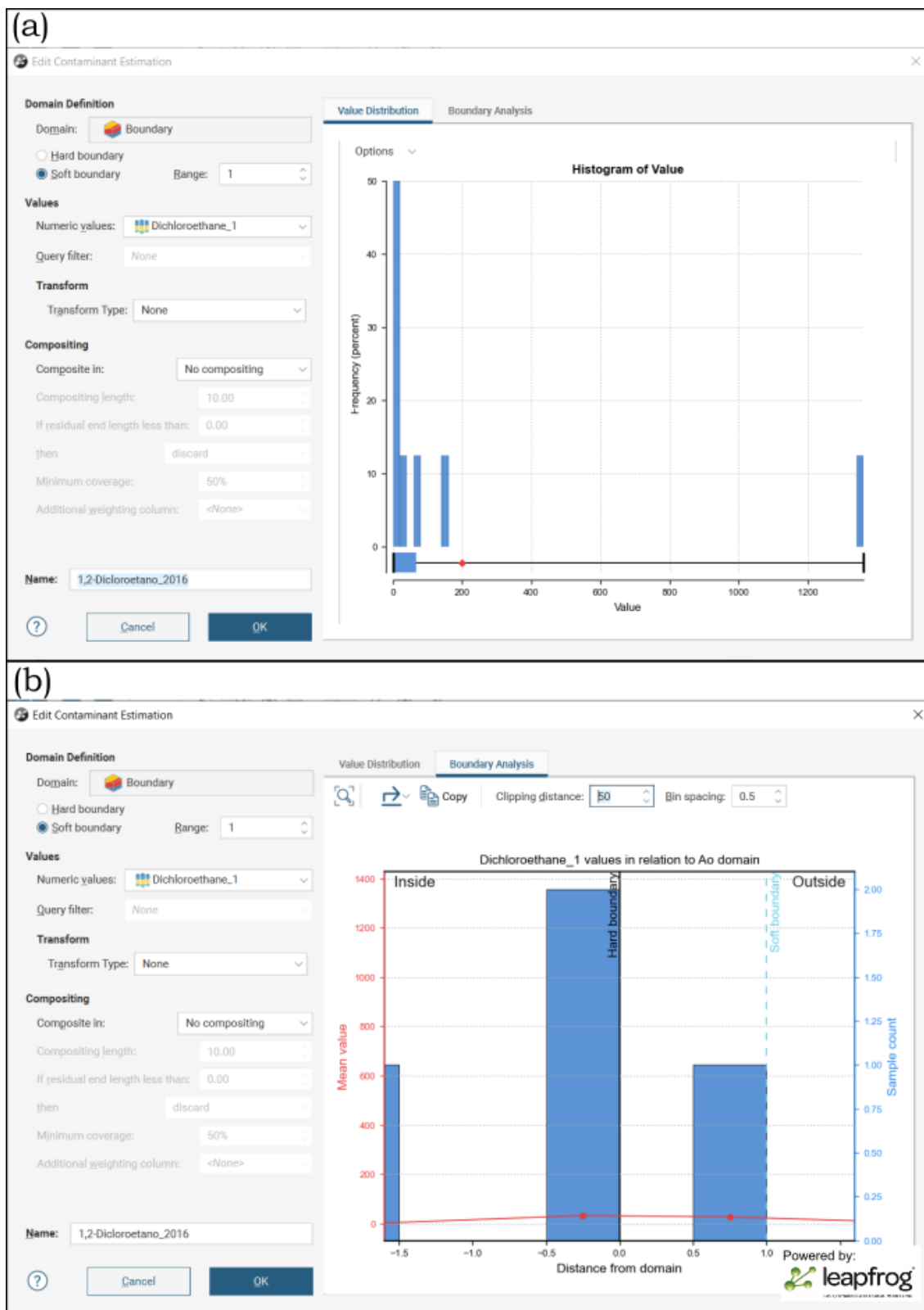


Figura 13: Ferramenta Nova Estimativa de Contaminante da Extensão de Contaminantes (a) Interface da ferramenta com a distribuição dos valores em histograma. (b) Interface da ferramenta com a visualização dos dados dentro do domínio escolhido.

Inicialmente, a aba "Value Distribution" (Distribuição dos valores) apresenta a distribuição em histograma dos valores selecionados em "Numeric Values" (Valores numéricos) que serão os dados modelados. No exemplo apresentado na Figura 15, os valores de concentração para 1,2- dicloroetano estão predominantemente inferiores a 200 µg/L. É nessa aba ainda que é determinado o domínio da estimativa, que, no presente projeto trata-se de um volume combinado entre os volumes geológicos e os volumes de saturação. Isso porque a estimativa para contaminantes em água subterrânea deve acontecer na zona saturada e utilizando como domínio as principais unidades afetadas, com destaque para as camadas de Argila Orgânica (Ao) e Sedimentos Variados (Sv).

A observação da distribuição das amostras em relação aos domínios é apresentada na aba "Boundary Analysis" (Análise de Limites) e pode-se escolher a opção de manter apenas o domínio (*Hard Boundary*) bem como permitir que a modelagem seja realizada em um limite maior de domínio (*Soft Boundary*), onde será escolhido o intervalo extra permitido para a modelagem. Desta forma, é possível selecionar apenas o domínio pré-determinado contendo as camadas de argila orgânica e sedimentos variados (*Hard Boundary*) ou definir um intervalo que permita a busca por pontos fora do domínio, como por exemplo, as unidades de rocha alterada e rocha sã.

Finalmente, nessa janela pode-se ainda determinar condições de composição de amostras e a transformação dos valores em logaritmo. Ambas as funções não são aplicáveis ao presente projeto.

Após essa etapa, inicia-se a elaboração de modelos espaciais com a criação de modelos de variogramas. Nessa etapa serão fornecidas ao *software* as informações pertinentes para a análise de variograma. Dentre essas informações está a determinação de um plano de tendência preferencial (Figura 16 (c) e (d)) que, neste caso, foi determinado conforme o fluxo de água subterrânea da época (Figura 16 (b)) para cada cenário escolhido. Esse plano auxilia no entendimento da direção da pluma e sua geometria. Comumente, esse plano quando é utilizado no entendimento de mineralizações em veios, é um plano com mesma direção e caimento do veio, por exemplo. No caso do projeto em questão, a direção da pluma é predominantemente determinada pela direção do fluxo de água subterrânea, seja ele em uma mesma

camada ou ainda representando intercomunicação entre mais de uma unidade hidroestratigráfica. Para o modelo atual, foi dada a preferência para a visualização dos fenômenos de transporte em uma mesma camada, sendo assim, os planos são, preferencialmente, horizontalizados. Embora essa seja uma delimitação adotada, é ainda uma delimitação simplificada, pois existe intercomunicação entre as camadas e o transporte vertical também é presente.

É a partir de então que se determina as seguintes informações:

- Tamanho do Passo: Determinado com base em uma distância média entre as sondagens realizadas na área;
- Quantidade de passos: Determinada de acordo com o tamanho no passo e a área de estudo;
- Tolerância do Passo e angular: Escolhidas através de processo de tentativa e erro a fim de fazer com que uma distância e ângulo mínimos sejam escolhidos para a busca dos pontos, para que não haja uma continuidade espacial suavizada em excesso (quando o valor de tolerância é alto) ou ruído em excesso (quando o valor de tolerância é muito baixo);
- Efeito Pepita: Dependerá da informação inserida. Em geral, os valores do presente projeto são distribuídos em variograma com efeito pepita insignificante.

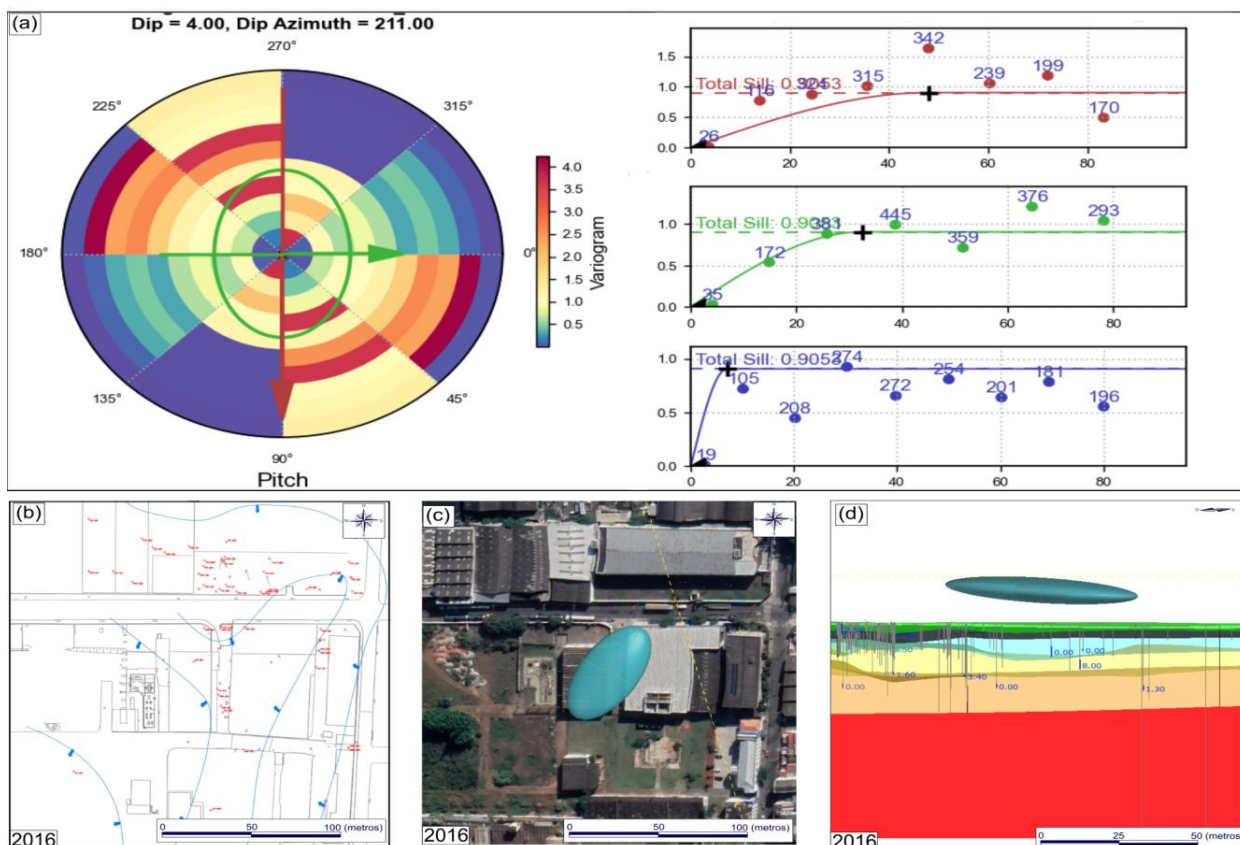


Figura 14: Construção do Modelo Espacial (a) Interface da ferramenta com diagrama radial e os variogramas. (b) Mapa potenciométrico da área de estudo no ano de 2016. (c) Vista em planta do plano preferencial determinado com base no fluxo de água subterrânea e (d) Vista em corte do plano preferencial escolhido com base no fluxo de água subterrânea.

