

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS Instituto de Geociências

CAETANO PONTES COSTANZO

ANÁLISE DE INCERTEZA DE DADOS HIDROGEOLÓGICOS EM ESTUDOS DE CASOS

CAMPINAS 2019

CAETANO PONTES COSTANZO

ANÁLISE DE INCERTEZA DE DADOS HIDROGEOLÓGICOS EM ESTUDOS DE CASOS

TESE APRESENTADA AO INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE DOUTOR EM CIÊNCIAS NA ÁREA DE GEOLOGIA E RECURSOS NATURAIS

ORIENTADOR: PROF. DR. ALEXANDRE CAMPANE VIDAL

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA TESE DEFENDIDA PELO ALUNO CAETANO PONTES COSTANZO E ORIENTADO PELO PROF. DR. ALEXANDRE CAMPANE VIDAL.

> CAMPINAS 2019

Ficha catalográfica Universidade Estadual de Campinas Biblioteca do Instituto de Geociências Marta dos Santos - CRB 8/5892

 Costanzo, Caetano Pontes, 1984 C823a Análise de incerteza de dados hidrogeológicos em estudos de casos / Caetano Pontes Costanzo. – Campinas, SP : [s.n.], 2019.
 Orientador: Alexandre Campane Vidal. Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Geociências.
 1. Incerteza (estatística). 2. Fraturas. 3. Redes Neurais (computação). 4. Águas subterrâneas - Escoamento. 5. Condutividade hidráulica. I. Vidal, Alexandre Campane, 1969-. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Geociências. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Analysis of hydrogeological data uncertainty in case studies Palavras-chave em inglês: Uncertainty (statistics) Fractures Neural networks (Computer science) Groundwater flow Hydraulic conductivity Área de concentração: Geologia e Recursos Naturais Titulação: Doutor em Geociências Banca examinadora: Alexandre Campane Vidal [Orientador] Sueli Yoshinaga Pereira Guilherme Daniel Avansi Alexandra Vieira Suhogusoff Marco Aurelio Zequim Pede Data de defesa: 04-07-2019 Programa de Pós-Graduação: Geociências

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a) - ORCID do autor: https://orcid.org/0000-0002-3001-0889

⁻ Currículo Lattes do autor: http://buscatextual.cnpq.br/buscatextual/visu



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS

AUTOR: Caetano Pontes Costanzo

ANÁLISE DE INCERTEZA DE DADOS HIDROGEOLÓGICOS EM ESTUDOS DE CASOS

ORIENTADOR: Prof. Dr. Alexandre Campane Vidal

Aprovado em: 04 / 07 / 2019

EXAMINADORES:

- Prof. Dr. Alexandre Campane Vidal Presidente
- Profa. Dra. Sueli Yoshinaga Pereira
- Prof. Dr. Guilherme Daniel Avansi
- Profa. Dra. Alexandra Vieira Suhogusoff
- Prof. Dr. Marco Aurelio Zequim Pede

A Ata de defesa com as respectivas assinaturas dos membros, encontra-se disponível no SIGA - Sistema de Fluxo de Tese e na Secretaria de Pósgraduação do IG.

Campinas, 04 de julho de 2019.

BIOGRAFIA

Caetano Pontes Costanzo é graduado em Geologia (2003 – 2008) pela Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP). Na graduação (2005), ingressou na área de geologia de recursos petrolíferos, por meio da bolsa de iniciação científica PRH-ANP 15 (Ciências e Engenharia dos Recursos Naturais de Óleo e Gás). Neste período, esteva presente na equipe do artigo "Modelagem Geoestatística 3D da Impedância Acústica Para a Caracterização do Campo de Namorado", publicado na Revista Brasileira de Geofísica em 2007.

Em 2008, iniciou sua atuação no mercado de consultoria ambiental na empresa WALM, trabalhando em projetos de licenciamento ambiental e gerenciamento de áreas contaminadas. Entre 2011 e 2014, fez mestrado na UNICAMP com a dissertação intitulada "Análise de Incerteza de Cenários de Bombeamento e Tratamento em Áreas Contaminadas". Fruto do mestrado, publicou na revista Águas Subterrâneas seu segundo artigo em 2015.

Em setembro de 2014, iniciou o curso de Doutorado em Geociências na UNICAMP, dando continuidade ao trabalho desenvolvido no mestrado e tentando conciliar sua experiência no mercado com a pesquisa acadêmica. Neste período, tem se dedicado à utilização de técnicas quantitativas em estudos de casos hidrogeológicos.

DEDICATÓRIA

Aos meus amores: Marina e Francisco.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço ao professor Alexandre Campane Vidal por ter me aceitado como orientando, ter aberto as portas para a ideia e o desenvolvimento das pesquisas realizadas nesta tese, por toda sua grande generosidade, e pelo seu esforço, dedicação e paciência desde a iniciação científica até agora, ou seja, 14 anos trabalhando juntos.

À Empresa WALM por me proporcionar todos os dias novos conhecimentos e desafios, bem como por fornecer a base de dados deste trabalho.

Aos meus eternos corinthianos e companheiros Bruno Costanzo e Jacinto Costanzo Junior. Às minhas amadas irmã e mãe, Iara e Evanisa, respectivamente. Aos meus sobrinhos Mumu, Livinha, Vicente, Beatriz e Luiz que proporcionam todos os dias uma alegria intensa.

À companheira de trabalho Simony Sakamoto pela ajuda no simulador de fluxo e transporte de contaminantes. Simony sempre rápida nas ideias e aplicações frente a um software.

À pesquisadora Michelle Kuroda pelas revisões feitas e pelo apoio na elaboração do capítulo 4 desta tese.

À minha querida e amada companheira de dia a dia Marina Marques Gimenez e ao nosso futuro filho, Francisco, que já na barriga dela me traz uma motivação nunca vista.

Por fim, a todos aqueles que contribuíram de alguma forma para realização deste projeto.

EPÍGRAFE

Ontem, meu bem, contei até cem Hoje não sei Hoje não sei (Itamar Assumpção)

RESUMO

A presente tese utilizou técnicas quantitativas, descritas em três artigos, que visaram à análise de incerteza de dados hidrogeológicos, a partir de informações de campo como: (i) descrições litológicas; (ii) vazão; (iii) nível estático; (iv) nível dinâmico; (v) mapeamento estrutural; (vi) concentrações de contaminantes e (vii) condutividade hidráulica. O primeiro artigo avaliou a favorabilidade hidrogeológica de uma região demandante de água e com poucas informações de litologia, mapeando as zonas mais favoráveis para a exploração de água subterrânea com base na incerteza litológica das principais unidades de fluxo, sendo que as áreas com valores de capacidade específica maiores que 1 m³/h/m foram consideradas produtivas. O segundo artigo integrou o modelo de redes de fraturas discretas (DFN) com o simulador de fluxo subterrâneo (MODFLOW). A técnica utilizada foi desenvolvida a partir da caracterização estatística e da simulação de cinquenta cenários de distribuição espacial dos tamanhos, direções e aberturas/preenchimento das fraturas mapeadas em campo. O objetivo foi avaliar a incerteza relacionada ao mapeamento estrutural de uma mina a céu aberto e o que esta incerteza influencia no possível desaguamento para o fundo de cava ao longo de dez anos de operação da mina. No terceiro artigo foi apresentada a simulação de fluxo e o transporte de contaminantes realizadas por simulador de fluxo (MODFLOW) e redes neurais artificias (RNA) em cem cenários estocásticos de condutividade hidráulica. O propósito foi avaliar a incerteza referente a este parâmetro hidrogeológico frente ao deslocamento de uma pluma de contaminação em 3 anos de simulação. Além disso, foi possível comprovar a eficiência das redes neurais artificiais em relação à velocidade da simulação para a estimativa do transporte de contaminantes, quando comparado com o MODFLOW. Dessa maneira, por meio de estudos de casos, esta tese demonstra a hipótese de que as técnicas geoestatísticas podem ser utilizadas para a análise de incerteza em estudos práticos de hidrogeologia honrando os dados de campo na geração de modelos e simulações robustos e realistas. Portanto, os métodos geoestatísticos podem ser utilizados como subsídio à tomada de decisão no gerenciamento dos recursos hídricos subterrâneos.

Palavras-chave: análise de favorabilidade, redes de fraturas discretas, redes neurais artificias, fluxo subterrâneo e condutividade hidráulica.

ABSTRACT

This thesis proposes the use of quantitative techniques, described in three articles, for the analysis of hydrogeological data uncertainty, based on field information such as: (i) lithology; (ii) flow rate; (iii) static level; (iv) dynamic level; (v) structural mapping; (vi) concentrations of contaminants and (vii) hydraulic conductivity. The 1º article evaluated the hydrogeological favorability of a water demanding region with scarce lithology information, mapping the favorable zones for the groundwater exploitation based on the lithological uncertainty of the main flow units; areas with specific capacity greater than 1m³/h/m were considered productive. The 2° article integrated the model of discrete fracture networks with the underground flow simulator. The technique used was developed based on the statistical characterization and on the simulation of fifty scenarios of spatial distribution of sizes, directions and openings obtained from field information. The main purpose was to evaluate the uncertainty related to the structural mapping of an open pit mine and what this uncertainty influences in the dewatering to the bottom of the pit during ten years of operation. In the third article, the model of flow and the contaminants transport were carried out by MODFLOW and artificial neural networks (ANN), and 100 stochastic hydraulic conductivity scenarios were done. The purpose was to evaluate the uncertainty regarding this hydrogeological parameter against the displacement of a plume in 3 years of simulation. In addition, it was possible to prove the efficiency of the artificial neural networks related to the speed of the simulation to estimate the transport of contaminants when compared to MODFLOW. Thus, by means of case studies, this thesis demonstrate the hypothesis that geostatistical techniques can be used for the analysis of uncertainty in practical studies, honoring the field data with the generation of robust and realistic models. Therefore, geostatistical methods can be used as input for decision-making in the management of groundwater resources.

Keywords: favorability analysis, discrete fracture network, artificial neural networks, underground flow and hydraulic conductivity.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1 – Localização da área de estudo (contorno em vermelho)29 Figura 2.3 – Afloramentos da Fm. Itapecuru na Ponta da Madeira, São Luíz / MA31 Figura 2.4 – Mapa com a localização dos poços utilizados (pontos vermelhos – piezômetros e poços de monitoramento; pontos pretos – poços de captação) 32 Figura 2.6 – Mapas de espessura e porcentagem de arenitos utilizados na Figura 2.7 – A: Mapa de cota do terreno utilizado como limite superior do modelo. B: vista lateral com a superfície do terreno e posicionamento dos pocos utilizados na pesquisa40 Figura 2.8 – Probabilidade da variável indicadora "arenito" para intervalos de profundidade em relação ao nível do mar.....42 Figura 2.9 – Média das probabilidades para a ocorrência de arenitos no modelo geológico 3D......45 Figura 2.10 – Histograma de função de probabilidade de massa para a variável capacidade específica da região de pesquisa46 Figura 2.11 – Área em coloração cinza representa valor de capacidade específica superior a 1 m³/h/m, sendo considerada produtiva pela análise de favorabilidade. Pontos em preto são os poços com dados de vazão, nível estático e nível dinâmico......47 Figura 2.12 - Gráfico de dispersão entre profundidade e produtividade dos Figura 2.13 – Favorabilidade hidrogeológica bayesiana para a área de estudo Figura 3.1 – Mapa da área de estudo (contorno em roxo) e reservatórios de Figura 3.2 – A) testemunho de sondagem e B) mapeamento em campo de talude, ambos utilizados para o mapeamento estrutural da mina – rede original de fraturas......59 Figura 3.3 – Mapa estrutural para a região da cava. A) Feições na área da cava, B) detalhe para a região nordeste. Verde - Falhas, Tracejado Azul lineamentos, Azul claro - fraturas com água, Rosa - fraturas. Notam-se grandes áreas da cava da mina sem informação do mapeamento estrutural realizado60 Figura 3.4 – Exemplo do dado bruto oriundo da descrição estrutural de testemunhos de sondagem e utilizados para o mapeamento estrutural da mina. Prof: Profundidade; Tipo: Tipo de estrutura encontrada; FR - fratura; In Fill -

tipo de preenchimento; Prench (mm): espessura do preenchimento; Ou: Outros; Ox: óxidos em geral; Cr: Criolita e Ch-Ox:Clorita e óxidos em geral60 Figura 3.5 – Exemplificação do método utilizado na pesquisa63 Figura 3.6 – Conjunto esquemático representativo de discos das fraturas geradas no modelo DFN64 Figura 3.7 – Histogramas de comprimentos e direcões das fraturas da área de pesquisa65 Figura 3.8 – Modelo utilizado na simulação de fluxo. Em amarelo, solo, em rosa células com presença de fraturas e marrom rocha cristalina sem presenca de fraturas......70 Figura 3.9 – A) Mapa topográfico utilizado no modelo de fluxo. B) Mapa de condições de contorno, malha de simulação e os 15 pontos de controle. Reservatórios de água a nordeste da cava70 Figura 3.10 – Resultado de um cenário do modelo DFN para a área da mina e seu entorno - distribuição espacial estimada dos parâmetros geométricos das fraturas......72 Figura 3.11 - Surgimento de água no talude entre a face da cava e os reservatórios a NE da área de pesquisa.....73 Figura 3.12 – Área alvo das simulações de fluxo (retângulo à NE) e sua interface com o modelo DFN73 Figura 3.13 - Histograma e função de probabilidade das vazões de Figura 3.14 – Modelos DFN relacionados aos grupos 6 (baixa vazão) e 14 (alta vazão)......80 Figura 4.1 – Localização da área de pesquisa (polígono em vermelho)............86 Figura 4.3 – Cenários de K gerados para avaliação da incerteza de K no deslocamento da pluma de ferro+290 Figura 4.4 – Esquema do funcionamento da rede neural MLP. Formado por três camadas distintas (entrada, oculta e saída), a rede neural tem como principal objetivo adaptar os valores de pesos associados aos neurônios a fim de convergir o treinamento aos valores de saída desejados. Desta forma, depois de propagar o sinal de entrada até a camada de saída, os ajustes dos pesos são feitos da camada de saída em direção à camada de entrada......94 Figura 4.5 – Correlação entre valores médios de k e concentrações de Fe em 3 Figura 4.6 - Variação das concentrações de Fe estimadas em função dos Figura 4.7 - Os gráficos mostram os resultados obtidos do treinamento da técnica MLP. O valor médio do desempenho da rede neural foi de 92% para a predição de Fe. Todas as correlações foram acima de 90%, demonstrando que

Figura 4.8 - Correlação entre valores médios de k e concentrações c	e Fe em 3
anos – 100 cenários de k	
Figura 4.9 - Variação das concentrações de Fe estimadas em funçã	io dos 100
cenários de k	101

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Grupos associados às rochas descritas nos poços
Tabela 2.2 – Valores de capacidade específica (m ³ /h/m) utilizados para a definição de áreas produtivas pela análise de favorabilidade
Tabela 2.3 – Pesos e valores de contraste para os dados originais das variáveis utilizadas
Tabela 3.1 – Dados de entrada do modelo DFN advindos do mapeamentoestrutural da mina64
Tabela 3.2 – Informações estatísticas dos dados relativos aos comprimentos, orientações e aberturas das fraturas
Tabela 3.3 – Parâmetros utilizados no modelo hidrogeológico68
Tabela 3.4 – Resultados das simulações de fluxo75
Tabela 3.5 – Agrupamento dos resultados iguais, cálculo do volume de água de fundo de cava (m ³) resultante do escoamento de água para a cava da mina e vazão de escoamento em 10 anos de lavra76
Tabela 3.6 – Dados utilizados de vazão de escoamento para o fundo de cava para a elaboração do histograma de probabilidade de massa
Tabela 4.1 – Ensaios <i>slug test</i> realizados em 10 poços de monitoramento88
Tabela 4.2 – Informações utilizadas para o modelo de fluxo e transporte de contaminantes