Desta forma, são elaboradas as plumas de contaminantes, cujas superfícies devem ser avaliadas pelo modelador. Essa avaliação pode ser realizada a partir dos próprios dados, de forma a verificar se os intervalos de concentrações estão sendo respeitados bem como, no caso deste e de outros projetos desenvolvidos na área de Gerenciamento de Áreas Contaminadas, a partir dos esboços de plumas previamente desenvolvidos de forma bidimensional. Uma vez verificada inconsistências nas superfícies geradas, deve-se retornar para a etapa de ajuste dos parâmetros de entrada, dos variogramas e do plano preferencial para uma nova validação. Finalmente, quando as superfícies forem validadas, pode ser dado o início a elaboração de produtos de saída, em seções, imagens, vídeos ou outras saídas possíveis a partir do Leapfrog Works®.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Associação Brasileira de Normas Técnicas, 2013, Modelo conceitual no gerenciamento de áreas contaminadas – Procedimento. Rio de Janeiro, RJ, 4 p.
- American Society for Testing and Materials (ASTM), 2020, ASTM E1689-20 Standard guide for developing conceptual site models for contaminated sites, 13p.
- Bedani, E. D. F., Saad, A. R., 2009, Paisagem natural paleógena da bacia sedimentar de São Paulo no município de Guarulhos, Estado de São Paulo: Geociências (São Paulo), v. 28, no. 4, p. 363–376.
- Caumon, G., Gray, G., Antoine, C. e Titeux, M.-O., 2012, Three-dimensional implicit stratigraphic model building from remote sensing data on tetrahedral meshes: theory and application to a regional model of La Popa Basin, NE Mexico: IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, v. 51, no. 3, p. 1613–1621.
- Clean-Up Information, 2018, Technology focus, Disponível em: <https://clu-in.org/techfocus/>. Acesso em 25 de Abril de 2021.
- Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB), 2001, Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas: CETESB, São Paulo, Vol. 2, 389 p.
- Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB), 2017, Decisão de Diretoria nº 038/2017/C, de 07 de fevereiro de 2017: CETESB, São Paulo, 65 p.
- Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB), 2020, Relatório de Áreas Contaminadas e Reabilitadas no Estado de São Paulo: CETESB, São Paulo, 12 p.
- Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB), 2021, Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas: CETESB, São Paulo, Vol. 3, Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/areas-contaminadas/documentacao/manual-de-gerenciamento-de-areas-contaminadas/informacoes-gerais/apresentacao/> Acesso em 13 de maio de 2021.
- Cowan, J., Beatson, R., Ross, H., Fright, W., McLennan, T., Evans, T., Carr, J., Lane, R., Bright, D., Gillman, A., Oshurst, P. e Titley, M., 2003, Practical implicit geological modelling: 5th International Mining Geology Conference, Bendigo, Victoria, Austrália, nº8/2003, p. 89-99.

- da Costa Casado, F., Etchebehere, M. L. d. C., Stevaux, J. C., De Oliveira, P. E. and Saad, A. R., 2011, Estratigrafia e paleoambiente neoquaternário da calha aluvial do Rio Paraíba do Sul entre os municípios de São José dos Campos e Taubaté, SP: Geociências (São Paulo), v. 30, no. 2, p. 125–145.
- Fundação Agência da Bacia Hidrográfica do Alto Tietê (FABHAT), 2019, Relatório de Situação dos Recursos Hídricos 2019 – Bacia Hidrográfica do Alto Tietê UGRHI-06, São Paulo, 111 p.
- Hart, S. T., Bertolo, R. A., Agostini, M. S., Feig, R., Barbosa, M. B. e Lima, P. L., 2021, Temporal conceptual model of contaminated complex sites applied for the management of a former supplywell area in tropically weathered bedrock: Sustainable Water Resources Management, v. 7.
- Hasui, Y., 1975, Evolução polifásica do Pré Cambriano a oeste de São Paulo: Boletim IG, v. 6, p. 95–108.
- Heilbron, M., Pedrosa-Soares, A. C., Campos Neto, M. d. C., Silva, L. d., Trouw, R. A. J. E Janasi, V. d. A., 2004, Província Mantiqueira: Geologia do continente sul-americano: evolução da obra de Fernando Flávio Marques de Almeida. P. 203–235.
- Instituto Geográfico e Cartográfico, 2014, Mapa das unidades hidrográficas de gerenciamento de recursos hídricos do Estado de São Paulo – UGRHI, Disponível em <http://www.igc.sp.gov.br/produtos/ugrhi.html>. Acesso em 19 de outubro de 2021.
- Kresic, N. e Mikszewski, A., 2013, Hydrogeological conceptual site models: data analysis and visualization: CRC press, 600 p.
- Marker, A., 2008, Avaliação ambiental de terrenos com potencial de contaminação: gerenciamento de riscos em empreendimentos imobiliários: Vol. Caderno 2, Brasília, Caixa Econômica Federal.
- Perrota, M., Salvador, E., Lopes, R. and D'Agostinho, L., 2005, Mapa Geológico do Estado de São Paulo. 1: 750.000: Programa levantamentos geológicos básicos do Brasil. Serviço Geológico do Brasil. São Paulo.
- Riccomini, C., 1989, O Rift Continental do Sudeste do Brasil [Tese de Doutorado]: Universidade de São Paulo, Instituto de Geociências.

- Riccomini, C., Sant'Anna, L. G. e Ferrari, A. L., 2004, Evolução Geológica do Rift Continental do Sudeste do Brasil: Geologia do continente Sul-Americano: evolução da obra de Fernando Flávio Marques de Almeida, v. p. 383–405.
- Schelwald-van der Kley, A. J. M., 2004, Communication on contaminated land: Network for Industrially Contaminated Land in Europe (NICOLE).
- Seequent, 2017, User Manual for Leapfrog Works: Seequent.
- Seequent, 2020a, 'Comparing leapfrog radial basis function and kriging', Disponível em: <https://www.seequent.com/comparing-leapfrog-radial-basis-function-and-kriging/>. Acesso em: 25 abril 2021.
- Seequent, 2020b, 'Introducing seequent's contaminants extension', Disponível em: <https://www.seequent.com/introducing-seequents-contaminants-extension/>. Acesso em: 25 abril 2021.
- Silva, A. L. N. d. and Aldeia, W., 2013, Processos químicos: oxidação química: Guia de elaboração de planos de intervenção para o gerenciamento de áreas contaminadas, IPT, v. 2, no. 6, p. 156–193.
- Simon, M., Saddington, B., Zahiraleslamzadeh, Z. e DiLorenzo, J., 1999, Multi-phase extraction: State-of-the-practice, technical report, TETRA TECH ENVIRONMENTAL MANAGEMENT VIENNA VA.
- Trouw, R. A. J., Heilbron, M., Ribeiro, A., Paciullo, F., Valeriano, C., Almeida, J., Tupinambá, M. and Andreis, R., 2000, The central segment of the Ribeira Belt: Tectonic Evolution of South America, v. 31, p. 287–310.
- United States Environmental Protection Agency (USEPA), 1996, Soil Screening Guidance: User's Guide: United States Environmental Protection Agency.
- United States Environmental Protection Agency (USEPA), 2004, How to evaluate alternative cleanup technologies for underground storage tank sites: A guide for corrective action plan reviewers.
- Vaz, L. F., 1996, Classificação genética dos solos e dos horizontes de alteração de rocha em regiões tropicais: Revista Solos e Rochas, v. 19, no. 2, p. 117–136.
- Yamamoto, J. K. and Landim, P. M. B., 2015, Geoestatística: conceitos e aplicações: Oficina de textos.

6. A Modelagem Implícita no Gerenciamento de Áreas Contaminadas: Uma avaliação temporal de uma pluma combinada de organoclorados

The Implicit Modelling in Contaminated Area Management: A temporal evaluation of an organochlorine commingled plume.

Resumo

Os modelos conceituais tridimensionais elaborados a partir da modelagem matemática por *softwares* de interpolação são importantes ferramentas para a integração e visualização de dados, todavia, são subutilizados pelo setor de meio ambiente. Existem várias as razões para esse fato, como o alto custo, falta de profissionais capacitados, de ferramentas específicas e de acesso a conteúdo para aprendizado. Poucos são os casos de representação de modelos integrados que considerem a evolução temporal de um projeto, no âmbito das atividades ambientais, da geologia, hidrologia, dos resultados analíticos e evolução da área. No presente trabalho, foi utilizada uma das ferramentas de modelagem disponíveis no mercado: o Leapfrog Works®, para a elaboração de modelo conceitual tridimensional e temporal (quadrimensional) de área contaminada por organoclorados. Este local e seu entorno possuem ocupação industrial desde a década de 1920, atividades com as quais a contaminação histórica está relacionada. Com o objetivo de investigar, remediar e monitorar as concentrações de contaminantes, uma série de atividades ambientais foram desenvolvidas entre os anos de 1999 e 2019. Os principais parâmetros de interesse são o 1,2-Dicloroetano e o Tetracloroetano, cujas plumas foram modeladas para sete campanhas distintas. Os modelos conceituais temporais produzidos evidenciam a evolução do conhecimento da área bem como o efeito das remediações na diminuição de concentrações e retração das plumas.