SUMÁRIO

Capítul	o 1 - Introdução	17
1.1	Justificativa e Apresentação	17
1.2	Objetivos	20
1.3	Estrutura do Trabalho	20
Capítul em Aqu	o 2 - Análise de Favorabilidade para Exploração de Água Subterrâ lífero Costeiro, Estado do Maranhão	nea 25
2.1	Introdução	26
2.2	Área de Estudo	28
2.3	Métodos	31
2.3.1	Base de Dados	31
2.3.2	Elaboração do Modelo Geológico 3D Por Meio de Métodos Estatísticos	.34
2.3.3	Análise de Favorabilidade	35
2.4	Resultado e Discussão	39
2.4.1	Modelo Geológico 3D	39
2.4.2	Análise de Favorabilidade	46
2.5	Conclusãos	53
2.0	Conclusoes	
Capítul Para Qu	o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fluantificação da Incerteza Hidrogeológica	uxo 54
Capítul Para Qu 3.1	o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fl uantificação da Incerteza Hidrogeológica Introdução	uxo 54 55
Capítul Para Qu 3.1 3.2	o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fl uantificação da Incerteza Hidrogeológica Introdução Caracterização da Área de Estudo	uxo 54 55 56
Capítul Para Q 3.1 3.2 3.3	o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fl uantificação da Incerteza Hidrogeológica Introdução Caracterização da Área de Estudo Método de Trabalho	uxo 54 55 56 58
Capítul Para Q 3.1 3.2 3.3 3.3.1	o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fl uantificação da Incerteza Hidrogeológica Introdução Caracterização da Área de Estudo Método de Trabalho Modelo de Redes de Fraturas Discretas - DFN	uxo 54 55 56 58 62
Capítul Para Qu 3.1 3.2 3.3 3.3.1 3.3.2	o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fl uantificação da Incerteza Hidrogeológica Introdução Caracterização da Área de Estudo Método de Trabalho Modelo de Redes de Fraturas Discretas - DFN Simulações do Fluxo Subterrâneo	uxo 54 55 56 58 62 67
Capítul Para Qu 3.1 3.2 3.3 3.3.1 3.3.2 3.4	o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fluantificação da Incerteza Hidrogeológica Introdução Caracterização da Área de Estudo Método de Trabalho Modelo de Redes de Fraturas Discretas - DFN Simulações do Fluxo Subterrâneo Resultado e Discussão	uxo 54 55 56 58 62 67 71
Capítul Para Qu 3.1 3.2 3.3 3.3.1 3.3.2 3.4 3.5	o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fluantificação da Incerteza Hidrogeológica Introdução Caracterização da Área de Estudo Método de Trabalho Modelo de Redes de Fraturas Discretas - DFN Simulações do Fluxo Subterrâneo Resultado e Discussão.	uxo 54 55 56 58 62 67 71 81
Capítul Para Qu 3.1 3.2 3.3 3.3.1 3.3.2 3.4 3.5 Capítul Transp	 o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fluantificação da Incerteza Hidrogeológica Introdução Caracterização da Área de Estudo Método de Trabalho Modelo de Redes de Fraturas Discretas - DFN Simulações do Fluxo Subterrâneo Resultado e Discussão Conclusões o 4 - Aplicação de Redes Neurais Artificiais Para Simulação de Fluxo 	uxo 54 55 56 58 62 62 67 71 81 xo e 83
Capítul Para Qu 3.1 3.2 3.3 3.3.1 3.3.2 3.4 3.5 Capítul Transp 4.1	 o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fluantificação da Incerteza Hidrogeológica Introdução Caracterização da Área de Estudo Método de Trabalho Modelo de Redes de Fraturas Discretas - DFN Simulações do Fluxo Subterrâneo Resultado e Discussão Conclusões o 4 - Aplicação de Redes Neurais Artificiais Para Simulação de Fluxo orte de Contaminantes Sob Incerteza de Condutividade Hidráulica 	uxo 54 55 56 58 62 67 71 81 co e 83 84
Capítul Para Qu 3.1 3.2 3.3 3.3.1 3.3.2 3.4 3.5 Capítul Transp 4.1 4.2	 o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fluantificação da Incerteza Hidrogeológica Introdução Caracterização da Área de Estudo Método de Trabalho Modelo de Redes de Fraturas Discretas - DFN Simulações do Fluxo Subterrâneo Resultado e Discussão Conclusões o 4 - Aplicação de Redes Neurais Artificiais Para Simulação de Fluxorte de Contaminantes Sob Incerteza de Condutividade Hidráulica Introdução Área de Pesquisa 	uxo 54 55 56 58 62 67 71 81 xo e 83 84 86
Capítul Para Qu 3.1 3.2 3.3 3.3.1 3.3.2 3.4 3.5 Capítul Transp 4.1 4.2 4.2.1	 o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fluantificação da Incerteza Hidrogeológica Introdução Caracterização da Área de Estudo Método de Trabalho Modelo de Redes de Fraturas Discretas - DFN Simulações do Fluxo Subterrâneo Resultado e Discussão Conclusões o 4 - Aplicação de Redes Neurais Artificiais Para Simulação de Fluxo orte de Contaminantes Sob Incerteza de Condutividade Hidráulica Introdução Área de Pesquisa Geologia Local 	uxo 54 55 56 58 62 67 71 81 81 83 84 86 87
Capítul Para Qu 3.1 3.2 3.3 3.3.1 3.3.2 3.4 3.5 Capítul Transp 4.1 4.2 4.2.1 4.2.2	 o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fluantificação da Incerteza Hidrogeológica Introdução Caracterização da Área de Estudo Método de Trabalho Modelo de Redes de Fraturas Discretas - DFN Simulações do Fluxo Subterrâneo Resultado e Discussão Conclusões o 4 - Aplicação de Redes Neurais Artificiais Para Simulação de Fluxorte de Contaminantes Sob Incerteza de Condutividade Hidráulica Íntrodução Área de Pesquisa Geologia Local 	uxo 54 55 56 58 62 67 71 81 xo e 83 84 86 87 87
Capítul Para Qu 3.1 3.2 3.3 3.3.1 3.3.2 3.4 3.5 Capítul Transp 4.1 4.2 4.2.1 4.2.2 4.2.3	 o 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fluantificação da Incerteza Hidrogeológica	uxo 54 55 56 58 62 67 71 81 co e 83 84 86 87 87 88

4.3.1 Modelo de Fluxo Subterrâneo e de Transporte de C MODFLOW	ontaminante –
4.3.2 Redes Neurais Artificiais - RNA	
4.4 Resultados e Discussões	96
4.4.1 Aplicação do MODFLOW - 30 Cenários de K	96
4.4.2 Treinamento de RNA Para os 30 Cenários	
4.4.3 100 Cenários de K e Possíveis Técnicas de Remediação	100
4.5 Conclusões	102
Capítulo 5 - Conclusões	104
Capítulo 6 - Referências	
ANEXOS	118
Anexo 01: Perfis dos Poços Utilizados no Capítulo 2	
Anexo 02: Perfis dos Poços Utilizados no Capítulo 4	

Capítulo 1 - Introdução

1.1 Justificativa e Apresentação

O crescimento demográfico e o desenvolvimento socioeconômico ocorridos nas últimas décadas têm ocasionado impactos diversos nos recursos naturais, principalmente nos recursos hídricos que, associados ao aumento dos índices de poluição de fontes pontuais, como os resíduos domésticos ou industriais, e não-pontuais, como a agricultura, contribuem para reduzir a disponibilidade hídrica global (Brito *et al.*, 2006).

Ademais, a exploração excessiva em conjunto com a má gestão dos recursos hídricos subterrâneos, por meio de novas tecnologias de perfuração e disponibilidade de energia a preço acessível, levaram a taxas muito altas de exploração de aquíferos e, consequentemente, ao desequilíbrio das condições naturais das águas subterrâneas. Esta exploração sem controle pode ocasionar um rápido declínio dos níveis deste recurso hídrico (Ahmed *et al.*, 2015).

No Brasil, a exploração das águas subterrâneas vem apresentando crescimento expressivo, principalmente a partir da década de 1970, com a instalação de diversos poços profundos de captação, predominantemente na região sudeste (Niedzielski Andrea, 2013).

A qualidade e a quantidade das águas subterrâneas dependem de vários fatores naturais, como geologia, velocidade de fluxo, qualidade da água de recarga, rocha reservatório e interação com os demais componentes do ciclo hidrológico. Além disso, atividades antrópicas, incluindo agricultura, indústria e o desenvolvimento dos grandes centros urbanos também desempenham um papel importante na qualidade e quantidade dos aquíferos (Qin *et al.*, 2013).

De acordo com Güler *et al.*, (2012), a gestão sustentável dos recursos hídricos subterrâneos requer uma boa compreensão da circulação das águas subterrâneas e dos processos hidrológicos / hidroquímicos a fim de garantir o suprimento confiável para a população.

Do mesmo modo, Sophiya & Syed, (2013), afirmam que o controle e a regularização da exploração das águas subterrâneas minimizariam o impacto

ambiental. No entanto, a falta de atendimento aos mecanismos reguladores, aliada à pouca infraestrutura para a informação disseminada sobre os aquíferos, inibem o desenvolvimento e execução eficazes de planos de gestão.

Dentro deste contexto, técnicas geoestatísticas, de estatística multivariada e de aprendizado de máquina, visam à integração de dados espaciais hidrogeológicos com o objetivo de descrever e analisar interações que auxiliem as previsões realizadas através de modelos, fornecendo subsídio à tomada de decisão em relação à gestão dos recursos hídricos subterrâneos (Camâra *et al.*, 2001).

Vários diferentes métodos têm sido aplicados para avaliar e caracterizar as variações tanto na qualidade como na quantidade das águas subterrâneas. Entre estes métodos, estão os métodos preditivos, como o método estatístico de análise de favorabilidade e diversas técnicas geoestatísticas (Matiatos *et al.* 2014).

A análise dos dados de subsuperfície através de métodos geoestatísticos ajuda a modelar uma variável regionalizada (estruturada segundo certa lei no espaço), estabelecendo uma função de correlação espacial que é denominada variograma. Trata-se de uma função que reflete a dependência espacial do fenômeno estudado (Niedzielski Andrea, 2013).

Sendo assim, técnicas geoestatísticas e estatísticas são cada vez mais utilizadas para diversos tipos de pesquisa relacionada às águas subterrâneas: (i) o estudo de fluxo, (ii) recarga e descarga, (iii) transporte de plumas de contaminação, (iv) potencial de exploração e (v) análises geoquímicas (Gégo & Hankins, 2001).

Deutsche (2002) comenta que, dentre as diferentes vertentes de estudos estatísticos existentes, a geoestatística é aquela que tem por objetivo analisar a variabilidade espacial ou temporal de determinado conjunto de dados. Esta ferramenta oferece a possibilidade de descrever a continuidade espacial, característica importante para diversos fenômenos naturais. A geoestatística utiliza técnicas de regressão linear clássicas com adaptações para aprimorar o desempenho no tratamento da variabilidade regional (Isaaks & Srivastava, 1989).

Dados experimentais medidos em n pontos distribuídos em uma determinada região com potencial hidrogeológico apresentam, em geral, uma aparente aleatoriedade. A junção destes dados de diversas fontes geológicas e hidrogeológicas, apresentados na forma de mapas de entrada, produz uma informação de maior confiabilidade quando comparada à análise individual dos dados (Pendock & Nedeljkovic, 1997).

A mesma abordagem também foi utilizada posteriormente por Sanchez-Martoz *et al.*, (2001), e Jiang *et al.*, (2009), para quantificar e caracterizar as águas subterrâneas em uma variedade de situações geológicas e hidroquímicas (Kolsi *et al.*, 2013).

Aquíferos heterogêneos, normalmente associados à presença de diferentes fácies e consequentemente diferentes valores de condutividade e capacidade específica, podem ser descritos e caracterizados por parâmetros geoestatísticos, fornecendo a variabilidade espacial desta propriedade (Demirci & Aksoy, 2011).

Dessa forma, é, portanto, notável que a avaliação de diversas possibilidades e métodos de análise contribuem para diminuir as incertezas associadas aos resultados obtidos, auxiliando na tomada de decisão para a gestão dos recursos hídricos subterrâneos.

Além disso, não têm sido desenvolvidos muitos estudos no Brasil envolvendo a aplicação de técnicas geoestatísticas com este intuito, tornando-se imprescindível que essa área seja desenvolvida no contexto acadêmico e de mercado em nível nacional.

Segundo Hirata *et al.* (2010, apud Ayer, 2017), a carência de dados básicos sobre a favorabilidade hídrica e seu potencial de exploração é a principal deficiência para uma gestão adequada dos aquíferos subterrâneos no Brasil, dificultando a elaboração de planos de gestão de recursos hídricos.

Isto posto, o presente trabalho tomou como base dados hidrogeológicos de três casos reais e aplicou a cada um destes casos um método principal quantitativo distinto, sendo eles: 1) Análise Bayesiana ou de Favorabilidade; 2) Redes de Fraturas Discretas; e 3) Redes Neurais Artificiais, sendo que os dois últimos foram utilizados em conjunto com simulador de fluxo (*MODFLOW*).

1.2 Objetivos

A presente pesquisa tem como objetivo geral avaliar a aplicação de técnicas geoestatísticas e estatísticas em casos reais como subsídio à tomada de decisão no gerenciamento das águas subterrâneas. Como objetivos específicos, tem-se:

- Definir a melhor área de exploração do aquífero Itapecuru na Ilha de São Luís/MA a partir da aplicação do método de análise de favorabilidade;
- Quantificar a incerteza hidrogeológica em uma mina a céu aberto por meio da técnica de rede de fraturas discretas, integrada a um simulador de fluxo, e, com isso, apoiar a tomada de decisão e previsão de possíveis custos de drenagem de cava;
- Avaliar a influência da incerteza relacionada ao parâmetro hidrogeológico condutividade hidráulica (k) no deslocamento de uma pluma de contaminação por meio de métodos estocásticos, redes neurais artificiais, simulador de fluxo e transporte de contaminantes.

1.3 Estrutura do Trabalho

O primeiro método utilizado neste trabalho, que compõem o **Capítulo 2**, corresponde à **análise bayesiana, ou de favorabilidade**, metodologia que é utilizada para indicar a existência de depósitos minerais com base na ponderação e associação espacial de dados geológicos e geofísicos.

Este método consiste em determinar a probabilidade de ocorrer um dado evento mediante uma condicionante, e, no gerenciamento de águas subterrâneas, muitas vezes é utilizado para analisar as incertezas de parâmetros hidrogeológicos de pequena escala visando à calibração de modelos de simulação de fluxo (Feyen *et al.*, 2002, 2003 apud Vidal, 2006).

Vidal (2006) aponta ainda os mapas de favorabilidade como resultado da análise bayesiana, elaborados a partir da discretização em células de atributos georreferenciados, correlacionando-os espacialmente.

Em suma, por meio da combinação das informações de diversos níveis é gerada uma saída de dados que permite o cálculo de um valor, resultando no mapa de favorabilidade.

Estes mapas, por sua vez, apresentam como resultado as áreas mais e menos favoráveis para a ocorrência de água subterrânea e, consequentemente, áreas com maior potencial de exploração por meio de poços de captação mais produtivos (Madrucci *et al.*, 2008).

O objetivo é combinar informações de diversos níveis para gerar uma saída de dados que permita o consultor ambiental calcular um determinado valor, tal como a probabilidade de ocorrer um depósito.

Primeiramente, a análise corresponde à elaboração do modelo de ocorrência, quando são discriminadas as evidências favoráveis à concentração, ou seja, critérios diagnósticos. A segunda etapa está relacionada à geração de um modelo de probabilidade, estruturado conforme o modo de ocorrência. Dessa forma, é possível predizer a favorabilidade de um depósito ou de um reservatório, de tamanho e volumes adequados, ocorrer em uma determinada área alvo.

Para a elaboração dos mapas de favorabilidade, inicialmente foi realizada a aquisição de dados de campo desenvolvido em área de estudo situada no Golfão Maranhense, próximo à cidade de São Luís, Estado do Maranhão, região nordeste do Brasil.

Foram utilizadas informações como testemunhos de sondagens, dados de vazão, níveis estático e dinâmico de poços de monitoramento, piezômetros e poços de captação.

A partir destes dados, foi elaborado um modelo geológico 3D através da utilização do método estatísticos krigagem por indicatriz (Journel, 1984), com o auxílio do software SGeMS – Stanford Geostatistical Modeling Software (Remy *et al.*, 2004), sendo que, neste estudo, a krigagem por indicatriz foi aplicada para a determinação da litologia. Deste modelo, foi possível ainda identificar áreas com maior e menor probabilidade de ocorrência de rochas reservatório.

Na sequência, foi realizada a análise de favorabilidade que possibilitou a definição de áreas produtivas de água subterrânea, bem como a geração do mapa de favorabilidade hidrogeológica, que permitiu a determinação das áreas com maior potencial de exploração de águas subterrâneas dentro da área de estudo.

Já o **modelo de fraturas discretas** (em inglês, Discrete Fracture Network Model – DFN), cujo caso real corresponde ao **Capítulo 3** deste trabalho, foi aplicado nesta pesquisa em um aquífero fraturado de uma mina a céu aberto, situada no Estado do Amazonas, região Norte do Brasil. Trata-se de um dos modelos descontínuos que buscam representar o meio fraturado a partir de dados de campo.

A geração das redes de fraturas discretas é a base para o traçado da rede de condutos unidimensionais equivalentes, utilizada na simulação hidráulica. Estes condutos conectam os centros das fraturas até o centro da respectiva intersecção com a fratura vizinha, de forma sucessiva, criando assim uma interligação entre as fraturas, caso estas estejam conectadas (Alan Reis, 2018).

O modelo DFN considera os processos de fluxo subterrâneo em rochas fraturadas por meio de um sistema de fraturas conectadas (Andersson & Dverstop, 1989). Seu algoritmo computacional simula individualmente as propriedades geométricas de cada fratura (orientação, tamanho, posição, etc.), além de analisar as relações topológicas entre as fraturas individuais e um conjunto de fraturas.

Estes modelos de redes de fraturas discretas tentam caracterizar diretamente o sistema de fraturas com base em dados de campo. Mapeamentos sistemáticos de fraturas com estes modelos em diversas escalas foram realizados por alguns autores me minas e túneis. A aplicação desses dados discretos em modelos hidrogeológicos normalmente ocorre em função da falta de informações em áreas não mapeadas (Sharp Jr, 1993).

Esta técnica pode ser gerada com base em mapeamento geológico estrutural, a fim de representar diferentes tipos de fraturas (Lei *et al.*, 2017).

Neste estudo, para a modelagem DFN foi utilizado um algoritmo simplificado em relação às rotinas presentes nos softwares PETREL© e RMS©. Os resultados obtidos foram então utilizados na modelagem hidrogeológica (*MODFLOW*), visando obter o volume de escoamento para o fundo de cava para cada rede de fratura discreta obtida.

Dessa forma, possibilitou-se a quantificação da incerteza relacionada à ausência de informações sobre a organização espacial das fraturas em algumas regiões da mina estudada.

O último caso real deste trabalho, que integra o seu **Capítulo 4**, utilizouse do método de **redes neurais artificiais (RNA)** para estimar concentrações de Fe em 3 anos de simulação. A técnica RNA conseguiu simular o fluxo e o transporte de contaminantes de forma rápida e eficiente, quando comparada a métodos tradicionais utilizados para este tipo de modelagem.

Além disso, foi possível avaliar a incerteza relacionada à condutividade hidráulica a partir de campos estocásticos de k e simulação do transporte de contaminantes por meio de RNA, *MODFLOW* e MT3D, minimizando, portanto, as incertezas associadas à tomada de decisão para gestão de área contaminada situada na cidade de Jundiaí, interior do Estado de São Paulo, região Sudeste do Brasil.

Em linha análoga de pesquisa, Pinto *et al.* (2104) utilizaram uma RNA treinada a partir de simulações executadas em *MODFLOW* e MT3DMS, e obtiveram ganhos de velocidade de processamento de ordem exponencial, como processo de otimização na remediação de águas subterrâneas.

Ranjithan *et al.* (1993) definiu uma rede neural como um sistema computacional constituído de um conjunto altamente interconectado de elementos simples de processamento de informações, denominados unidades.

O estado de uma unidade é representado por uma grandeza, denominada nível de ativação, baseada na quantidade de informação que é processada em qualquer tempo determinado.

A conexão entre duas unidades indica a transmissão de informação entre elas, enquanto que a força da conexão é associada a cada conexão para representar o grau de importância da informação transmitida. A arquitetura da RNA é então descrita pelo número de unidades e seu padrão de interconectividade.

Entre os métodos de redes neurais supervisionadas, ou seja, que utilizam padrões pré-determinadas para classificação e estimativa de propriedades, o algoritmo de Perceptron de múltiplas camadas (MLP), desenvolvido por Rosenblatt (1962), é o mais utilizado.

O principal objetivo deste algoritmo é criar um modelo que relacione corretamente o dado de entrada ao resultado utilizado no treinamento da ferramenta. O treinamento refere-se ao aprendizado da técnica e é definido conforme método de retropropagação, em que o erro da predição é utilizado para ajustar os valores das conexões sinápticas da rede (pesos) a partir da função de treinamento não linear Levenberg-Marquardt.

Para a implementação da RNA neste trabalho, foi utilizada a plataforma MATLAB©, partindo-se de modelagem hidrogeológica previamente realizada com *MODFLOW*.

Este estudo pode ser considerado uma continuidade do trabalho de Costanzo & Vidal (2014) realizado na mesma área. No contexto de análise de incertezas, utilizou-se o método de RNA para avaliar a incerteza em relação à variabilidade da condutividade hidráulica (k) e sua relação com a variação de contaminantes na água subterrânea local, em comparação aos cenários criados para a mesma análise no estudo desenvolvido em 2014.

O último capítulo da tese (**Capítulo 5 - Conclusões**) resume os principais resultados obtidos nos três casos reais analisados e considera as principais vantagens em se utilizar técnicas geoestatísticas e estatísticas em questões relacionadas à área de hidrogeologia.

Capítulo 2 - Análise de Favorabilidade para Exploração de Água Subterrânea em Aquífero Costeiro, Estado do Maranhão

Resumo:

Esta pesquisa aplica a análise de favorabilidade para a exploração de águas subterrâneas, visando à diminuição do risco exploratório em função, principalmente, das características da rocha reservatório em região costeira. O estudo foi elaborado com dados de litologia, vazão, nível estático e nível dinâmico de poços instalados próximos à cidade de São Luís / MA em área portuária / industrial. A área alvo foi escolhida devido à complexidade geológica e a proximidade com o mar, que acarretam baixa previsibilidade no comportamento hidrodinâmico antes dos projetos de perfuração, além de ser demandante de altas vazões de água subterrânea. As áreas com valores de capacidade específica superiores a 1,0 m³/h/m foram consideradas produtivas. Os resultados encontrados limitaram três principais áreas (norte, centro-leste e sudoeste) com maiores potenciais de exploração em função dos dados disponíveis de descrição litológica e vazão.

Palavras-chave: análise de favorabilidade, litologia e capacidade específica.

Abstract:

Favorability analysis has been applied as a method to reduce the exploration risk in groundwater exploration due, mainly, to the characteristics of reservoir rock in coastal aquifer. The research has been elaborated with well hydraulics data and lithology from wells located near the city of São Luís / MA. The target area was chosen because of the geological complexity and proximity to the sea, which leads to a low predictability in hydrodynamic behavior before drilling projects. Areas with specific capacity values above 1.0 m³/h/m were considered productive. The results limited three areas (north, east-center and south-west) with higher exploitation potentials due to the available data.

Keywords: favorability analysis, lithology and specific capacity.

2.1 Introdução

Aquíferos costeiros se localizam na costa continental e possuem conexão hidráulica com a água marinha. Este tipo de aquífero é caracterizado por variações de salinidade no espaço e no tempo, o que demanda abordagens diferenciadas em relação ao fluxo da água subterrânea, bem como às áreas com melhores potenciais de exploração (Post & Abarca, 2009).

A exploração de aquíferos costeiros, de forma não planejada, pode perturbar o equilíbrio natural de descarga e recarga, causando consequências como sobre-exploração e subsidência de terrenos (Moreaux & Reynaud, 2006). Além disso, pode alterar o equilíbrio natural estabelecido entre a água doce e salgada o que resulta no avanço incontrolado da cunha salina (Darnault & Godinez, 2008).

A principal deficiência para a gestão adequada dos aquíferos costeiros brasileiros é a carência de dados básicos sobre a favorabilidade hídrica e seu potencial de exploração, o que dificulta a elaboração de planos de gestão atual e futura (Hirata *et al.*, 2010).

A boa gestão dos recursos hídricos subterrâneos está essencialmente associada à escolha dos principais fatores que causam uma vazão sustentável nos poços, bem como a delimitação de áreas com características semelhantes de fluxo do aquífero. Em áreas costeiras, pouco exploradas e com baixa densidade de informação, o conhecimento destes fatores torna-se fundamental (Madrucci, 2004).

Neste sentido, o sucesso na exploração está associado ao grande número de variáveis, relacionadas a fatores geológicos e da dinâmica da intrusão salina. Partes dessas informações são dependentes do método e qualidade do equipamento de perfuração, do perfil construtivo e da finalidade de construção de determinado poço.

Portanto, a abordagem diferenciada em relação às principais características deste aquífero, bem como à sua gestão, pode ser realizada por meio de análises estatísticas das principais variáveis relacionadas aos fatores geológicos e de dinâmica salina.

Técnicas estatísticas para avaliar a favorabilidade de potenciais reservatórios e recursos naturais têm sido aplicadas por diversos autores como,

Bonham-Carter, 1994; Rostirolla, 1997; Raines, 1999; Harris *et al.*, 2003; Araújo e Macedo, 2002; Vidal *et al.*, 2006 e Madrucci *et al.*, 2008.

A análise de favorabilidade, ao invés de interpretar de forma isolada cada variável amostrada, permite que os atributos georeferenciados sejam discretizados em células e correlacionados espacialmente, resultando em mapas de favorabilidade. Logo, através da combinação das informações de diversos níveis, é gerada uma saída de dados que permite o cálculo de um valor, resultando no mapa de favorabilidade (Vidal, 2006).

A combinação das informações utilizadas pela análise de favorabilidade é realizada pela aplicação da probabilidade bayesiana, utilizada para determinar a correlação espacial entre um evento e fatores relacionados a um conjunto de pesos, sendo um peso definido para cada classe de fator. Esta relação espacial facilita a compreensão quantitativa do potencial de produtividade dos recursos hídricos subterrâneos (Lee *et al.*, 2012).

A carência de informações de subsuperfície e as incertezas quanto à distribuição das diferentes características litológicas e hidráulicas motivaram a escolha do aquífero costeiro Itapecuru para o desenvolvimento deste trabalho.

Além disso, a região de pesquisa é uma área portuária e industrial deficitária em relação à demanda de água. A água subterrânea é utilizada tanto para as atividades operacionais do Porto como também para uma usina de Pelotização, com consumo de 4.934 m³/dia, que representam 52% do consumo diário total de água. Esta demanda é crescente e, consequentemente, novos poços de captação serão necessários para a oferta de água.

Dessa forma, o principal objetivo deste estudo é avaliar potenciais áreas para exploração das águas subterrâneas associadas ao aquífero Itapecuru utilizando-se de análise de favorabilidade, a fim de permitir uma melhor gestão deste recurso hídrico, bem como aumentar as possibilidades de oferta de água para a região.

2.2 Área de Estudo

A área de estudo situa-se próxima à cidade de São Luís, na margem leste da Baía de São Marcos, no Estado do Maranhão, nordeste do Brasil. A Figura 2.1 ilustra a localização geográfica da área de pesquisa.

Os principais rios que cortam a região são o Bacanga e o Anil (Santos & Leal, 2013), sendo que a área de estudo encontra-se no centro de um sistema de golfo, com variações médias de maré de 4 m e máxima superior a 7 m (Teixeira & Souza Filho, 2009).

No contexto geológico, a área de pesquisa está localizada na Bacia de São Luís que, junto com as bacias Ilha Nova e Barreirinhas, formam um sistema de grábens profundos, limitados por falhas normais orientadas na direção NW-SE (Almeida, 1967).

A Bacia de São Luís possui coluna sedimentar que atinge espessura de 5.000 m, dos quais 2.500 m correspondem ao intervalo Mesozoico (Cretáceo) e o intervalo restante ao Cenozóico (Almeida *et al.*, 1977).



Figura 2.1 – Localização da área de estudo (contorno em vermelho)

Com relação à geologia local, conforme CPRM (1994), as principais unidades hidroestratigráficas da área de pesquisa são:

- Unidade de Aluviões;
- Unidade de sedimentos Terciários da Formação Barreiras;
- Unidade de sedimentos do Terciário Paleógeno;
- Unidade de materiais da Formação Itapecuru, do Cretáceo;
- Unidade de embasamento cristalino formado por rochas graníticas.

O aquífero pesquisado neste trabalho é o Itapecuru, conforme pode ser visto no modelo hidrogeológico esquemático da Figura 2.2.



Figura 2.2 – Modelo hidrogeológico esquemático do aquífero Itapecuru

Fonte: Walm, 2012

A Formação Itapecuru é constituída por areias de coloração laranja, com granulometria média a grossa, muito argilosas, com intercalações de argila e silte e estratificações plano-paralelas (Figura 2.3). Seu potencial hidrogeológico é classificado como satisfatório para poços com demanda de vazão inferior a 40 m³/h e até 200 m de profundidade (CPRM, 1994).

Os afloramentos desta formação são observados na Ponta da Madeira e no Farol de São Marcos, no município de São Luís. A espessura média investigada deste aquífero é de 80 m, mas atinge possivelmente profundidades bem maiores até o embasamento cristalino que, segundo dados da CPRM (1994), ocorre a cerca de 1.250 m de profundidade. O embasamento é constituído pelas rochas graníticas da Suíte Intrusiva Rosário.



Figura 2.3 – Afloramentos da Fm. Itapecuru na Ponta da Madeira, São Luíz / MA

2.3 Métodos

O fluxo de trabalho adotado nesta pesquisa apresenta a seguinte ordem: (i) aquisição de dados de campo oriundos de um projeto da empresa WALM Engenharia e Tecnologia Ambiental Ltda. (descrições de testemunhos de sondagens, dados de vazão, nível estático e nível dinâmico de poços de monitoramento, piezômetros e poços de captação); (ii) elaboração do modelo geológico 3D a partir de métodos geoestatísticos; (iii) definição de áreas produtivas de água subterrânea; (iv) elaboração de mapa de favorabilidade.

2.3.1 Base de Dados

A base de dados utilizada refere-se às informações geológicas advindas das descrições de testemunhos de sondagens de 26 poços instalados na área. Além dessas informações, foram utilizados dados de vazão, nível estático e nível dinâmico de 14 poços dentre os 26 presentes na área. A Figura 2.4 exibe a localização destes 26 poços utilizados na pesquisa.

Com base nos dados de poços, a descrição litológica total corresponde à informação de 2.869 metros. Os diferentes tipos litológicos foram agrupados em três principais classes: (i) rochas argilosas; (ii) rochas referentes aos sedimentos do Paleógeno (Formação Barreiras) e (iii) sedimentos mais antigos da Formação Itapecuru.

Buscando uma classificação voltada às propriedades de aquífero, os grupos litológicos foram agrupados em duas classes: (i) "arenitos" e (ii) "argilas", visto que representam as litologias que condicionam o fluxo subterrâneo e o potencial de reservatórios de água.



Figura 2.4 – Mapa com a localização dos poços utilizados (pontos vermelhos – piezômetros e poços de monitoramento; pontos pretos – poços de captação)

Os poços apresentam profundidade média de 110 m, com profundidade mínima de 56 m e máxima de 167 m (Figura 2.5). As profundidades mínima e máxima comprovam que o aquífero explorado é o Itapecuru.



Figura 2.5 – Profundidade dos poços na área de pesquisa

De acordo com a Figura 2.4, observam-se vários poços alinhados, como exemplo, os seis poços na borda leste da área (P-04, P-11, P-05, P-06, P-12 e P-8) estão posicionados em uma linha norte sul. No entanto, de forma geral os poços estão distribuídos por toda área, sendo algumas áreas cobertas de informação. Logo, os poços alinhados não interferem nos métodos utilizados.

A porção central da área é coberta por vários poços, enquanto que as bordas da área nas porções sudoeste e, principalmente, a norte e noroeste apresentam ausência de informações. Outro ponto a se destacar é a presença de poços posicionados bem próximos um ao outro, aumentando a incerteza espacial da informação de subsuperfície, associada às descrições litológicas dos poços.

As descrições geológicas descrevem as litologias conforme granulação da rocha sedimentar, alguns apenas por diferenciação de cor e pela associação de duas classes de granulação. Por isso, foi adotada a litologia predominante, com base na granulação do sedimento, para a definição dos tipos litológicos. Todas as litologias descritas em campo, conforme dito anteriormente, foram agrupadas em arenitos e argilas, como pode ser visto na Tabela 2.1.

Grupos	Litologia	Porcentagem
Arenitos (47,2%)	Arenito	4,7%
	Arenito grosso	2,0%
	Arenito fino	14,0%
	Arenito muito fino	16,7 %
	Arenito Argiloso	2,6%
	Arenito Siltoso	7,2%
Argilas (52,8%)	Argilito	48%
	Siltito	3,3%
	Carbonato	1,5%

Tabela 2.1 – Grupos associados às rochas descritas nos poços

2.3.2 Elaboração do Modelo Geológico 3D Por Meio de Métodos Estatísticos

A malha para a geração do modelo geológico corresponde a 1.710.000 células, com 150 células no eixo x, 150 no eixo y e 76 em z, e as dimensões de 53,64 m, 65,87 m e 2,5 m, respectivamente. Tais dimensões foram definidas de acordo com o tamanho da área de estudo e profundidade dos poços.

O método geoestatístico aplicado para a geração do modelo geológico 3D foi a krigagem por indicatriz (Journel, 1984). Para auxiliar na criação do modelo, foi utilizado o software *SGeMS – Stanford Geostatistical Modeling Software* (Remy *et al.*, 2004). A krigagem por indicatriz é aplicada a variáveis discretas e, neste caso, foi aplicada para a determinação apenas da litologia.

A krigagem por indicatriz serve para produzir a predição de valores sobre uma superfície ou volume e, sobretudo, para gerar modelos de incertezas locais para dados geográficos que compartilham uma base de informações (Felgueiras *et al.*, 2002).

Esta krigagem compreende um tipo não linear, que se utiliza da posição de valores dos dados para gerar uma distribuição local em vez de uma distribuição global das propriedades analisadas (Goovaerts, 1997). A técnica tem como etapa inicial a transformação binária dos dados. Desta maneira, são geradas as variáveis indicatrizes ($I_{(x)}$). Dado um conjunto x e o complementar Xc^{X^e}, no domínio $A = X \cup X^{e} A = X \cup X^{e}$, onde há amostras x_i localizadas em A com i=1, ..., n. A variável indicatriz I(x_i) é dada por:

$$I(x_i) = 1, sex_i \in X$$
$$= 0, sex_i \in X^c,$$
(1)

onde X é um conjunto do domínio A e Xc^{X^c} o conjunto complementar de x.

A condição leva a um quadro onde os valores assumidos a cada conjunto e em cada ponto amostral pertençam a 0 ou 1. Posterior à definição das variáveis indicatrizes, realizam-se procedimentos similares ao utilizado na krigagem ordinária.

2.3.3 Análise de Favorabilidade

O objetivo para a utilização da análise de favorabilidade, um método baseado na estatística bayesiana, está na definição das áreas mais favoráveis à exploração de água subterrânea e determinação das variáveis que possuem maior peso na definição das áreas de exploração (Vidal, 2002).

A análise de favorabilidade é utilizada para indicar a existência de áreas de potencial aquífero, embasada na ponderação e associação espacial de dados geológicos com fins exploratórios. O propósito desta avaliação é discriminar as regiões com melhores chances para exploração (Rostirolla, 1996).