Abstract

Three-dimensional conceptual models developed from mathematical modelling by interpolation softwares are important tools for data integration and visualization, however, they are underused by the environmental sector. There are several reasons for this fact, such as the high cost, lack of trained professionals, specific tools and access to content

for learning. There are few cases of representation of integrated models that consider the temporal evolution of a project, within the scope of environmental activities, geology, hydrology, analytical results and evolution of the area. In the present work, one of the modeling tools available on the market was used: the Leapfrog Works®, for the elaboration of a three-dimensional and temporal (four-dimensional) conceptual model of an area contaminated by organochlorines. This place and its surroundings have been industrially occupied since the 1920s, activities with which the historical contamination is related. In order to investigate, remediate and monitor concentrations of contaminants, a series of environmental activities were developed between 1999 and 2019. The main parameters of interest are 1,2-Dichloroethane and Tetrachloroethene, whose plumes were modeled for seven distinct campaigns. The temporal conceptual models produced show the evolution of knowledge in the area as well as the effect of remediation in decreasing concentrations and plume retraction.

6.1. Introdução

Até o ano de 2020 foram cadastradas mais de 6.400 áreas contaminadas na Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB, 2020), a principal agência do Governo do Estado de São Paulo responsável pelo controle, fiscalização, monitoramento e licenciamento de atividades geradoras de poluição. Referência em todo o país, a CETESB elaborou uma série de decretos, leis, resoluções e manuais relacionados ao Gerenciamento de Áreas Contaminadas (GAC). No ano de 2021 foi apresentada de forma parcial a terceira edição do Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas (CETESB, 2021) em que são definidas as seguintes etapas para o GAC: Avaliação Preliminar, Investigação Confirmatória e Detalhada, Avaliação de Risco, Plano de Intervenção, Monitoramento e Acompanhamento de Medida de Controle de Engenharia.

A elaboração do primeiro Modelo Conceitual de Área (MCA) é realizada ainda na Avaliação Preliminar. Esse modelo é definido pela ASTM E1689 (2020) como uma representação escrita ou pictórica de um sistema ambiental e os processos biológicos, físicos e químicos que determinam o transporte de contaminantes da fonte até os seus receptores. Conforme o avanço do GAC, o modelo deve ser atualizado e revisado com a entrada de novos dados no projeto.

A elaboração de modelos conceituais é rotina em diversas áreas das geociências, incluindo a mineração e geologia de engenharia, com o suporte de ferramentas de modelagem e visualização tridimensional. De modo geral, os principais projetos relacionados ao GAC representam os modelos conceituais em forma de texto, tabelas e figuras (croquis) e é com base nesses modelos que são testadas hipóteses e decisões são tomadas.

Apesar do grande potencial de produção de dados permitido por novas ferramentas de investigação, aumento da capacidade laboratorial, das geotecnologias, do volume de áreas investigadas e longa duração dos projetos, a utilização da modelagem é subutilizada nos projetos de Gerenciamento de Áreas Contaminadas. Dentre as principais causas para esse fato estão a escassez de ferramentas específicas, a falta de conteúdo para aprendizado e de pessoas capacitadas para elaborar e interpretar os modelos gerados.

Além disso, nota-se também a carência de publicações que abordem a elaboração de modelos conceituais por meio da modelagem matemática para o Gerenciamento de Áreas Contaminadas, sobretudo em português. A quantidade é ainda menor quando se busca por modelos conceituais tridimensionais temporais. Considerando tudo isso, o presente trabalho tem como objetivo apresentar um modelo conceitual tridimensional e temporal de uma área contaminada.

6.2. Caracterização histórica da área de estudo

Localizada na Região Metropolitana de São Paulo (RMSP), a área de estudo é ocupada por indústrias desde a década de 1920. A principal atividade responsável pela contaminação histórica de organoclorados foi a fundição de aço, exercida na área de estudo entre as décadas de 1960 e 1990. Desde então, o uso industrial é continuado com a estamparia de metais, manufatura de artefatos plásticos, produção de herbicidas, pigmentos, álcali-benzeno e nitrato de chumbo. Ao redor, são reconhecidas outras áreas industriais bem como áreas de ocupação residencial e comercial.

Tendo em vista sua ocupação histórica, foram desenvolvidos os primeiros estudos ambientais representativos no ano de 2000 com a coleta de água subterrânea e solo para análises químicas. Nesse período houve a detecção de compostos aromáticos, sulfato, cromo, bifenila policlorada, fenol, chumbo, cromo e mercúrio acima dos valores orientados adotados na época.

Desde então a área passou por uma série de medidas de remediação ambiental com o objetivo de reduzir as concentrações e eliminar o risco envolvido. Dentre as medidas, foram removidas mais de 60 mil toneladas de solo impactado e foi instalado um sistema de extração multifásica que atuou entre os anos de 2002 e 2014 nas porções aquíferas mais rasas. Essa técnica foi melhorada e adotou-se, em conjunto, a técnica de *air sparging* no ano de 2006.

Os estudos ambientais abrangeram também o aquífero cristalino, a partir do ano de 2002, quando foi instalado um sistema de bombeamento e tratamento de água subterrânea. Esse sistema foi ampliado em 2006 para o aquífero de rocha alterada e encerrado no ano de 2014.

A camada de argila orgânica presente na área por sua menor permeabilidade promoveu a retenção de contaminantes que, posteriormente, atuaram como fonte secundária. Desde então, essa camada foi alvo de investigação e no ano de 2016 é marcado o momento em que o modelo conceitual de área foi aprimorado, com um satisfatório entendimento sobre o meio físico e distribuição de contaminantes, permitindo assim, a instalação de sistemas de biorremediação e remediação termal que atuaram entre os anos de 2016 e 2018

Estudos de investigação de fontes utilizando a análise isotópica de compostos específicos foram realizados nos anos de 2016 e 2019, a fim de confirmar a existência de plumas combinadas, considerando uma fonte externa, ao norte da planta. O modelo conceitual considerando a combinação de plumas é apresentado em Hart et al. (2021). Atualmente, a área é considerada reabilitada para uso declarado desde o ano de 2019.

6.3. Contexto geológico e hidrogeológico

A área de estudo está localizada sobre a Faixa Ribeira, um orógeno acrescionário colisional de idade brasileira e desenvolvido durante a amalgamação do Continente Gondwana (Hasui, 1975). São constituintes da Faixa Ribeira os Terrenos Ocidental, Oriental, Paraíba do Sul, Cabo Frio e Embu (Trouw et al., 2000 e Heilbron et al., 2004), esse último, sendo o embasamento observado na área de estudo. Tais autores subdividem a Faixa Ribeira, também, em oito domínios estruturais denominados: Domínio Andrelândia, Juiz de Fora, São Roque, Costeiro, Socorro, Grupo Paraíba do Sul, Intrusivas Granitoides e Complexo Embu.

Perrota et al (2005) subdivide o Complexo Embu em sete unidades conforme a sua variação litológica. São reconhecidas, assim, as unidades milonítica, sericita xisto, quartzítica, paragnáissica, gnaisses bandados, xistos localmente migmatítico e ortognáissicas. É sobre esse embasamento que se deu a deposição dos sedimentos associados às Bacias do Rifte Continental do Sudeste Brasileiro (RCSB) (Riccomini et al, 2004), cujo segmento central engloba as Bacias de São Paulo, Taubaté, Resende e Volta Redonda.

A Bacia de São Paulo é o compartimento geológico sobre o qual está localizada a área de estudo. Preenchida por sedimentos de idade Paleógena e Neógena associados ao Grupo Taubaté, marcadamente pelas Formações Resende, Tremembé e São Paulo (Figura 17), possui também a deposição de sedimentos recentes associados à dinâmica fluvial dos rios presentes nas imediações.

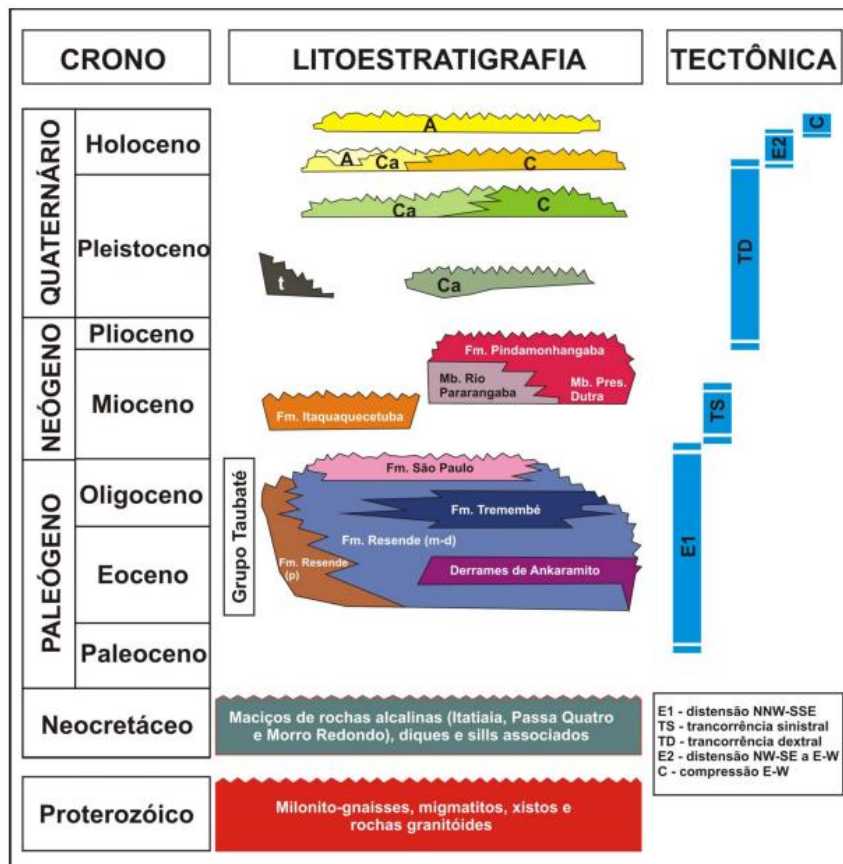


Figura 15: Quadro litoestratigráfico e evolução tectono-sedimentar do segmento central do RCSB (Riccomini et al, 2004 apud Casado et al. 2011). Onde: p – leques aluviais proximais; m-d – leques aluviais medianos a distais associados à planície aluvial de rios entrelaçados; t-depósito de tálus; c-depósitos coluviais; ca-depósitos colúvio aluviais; a-depósitos aluviais. Extraído de da Costa Casado (2011).