Nesta metodologia os atributos georeferenciados são discretizados em células e correlacionados espacialmente. A combinação das informações de diversos níveis é utilizada para gerar uma saída de dados que permite calcular a probabilidade de determinada ocorrência de uma acumulação, seja esta de petróleo, de água subterrânea ou acumulação de minerais (Vidal *et al.*, 2006).

A etapa inicial da avaliação corresponde à geração do modelo de ocorrência, quando são discriminadas as evidências favoráveis à concentração

(critérios diagnósticos). A segunda etapa consiste na geração de um modelo de probabilidade, estruturado segundo o modo de ocorrência. Assim, é possível predizer a favorabilidade de um depósito mineral, de tamanho e volume adequados, ocorrer em determinada área alvo.

Seguindo as premissas presentes em Rostirolla *et al.*, (1997), são consideradas "necessárias" aquelas variáveis que sempre existem associadas aos depósitos conhecidos, enquanto as variáveis "suficientes" podem ou não existir, mas a sua presença representa um forte indício de ocorrência do depósito.

A condição de suficiência de uma variável E é satisfeita quando a probabilidade de existência do depósito (hipótese H) é maximizada com a presença da variável (P(H|E) = máximo). A condição de necessidade da variável é satisfeita quando a probabilidade de não existência do depósito é maximizada com a ausência da variável $\left(P(\overline{H/E})\right) = máximo$.

Nos mapas de variáveis exploratórias, os pontos conhecidos (amostras da população estudada) são tratados como pixels e estimados espacialmente. A probabilidade condicional é obtida através do número de pixels da variável inserido na área produtiva, em relação ao número total de pixels existente da variável.

Segundo o modelo adotado por Bonham-Carter (1994), em todas as células avaliadas, a chance posterior Ch(H|Ejk) de ser encontrado um reservatório (ou hipótese H) é dada pelo somatório da chance prévia Ch(H), obtida da razão entre o número de pixels da área produtiva pelo número de pixels da área de estudo, com os ponderadores w_i^k referentes às evidências E_i^k:

$$\ln Ch(H|E_j^k) = w_j^k + \ln Ch(H)$$
⁽²⁾

onde o índice superior k refere-se à presença (+) ou ausência (-) da variável em relação ao depósito, e os ponderadores w_j^k são razões de probabilidade calculados do seguinte modo para cada variável E_i^k :

$$w_{j}^{k} = \ln \frac{P\left(E_{j}^{k} | H\right)}{P\left(E_{j}^{k} | \overline{H}\right)} = \ln \frac{\frac{H \cap E_{j}^{k}}{H}}{\frac{H \cap E_{j}^{k}}{\overline{H}}}$$
(3)
Todos os níveis georeferenciados adicionais devem ser computados como mapas binários e, para Ej(j=1,2,3,...n) mapas, o somatório é representado pela fórmula:

$$Ch(H|E_1^k \cap E_2^k \cap \dots E_n^k) = \exp\left\{\sum_{j=1}^n w_j^k + \ln Ch(H)\right\}$$
(4)

Baseado nos resultados, a probabilidade posterior (ou favorabilidade para cada célula avaliada) pode ser obtida a partir da chance posterior.

Dessa forma, a análise conduzida pelos dados (análise bayesiana), após definido o modelo geológico, selecionam-se os mapas de evidência e calculam-se os pesos de evidência (w+ e w-) para cada classe dos mapas temáticos. Após isso, definem-se os fatores positivos à ocorrência de água subterrânea e elaboram-se mapas binários os quais são atribuídos os pesos w+ e w-.

A partir dos mapas binários, realiza-se o teste de independência condicional e por fim, elabora-se o mapa de favorabilidade (mapa de probabilidade posterior), por meio da probabilidade prévia de ocorrência e nos pesos de evidência (w+ e w-) de cada mapa envolvido na análise (Madrucci *et al.*, 2008).

2.3.3.1 Análise de Favorabilidade Aplicada Neste Trabalho

No presente trabalho, as variáveis utilizadas para a análise de favorabilidade correspondem aos mapas gerados no modelo geológico 3D, ou seja, (1) porcentagem de arenitos, (2) espessura de arenitos (Figura 2.6) e a (3) média das probabilidades de ocorrência de arenitos dos cenários P25, P50 e P75 (Figura 2.9).

Métodos convencionais de interpolação foram utilizados para a determinação do mapa de espessura de arenitos e porcentagem de arenitos definidos com a utilização das informações dos poços. O mapa de espessura de arenitos ilustra espessuras superiores a 30 m em grande parte da área. Ao analisar a porcentagem de arenitos em relação às argilas, a área sul apresenta as menores porcentagens, enquanto a área centro-norte as maiores.

Para a aplicação da análise de favorabilidade na exploração do aquífero costeiro, foram adotadas como condições de sucesso as áreas de maior produtividade nos poços da base de dados, verificadas por meio dos valores de capacidade específica (obtidas quando a vazão é dividida pela diferença entre o nível dinâmico e o nível estático). Esta medida corresponde à quantidade de água retirada do poço por unidade de tempo e de rebaixamento (Freeze & Cherry, 2017).

A Tabela 2.2 contempla os dados de capacidade específica (m³/h/m) utilizados para a definição de áreas produtivas pela análise de favorabilidade.





*Poço	Q (m ³ /h)	Profundidade (m)	Nível Estático (m)	Nível Dinâmico (m)	Capacidade específica (Q/ND-NE - m ³ /h/m)
PZ01	8,00	113,00	16,00	19,00	2,67
PZ02	4,90	120,00	32,15	33,40	3,92
PZ03	17,00	113,00	46,10	59,00	1,32
PZ04	9,00	113,00	32,20	35,45	2,77
PZNI01	5,66	120,00	36,15	39,15	1,89
PZNI03	3,60	120,00	34,40	38,45	0,89
P-01	4,19	167,00	31,46	44,05	0,33
P-02	1,67	149,00	31,83	66,80	0,05
P-03	3,44	142,00	35,06	55,98	0,16
P-06 (P-10)	2,43	122,00	34,30	56,10	0,11
P-07	2,56	138,00	13,83	30,97	0,15
P-08	3,06	162,00	26,50	43,35	0,18
P-10B	2,56	112,20	24,10	49,84	0,10
P-10E	1,49	128,00	25,70	44,06	0,08

Tabela 2.2 – Valores de capacidade específica (m³/h/m) utilizados para a definição de áreas produtivas pela análise de favorabilidade

Fonte: Walm Engenharia e Tecnologia Ambiental LTDA, 2012.

*Dos 26 poços utilizados da base de dados, 14 apresentam dados de vazão, nível estático e nível dinâmico.

A capacidade específica é influenciada pelas características físicas do reservatório, traduzida essencialmente pela transmissividade do aquífero. Nesta pesquisa, a incerteza associada à variável capacidade específica não será analisada.

2.4 Resultado e Discussão

2.4.1 Modelo Geológico 3D

O modelo geológico foi limitado próximo à superfície do terreno. Embora posicionado próximo à região costeira, a variação da cota altimétrica é significativa, ao nível do mar na porção norte da área e atingindo cota máxima de 45 m em alguns pontos do mapa (Figura 2.7). Os valores de profundidades dos poços foram convertidos conforme os valores de cota do terreno e posicionados na malha do modelo.

Figura 2.7 – A: Mapa de cota do terreno utilizado como limite superior do modelo. B: vista lateral com a superfície do terreno e posicionamento dos poços utilizados na pesquisa



Conforme mencionado na seção 2.3.1, a determinação dos dois grupos litológicos (arenitos e argilas) foi baseada na granulação, sendo o grau de seleção outro critério para a subdivisão dos arenitos, assumindo a correlação entre esses dois parâmetros com porosidade e permeabilidade, respectivamente.

Após ajuste dos variogramas para cada litologia e a definição do raio de pesquisa, foi realizada a estimativa do modelo de distribuição das fácies. Para evitar erros de estimativa, as células da malha fora da área de interesse foram consideradas nulas, como também em porções com baixa densidade de informação.

Os variogramas apresentaram baixa continuidade espacial para os dois grupos litológicos, indicando que na área não há tendência de aumento nos valores para cada litologia, podendo ser considerada constante a distribuição na área.

Os resultados da krigagem indicatriz apresentam valores entre 0 e 1, correspondendo à probabilidade de ocorrência da variável arenito, para cada célula da malha de pesquisa (Figura 2.8). Os resultados estão apresentados, para as profundidades de 82,5 m à 5 m, com intervalos de 12,5 m. A área sul apresenta as

menores probabilidades para ocorrência de rochas reservatórios, enquanto que a centro-norte as maiores.

A krigagem indicatriz utiliza-se da média ponderada para o cálculo das informações desconhecidas nos pontos vizinhos. Caso todas as variáveis estimadas ultrapassem o limite fixado em regiões adjacentes, a técnica atribui uma alta probabilidade de ocorrência na região de interesse (Liu *et al.*, 2004).

Atribuindo-se as possíveis variações de capacidade específica para as duas litologias mapeadas, a distribuição espacial da probabilidade de ocorrência de sedimentos arenosos, nos planos horizontal e vertical, possibilita a previsão das potenciais zonas de reservatórios de água a partir de dados litológicos.

Para a distribuição das probabilidades de ocorrência das rochas reservatórios em uma única malha, foi executada a junção, com base na seleção da litologia com maior probabilidade em cada célula da malha. O modelo estimado mantém a mesma proporção dos grupos de sedimentos em relação à proporção obtida pela descrição de campo dos poços.



Figura 2.8 – Probabilidade da variável indicadora "arenito" para intervalos de profundidade em relação ao nível do mar

70m

45m



A área central apresenta alta probabilidade para sete dos oito intervalos ilustrados. Para as maiores profundidades, grande parte da área apresenta condições favoráveis à ocorrência de arenitos.

A fim de quantificar a incerteza, foi possível representar a variável indicatriz por probabilidades de ocorrência. Neste caso foram representadas as probabilidades de 25% (P25), 50% (P50) e 75% (P75). A estimativa de P25 seria a estimativa otimista na qual é determinado que todas as probabilidades superiores a

25% correspondem a arenitos e valores inferiores a argilas. O oposto ocorre para P75, que seria a estimativa pessimista.

A probabilidade média de ocorrência de arenitos seria a P50. Como esperado, em função dos dados de descrições de testemunhos de campo, a região central-norte e as porções mais profundas apresentam maiores áreas acima dos valores limites.

A média das probabilidades de todas as profundidades para cada cenário, P25, P50 e P75, pode sintetizar as probabilidades encontradas no modelo 3D (Figura 2.9). Estes três mapas da média das probabilidades foram utilizados para a análise de favorabilidade hidrogeológica que será discutida no item 2.4.2.

Conforme as figuras geradas no modelo geológico 3D, a área norte apresenta elevado potencial de exploração. Na porção central é destacada a região leste também com possível potencial de captação de água subterrânea. Por fim a porção oeste da região sul apresenta bons valores de probabilidade de ocorrência de rocha reservatório.



Figura 2.9 – Média das probabilidades para a ocorrência de arenitos no modelo geológico 3D

2.4.2 Análise de Favorabilidade

2.4.2.1 Definição de Áreas Produtivas

Como os poços de captação são construídos para diferentes finalidades, a exploração de água subterrânea, diferente dos depósitos mineralizados, não apresenta um valor de teor de corte (*cut off*) para um poço se tornar economicamente viável. Por exemplo, uma vazão de 10 m³/h pode ser inviável para o abastecimento público de uma cidade, porém útil para uma propriedade rural.

Dessa forma, como não há limites estabelecidos para a definição do teor de corte, este valor, para esta pesquisa, foi determinado a partir das medidas estatísticas da distribuição da variável capacidade específica de 14 poços da base de dados (Tabela 2.2).

Portanto, a variável capacidade específica apresenta média de 1,04 m³/h/m, mediana de 0,26 m³/h/m e variância de 1,63. Para a definição das áreas definidas como produtivas, foi estabelecido valor de corte de 1,00 m³/h/m, que possui a maior frequência, como pode ser visto no histograma de função de probabilidade de massa na Figura 2.10.



Figura 2.10 – Histograma de função de probabilidade de massa para a variável capacidade específica da região de pesquisa

Para a elaboração do mapa de áreas produtivas a partir dos dados de capacidade específica foi utilizado o método geoestatístico da krigagem como algoritmo interpolador. Dessa forma, preliminarmente, foi feita a análise variográfica que indicou como mais apropriado o variograma omnidirecional. O modelo de variograma foi do tipo esférico, com alcance de 8 km e patamar de 0,9. A krigagem utilizada foi a ordinária e o mapa final da área, com capacidade específica superior a 1 m³/h/m, configurou a "área mineralizada" (Figura 2.11).





No mapa, as áreas consideradas produtivas estão localizadas por toda a porção norte da área de pesquisa; por outro lado, as porções centro e sul, podem ser caracterizadas pelos baixos valores de capacidade específica.

O mapeamento de áreas produtivas será utilizado para correlacionar com os mapas de probabilidade de ocorrência de arenitos do modelo geológico, sendo possível verificar a maior presença de arenitos a norte da área pesquisada.

Com base na profundidade dos poços com dados de capacidade específica, foi elaborado o gráfico da distribuição dos poços em função da capacidade específica e da profundidade (Figura 2.12). Nota-se que poços entre 100 e 150 m de profundidade apresentam tanto valores altos (3,92 m³/h/m) como baixos (0,05 m³/h/m) de capacidade específica, não sendo possível encontrar uma correlação entre profundidade e produtividade do poço para este intervalo.

Os poços mais profundos (entre 160 e 180 m) apresentaram baixos valores de capacidade específica, ou seja, o P-08 possui 0,18 m³/h/m, enquanto o P-01 apresenta 0,33 m³/h/m.

O modelo geológico indicou que, para a região do P-08, em maiores profundidades, há uma maior probabilidade de ocorrência de rochas argilosas que coincidem com a baixa produtividade deste poço.

No entanto, o P-01 está localizado em região com presença de arenitos em maiores profundidades e este baixo valor de capacidade específica pode estar associado ao perfil construtivo do mesmo ou lentes de argila pontuais não identificadas no modelo geológico 3D.



Figura 2.12 – Gráfico de dispersão entre profundidade e produtividade dos poços

Essa variação de produtividade observada na Figura 2.12 significa que, mesmo os arenitos estando em profundidades maiores em praticamente toda a área de pesquisa, a profundidade do poço não é garantia de alta produtividade. A produtividade pode estar relacionada também com outros fatores, por exemplo, perfil construtivo do poço, principalmente posicionamento em subsuperfície das seções filtrantes, fatores geomorfológicos e áreas de recarga e descarga do aquífero.

2.4.2.2 Mapa de Favorabilidade

A definição de mapa de favorabilidade envolve a análise de dados espaciais que visam à predição da ocorrência de mineralizações, no caso deste trabalho, da ocorrência de reservatórios de água subterrânea.

Por serem variáveis discretas, a análise se inicia com a atribuição do valor 1 na intersecção das áreas consideradas produtivas com as feições definidas nos mapas de espessura, porcentagem e média das probabilidades de ocorrência de arenitos. E valor zero quando não há intersecção. Foram utilizadas todas as variáveis descritas (porcentagem de arenitos, espessura de arenitos e médias das probabilidades de ocorrência de arenitos), uma vez que os valores de contraste foram superiores a 0,5 (Tabela 2.3).

A probabilidade posterior foi então calculada através da soma dos pesos das variáveis para cada célula, mais a probabilidade a priori (Equação 4). Os resultados obtidos de cada célula foram plotados em mapa, que apresenta as áreas mais favoráveis à exploração de água subterrânea correspondente aos maiores valores de probabilidade posterior (Figura 2.13).



Figura 2.13 – Favorabilidade hidrogeológica bayesiana para a área de estudo

É possível observar que as áreas favoráveis à exploração de água subterrânea apresentam elevados valores de probabilidade posterior.

Para o cálculo dos pesos (w+ e w-) das variáveis selecionadas (espessura, porcentagem e média das probabilidades de ocorrência de arenitos) foi utilizado o algoritmo proposto por Bonham-Carter (1994), conforme Equação 3.

Estes pesos são os atributos mais importantes na análise de favorabilidade, pois quanto maior for a diferença entre w+ e w- ou o contraste "C", mais correlacionável é a variável com a área de maior capacidade específica (Bonham-Carter, 1994). Os valores de contraste para os dados originais estão presentes na Tabela 2.3.

Situação de descarte de alguma variável ocorreria se os pesos apresentassem valores de contaste próximos a zero. Isso comprova que as variáveis utilizadas para a análise de favorabilidade podem ser correlacionadas isoladamente com as áreas mais produtivas.

O melhor valor de contraste é obtido pela variável porcentagem de arenitos, com valor de 4,98. Os demais valores de contraste para os mapas de espessura e médias das probabilidades de ocorrência de arenitos são positivos e inferiores ao da porcentagem de arenitos, indicando, para todas as variáveis analisadas, boa correlação com as áreas produtivas.

Tabela 2.3 – Pesos e valores de contraste para os dados originais das variáveis utilizadas

Variáveis Utilizadas	W ⁺	W	Contraste
Porcentagem de arenitos	3,73	-1,26	4,98
Espessura de arenitos	0,94	-0,45	1,38
Média P25	1,75	-0,81	2,57
Média P50	2,13	-1,16	3,29
Média P75	1,57	-1,12	2,69

A porcentagem de arenitos e os valores médios de P50 são as variáveis que apresentam a maior correlação com a produtividade dos poços. Por outro lado, as informações presentes no mapa de espessura de arenitos têm pouca correspondência com a distribuição da capacidade específica.

Ao comparar o mapa de capacidade específica (áreas consideradas produtivas) com o mapa de porcentagem de arenitos, é possível observar que este último apresenta altos valores na região norte e baixos nas porções central e sul, o que corresponde a uma boa correlação com as áreas de alto valor de capacidade específica.

O oposto pode ser verificado no mapa de espessura de arenitos, no qual é possível verificar altos valores de espessuras, praticamente, na área toda e, por isso, apresenta um baixo valor de contraste.

A baixa correlação entre o mapa de espessuras de arenitos e o mapa de áreas produtivas pode ser explicada pelo posicionamento dos filtros dos poços. O mapa de espessura considera a espessura total de arenitos, enquanto que a capacidade específica leva em conta o intervalo onde a seção filtrante de cada poço está posicionada em subsuperfície. Portanto, o mapa de espessura de arenitos pode ter superestimado a capacidade real dos reservatórios ou os projetos construtivos dos poços podem não ter considerado a potencialidade das regiões com alta espessura de arenitos, principalmente, em maiores profundidades.

Como exemplo, o poço P-10B está localizado numa porção da região de pesquisa com alto valor de espessura de arenito (entre 58 e 62 m), porém possui baixa capacidade específica (0,10 m³/h/m) e, consequentemente, não está inserido em áreas consideradas produtivas.

Analisando-se com mais detalhe o perfil construtivo desse poço, nota-se que os filtros estão posicionados em intervalos distintos e aleatórios, que somados resultam em 40 m de arenitos.

Dessa forma, o projeto construtivo do poço não considerou a maior potencialidade dessa região em função da espessura de arenito, o que pode ter ocasionado uma perda de 22 m de espessura de rocha reservatório e consequentemente baixa capacidade específica para o poço.

Outro fator geológico para essa baixa correlação seria relacionado à diagênese nos arenitos; este aspecto não foi analisado neste trabalho. Com o aumento da profundidade pode ocorrer o aumento da salinidade da água, favorecendo a cimentação e não a dissolução.

No mapa de favorabilidade (Figura 2.13), a maior probabilidade de sucesso na exploração das águas subterrâneas está localizada na porção norte da área pesquisada e, secundariamente, as regiões centro-leste e sudoeste.

As áreas mais favoráveis à exploração apresentam as maiores porcentagens de arenito e as maiores probabilidades de ocorrência de rochas reservatório, bem como, conforme os dados de nível estático, possuem baixo nível potenciométrico, indicando que os poços utilizados na pesquisa captam água tanto de camadas superficiais como mais profundas do aquífero Itapecuru.

2.5 Conclusões

Levando em consideração apenas as variáveis litologia, vazão, nível estático e nível dinâmico, a análise de favorabilidade realizada para o aquífero Itapecuru em região costeira conseguiu identificar áreas mais favoráveis para a exploração das águas subterrâneas e, consequentemente, aumentou as possibilidades de oferta de água para uma região altamente demandante deste recurso natural.

A condição de alta variabilidade das informações referentes às descrições litológicas dos perfis dos poços da base de dados, como também a distribuição espacial irregular dos mesmos (maior concentração de informação na porção leste da área), podem contribuir para aumentar o grau de incerteza do modelo geológico 3D gerado, o qual pode gerar possíveis erros no mapa de favorabilidade. No entanto, vale ressaltar que o modelo é originado pelas informações de campo dos poços e o mapa de favorabilidade foi validado com valores positivos de contraste.

Os dados e resultados apresentados neste capítulo são uma primeira tentativa de aplicar o método de favorabilidade bayesiana para a exploração de forma mais planejada das águas do aquífero Itapecuru na ilha de São Luís, sendo que as dificuldades encontradas no decorrer do trabalho indicaram ser necessário um melhor desenvolvimento na definição dos critérios de *cut off* para a variável capacidade específica na definição de áreas produtivas.

Com isso, é recomendado que trabalhos posteriores utilizem novas variáveis relacionadas à caracterização da rocha reservatório, como transmissividade e condutividade hidráulica, e também realizem a definição de classes no caso de variáveis discretas, por exemplo, características hidrográficas.

Além disso, é importante a inserção da variável salinidade no mapa de favorabilidade a fim de se avaliar a influência da cunha salina no aquífero Itapecuru. Dependendo dessa influência, o recurso hídrico subterrâneo pode não ser utilizado para uso industrial ou portuário em função dos padrões de qualidade, que podem ser prejudicados pela influência da água do mar.

Capítulo 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fluxo Para Quantificação da Incerteza Hidrogeológica

Resumo:

O modelo de redes de fraturas discretas (DFN) em conjunto com a simulação de fluxo subterrâneo foi aplicado nesta pesquisa em um aquífero fraturado de uma mina a céu aberto. A simulação condicional dos sistemas de fraturas foi desenvolvida e utilizada para a quantificação e avaliação da incerteza das estruturas geológicas e para a previsão das possíveis vazões de escoamento das águas para o fundo de cava. O método utilizado foi baseado na caracterização estatística e na simulação de cenários de distribuição espacial dos tamanhos, direções e aberturas das fraturas e suas influências no comportamento do fluxo. A configuração espacial das estruturas foi gerada por processos de Poisson, enquanto que os tamanhos e ângulos foram gerados pela simulação das fraturas considera dados de campo, como mapeamento de taludes e dados de testemunhos de sondagem. Os cenários resultantes honraram os dados e informações de campo e quantificaram e avaliaram a incerteza atrelada à distribuição das fraturas. Por fim, a pesquisa conseguiu demonstrar os aspectos práticos do método de simulação proposto com base nos resultados das vazões de escoamento das águas para o fundo da cava.

Palavras-chave: incerteza, redes de fraturas discretas, fluxo subterrâneo.

Abstract:

The model of discrete fracture networks with the underground flow simulation was applied in this research in a fractured aquifer of an open pit mine. The conditional simulation of the fracture systems was developed and used for the quantification and evaluation of the uncertainty of the geological structures and for the prediction of the possible flows of water to the bottom of the mine. The method used was based on the statistical characterization and simulation of spatial distribution scenarios of fracture sizes, directions and openings and their influence on flow behavior. The spatial configuration of the structures was generated by Poisson processes, while the sizes and angles were generated by the Gaussian simulation. The flow simulation was performed with the MODFLOW software, and the fracture simulation considers field data, such as slope mapping and survey data. The resulting scenarios honored field data and quantified and evaluated the uncertainty associated with fracture distribution. Finally, the research was able to demonstrate the practical aspects of the proposed simulation method based on the results of the flows of water to the bottom of the proposed simulation method based on the results of the flows of water to the bottom of the proposed simulation method based on the results of the flows of water to the bottom of the proposed simulation method based on the results of the flows of water to the bottom of the proposed simulation method based on the results of the flows of water to the bottom of the proposed simulation method based on the results of the flows of water to the bottom of the proposed simulation method based on the results of the flows of water to the bottom of the proposed simulation method based on the results of the flows of water to the bottom of the proposed simulation method based on the results of the flows of water to the bottom of the proposed simulation method based on the results of the flows of water to the bottom of the proposed simulation method based on the results of

Keywords: uncertainty, discrete fracture network, underground flow.

3.1 Introdução

As heterogeneidades geológicas relacionadas às características estruturais, como a distribuição espacial das fraturas, estão presentes em diversas escalas, possuindo importante influência no comportamento do fluxo subterrâneo em aquíferos cristalinos (Pereira, 1998). Atualmente, um dos principais desafios em hidrogeologia é o entendimento do fluxo subterrâneo em aquíferos fraturados (Borgne *et al.*, 2006).

A previsão dessas estruturas geológicas em minas a céu aberto é uma das primeiras questões enfrentadas nas atividades inerentes ao planejamento minerário. Fraturas não só influenciam o desenvolvimento da exploração mineral, com as condicionantes impostas pelas mesmas na estabilidade dos taludes, bem como na formação de caminhos preferenciais das águas, que implicam tanto na estabilidade como nos projetos de drenagem da operação de lavra.

Portanto, estes canais de fluxo subterrâneo podem aumentar significativamente o volume de desaguamento para a cava da mina, causando um possível aumento dos custos para a implantação de drenagens e poços de bombeamento para o rebaixamento (Sun H Q. *et al.*, 2009).

Dessa forma, as incertezas sobre as estruturas geológicas no planejamento e durante a operação da lavra podem ocasionar perdas financeiras significativas para o projeto, pois geram atrasos no cronograma de exploração, alterações na produção e possíveis perdas de reservas.

Sendo assim, a avaliação e quantificação da incerteza relacionada ao sistema de fraturamento passam a ser importantes para o planejamento e operação de uma mina. A lavra pode ser melhor controlada e segura com a aplicação e integração de métodos para quantificar a incerteza nas modelagens de estruturas geológicas e hidrogeológicas (Dimitrakopoulos & Li, 2000).

Em muitos casos, os dados disponíveis para a estimativa da probabilidade de ocorrência de fraturas numa área a ser lavrada são oriundos apenas de um número limitado de testemunhos de sondagens de exploração e também restritos à viabilidade de acesso a afloramentos e taludes iniciais da cava.

Com isso, ferramentas geoestatísticas são utilizadas para a geração de simulações que possam reproduzir a variabilidade espacial de parâmetros controladores da lavra (Pardo *et al.*, 2013).

Na prática, um conjunto de realizações simuladas é utilizado para avaliar o impacto da incerteza espacial das variáveis de interesse (espessura do corpo de minério, nível piezométrico, falhas, fraturas, lineamentos, entre outros).

A análise da incerteza, relacionada à ausência de dados em uma determinada região do espaço, é a compreensão e descrição de padrões espaciais das variáveis conhecidas como espessura, falhas e fraturas. Um parâmetro importante que distingue a estimativa geoestatística de outros tipos de estimativa é o modelo de variograma, o qual controla os pesos atribuídos das variáveis aos dados conhecidos das proximidades (Srivastava, 2013).

No entanto, a previsão de estruturas geológicas em minas a céu aberto é extremamente difícil em função da alta variabilidade de dimensões, do complexo processo de formação e também da dificuldade de analisá-las em testemunhos de sondagem.

Trabalhos como o de Li & Dimitrakopoulos, 2002; Dimitrakopoulos, 2011; Benndorf & Dimitrakopoulos, 2013; Feng *et al*, 2015 e Goodfellow & Dimitrakopoulos, 2016 utilizaram-se de métodos geoestatísticos para quantificar a incerteza da localização de estruturas geológicas frente à produção minerária.

Dessa maneira, este trabalho possui como objetivo simular cenários de probabilidade de ocorrência de fraturas, por meio de redes de fraturas discretas, avaliando o impacto desses cenários no fluxo subterrâneo.

Esta integração do modelo de redes de fraturas discretas com a simulação do fluxo subterrâneo contribui com a previsão de possíveis cenários de vazão de escoamento das águas no decorrer da operação da mina a céu aberto.

3.2 Caracterização da Área de Estudo

A área de pesquisa está situada na região norte do Brasil (Figura 3.1), região esta caracterizada pelo clima equatorial com os meses mais chuvosos entre novembro e maio e menos chuvosos entre junho e outubro. As médias pluviométricas mensais para as estações meteorológicas situadas no entorno da área de estudo são de aproximadamente 150 mm/mês (Bastos *et al.*, 2005). Para os meses de maior escoamento superficial, as vazões médias são superiores a 1.400 m³/s (dados da estação base da Siderama localizada no município de Urucará / AM).

A mina ocupa área aproximada de 946.500 m² e um perímetro de cava de 4.342 m. A cota altimétrica da área é próxima a 200 m. Na porção nordeste da cava, estão posicionados dois reservatórios de água, cobrindo área de 4.260.000 m² e um volume aproximado de 2,56E+07 m³ (Figura 3.1).





A região insere-se na porção sul do Escudo das Guianas, na parte norte do Cráton Amazônico, o qual está localizado na porção norte da Plataforma Sul-Americana (Pires, 2005). Alguns modelos foram propostos e aplicados para fundamentar o entendimento da evolução geológica do Cráton Amazônico, que pode ser compreendido, de forma simplificada, como uma compartimentação geocronológica e geotectônica de províncias que englobam eventos de 3,10 e 0,99 Ga (Vedana, 2010).

Tassinari & Macambira (1999, apud Vedana, 2010) dividem essa área cratônica em seis grandes províncias geocronológicas com núcleo de idade arqueana (<2,3Ga), representado pela província Amazônia Central e agregando cinturões móveis de idades decrescentes até 1,00Ga. As outras cinco províncias são: Maroni-Itacaiúnas (2,2-1,95 Ga), Ventuari-Tapajós (1,95-1,80 Ga), Rio Negro-Juruena (1,80-1,55 Ga), Rondonian-San Ignácio (1,50-1,30 Ga) e Sunsás (1,30-1,00 Ga). Estes mesmos autores posicionaram as rochas da região de pesquisa entre 1,95 Ga e 1,80 Ga, o que as insere na província Ventuari-Tapajós, a qual foi relacionada às rochas vulcânicas ácidas e intermediárias (riolitos, riodacitos e dacitos), subvulcânicas (adamelitos e tonalitos), piroclásticas (tufos e brechas) e rochas intrusivas ácidas (granitos tipo alaskito).

De acordo com a interpretação de testemunhos de sondagens realizadas na área da mina, o perfil estratigráfico, da base para o topo, é composto por albita granito (220 m - 48 m), anfibólio - biotita sienogranito (48 m - 9 m) e solo (9 m - cota superficial).

Formado por rochas ígneas, o aquífero local é do tipo cristalino. Neste caso, é fundamental o conhecimento e mapeamento da geometria das zonas de fraturas. Estas estruturas geológicas podem ocorrer tanto em pequenas escalas como em escalas regionais, ambas com potencial de influenciar o comportamento do fluxo das águas subterrâneas local.

Conforme dados de piezômetros, fornecidos pela mineradora, o nível d'água estabilizado é de 1 m e o fluxo d'água subterrâneo (anterior à lavra) é de sudoeste para nordeste da área pesquisada.

3.3 Método de Trabalho

A base de dados é composta por 337 medidas das características das fraturas, que correspondem ao comprimento, direção e abertura. Essas informações foram geradas pela mineradora e estão inseridas no mapa estrutural da mina, sendo

elaborado com as informações oriundas de testemunhos de sondagens e de mapeamento de campo de taludes acessíveis da cava.

A Figura 3.2 ilustra um testemunho de sondagem utilizado para a interpretação estrutural, bem como o mapeamento de talude realizado. Já a Figura 3.3 exibe o mapeamento estrutural da mina (rede original de fraturas), bem como as regiões sem informação estrutural.

Figura 3.2 – A) testemunho de sondagem e B) mapeamento em campo de talude, ambos utilizados para o mapeamento estrutural da mina – rede original de fraturas



Figura 3.3 – Mapa estrutural para a região da cava. A) Feições na área da cava, B) detalhe para a região nordeste. Verde – Falhas, Tracejado Azul – lineamentos, Azul claro – fraturas com água, Rosa – fraturas. Notam-se grandes áreas da cava da mina sem informação do mapeamento estrutural realizado



A Figura 3.4 ilustra os dados brutos de descrição de testemunhos de sondagem utilizados no mapeamento estrutural da mina em forma de planilha.

Figura 3.4 – Exemplo do dado bruto oriundo da descrição estrutural de testemunhos de sondagem e utilizados para o mapeamento estrutural da mina. Prof: Profundidade; Tipo: Tipo de estrutura encontrada; FR – fratura; In Fill – tipo de preenchimento; Prench (mm): espessura do preenchimento; Ou: Outros; Ox: óxidos em geral; Cr: Criolita e Ch-Ox:Clorita e óxidos em geral

ononita e			abb cill geru
Prof	Тіро	In Fill	Prench (mm)
2,78	FR	Ou	0,7
5,45	FR	Ou	0,8
12,34	FR	Ox	0,4
13,9	FR	Cr	0,5
13,97	FR	Cr	1
14,1	FR	Cr	2
14,68	FR	Ch-Ox	0,5

Assim, com a base de dados fornecida pela mineradora, foi possível a análise das distribuições das estruturas na mina, com a obtenção dos dados

relacionados aos parâmetros geométricos das fraturas como direção e comprimento. Além disso, também foi possível diagnosticar as fraturas abertas, as quais estão com presença de água, bem como as fraturas preenchidas por cimento e/ou secas. No entanto, o banco de dados não disponibiliza o tamanho das aberturas (mm) e este dado foi obtido em pesquisa bibliográfica.

As falhas e fraturas apresentam elevada densidade de ocorrência com grande variação de direções. Na análise do banco de dados foi possível associar os lineamentos de menores dimensões às falhas.

Conforme mencionado anteriormente, algumas das fraturas localizadas na região nordeste da área foram constatadas em campo com presença de água. Estas fraturas estão próximas aos reservatórios localizados a nordeste da mina e são fraturas sub-horizontais de alívio e abertas verticais a sub-verticais, as quais foram mapeadas nos taludes da cava da mina (Figura 3.2B).