Localmente, a geologia da área foi descrita a partir das sondagens realizadas durante as atividades ambientais e discutida em Hart et al. (2021). Essas sondagens foram reinterpretadas conforme o Perfil de Intemperismo para Regiões Tropicais (Vaz, 1996) e separadas em seis litologias:

- Aterro: Formado por sedimentos silto-arenosos, de cor avermelhada a ocre, bastante friável;
- Argila Orgânica: Camada formada por material de cor preta, com presença predominante de matéria orgânica em decomposição;
- Sedimentos variados: Intercalação entre camadas mais arenosas e mais argilosas, de coloração e plasticidade variável;

- Solo de Alteração de Rocha: Possui granulometria areno-argilosa, de coloração variável, apresenta minerais secundários e é predominantemente friável;
- Rocha alterada dura: Apresenta preservação de estruturas da rocha sã, bastante fraturada; e
- Rocha Sã: Constituída por rocha gnáissica.

Essa composição geológica é responsável pela presença de dois aquíferos principais na área de estudo, sendo eles os Sistemas Aquíferos Sedimentar (SAS) e Cristalino (SAC). O primeiro aquífero é chamado de Aquífero São Paulo é constituído pelos sedimentos das Formações Resende, Tremembé e São Paulo, sendo um aquífero heterogêneo, marcadamente pela deposição de lentes arenosas irregulares e intercalação entre sedimentos argilosos e siltsos. É um aquífero considerado livre a semiconfinado pela CETESB e com porosidade primária predominante.

Já o Sistema Aquífero Cristalino, também chamado de Aquífero Pré-Cambriano, é constituído na área de estudo pelas rochas do Complexo Embu, com pouca porosidade primária e maior atuação de um sistema estrutural de falhas e fraturas para o transporte de água subterrânea. Em ambos os aquíferos, há a tendência de fluxo de água subterrânea para sudoeste, onde há uma zona de descarga próxima (córrego).

6.4. A modelagem implícita

A modelagem implícita é uma alternativa ao tradicional método de modelagem explícita que, segundo Cowan et al. (2003), é um método manual, que depende da digitalização de linhas, muitas vezes a partir de seções geológicas pré-estabelecidas. Os mesmos autores apontam uma série de desvantagens envolvendo a utilização da modelagem explícita, como a não replicabilidade do modelo, já que depende de interpretações únicas do modelador, alto consumo de tempo na digitalização, dificuldade em trabalhar com geometrias complexas e a dificuldade em acrescentar novas informações a um modelo preexistente.

Na tentativa de contornar essas desvantagens e suportada pelo avanço tecnológico e na capacidade de processamento dos computadores, surge a modelagem implícita.

Esse método é capaz de integrar uma série de informações de forma automatizada através de algoritmos. Dentre os algoritmos possíveis para a realização da modelagem implícita está o Fast Radial Basis Function (Fast RBF™), patenteado pela Seequent, empresa desenvolvedora do *software* Leapfrog Works ®.

Esse algoritmo consiste em uma série de funções que envolvem um conjunto de dados a partir dos quais é escolhido um conjunto de funções básicas, de forma que a sua combinação linear satisfaça as condições de interpolação, conforme é apresentado por Caumon et al. (2012):

$$f(x) = \sum_{i=1}^L c_i \cdot p_i(x) + \sum_{n=1}^N \lambda_n \cdot \Phi(|x - x_n|)$$

Onde:

$p_i(x)$: São funções polinomiais de base

c_i : Coeficientes de drifte

L : Total de termos polinomiais

N : Número de pontos de dados

$\Phi(|x - x_n|)$: É uma função de covariância entre um ponto de dado (x_n) e um ponto desconhecido (x).

λ_n : São os coeficientes de interpolação desconhecidos

Para encontrar os coeficientes, é necessário resolver o seguinte sistema linear:

$$\begin{bmatrix} \Phi & P \\ P^T & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \lambda \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ 0 \end{bmatrix}$$

Onde:

$$\Phi = \begin{bmatrix} \phi(0) & \cdots & \phi(|x_1 - x_N|) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi(|x_N - x_1|) & \cdots & \phi(0) \end{bmatrix}$$

$$P = \begin{bmatrix} p_l(x_1) & \cdots & p_L(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ p_l(x_N) & \cdots & p_L(x_N) \end{bmatrix}$$

Sendo assim, o Fast RBF™ é um método de interpolação global, com equivalência matemática à krigagem dupla, possui variogramas de controle de dados e sua extrapolação pode ser realizada a partir de uma média especificada ou de forma automática (Seequent, 2020).

A aplicação da modelagem implícita e do Fast RBF™ em projetos relacionados ao Gerenciamento de Áreas Contaminadas, é possível através da Extensão de Contaminantes, compatível com o Leapfrog Works ®. Essa extensão permite trabalhar com dados de resultados analíticos, realizar análise estatística e trabalhar com a variografia experimental para a elaboração de superfícies e volumes de isovalores de concentração de contaminantes, chamadas de plumas de contaminação. Dentre os modelos teóricos presentes na interface da extensão estão os modelos esférico, exponencial e gaussiano.

6.5. Fluxo de Trabalho e Dados de Entrada

A elaboração do Modelo Conceitual Temporal da área de estudo considerando a evolução e comportamento das plumas de contaminantes em água subterrânea com foco nas unidades sedimentares, em que a porosidade primária é predominante, seguiu o fluxo de trabalho apresentado na Figura 18 baseado no que é apresentado no Manual do Leapfrog Works ® (Seequent, 2017).

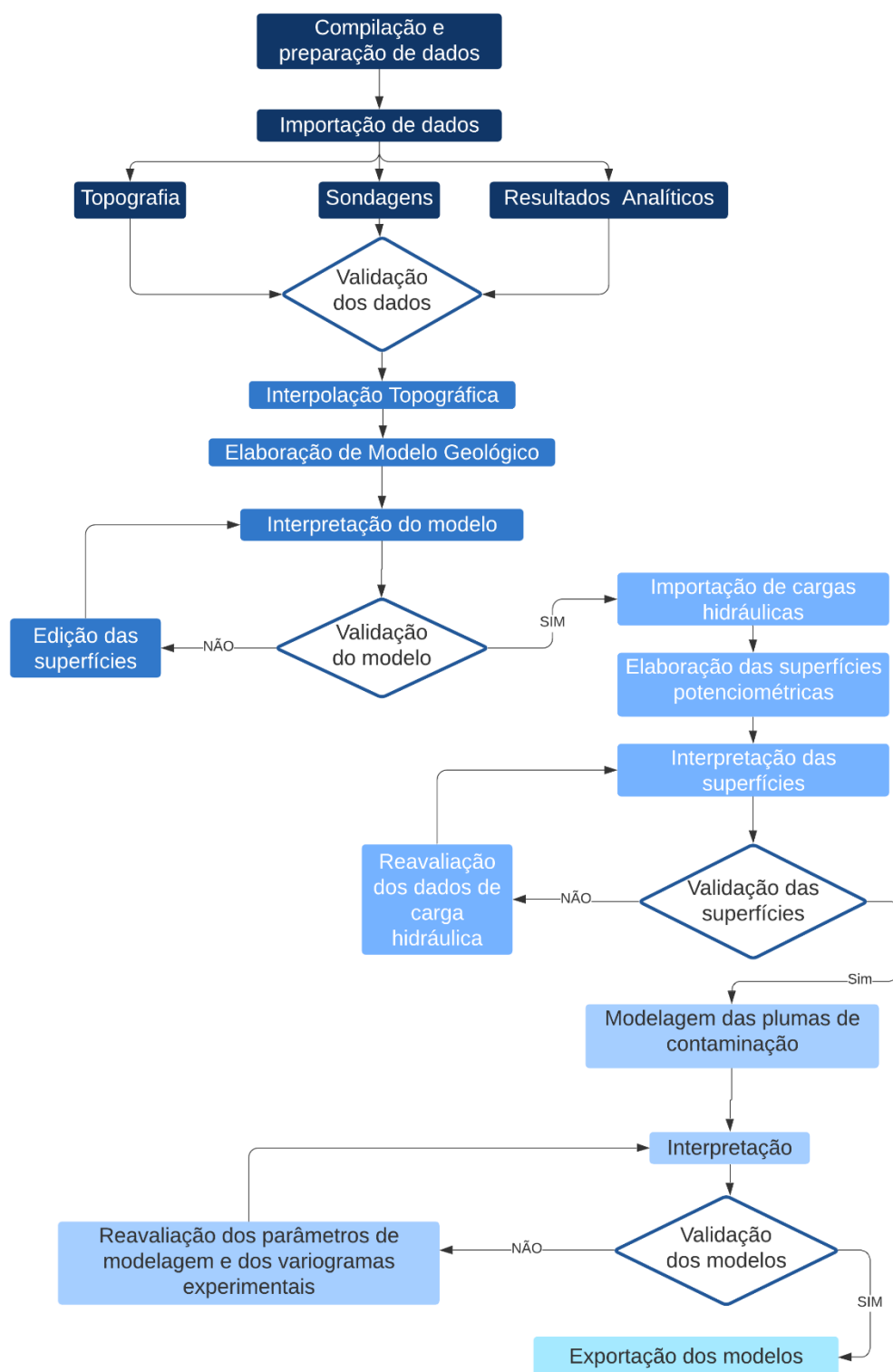


Figura 16: Fluxograma para elaboração de modelos conceituais no Leapfrog Works ®.