As falhas e fraturas foram descritas em uma densidade de pontos significativa, que possibilitou a caracterização estrutural da área. A maioria das medidas está posicionada na porção centro-leste, condicionada aos acessos disponíveis aos taludes da mina, como também ao acesso aos locais para o trabalho das sondas de perfuração.

Em todos os taludes e nos testemunhos de sondagens, o registro da densidade de falhas e fraturas foi constante. Os lineamentos, identificados em imagem de satélite coincidiram com os pontos mapeados de falhas e fraturas.

Estes dados de campo (realizados para mapeamento estrutural da mina) permitem a determinação da localização e da orientação das fraturas e falhas no maciço rochoso, estabelecendo assim os possíveis caminhos preferenciais que a água subterrânea tende a percorrer em seu trânsito (Reis & Alamy Filho, 2018).

Com isso, para a simulação dos modelos de redes de fraturas discretas para toda a região da cava da mina, foram descartadas as medidas de lineamentos. Os dados de entrada utilizados correspondem às:

- Fraturas,
- Fraturas com água,
- Falhas.

Todos os dado foram agrupados em uma única variável denominada somente como fratura nesta pesquisa.

3.3.1 Modelo de Redes de Fraturas Discretas - DFN

A avaliação do fluxo subterrâneo em aquíferos fraturados pode ser realizada utilizando-se de métodos especiais numéricos ou analíticos para a obtenção do campo de fluxo em cada fratura. O método de redes de fraturas discretas (em inglês, *Discrete Fracture Network Model* – DFN) representa os modelos descontínuos que buscam representar o meio fraturado, baseando-se em dados levantados em campo (Long *et al.*, 1982; Robinson, 1984).

O modelo DFN é uma abordagem discreta espacial que considera os processos de fluxo de fluido em rochas fraturadas por meio de um sistema de fraturas conectadas. A técnica foi criada na década de 80 para modelos 2D e 3D e foi continuamente desenvolvida com aplicações em engenharia de reservatórios (Andersson & Dverstop, 1987). Como pode ser observada na Figura 3.3, a rede de fraturas original (mapeamento estrutural da mina) apresenta elevada conectividade entre as mesmas, considerando apenas os pontos mapeados na área.

O algoritmo computacional DFN simula explicitamente as propriedades geométricas de cada fratura individualmente, como orientação, tamanho, posição, forma e abertura, analisando as relações topológicas entre as fraturas individuais e um conjunto de fraturas. O DFN pode ser gerado a partir de mapeamento geológico estrutural para representar diferentes tipos de fraturas incluindo juntas, falhas, veios e planos acamadados (Lei *et al.*, 2017), estando presente em softwares de modelagem geológica como o PETREL© e o RMS©.

O levantamento de dados estruturais em campo pode ser considerado difícil para a utilização das redes de fraturas discretas, visto que estes estão visíveis apenas em taludes da cava ou por meio de testemunhos de sondagens.

Dessa maneira, é usual a geração de modelos estatísticos, como dado de entrada ao método DFN, que informam valores das propriedades geométricas importantes, válidos para todo o aquífero fraturado, obtidos através de medições realizadas em regiões restritas, como nesta pesquisa, a qual possui apenas a região nordeste com elevada densidade de informações de campo (Figura 3.3). Portanto, é possível estabelecer, a partir de médias e desvios padrões das propriedades geométricas, como as fraturas se distribuem e como se forma a rede de escoamento de água na rocha (Reis & Alamy Filho, 2018). A Figura 3.5 exemplifica o método utilizado na pesquisa.



Figura 3.5 – Exemplificação do método utilizado na pesquisa

O modelo sintético da configuração estrutural da mina utilizou como dados de controle:

- Distribuição de direção e modelo variográfico para direção de fraturas;
- Distribuição de comprimento e modelo variográfico para comprimento de fraturas.

A Tabela 3.1 apresenta os dados de entrada do modelo DFN utilizado.

	mina		
Dados Iniciais do Modelo			
Formato e dimensões do volume de simulação	Forma cúbica: dimensão da aresta Forma prismática: comprimento (em x), largura (em y), e profundidade (em z)		
Número de famílias de fraturas do maciço rochoso	35 - Número inteiro de famílias		
Dados para cada uma das famílias			
Densidade volumétrica de fraturas	Número de fraturas por metro cúbico de volume (1/m ³)		
Comprimento das fraturas	Média (m) e desvio padrão (m)		
Abertura das fraturas	Todas as fraturas foram consideradas abertas, com isso não foi considerada a distância de abertura. As células do grid que são atravessadas por fratura foram consideradas com maior condutividade hidráulica Os valores de abertura não foram mapeados em campo. Dessa forma, utilizou-se de dados bibliográficos* para os valores de média e desvio padrão (mm)		
Orientação das fraturas	Média do ângulo de mergulho (°) e média do ângulo de direção (°)		

Tabela 3.1 – Dados de entrada do modelo DFN advindos do mapeamento estrutural da mina

*Long & Billaux (1987), Moreno *et al.*, (1988), Tsang *et al.*, (1988) e Keller *et al.*, (1999).

Cada família direcional de fraturas é representada por um conjunto de discos com uma distribuição de raios e direções inferidas da análise estatística dos dados de campo (Cacas *et al.*, 1990), conforme pode ser visto na Figura 3.6.

Figura 3.6 – Conjunto esquemático representativo de discos das fraturas geradas no modelo DFN



Fonte: Adaptado de Cacas et al., 1990

As dimensões dos raios dos discos de vizinhança são proporcionais ao tamanho da fratura. As distribuições dos comprimentos das fraturas tem comportamento lognormal (Figura 3.7), por isso o mesmo comportamento foi adotado para o raio de abrangência da fratura.

As direções das fraturas apresentam grande dispersão, com média para direção N99, mas com quatro modas distintas, N0, N70, N120 e N160 (Figura 3.7). As dimensões dessas estruturas variam de 4 a 300 m, com tamanho médio de 35 m.



Figura 3.7 – Histogramas de comprimentos e direções das fraturas da área de pesquisa

Na Tabela 3.2 estão expostos os valores mínimo, máximo, média e desvio padrão dos dados de comprimento, orientação e abertura das fraturas utilizadas no modelo (337 medidas/amostras no total).

Tabela 3.2 – Informações estatísticas dos dados relativos aos comprimentos, orientações e aberturas das fraturas

Parâmetro Geométrico	Mínimo	Máximo	Média	Desvio padrão
Comprimento (m)	4,85	306,44	35,04	32,36
Orientação (graus)	0,00	179,53	99,36	51,08
Abertura (mm)*	-	-	0,2	0,05

*Dados bibliográficos: *Long & Billaux (1987), Moreno *et al.*, (1988), Tsang *et al.*, (1988) e Keller *et al.*, (1999).

O modelo variográfico, utilizado como parâmetro de controle para a simulação, possibilitou incorporar a relação espacial no modelo dos atributos de falhas/fraturas como: dimensão, direção e abertura das fraturas. As três variáveis foram estimadas pelo método de simulação sequencial gaussiana (SSG).

A SSG é a aplicação de procedimento de simulação sequencial para funções aleatórias multigaussianas, considerando a simulação de N variáveis aleatórias $\{Z(x_i), i = 1, N\}$ e condicionadas ao conjunto de n pontos de dados $\{z(x_{\alpha}), \alpha = 1, n\}$ (Deutsch, 2002).

Neste algoritmo, um valor aleatório é atribuído a cada célula da malha que não possui dado, definindo uma ordem aleatória para todas as células. Para cada célula, a função de densidade de probabilidade (FDP) é estimada baseada em um número de dados condicionantes vizinhos (dados iniciais e dados simulados precedentes). Um valor aleatório desta FDP é atribuído estabelecendo uma continuidade espacial.

As informações das medidas de distância entre as fraturas e densidade de ocorrência foram utilizadas para calibração e posicionamento das sementes pelo método de Poisson. Com isso, a localização das fraturas em áreas não mapeadas honram as duas variáveis.

A distribuição de Poisson é uma distribuição discreta de probabilidade, aplicável à ocorrência de um evento em um intervalo especificado. A variável aleatória x é o número de ocorrências do evento em um intervalo, que pode ser, como exemplo, tempo, distância, área, volume ou outra unidade análoga (Dimitrakopoulos & Li, 2000). A probabilidade do evento ocorrer "x" vezes em um intervalo é representada pela fórmula abaixo:

$$P(x;\mu) = \frac{\mu^x e^{-\mu}}{x!} \tag{1}$$

onde µ corresponde à média do evento em análise.

Importante mencionar que mais da metade das fraturas (220 fraturas) do mapeamento estrutural original da mina foram classificadas como preenchidas ou secas, e, portanto, não condutoras de água. Para a geração do modelo DFN e a simulação do fluxo, a quantidade de fraturas abertas ou com água foi mantida de acordo os dados de campo e as consequências disso serão discutidas no item 3.4.

Os efeitos dos mecanismos deformacionais e de transferência de calor durante a formação do maciço rochoso no fluxo d'água subterrânea são frequentemente ignorados (Zimmerman & Bodvasson, 1996; Yu, *et al.*, 1999) e, nesta pesquisa, não foram considerados na geração do modelo DFN.

Alguns autores (Niemi *et al.*, 2000; Keller *et al.*, 1999; Cacas *et al.*, 1990) conseguiram obter resultados robustos para a caracterização estatística em aquíferos fraturados, bem como as respectivas funções de densidade de probabilidade (FDP), para cada parâmetro geométrico das fraturas. Foi identificada uma semelhança nas FDPs definidas, quando os autores encontravam uma mesma característica do sistema, até mesmo em diferentes localidades geográficas (Reis & Alamy Filho, 2018).

No entanto, para esta pesquisa foi realizada a análise do meio fraturado, a partir de dados de campo, com a utilização de técnicas estocásticas que utilizam o caráter aleatório presente nas funções de densidade de probabilidade (FDPs) para a geração artificial de redes discretas de fraturas (DFN).

Foram utilizados como dados de entrada apenas valores de média e desvio padrão para cada uma das características do sistema fraturado. O modelo segue a distribuição estatística indicada para cada variável e permite posteriormente a simulação do fluxo no meio subterrâneo fraturado.

Dessa maneira, o modelo DFN consegue capturar a organização espacial das fraturas, correlacionar às propriedades estatísticas básicas das características geométricas das estruturas e, consequentemente, prever a conectividade das fraturas dentro do maciço rochoso, as quais são os caminhos a serem percorridos pela água subterrânea (Bour & Davy, 1999; Odling *et al.*, 1999).

O modelo DFN utilizado nesta pesquisa não considera os índices RQD (índice de qualidade de rocha) e RMR (índice de massa de rocha), apenas os parâmetros geométricos das fraturas.

3.3.2 Simulações do Fluxo Subterrâneo

As modelagens hidrogeológicas para a simulação do fluxo e consequente aporte de água para o fundo de cava da mina foram realizadas com o software *MODFLOW* (*U.S Geological Survey, 2011*).

O MODFLOW simula as interações hidrogeológicas, onde são inseridos os dados pertinentes à constituição geológica do meio poroso, bem como as principais características hidrológicas e condições de contorno. Criado pelo U.S Geological Survey, o programa computacional gera um modelo de fluxo

tridimensional baseado em diferenças finitas, sendo amplamente utilizado para prever o comportamento de sistemas de fluxo subterrâneo.

Nesta pesquisa, a modelagem do fluxo subterrâneo foi realizada para os 50 modelos de redes de fraturas discretas (DFN), para aquíferos constituídos por rocha cristalina com feições estruturais. As duas outras unidades de fluxo consideradas no modelo hidrogeológico (solo e rocha cristalina sem feições estruturais) mantiveram as mesmas características durante a simulação DFN dos 50 cenários de variação de comprimento, direção e abertura das fraturas.

Na Tabela 3.3 estão apresentados os parâmetros utilizados no modelo hidrogeológico.

	Parametros utilizados
Número de células	72.000 células sendo, 24.000 células por camada, ou seja, 150 células na direção x (4 m) e 160 na y (5 m); foram consideradas 3 camadas que representam as três unidades de fluxo: (i) solo; (ii) rocha cristalina com feições estruturais e (iii) rocha cristalina sem feições estruturais
Regime	Transiente
Condições de contorno	Nas bordas do modelo, ou seja, nas porções mais altas da região
Base e topo do modelo	A base do modelo está na cota -100 m e o modelo considerou 3 mapas de topo, sendo: Topo 1 - topo do terreno, Topo 2 a 20 m e Topo 3 a 50 m; foram considerados 3 mapas de base: base do terreno a 20 m, Base 1 a 50 m e Base 2 a -100m
Tempo de simulação	Dois períodos, dois anos e dez anos, divididos em 10 passos cada
Pontos de controle e calibração	Foi considerado um ponto de observação na cota mais baixa do modelo. A calibração do modelo foi realizada por 15 pontos de controle. Estes pontos foram distribuídos aleatoriamente na área, com profundidade de nível d'água variando de 1 a 2 metros (conforme dados de piezômetros instalados na mina), de forma linear em relação à altitude do terreno
Recarga e evapotranspiração	Foram considerados os dados das estações meteorológicas da região de pesquisa, quer dizer, 150 mm/mês para recarga (pluviometria) e 12,63 mm/mês para evapotranspiração. Estação de Siderama localizada no município de Urucará / AM
Armazenamento específico; coeficiente de armazenamento e capacidade específica	Foram utilizados os valores de default do <i>MODFLOW</i>
Condutividade hidráulica, K**	Unidade de fluxo solo: 1m/d*; unidade de fluxo rocha cristalina com feições estruturais: 10 ⁻⁶ m/d*; unidade de fluxo rocha cristalina sem feições estruturais: 10 ⁻¹⁰ m/d*
Porosidade	Unidade de fluxo solo: 25% [*] ; unidade de fluxo rocha cristalina com feições estruturais: 20% [*] ; unidade de fluxo rocha cristalina sem feições estruturais: 2%

Tabela 3.3 – Parâmetros utilizados no modelo hidrogeológico
Parâmetros utilizados

*Valores retirados de Heath, 1983.

Ē

**Variações entre condutividade hidráulica vertical e horizontal não foram considerados no modelo em função da ausência de informações de campo.

As condições de contorno foram definidas conforme a topografia da área, que apresenta cursos d'água em todo o seu limite, estando a mina situada em um alto topográfico em condições de área de recarga local. Os reservatórios de água situados a nordeste podem influenciar as condições hidrológicas da mina e foram considerados no modelo.

Conforme supracitado, as condições de contorno foram colocadas nas bordas do modelo, em áreas de alto topográfico. Com isso, são mantidos os níveis d'água nestas células, o que pode significar um aporte lateral ao modelo. No entanto, como o principal objetivo da pesquisa é avaliar a incerteza relacionada à influência das fraturas na cava, o aporte lateral não foi considerado um problema.

Os dois reservatórios superficiais presentes na área foram incorporados ao modelo como um reservatório único, com as mesmas características, posicionados em topografia elevada, se comportando como recarga, durante todo o período de simulação. A condutividade hidráulica adotada para a base do reservatório foi de 10⁻² m/d.

A Figura 3.8 apresenta as três unidades de fluxo consideradas no modelo: em amarelo, no topo do terreno, a espessura referente a solo; em rosa, as células da malha cortadas por feições estruturais (fraturas); a cor marrom corresponde às células referentes à rocha cristalina sem presença de feições estruturais.

As três unidades de fluxo foram definidas com base no mesmo banco de dados utilizados para o modelo DFN, ou seja, interpretações de testemunhos de sondagem e mapeamento dos taludes da cava da mina.



Figura 3.8 – Modelo utilizado na simulação de fluxo. Em amarelo, solo, em rosa células com presença de fraturas e marrom rocha cristalina sem presença de fraturas

A Figura 3.9 apresenta o modelo utilizado para a modelagem hidrogeológica.

Figura 3.9 – A) Mapa topográfico utilizado no modelo de fluxo. B) Mapa de condições de contorno, malha de simulação e os 15 pontos de controle. Reservatórios de água a nordeste da cava



Três parâmetros foram escolhidos para a calibração do modelo de fluxo: a condutividade hidráulica horizontal, recarga pluviométrica e condutividade do fundo

do reservatório, sendo obtidos os valores de $3,44^{-07}$ m/s, $1,18^{-3}$ m/s e 10^{-6} m/s, respectivamente.

Dados de vazão dos rios ao redor da área de estudo e dos vertedouros da mina não foram considerados no modelo hidrogeológico.

3.4 Resultado e Discussão

A pesquisa teve como principal resultado a geração de 50 modelos de redes de fraturas discretas (DFN) que visam prever a configuração espacial dos parâmetros geométricos como comprimento, direção e abertura das fraturas para toda a área da mina.

Os 50 modelos DFN foram utilizados na modelagem hidrogeológica (*MODFLOW*) e os resultados de fluxo subterrâneo com o consequente volume de escoamento para o fundo da cava foram analisados de acordo com cada rede de fratura discreta.

As características estatísticas dos parâmetros geométricos do modelo honraram os dados originais (mapeamento estrutural da mina) e a partir da avaliação dos dados geotécnicos resultantes, é possível compreender o comportamento do maciço rochoso em profundidade, tanto na sua questão estrutural, quanto no seu comportamento hidrogeológico, levando em consideração apenas os parâmetros geométricos mencionados.

Essa integração entre DFN e *MODFLOW* possibilita a quantificação da incerteza relacionada ao desconhecimento, em algumas regiões da mina, da organização espacial das fraturas sobre o comportamento do fluxo subterrâneo durante 10 anos de lavra.

Um dos cenários do modelo DFN está representado na Figura 3.10 e a avaliação da modelagem hidrogeológica será feita apenas com base nos resultados dos volumes de desaguamento para o fundo de cava.

Com isso, o modelo hidrogeológico gerado é considerado simplificado, conforme discutido na seção 3.3.2, buscando apenas avaliar a distribuição das fraturas e suas características geométricas, que representam os caminhos preferenciais das águas.



Figura 3.10 – Resultado de um cenário do modelo DFN para a área da mina e seu entorno – distribuição espacial estimada dos parâmetros geométricos das fraturas

Entre a face da cava e os reservatórios localizados a nordeste ocorre uma região crítica, onde as fraturas mapeadas apresentaram circulação de água (Figura 3.11).

Portanto, esta região possui maior probabilidade para contribuir com o aporte de água subterrânea para o fundo da cava. Neste caso, a simulação de fluxo foi aplicada somente na porção nordeste de cada modelo DFN, e assim foi avaliada a influência da distribuição das fraturas neste local, considerado crítico para a lavra (Figura 3.12).
Figura 3.11 – Surgimento de água no talude entre a face da cava e os reservatórios a NE da área de pesquisa



Figura 3.12 – Área alvo das simulações de fluxo (retângulo à NE) e sua interface com o modelo DFN



Os resultados das simulações de fluxo subterrâneo para os 50 modelos de DFN representam as variações de carga hidráulica no tempo simulado, ou seja, ao longo de 10 anos de operação da mina.

O nível d'água (m) no fundo de cava da mina no tempo zero da simulação é nulo para todas as modelagens realizadas e, após 10 anos de simulação, verificase o acúmulo de água no fundo de cava para cada modelo discreto de fraturas, conforme poder ser visto na Tabela 3.4.

Mesmo simulando apenas a área a nordeste (área crítica entre a face da cava e os reservatórios de água), foi considerado que todo o escoamento de água, em função da diferença de topografia, segue na direção e sentido para o fundo da cava de todo o perímetro minerário.

Modelo de redes de fraturas discretas - DFN	Nível d'água acumulado no fundo de cava da mina em 10 anos de operação (m)	Modelo de redes de fraturas discretas – DFN	Nível d'água acumulado no fundo de cava da mina em 10 anos de operação (m)
DFN-1	0,94	DFN-26	1,18
DFN-2	0,79	DFN-27	1,20
DFN-3	1,24	DFN-28	1,18
DFN-4	1,19	DFN-29	1,23
DFN-5	92,65	DFN-30	1,18
DFN-6	1,19	DFN-31	1,18
DFN-7	1,20	DFN-32	1,18
DFN-8	1,21	DFN-33	15,16
DFN-9	1,22	DFN-34	1,19
DFN-10	1,19	DFN-35	1,18
DFN-11	1,18	DFN-36	1,18
DFN-12	1,18	DFN-37	1,18
DFN-13	1,18	DFN-38	1,20
DFN-14	1,18	DFN-39	93,39
DFN-15	1,18	DFN-40	1,18
DFN-16	1,18	DFN-41	1,18
DFN-17	1,18	DFN-42	1,18
DFN-18	1,18	DFN-43	1,21
DFN-19	-0,07	DFN-44	1,18
DFN-20	1,18	DFN-45	1,18
DFN-21	1,20	DFN-46	1,18
DFN-22	1,18	DFN-47	1,18
DFN-23	2,51	DFN-48	1,18
DFN-24	1,18	DFN-49	1,18
DFN-25	1,18	DFN-50	1,19

Tabela 3.4 – Resultados das simulações de fluxo



Diversos modelos de redes de fraturas discretas tiveram o mesmo resultado em relação ao acúmulo da água no fundo da cava, sendo eles: 5 modelos apresentaram um acumulo de 1,19 m; 29 modelos tiveram uma espessura de nível d'água resultante de 1,18 m; 4 simulações com o resultado de 1,20 m; 2 com 1,21 m; 9 resultados apresentaram níveis d'água variáveis e o DFN-19 resultou em um nível d'água negativo. A Tabela 3.5 agrupa estes resultados e exibe o cálculo de volume de água de fundo de cava (m³) para cada grupo de DFN, bem como a vazão de escoamento em m³/h considerando 10 anos de lavra.

Grupo	DFN	Aumento do nível d'água do fundo de cava em 10 anos de lavra (m)	Volume total acumulado em 10 anos de lavra (m ³) – Nível d'água x Área da cava	Vazão de escoamento em 10 anos de lavra (m ³ /h)
01	DFN-4; DFN-6; DFN-10; DFN-34 e DFN-50	1,19	1.126.335,00	12,86 m ³ /h
02	DFN-11; DFN-12; DFN-13; DFN- 14; DFN-15; DFN-16; DFN-17; DFN-18; DFN-20; DFN-22; DFN- 24; DFN-25; DFN-26; DFN-28; DFN-30; DFN-31; DFN-32; DFN- 35; DFN-36; DFN-37; DFN-40; DFN-41; DFN-42; DFN-44; DFN- 45; DFN-46; DFN-47; DFN-48 e DFN-49	1,18	1.116.870,00	12,75 m ³ /h
03	DFN-7; DFN-21; DFN-27 e DFN- 38	1,20	1.135.800,00	12,97 m ³ /h
04	DFN-8 e DFN-43	1,21	1.145.265,00	13,07 m ³ /h
05	DFN-1	0,94	889.710,00	10,16 m ³ /h
06	DFN-2	0,79	747.735,00	8,54 m³/h
07	DFN-3	1,24	1.173.660,00	13,40 m ³ /h
08	DFN-5	92,65	87.693.225,00	1.001,06 m ³ /h
09	DFN-9	1,22	1.154.730,00	13,18 m ³ /h
10	DFN-19	-0,07	-66.255,00	Descartado
11	DFN-23	2,51	2.375.715,00	27,12 m ³ /h
12	DFN-29	1,23	1.164.195,00	13,29 m ³ /h
13	DFN-33	15,16	14.348.940,00	163,80 m ³ /h
14	DFN-39	93,39	88.393.635,00	1.009,06 m ³ /h

Tabela 3.5 – Agrupamento dos resultados iguais, cálculo do volume de água de fundo de cava (m³) resultante do escoamento de água para a cava da mina e vazão de escoamento em 10 anos de lavra

O grupo 10 (DFN-19) apresentou resultado negativo e, com isso, foi descartado da avaliação dos dados resultantes do modelo DFN/*MODFLOW*.

O valor médio de vazão de todos os dados foi de 56,56 m³/h; mínimo de 8,54 m³/h e máximo de 1.009,06 m³/h. O desvio padrão calculado para os resultados de vazão de escoamento para o fundo de cava foi de 198,87 m³/h.

Os resultados simulados de vazão estão coerentes com a realidade adotada para vazões de desague de minas a céu aberto em aquífero fraturado. O

valor mais frequente encontrado nos resultados (151,47 m³/h) possui a mesma ordem de grandeza de duas minas a céu aberto que apresentam vazões de bombeamento para drenagem de fundo de cava de 325 m³/h e 789 m³/h. Estas minas possuem dimensões semelhantes com a desta pesquisa, e estes valores foram obtidos em entrevista com o hidrogeólogo, Thiago Manzini, que atua na área de hidrogeologia no setor minerário.

A Figura 3.13 exibe o histograma para os resultados de vazão de escoamento (m³/h) do *MODFLOW*. A Tabela 3.6 contempla os dados utilizados para a realização do histograma de função de probabilidade de massa.

Tabela 3.6 – Dados utilizados de vazão de escoamento para o fundo de cava para a elaboração do histograma de probabilidade de massa

Classes	Corte	Frequência
1	151,47	46
2	294,40	1
3	437,33	0
4	580,26	0
5	723,20	0
6	866,13	0
7	1009,06	2

Figura 3.13 – Histograma e função de probabilidade das vazões de escoamento simuladas (m³/h) para os modelos DFN



Os valores baixos de vazão e até mesmo o valor negativo podem estar relacionados à incerteza no modelo DFN, para estes casos, seria ideal o maior número de informações em toda área da mina.

Outra hipótese é que os dados utilizados de bibliografia para os valores de média e desvio padrão de abertura das fraturas podem não estar condizentes com a realidade do aquífero fraturado pesquisado, podendo estes valores ser maiores na realidade e principalmente na área crítica entre a face da cava e os reservatórios a nordeste.

Outro fator importante que pode ter contribuído para os resultados de baixa vazão é a condutividade hidráulica em meio fraturado, a qual pode ser calculada pela Lei Cúbica, desenvolvida por Snow (1968 apud Freeze & Cherry, 1979) que normalmente é aplicada para fluxos laminares e lineares, onde também se aplica a lei de Darcy, sendo que sua equação é:

$$K = \frac{\gamma N b^3}{12\vartheta}$$
(2)

Onde Y: Peso específico do fluido; b: abertura das fraturas; N: Número de fraturas por unidade de distância (frequência); ϑ : Viscosidade do fluido.

Os modelos DFN utilizados não consideraram o parâmetro frequência (N) na simulação, o que pode acarretar em valores menores de K em comparação com a realidade do maciço. Além disso, conforme mencionado anteriormente, para os valores de abertura, a qual tem um peso importante no cálculo de K, foram utilizados dados bibliográficos que podem ter subestimado o potencial de condutividade do aquífero modelado.

Porém, o principal objetivo da pesquisa foi analisar as diferenças de resultados do simulador de fluxo hidrogeológico frente à incerteza dos parâmetros comprimento, direção e abertura da rede de fraturas de cada modelo e, também, conforme já colocado, os resultados de vazão obtidos (média e máximo) estão em uma ordem de grandeza semelhantes aos dados de vazões reais de desague em minas a céu aberto em rochas cristalinas.

Os resultados dos grupos de alta vazão (grupos 8 e 14) podem ser explicados pela alta densidade, diagnosticada nos modelos DFN, das distribuições espaciais das dimensões e direções das fraturas, as quais funcionam como caminhos preferenciais das águas em direção ao fundo de cava, além de estarem, em grande parte, conectadas/interligadas. Esta alta densidade dos parâmetros geométricos e conectados pode sobrepor o parâmetro frequência e ter ocasionado cenários de alta vazão.

Além disso, em um maciço rochoso cristalino, o grau de fraturamento e a conectividade das fraturas são os elementos principais que controlam o fluxo subterrâneo de água, pois, normalmente, quanto maior a quantidade de fraturas, a tendência é que seja também maior a facilidade com que o fluxo atravesse o meio rochoso (Freeze & Cherry, 1979). No entanto, essa premissa pode apresentar exceções, por exemplo, quando as fraturas passam por processos de alteração que promovam a colmatação das mesmas, tornando-as uma barreira ao fluxo e não um meio condutivo. Este fator não foi considerado no mapeamento estrutural da mina e, consequentemente, nos modelos DFN, então algumas fraturas modeladas podem estar colmatadas e não representam canais de fluxo.

Comparando-se os dois modelos DFN que originaram os extremos de volume (mínimo e máximo), percebe-se uma importante diferenciação na estrutura organizacional das redes de fraturas discretas, ou seja, é possível constatar que há maior conexão dos caminhos preferenciais das águas subterrâneas, como também uma maior dimensão e densidade das estruturas no grupo 14, de alta vazão, em relação ao grupo 6, com baixa vazão e fraturas não conectadas (Figura 3.14).



Figura 3.14 – Modelos DFN relacionados aos grupos 6 (baixa vazão) e 14 (alta vazão)

A diferença de vazão de escoamento entre os grupos 6 (baixa vazão) e 14 (alta vazão), conforme já mencionado, representa 1.000,52 m³/h em 10 anos de operação da mina. Essa diferença relacionada à incerteza do mapeamento estrutural pode ocasionar despesas financeiras significativas, não previstas, bem como riscos em relação ao surgimento de águas nas frentes de operação, o qual pode paralisar a lavra por um determinado tempo e, consequentemente, também gerar perdas financeiras para o empreendimento.

A correlação direta entre as características geométricas das fraturas (comprimento e direção) com o volume de desaguamento no fundo de cava é uma validação importante para os modelos de redes de fraturas discretas gerados nessa pesquisa, ou seja, os modelos conseguiram honrar as características geométricas das fraturas mapeadas em campo e validar os conceitos tradicionais de escoamento de água em meios fraturadas, sendo que, quanto maior as variações dos comprimentos e das direções, mais caminhos serão percorridos pelas águas e, consequentemente, maiores vazões de escoamento para o fundo de cava.

3.5 Conclusões

O modelo DFN desenvolvido nesta pesquisa considerou que as fraturas podem ser representadas por discos circulares, sendo que a localização, orientação, tamanho e abertura destas fraturas puderam ser inferidos a partir do mapa estrutural da mina.

O método DFN realizou a simulação de campos de probabilidade que refletiram a continuidade espacial da densidade de fraturas mapeadas na área da cava, bem como honraram a base de dados utilizada.

No entanto, o modelo de fluxo na simulação das redes discretas de fraturas teve como premissa que os parâmetros geométricos das fraturas funcionam como canais de rede de fluxo sem considerar dados de campo de abertura das mesmas, apenas bibliográficos, o que pode ter colaborado para os resultados de baixa vazão.

Devido à limitação de técnicas de medição para explorar a geometria e locais de estruturas de subsuperfície, é necessária a utilização de técnicas estatísticas para expandir os intervalos das previsões, incluindo nos modelos informações possíveis, conforme os dados disponíveis esparsos em regiões restritas.

Os resultados demonstram que as distribuições espaciais, comprimentos, direções e aberturas das fraturas podem influenciar de maneira importante no comportamento do fluxo subterrâneo e na operação minerária a partir do momento que a lavra avance para regiões não mapeadas estruturalmente.

O modelo DFN é uma primeira tentativa de prever os caminhos preferencias das águas a partir de um mapeamento de campo restrito. Ele se demonstrou eficaz em honrar os dados estatísticos originais de distribuição, tamanho e orientação das fraturas. A partir disso, realizou-se a integração entre o modelo de redes de fraturas discretas e o simulador de fluxo.

Essa integração se mostrou frágil pela falta de dados de campo, como espessura de abertura das fraturas e dados de condutividade hidráulica e transmissividade.

No entanto, a pesquisa conseguiu atingir seu objetivo de avaliar a incerteza de estruturas geológicas sobre o comportamento do fluxo, sendo que

novos modelos podem ser aprimorados com mais dados de campo e, consequentemente, maior confiabilidade nos resultados do simulador de fluxo com a interface DFN.

Capítulo 4 - Aplicação de Redes Neurais Artificiais Para Simulação de Fluxo e Transporte de Contaminantes Sob Incerteza de Condutividade Hidráulica

Resumo:

A incerteza relacionada à variabilidade espacial da condutividade hidráulica (K) é um importante aspecto a ser considerado nas simulações da migração de plumas de contaminantes e, consequentemente no gerenciamento ambiental de áreas contaminadas. A utilização de modelos estocásticos de K em conjunto com a simulação de fluxo e o transporte de contaminantes é frequente em pesquisas para a previsão do comportamento da pluma, bem como para projetos de remediação sob a incerteza deste parâmetro hidrogeológico. No entanto, as técnicas tradicionais de modelagem de fluxo e de contaminantes, como o MODFLOW e o MT3D, baseadas no método de diferenças finitas, normalmente são lentas e exigem bastante esforço computacional. Dessa maneira, esta pesquisa aplicou redes neurais artificias (RNA) em 100 cenários de condutividade hidráulica, realizados por métodos estocásticos, a fim de avaliar a incerteza de K na migração de uma pluma. Além disso, foi possível validar a utilização de RNA como ferramenta de decisão para a estimativa da concentração média de contaminantes nas águas subterrâneas ao longo de três anos de simulação. Com base nos resultados obtidos, foi possível avaliar possíveis técnicas de remediação para a área de pesquisa em função da migração da pluma sob a incerteza da condutividade hidráulica.

Palavras-chave: modelagem matemática, águas subterrâneas, variabilidade espacial, gerenciamento de áreas contaminadas.

Abstract:

The uncertainty related to the spatial variability of hydraulic conductivity (K) is an important aspect to be considered in simulations of contaminant plume migration and, consequently in the environmental management of contaminated areas. The use of stochastic K models with flow simulation and the transport of contaminants is frequent in researches to predict the behavior of the plume as well as to remediation projects under the uncertainty of this hydrogeological parameter. However, traditional flow modeling and contaminant techniques, such as MODFLOW and MT3D, based on the finite difference method, are usually slow and require considerable computational effort. Thus, this research applied artificial neural networks (ANNs) in 100 scenarios of hydraulic conductivity, performed by stochastic methods, in order to evaluate the uncertainty of K in the migration of the plume. In addition, it was possible to validate the use of ANNs as a decision tool for estimating the average concentration of contaminants in groundwater over three years of simulation. Based on the results obtained, it was possible to evaluate remediation techniques for the research area due to the migration of the plume under the uncertainty of the hydraulic conductivity.

Keywords: mathematical modeling, groundwater, spatial variability, environmental management of contaminated areas.

4.1 Introdução

No cadastro de áreas contaminadas do Estado de São Paulo constam 6.110 áreas com problemas de contaminação, sendo que 72% dessas áreas são postos de combustíveis, 19% indústria, 5% comércio, 3% disposição de resíduos e 1% acidentes, agricultura e/ou fonte desconhecida (CETESB, 2018).