Desta forma, foram dados de entrada as informações de topografia, considerando coordenadas leste, norte e cota altimétrica, aplicadas no projeto em projeção SIRGAS 2000, zona 23S; informações de descrição litológica considerando a profundidade e descrição das distintas unidades, perfil construtivo dos poços, em especial com a informação de localização das seções filtrantes dos poços.

Além disso, foram avaliados os dados de medição de nível de água realizados durante as atividades ambientais, transformados em carga hidráulica a partir dos dados topográficos. Finalmente, para a visualização final também foram inseridas no Leapfrog Works ® imagens de satélite, extraída do Google Earth Pro e a planta da área, em formato CAD.

6.6. Modelagem tridimensional geológica

Para a elaboração do modelo geológico da área de estudo foram utilizadas as informações de sondagens realizadas durante as atividades ambientais. Todas as descrições litológicas foram reclassificadas com base em Vaz (1996) e adicionadas ao *software*. As seis unidades geológicas que fazem parte do modelo conceitual foram interpoladas para geração de superfícies a partir das informações de sondagem (Figura 19a).

Como a estratigrafia da área já era previamente conhecida, de forma que não apresenta grande complexidade estrutural, sendo predominantemente formada por camadas horizontais a sub-horizontais de rocha, rocha alterada, solo e sedimentos foi possível aplicar o conjunto de funções dentro do Fast RBF™ para depósitos. Esse conjunto de funções específicas tem como produto, superfícies de contato para estratigrafia concordante (Figura 19b), úteis para representação de superfícies sem contatos erosivos ou descontinuidades. Uma vez estabelecidas a ordem cronológicas das unidades e os contatos entre as mesmas, são gerados os volumes litológicos de forma automática (Figura 19c)

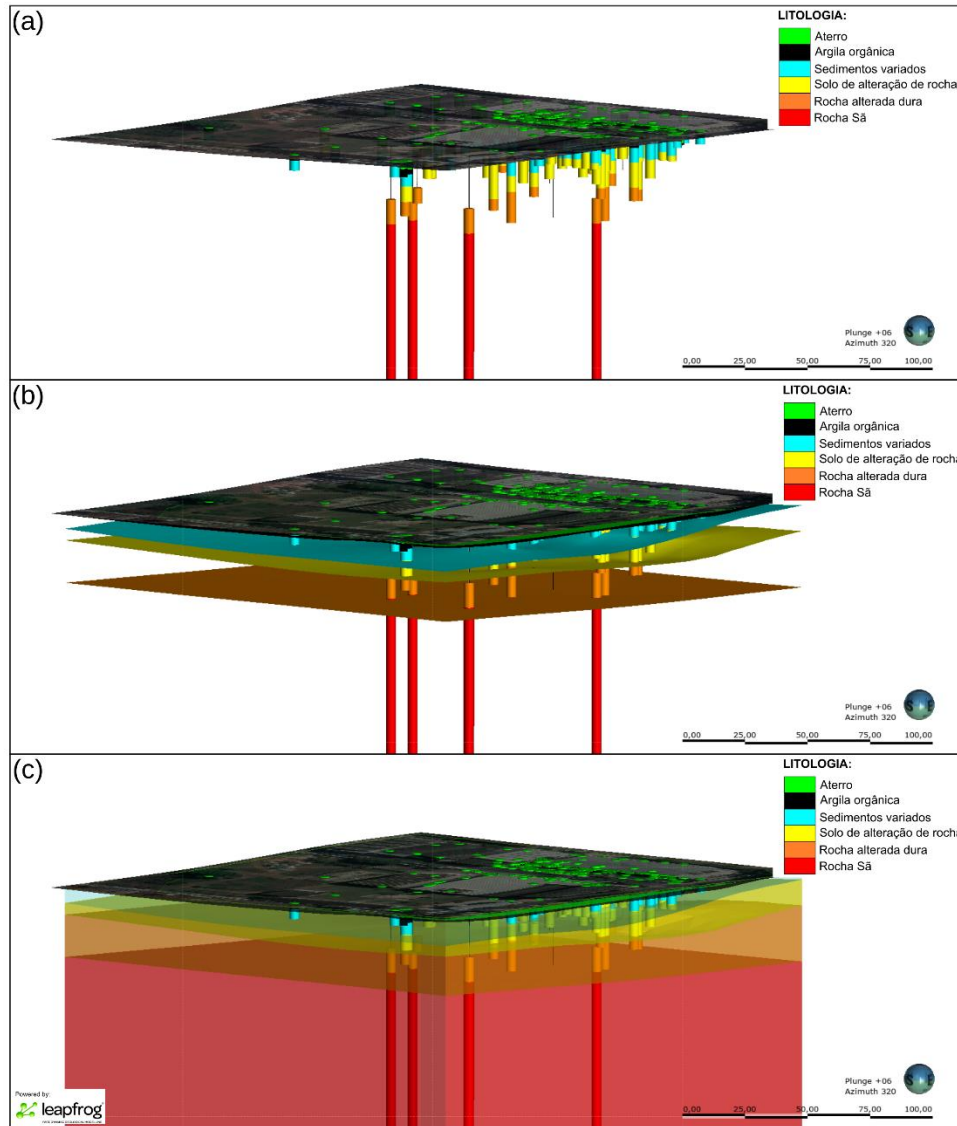


Figura 17: Elaboração do modelo geológico. (a) vista das sondagens com informação de litologia; (b) superfícies de contato geradas a partir da interpolação dos dados e (c) volumes gerados a partir das superfícies de contato. Sem exagero vertical.

A unidade de rocha sã é a base do modelo geológico elaborado, tem início em 30 metros abaixo da superfície topográfica e alcança a profundidade máxima de 288,847 metros (PP-06), formada essencialmente pela unidade gnáissica do Complexo Embu. Essa unidade é caracterizada pela predominância de porosidade secundária, isto é, com atuação de fraturas e falhas para o fluxo de água subterrânea. Para esse trabalho, ainda que permitida pela interface do Leapfrog Works ®, não foram inseridas informações estruturais e de localização das principais falhas e fraturas identificadas na área.

Sobreposta a essa unidade está a rocha alterada dura, unidade que demonstra as primeiras alterações da rocha sã e está localizada, aproximadamente, entre as profundidades de 20 e 30 metros. Nessa unidade, há a existência de porosidade dupla, quando existe além da porosidade por fraturas e falhas, também a porosidade intergranular.

Acima desse conjunto de rochas está o solo de alteração de rocha, também de porosidade dupla, é um pacote de espessura variável, e está localizado entre as profundidades de 8 a 20 metros, em contato irregular com a unidade de sedimentos variados. Essa unidade, por sua vez, possui contato mais homogêneo com a camada de argila orgânica, a unidade de menor espessura entre todas e ocorre entre as profundidades de 5 a 8 metros. Como unidade de topo da estratigrafia da área, está a unidade de aterro, com espessura máxima de 5 metros a partir da superfície topográfica.

As superfícies potenciométricas delimitadas a partir da avaliação histórica do nível de água na área de estudo indicou pouca variação ao longo dos anos e, de forma simplificada, pode auxiliar a compreender o fluxo de água subterrânea preferencialmente para sul e sudoeste, concordante com o que foi avaliado nos mapas potenciométricos históricos. Essas superfícies atravessam as litologias de aterro, argila orgânica e sedimentos variados (Figura 20a e Figura 20b).

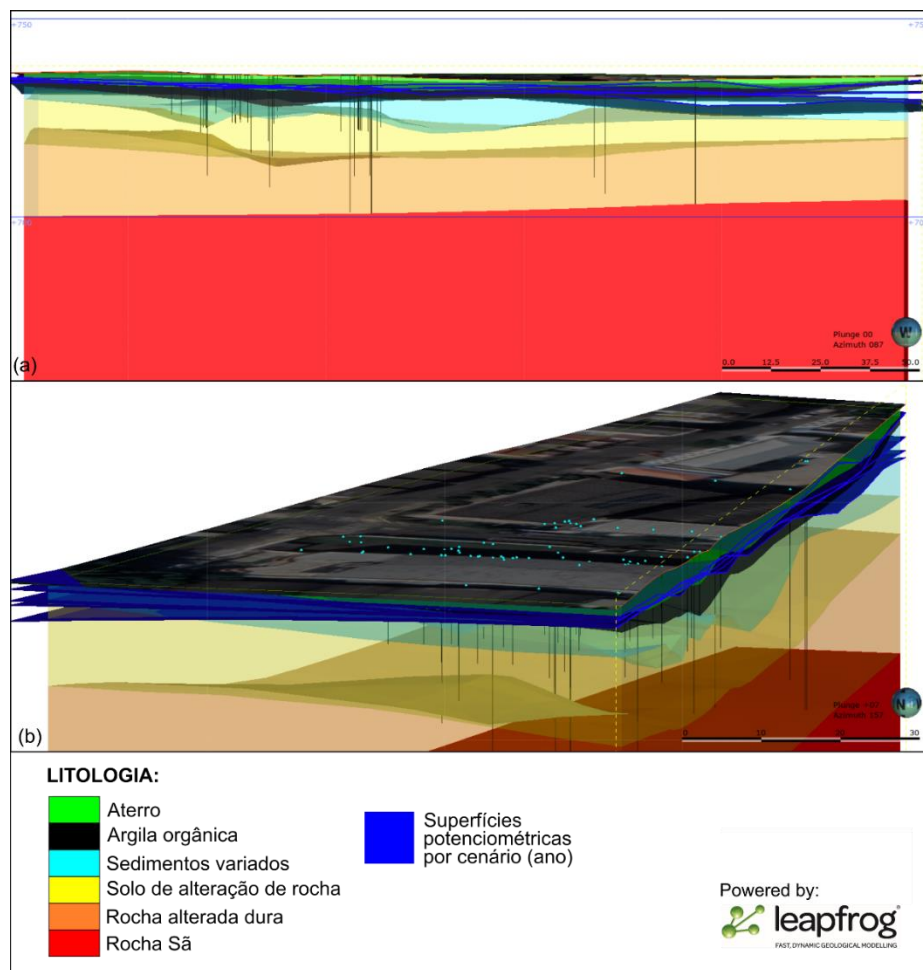


Figura 18: Avaliação das superfícies potenciométricas. (a) corte norte-sul com visada para leste com informação de litologia e superfícies potenciométricas históricas e (b) corte norte-sul com visada para sudeste com informação de litologia e superfícies potenciométricas históricas. Sem exagero vertical.

6.7. Modelagem implícita para plumas de contaminantes

Para a representação temporal dos modelos conceituais foram utilizadas sete campanhas de coleta de água subterrânea baseados no contexto ambiental da área e disponibilidade de dados. Durante as campanhas de coleta e análise de água subterrânea, as substâncias de maior relevância, escolhidas com base na ocorrência, série de degradação e toxicidade. Para a mesma área de estudo, Hart et al. (2021) pontua que as principais detecções ocorreram para os compostos 1,2-Dicloroetano e Tetracloroetano, que serão modeladas nos cenários pré-estabelecidos e apresentados a seguir:

Tabela 1 – Escopo de cenários (anos) e contexto associado.

ANO	CONTEXTO
2000	Primeiro ano com campanha de amostragem com distribuição significativa de análises de compostos orgânicos voláteis. Anterior aos trabalhos de remediação (bombeamento e tratamento) iniciado em 2002.
2006	Extensão do sistema de bombeamento e tratamento com alcance também para a unidade de solo de alteração de rocha.
2011	Campanha realizada entre a extensão do sistema de bombeamento e tratamento e a redução da profundidade do poço profundo (PP-05).
2013	Amostragem realizada após a redução da profundidade do PP-05.
2016	Campanha após o desligamento do sistema de bombeamento e tratamento e logo antes da realização das atividades de bio e termorremediação.
2018	Final das atividades de bio e termorremediação.
2019	Ano de encerramento do monitoramento semestral pós atividade de remediação

Uma vez definido o escopo analítico e temporal, foi realizada a validação do banco de dados de resultados analíticos dentro da interface do Leapfrog Works ®. Assim, foi possível retirar amostras duplicatas ou coletadas em um mesmo cenário e em um mesmo intervalo. De forma conservadora, foram mantidos os dados com a maior concentração de contaminantes. Além disso, os valores cujas concentrações foram reportadas como menores que o limite de quantificação do laboratório foram substituídos no banco de dados por zero, sendo assim uma condição de contorno fornecida ao *software* para que durante a interpolação, não haja superestimação dos volumes e auxilie na delimitação das plumas, minimizando os efeitos de borda. É importante ressaltar que os limites de quantificação do laboratório para os compostos são comumente apresentados como 1,0 a 2,0 ug/L.

O domínio da estimativa foi determinado de forma a constituir o volume saturado de solo e rocha. Isso porque, é avaliado no modelo proposto a distribuição espacial de contaminantes em fase dissolvida. Serão elaboradas ao todo 14 plumas, uma para cada cenário e substância química de interesse considerando como valor mínimo os valores orientadores definidos pela CETESB (2016). Para os anos de 2018 e 2019, os resultados

serão comparados também, com as metas de remediação estabelecidas para a área no ano de 2016 e revisado em 2018. Esses valores foram definidos com base em estudos de avaliação de risco à saúde humana e, apresentados no presente trabalho, como os valores mais restritivos calculados para as concentrações máximas aceitáveis (CMA). Esses valores são 1160 µ/L para 1,2-Dicloroetano e 6130 µ/L para Tetracloroetano.

Essas plumas são elaboradas a partir da interpolação de dados através do algoritmo Fast RBF™. Os dados são ajustados com base na variografia experimental (Figura 21a), considerando um plano preferencial (Figura 21c e Figura 21d). Esse plano preferencial indica uma direção de tendência. No caso dos projetos envolvendo contaminantes em fase dissolvida, entende-se que a direção de tendência é a mesma em que se dá o fluxo preferencial de água subterrânea.

Nesse sentido, a ausência de informações sobre a localização, tamanho e orientação de fraturas e falhas, faz com que o modelo seja limitado no contexto da rocha sã. Nesse aquífero, o fluxo preferencial, e portanto, os planos de tendência deveriam seguir a orientação dessas estruturas e não o fluxo de água apontado pelas camadas de porosidade primária e dupla.

Todavia, na ausência dessas informações, os planos de tendência foram determinados por cenário, considerando a avaliação de direção do fluxo de água subterrânea histórico (Figura 21b). Cada modelo possui como principais parâmetros de entrada: tamanho, quantidade e tolerância de passo, tolerância angular e efeito pepita (se aplicável) e, assim, pode ser realizado o ajuste manual e interativo com base nos pares formados.

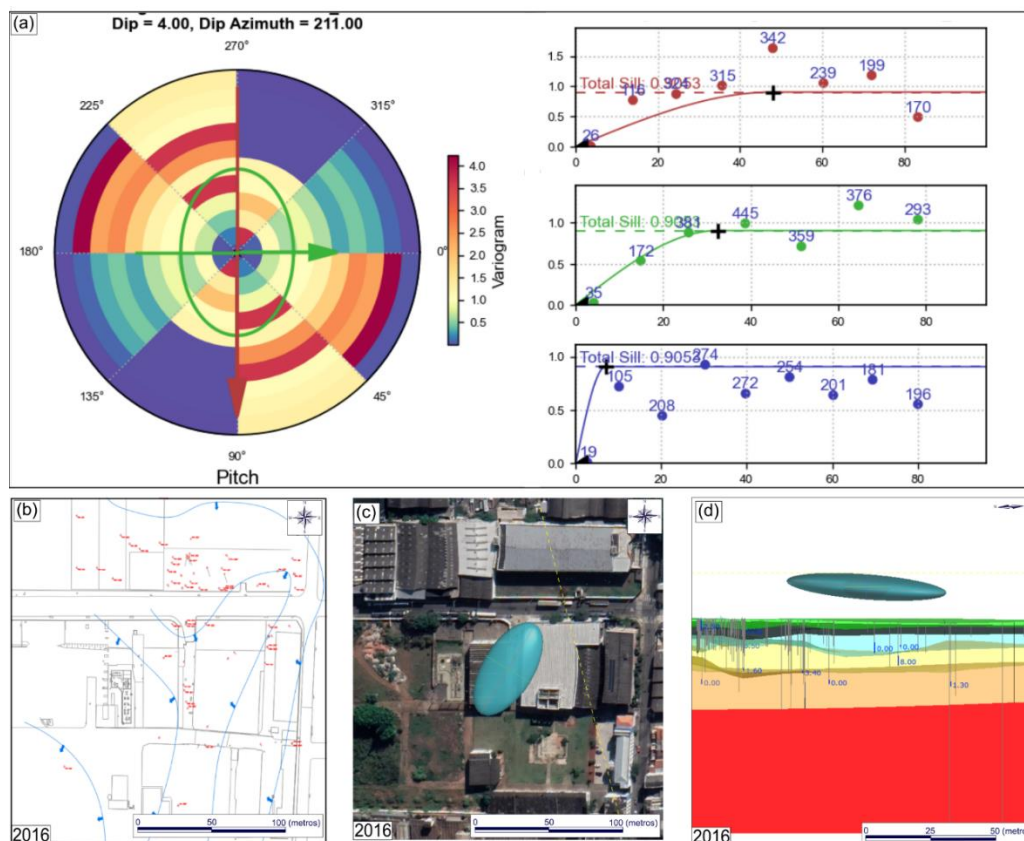


Figura 19: Variografia experimental para elaboração de plumas de contaminantes. (a) Interface da Extensão de Contaminantes com diagrama radial e os variogramas para os dados de 1,2-dicloroetano para o ano de 2016; (b) Mapa potenciométrico da área de estudo no ano de 2016 utilizado para determinação do plano preferencial; (c) Vista em planta do plano preferencial determinado a partir do mapa potenciométrico do ano de 2016 e (d) vista em perspectiva do plano preferencial determinado a partir do mapa potenciométrico do ano de 2016.

Esse ajuste manual e interativo é responsável por alterar a geometria, extensão e precisão do modelo. Desta forma, cada ajuste gera um novo volume, que deve ser validado com base nos dados e caso não estejam satisfatórios, deve-se alterar os parâmetros de entrada e realizar novos ajustes até que os volumes sejam validados.

6.8. Modelo Conceitual Temporal da Área de Interesse

Os modelos conceituais finais integram as informações litológicas e a evolução das plumas de contaminantes para as duas substâncias químicas avaliadas. Um corte NNW-SSE foi realizado no modelo geológico passando pelo centro de massa da pluma

interna na área de estudo para melhor visualização dos resultados que também são apresentados em formato de vídeo, disponível no Apêndice I.

Ambos os modelos apresentados (Figuras 22 e 23) foram construídos a partir de fotografias tridimensionais da contaminação em cada cenário. De modo geral, é notável o aumento na extensão das plumas de contaminação entre os anos de 2000 e 2016. Essas mudanças temporais podem estar associadas com variações da realidade dos cenários, isto é, existe um verdadeiro aumento na extensão e concentração dos contaminantes ao longo dos anos que podem estar associados aos fatores naturais e antrópicos. Sendo assim, uma fonte ativa de contaminação ou interferências no nível de água causados por remediação ou ainda processos naturais como a dispersão podem atuar de forma a modificar os limites da pluma.

Por outro lado, mudanças temporais também podem estar associadas à instrumentação. Desta forma, variação no grau de detalhamento e representatividade também podem causar em um modelo conceitual alterações visuais na extensão, geometria e concentração da pluma de contaminação.

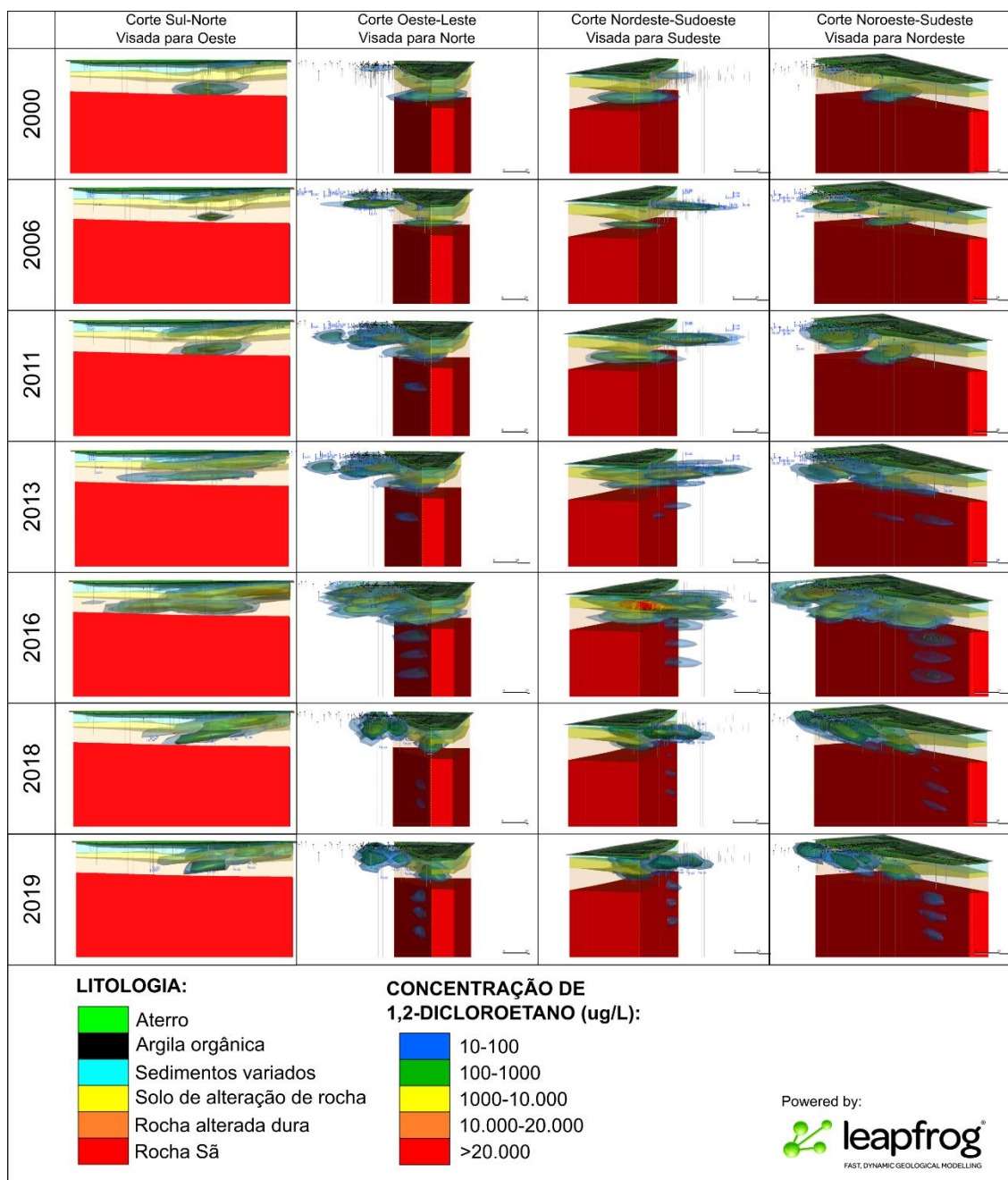


Figura 20: Vistas em diferentes perspectivas do modelo conceitual tridimensional com informações de litologia e pluma de 1,2-dicloroetano para a área de estudo. Figura sem exagero vertical.

No ano de 2000 foi realizado o primeiro monitoramento de água subterrânea com coleta de amostras representativas para construção do entendimento da contaminação em subsuperfície. Foram coletadas amostras em oito diferentes poços de monitoramento em diferentes unidades hidroestratigráficas. É verificada a presença de 1,2-Dicloroetano e Tetracloroetano na região central da planta industrial, distribuídas nas unidades de

rocha sã, rocha alterada dura e sedimentos variados. Pela ausência de uma malha de amostragem regular, a delimitação destas plumas apresenta alto nível de incerteza.

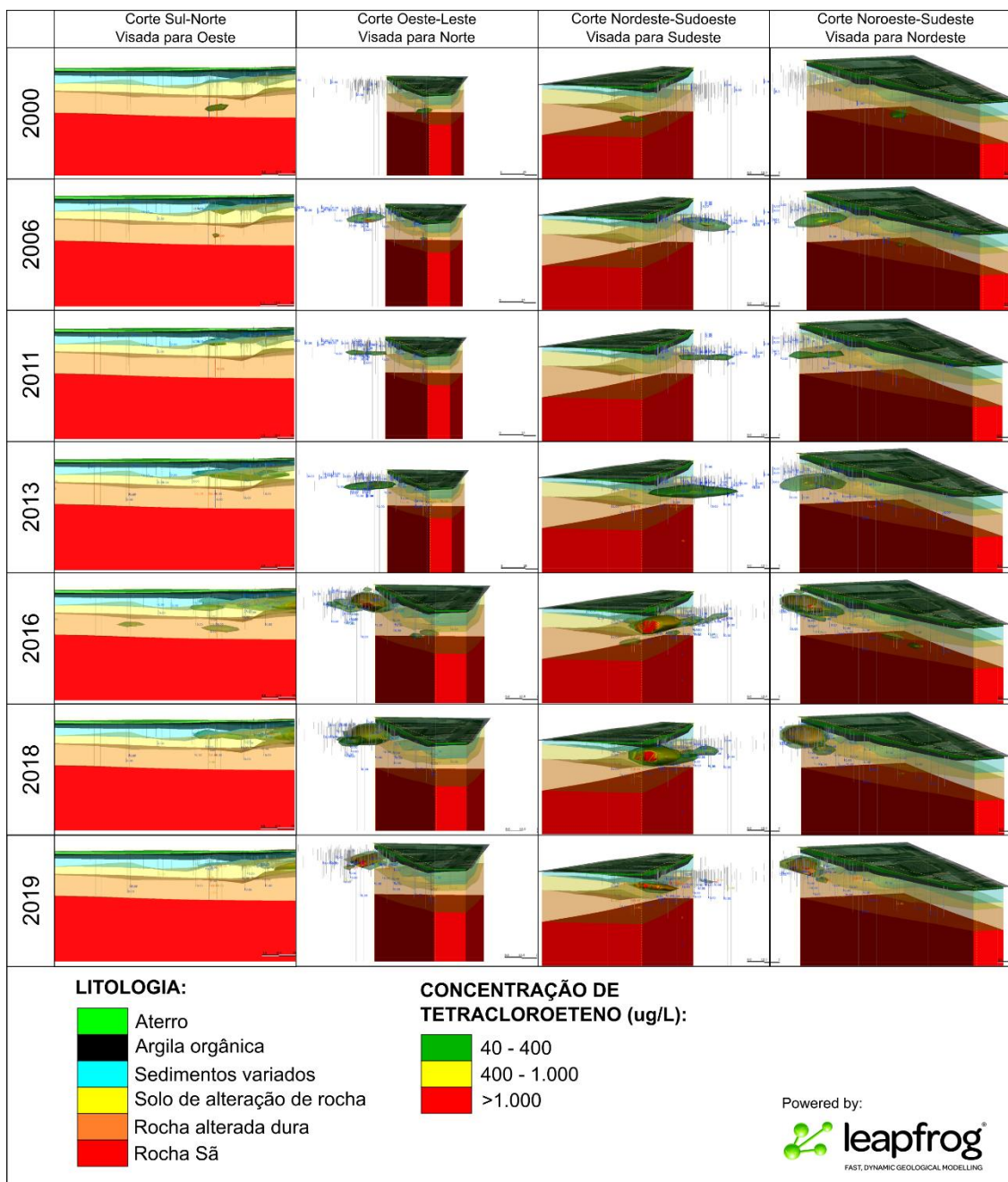


Figura 21: Vistas em diferentes perspectivas do modelo conceitual tridimensional com informações de litologia e pluma de tetracloreto para a área de estudo. Figura sem exagero vertical.

Em 2006, com um aumento na quantidade de poços amostrados para 31 nota-se a extensão das plumas, para leste. Essa tendência é observada novamente nos anos de

2011, 2013 e 2016, quando a pluma atinge a sua extensão máxima e é apresentado o diagnóstico atualizado da área de estudo. Uma alteração real de tal porte nos cenários não é sustentada pelos estudos ambientais desenvolvidos na área. Sendo assim, nota-se que os modelos gerados apresentam a evolução do conhecimento e entendimento, considerando as atividades ambientais até o ano de 2016 quando o modelo foi aprimorado de forma satisfatória. Em especial, o aumento das dimensões das plumas modeladas pode ter relação com o número de pontos amostrados em cada campanha. Uma vez apresentada a delimitação vertical e horizontal das plumas de contaminação, foram propostos dois sistemas de remediação que atuaram com foco na camada de argila orgânica: a remediação termal e a biorremediação.

Esses dois sistemas atuaram entre os anos de 2016 e 2018 com o objetivo de reduzir as concentrações e promover a retração das plumas. A primeira campanha de amostragem de água subterrânea após o término das atividades de remediação foi realizada no ano de 2018, em poços que possuem a mesma representatividade daqueles amostrados em 2016, anteriormente às atividades. Como resultado, nota-se uma significativa redução na extensão das plumas e nas concentrações máximas observadas. Essa tendência é continuada no ano de 2019, quando foi realizado o último monitoramento semestral após as atividades de remediação.

Desta forma, os modelos apresentados após o ano de 2016 representam variações reais associados à remediação e não mais uma mudança devido à instrumentação, grau de detalhamento e representatividade. Essa é uma tendência que também pode ser observada na avaliação dos volumes totais das plumas de contaminantes calculadas pelo Leapfrog Works® (Figura 24).

O volume total das plumas representa o volume de solo ou rocha, água, gases e contaminantes dissolvidos, cujas concentrações são superiores aos valores orientadores da CETESB (2016). Esse volume apresenta aumento aparente até o ano de 2016 quando são realizados o diagnóstico aprimorado e as atividades de remediação. Após esse momento, há redução significativa da concentração dos dois contaminantes até o ano de 2019.

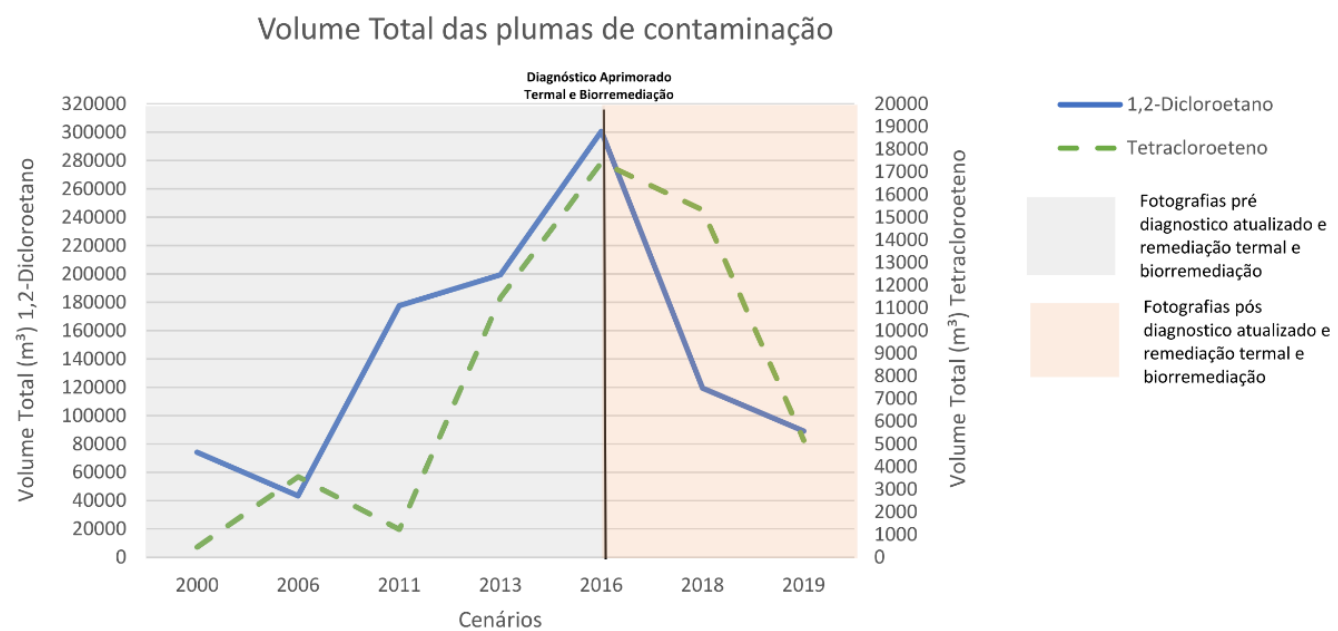


Figura 22: Evolução do volume em m³ das plumas de 1,2-Dicloroetano e Tetracloroetano.

Desde o ano de 2013, os modelos indicam a possibilidade de entrada de 1,2-Dicloroetano e Tetracloroetano na área de estudo tendo como origem o limite norte da área de estudo. Essa é uma hipótese que já foi anteriormente levantada e motivou a avaliação de isótopos para compostos específicos nos anos de 2016 e 2019. Os modelos gerados corroboram a hipótese de existência de plumas combinadas, com uma fonte interna conhecida e uma fonte externa ainda desconhecida.

6.9. Conclusões

A elaboração de um modelo conceitual tridimensional se mostrou uma importante ferramenta para visualização da construção do conhecimento e entendimento da delimitação de pluma de contaminantes ao longo do tempo bem como para a avaliação do desempenho de sistemas de remediação na redução das concentrações e retração das plumas de contaminação.

Para que isso fosse possível, a aplicação da modelagem implícita, através do algoritmo Fast RBF™, teve um importante papel na representação tridimensional integrada das informações de resultados analíticos e contexto geológico do projeto.

Conforme já pontuado por Cowan et al. (2003), esse tipo de modelagem apresenta uma série de vantagens e para o presente projeto destaca-se a metodologia intuitiva, rapidez dos processos, consumo inteligente de capacidade computacional, replicabilidade do modelo e possibilidade de exportação do modelo em formato de vídeo, permitindo a análise temporal dos fenômenos.

Durante o processo de construção do modelo, foi notável a dificuldade em gerenciar, organizar e aplicar um banco de dados histórico, considerando a atividade de muitas empresas e profissionais distintos, cada um com sua interpretação na descrição litológica, gerando uma série de dados conflitantes, que precisaram ser reavaliados e reajustados.

Existem ainda, limitações dos modelos apresentados, em especial do que diz respeito ao aquífero fraturado, em que a presença de porosidade secundária possui papel predominante na determinação da direção do fluxo de água subterrânea. A análise dos dados estruturais complementa e pode auxiliar no entendimento no modelo como um todo.

Sendo assim, apesar de os modelos tridimensionais elaborados a partir de *softwares* de modelagem serem importantes ferramentas para a integração e visualização de no setor de meio ambiente, requerem ainda uma série de cuidados. Esses, devem ser iniciados ainda na tomada de dados em campo, na uniformização das informações e gerenciamento de banco de dados além da presença de profissionais capacitados na elaboração e interpretação dos resultados da modelagem.

6.10. Agradecimentos

Os autores agradecem à FUSP pelo apoio financeiro e a Seequent pela parceria firmada para elaboração do presente trabalho.

6.11. Referências Bibliográficas

American Society for Testing and Materials (ASTM), 2020, ASTM E1689-20 Standard guide for developing conceptual site models for contaminated sites, 13p.

Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB), 2026, Valores Orientadores para Solo e Água Subterrânea do Estado de São Paulo 2016: CETESB, São Paulo, 3 p.

Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB), 2020, Relatório de Áreas Contaminadas e Reabilitadas no Estado de São Paulo: CETESB, São Paulo, 12 p.

Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB), 2021, Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas: CETESB, São Paulo, Vol. 3, Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/areas-contaminadas/documentacao/manual-de-gerenciamento-de-areas-contaminadas/informacoes-gerais/apresentacao/> Acesso em 13 de maio de 2021.

Cowan, J., Beatson, R., Ross, H., Fright, W., McLennan, T., Evans, T., Carr, J., Lane, R., Bright, D., Gillman, A., Oshurst, P. e Titley, M., 2003, Practical implicit geological modelling: 5th International Mining Geology Conference, Bendigo, Victoria, Austrália, nº8/2003, p. 89-99.

da Costa Casado, F., Etchebehere, M. L. d. C., Stevaux, J. C., De Oliveira, P. E. and Saad, A. R., 2011, Estratigrafia e paleoambiente neoquaternário da calha aluvial do Rio Paraíba do Sul entre os municípios de São José dos Campos e Taubaté, SP: Geociências (São Paulo), v. 30, no. 2, p. 125–145.

Hart, S. T., Bertolo, R. A., Agostini, M. S., Feig, R., Barbosa, M. B. e Lima, P. L., 2021, Temporal conceptual model of contaminated complex sites applied for the management of a former supplywell area in tropically weathered bedrock: Sustainable Water Resources Management, v. 7.

Hasui, Y., 1975, Evolução polifásica do Pré Cambriano a oeste de São Paulo: Boletim IG, v. 6, p. 95–108.

Heilbron, M., Pedrosa-Soares, A. C., Campos Neto, M. d. C., Silva, L. d., Trouw, R. A. J. E Janasi, V. d. A., 2004, Província Mantiqueira: Geologia do continente sul-americano: evolução da obra de Fernando Flávio Marques de Almeida. P. 203–235.

- Perrota, M., Salvador, E., Lopes, R. and D'Agostinho, L., 2005, Mapa Geológico do Estado de São Paulo. 1: 750.000: Programa levantamentos geológicos básicos do Brasil. Serviço Geológico do Brasil. São Paulo.
- Riccomini, C., Sant'Anna, L. G. e Ferrari, A. L., 2004, Evolução Geológica do Rift Continental do Sudeste do Brasil: Geologia do continente Sul-Americano: evolução da obra de Fernando Flávio Marques de Almeida, v. p. 383–405.
- Seequent, 2017, User Manual for Leapfrog Works: Seequent.
- Seequent, 2020, 'Comparing leapfrog radial basis function and kriging', Disponível em: <https://www.seequent.com/comparing-leapfrog-radial-basis-function-and-kriging/>. Acesso em: 25 abril2021.
- Trouw, R. A. J., Heilbron, M., Ribeiro, A., Paciullo, F., Valeriano, C., Almeida, J., Tupinambá, M. and Andreis, R., 2000, The central segment of the Ribeira Belt: Tectonic Evolution of South America, v. 31, p. 287–310.
- Vaz, L. F., 1996, Classificação genética dos solos e dos horizontes de alteração de rocha em regiões tropicais: Revista Solos e Rochas, v. 19, no. 2, p. 117–136.