A contaminação das águas subterrâneas por meio de vazamentos, derramamentos e/ou despejos de substâncias químicas é considerada como um dos maiores desafios ambientais atualmente, sendo que a incerteza relacionada à variabilidade espacial do parâmetro de condutividade hidráulica (K) é importante para o gerenciamento ambiental de áreas contaminadas (Ahlfeld *et al.* 1988; Johnson e Rogers, 2000; Costanzo e Vidal, 2014).

Ao influenciar o fluxo subterrâneo e o transporte de contaminantes em subsuperfície, a condutividade hidráulica é considerada uma variável relevante para as tomadas de decisões nos processos de investigação, remediação e monitoramento ambiental (Bayer e Finkel, 2007).

A estimativa precisa deste parâmetro hidrogeológico é uma tarefa difícil, uma vez que ele possui alta variabilidade, sendo as maiores incertezas relacionadas à sua distribuição espacial e o impacto na migração das plumas de contaminação (Ranjithan *et al.* 1993).

Dessa forma, o mapeamento dos valores de K, como o estabelecimento das direções de conectividade e continuidade em um aquífero contaminado, é importante para a simulação do fluxo e transporte de contaminantes (Journel e Alabert, 1988). Até mesmo quando a caracterização dessa variável espacial é adequada, obtida por meio de dados de campo, a dificuldade em representar a heterogeneidade espacial permanece, principalmente em função da incerteza associada às áreas não amostradas (Ricciardi *et al.* 2007).

Com isso, a avaliação da incerteza de K em projetos ambientais pode ser realizada a partir de métodos de multicenários, como a abordagem pelo método Monte Carlo (estocástica). Nessa técnica, múltiplas realizações de campos de condutividade são geradas de forma randômica e o simulador de fluxo é aplicado em cada campo de K, sendo os resultados avaliados de forma conjunta no impacto de cada cenário da simulação de fluxo (Liu *et al.* 2004).

Diversos autores já adotaram a abordagem estocástica na tentativa de simular campos de condutividade hidráulica a fim de subsidiar o gerenciamento de aquíferos contaminados, como Costanzo e Vidal (2014); Alberto e Chang (2011); Flach *et al.* (2005); Demirci e Aksoy (2011); Lee *et al.* (2000); Liu *et al.* (2004). Esta abordagem representa realizações de campos de K para simular os possíveis cenários de condutividade e assim avaliar a incerteza deste parâmetro no deslocamento da pluma (Ranjithan *et al.* 1993).

No entanto, nas últimas décadas, como forma de otimizar a aplicação das técnicas estocásticas, o método de redes neurais artificiais (RNA) vem sendo utilizado. A rede neural é um método que possui capacidade de aprendizagem relacionada à extração de regras e padrões do treinamento de grandes conjuntos de dados, com funcionamento inspirado em seres vivos (Vinyals e Le, 2015; Haykin, 1999; Poulton, 2001).

Ranjithan *et al.* (1993) utilizaram RNA para avaliar o impacto da variação espacial de K em um projeto de remediação da pluma por bombeamento e tratamento. Já Rogers e Dowla (1994) aplicaram redes neurais para prever os resultados do fluxo e transporte de contaminantes, bem como para encontrar um projeto de remediação eficiente em relação a custo e tempo.

Os autores Johnson e Rogers (2000) identificaram localizações ideais de poços de bombeamento e de injeção por meio da técnica de redes neurais artificiais. Outras pesquisas também utilizaram RNA em aquíferos contaminados, por exemplo, Maskey *et al.* (2000); Hassan *et al.* (2001); Rao *et al.* (2003); Coppola *et al.* (2003); Samani *et al.* (2007) e; Nikolos *et al.* (2007).

As técnicas de redes neurais artificiais estão em contínua evolução e são aplicadas em diversas áreas de pesquisas. A adoção desta técnica para a área de hidrogeologia permitirá ampliar a velocidade da análise de dados hidrogeológicos, os quais influenciam a tomada de decisão no gerenciamento de aquíferos contaminados.

Portanto, esta pesquisa possui como objetivo principal a aplicação de redes neurais artificiais para a previsão do deslocamento de uma pluma de contaminação frente à incerteza relacionada à condutividade hidráulica (K).

Por meio da utilização de redes neurais espera-se uma maior velocidade na geração dos resultados a fim de subsidiar à tomada de decisão, bem como aprimorar o modelo conceitual hidrogeológico de uma área com problema de contaminação.

4.2 Área de Pesquisa

A área de estudo é a fábrica da Itautec de Jundiaí/SP, a qual está exposta na página 420 do cadastro Áreas em Processo de Remediação no Estado de São Paulo da CETESB (2018). A área apresenta como principal foco de contaminação a presença de metais em águas subterrâneas, havendo indício também em subsolo, provenientes da antiga operação fabril, armazenamento e descarte de insumos e histórico de vazamento. O local vem sendo remediado por bombeamento e tratamento desde abril de 2014. A figura 4.1 contempla a localização da área de pesquisa.



Figura 4.1 – Localização da área de pesquisa (polígono em vermelho)

Foi possível caracterizar a geologia local, de acordo com WALM (2012), da seguinte maneira, da base para o topo da sequência estratigráfica alvo da pesquisa:

- 40 a 30 metros: rocha gnáissica pouco alterada cinza esverdeado e fraturado – Alteração do próprio Complexo Amparo;
- 30 a 0 metros: depósitos sedimentares quaternários relacionados aos processos de erosão e transporte do rio Jundiaí situado a norte da área – Sedimentos Aluvionares do Cenozóico.

A base impermeável do modelo hidrogeológico conceitual da área de pesquisa são rochas granítico/gnáissicos do Complexo Amparo.

Durante as sondagens para a instalação dos poços de monitoramento, foram identificadas diversas litologias relacionadas aos sedimentos quaternários, sendo que estas litologias foram agrupadas em sedimentos argilosos e arenosos, os quais são condicionantes do fluxo subterrâneo local.

4.2.2 Hidrogeologia Local

A área de pesquisa possui profundidade média do nível d'água de 5,26m, mínima de 2,55m e máxima de 7,40m. O valor médio da profundidade do nível d'água está posicionado no intervalo dos sedimentos arenosos e nesta profundidade ocorrem as maiores concentrações da contaminação do aquífero não confinado.

O fluxo subterrâneo realizado através de observações de campo, e que serve como referencia na validação dos modelos de fluxo, possui orientação preferencial de sul para norte, no sentido da zona de descarga local (rio Jundiaí), com pequenas alterações de direção.

Dez ensaios *slug test* foram realizados para a avaliação dos dados de condutividade hidráulica do lençol freático local. Os resultados destes ensaios podem ser visualizados na Tabela 4.1. Estes ensaios foram realizados apenas na cobertura aluvionar da área.

O valor médio de condutividade foi de 2,66 x 10^{-4} m/s, mínimo de 4,12 x 10^{-5} m/s e máximo de 8,32 x 10^{-4} m/s.

Poço	Condutividade (m/s)	Condutividade (m/ano)
PM-19	8,32E-04	262,38
PM-06/15	4,12E-05	12,99
PM-13C	7,07E-05	22,30
PM-13B	2,88E-04	90,82
PMm-19	1,62E-04	51,09
PMm-13C	6,99E-05	22,04
PMm-05	5,50E-04	173,45
PMm-17	3,58E-04	112,90
PMp-05	2,26E-04	71,27
PMp-13C	5,92E-05	18,67

Tabela 4.1 – Ensaios slug test realizados em 10 poços de monitoramento

4.2.3 Pluma de Contaminação

A pluma de contaminação foi delimitada segundo diretrizes da Companhia Ambiental do Estado de São Paulo – CETESB e com base nas concentrações do contaminante ferro dissolvido (Fe⁺²) (Figura 4.2).

Para gerar esta pluma inicial, objeto da simulação de fluxo e transporte de contaminantes, foi elaborada uma malha irregular de 52 x 53 blocos referentes a 430 x 540 m. Em profundidade, a pluma está numa camada de 5 m de espessura considerada como não confinada.

As direções de fluxo da água subterrânea são de sul para norte, por isso foi adotado condições de contorno com células de carga constante nas bordas sul e norte, seguindo as direções de fluxo no local. Na porção a norte do rio Jundiaí as células foram consideradas nulas.

É possível perceber que as maiores concentrações da contaminação (*hot spots*) estão próximas ao PM-09. Para o melhor detalhamento, as células do grid foram refinadas nesta porção do terreno. Além disso, em função desta alta concentração diagnosticada nesta região, maior adensamento de poços foi instalado a jusante deste *hot spot* com o objetivo de delimitar a pluma em direção ao rio Jundiaí.



Figura 4.2 – Pluma de contaminação dissolvida de ferro+2 (µg/L)

4.3 Métodos

Foram realizadas simulações estocásticas para a geração de cem cenários com diferentes distribuições de condutividade hidráulica.

O método sequencial de simulação escolhido foi a simulação gaussiana sequencial (SGS). De acordo com Yamamoto e Landim (2013), a SGS é a aplicação de procedimento de simulação sequencial para funções aleatórias multigaussianas.

Para tal, realiza-se a simulação de N variáveis aleatórias ${Z(x_i), i = 1, N}$ localizados sobre os nós de uma malha regular e condicionadas ao conjunto de n pontos de dados ${z(x_{\alpha}), \alpha = 1, n}$.

Neste algoritmo, um valor aleatório é atribuído a cada célula que não possui dado experimental, definindo uma ordem aleatória para todas as células da malha. Para cada célula, uma função de densidade de probabilidade (fdp) é estipulada com base em um número de dados condicionantes vizinhos (dados iniciais e dados simulados precedentemente). O valor aleatório da fdp é atribuído estabelecendo-se uma continuidade espacial. A figura 4.3 exemplifica três cenários de K gerados com a metodologia proposta no presente trabalho.

Figura 4.3 – Cenários de K gerados para avaliação da incerteza de K no deslocamento da pluma de ferro+2



A partir de 100 cenários de condutividade hidráulica, foram realizadas 30 simulações de fluxo e transporte de contaminantes utilizando-se da técnica tradicional por diferenças finitas (*MODFLOW* e MT3D). Os resultados destas trinta simulações foram utilizados para o treinamento das redes neurais artificiais. Desse modo, basicamente, a pesquisa se divide em cinco etapas metodológicas principais:

- Geração de 100 cenários de condutividade hidráulica por meio de métodos estocásticos (simulação gaussiana sequencial), sendo que quanto maior o número do cenário menor será a grandeza dos valores de K estipulados;
- ii. Simulação de fluxo e transporte de contaminantes por meio do MODFLOW para 30 cenários de K (cenário 1 ao cenário 30);
- iii. Com os resultados da simulação de fluxo, a rede neural foi treinada para predizer os resultados do MODFLOW;
- iv. Simulação de fluxo e transporte de contaminantes por meio de redes neurais artificias para 70 cenários de K (cenário 31 ao cenário 100) para a fase de avaliação;
- v. Avaliação da variabilidade da concentração de ferro em 3 anos do deslocamento da pluma para os 100 cenários modelados.

Para o treinamento da rede neural para a simulação da pluma de contaminação foram utilizados os parâmetros estatísticos dos cenários de K e as concentrações de Fe⁺² nos poços de monitoramento.

A análise da incerteza relacionada à K no deslocamento da pluma de contaminação foi avaliada com base na correlação entre os valores médios dos cenários de condutividade hidráulica e as concentrações dissolvidas (μg/L) de ferro que persistiram na área de pesquisa após três anos de simulação, ou seja, quanto maior o valor médio de K, menos ferro tende a ficar na área e vice e versa.

Os softwares utilizados nesta pesquisa foram: (i) SGEMS (Remy, 2004) para a geração dos 100 cenários de K; (ii) MATLAB e (iii) *MODFLOW* (*U.S GEOLOGICAL SURVEY*, 2011) para a simulação do fluxo e o transporte de contaminantes, todos os softwares foram utilizados em suas versões livres ou possuem licença de uso para a comunidade acadêmica.

4.3.1 Modelo de Fluxo Subterrâneo e de Transporte de Contaminante – *MODFLOW*

O modelo de fluxo subterrâneo e de transporte de contaminantes foi aplicado para o treinamento das redes neurais artificiais, bem como para prever a concentração da pluma de ferro em 3 anos de simulação.

A tabela 4.2 apresenta as principais características do modelo.

Informações utilizadas		Justificativa da informação, caso necessária	
Contaminante considerado	Ferro+2 (µg/L)	-	
Coeficiente de distribuição	0,0	O coeficiente de distribuição para o ferro não é significativo, o que faz com que ele possua alta mobilidade.	
Números de camadas	2 Camada 1 – Topo , Não confinado Camada 2 – Base, Confinado/Não-confinado Transmissividades variadas.	Foram consideradas as litologias predominantes da área, ou seja, areia no topo e argila na base do modelo.	
Número de células	Malha 16 x 20, com distribuição irregular e adensamento na região norte com maior número de poços.	Adensamento da malha na região crítica de contaminação – <i>hot spot</i> .	
Condições de contorno	Carga hidráulica fixa durante a simulação na região sul da área de pesquisa e células nulas na região norte após o rio Jundiaí	Com base no gradiente hidráulico.	
Regime	Transiente	-	
Tempo de simulação	3 anos	-	
Calibração	Valores de nível d'água calculados e observados em campo apresentaram boa correlação	Comparison of Calculated and Observed Heads 694.18	
Porosidade efetiva para a camada superior	4 e 6%	4% para a região de menor porcentagem e 6% para áreas de maior porcentagem de areias, conforme Costanzo & Vidal (2014).	
Porosidade efetiva para a camada	2%	Constante para toda a camada em função do maior volume de sedimentos argilosos	

Tabela 4.2 – Informações utilizadas para o modelo de fluxo e transporte de contaminantes

Informações utilizadas		Justificativa da informação, caso necessária
inferior		(Costanzo & Vidal, 2014).
Fator de retardamento	0,0	Fator de retardamento para o ferro não é significativo, o que faz com que ele possua alta mobilidade.
Coeficiente de decaimento de primeira ordem	Não foi utilizado	-
Concentrações iniciais utilizadas	Dados provenientes da pluma de contaminação delimitada a partir dos resultados das análises realizadas.	-
Cota do fundo e carga hidráulica do rio Jundiaí	Levantamento topográfico	-
Valor de recarga do aquífero estudado	CEPAGRI - precipitação anual para a região da área de estudo (113mm).	-
Evapotranspiração	Considerado nulo	Em função do tamanho da área (relativamente pequena) este parâmetro não foi considerado no modelo.
Condutividade hidráulica k	Cenários de k gerados por técnicas estocásticas – Camada superior – arenosa. Para a camada 2 (base do modelo - argila): 1,0E-06 m/s – horizontal e 1,0E-07 m/s – vertical.	Ensaios tipo <i>slug test</i> de campo.
Porosidade efetiva	4,5%	Média dos valores obtidos por análises de
Densidade aparente	1,36 mg/m ³	laboratório
Densidade seca	1 08 mg/m°	

4.3.2 Redes Neurais Artificiais - RNA

4.3.2.1 Perceptron de Múltiplas Camadas (MLP)

Uma das técnicas mais utilizadas para predição de propriedades contínuas em inteligência artificial é o método Perceptron de Múltiplas Camadas (MLP). A justificativa da ampla contribuição da técnica, especialmente em geociências, é justificada por Poulton (2001) pela sua extensa habilidade e flexibilidade de adaptação para solucionar problemas com dados escassos e de relações complexas, comuns nesta área.

MLP, como outras técnicas de redes neurais, é baseada no aprendizado por repetição ou treinamento. A rede é constituída de neurônios, ou nós, que estão conectados, imitando o funcionamento do cérebro humano (Figura 4.4). Desta forma, as amostras são recebidas pelos nós, como as sinapses atuam nos neurônios. Computacionalmente, esta equivalência é realizada por pesos associados a cada um dos nós.

Tais pesos ponderam a influência das variáveis de cada amostra antes de transformá-las através da função de ativação, também associada a cada um dos nós. Em geral a saída desta transformação é vinculada a um valor constante. Este valor passa posteriormente por uma avaliação que condiciona se este pulso será inibido ou se será enviado para o próximo neurônio ao qual está conectado, chamado de *threshold*, ou limiar.

A rede MLP é formada por três camadas distintas: camada de entrada, camada oculta e camada de saída. Na camada de entrada, os neurônios recebem as amostras de entrada. O treinamento da rede ocorre nas camadas ocultas e o resultado final é representado pela camada de saída.

Na figura abaixo (Figura 4.4) o exemplo simula uma amostra com 3 dimensões, ou 3 variáveis, cujos valores são ponderados por pesos e posteriormente transformados nos neurônios pelas funções de ativação.

Figura 4.4 – Esquema do funcionamento da rede neural MLP. Formado por três camadas distintas (entrada, oculta e saída), a rede neural tem como principal objetivo adaptar os valores de pesos associados aos neurônios a fim de convergir o treinamento aos valores de saída desejados. Desta forma, depois de propagar o sinal de entrada até a camada de saída, os ajustes dos pesos são feitos da camada de saída em direção à camada de entrada



Note que, além do limiar que decidirá se o impulso será propagado, ainda há a adição de uma tendência (bias), representada por uma constante adicionada ao valor de saída da função de ativação. Na camada de saída, os valores limiares resultantes das funções de ativação são comparados e apenas o maior valor é propagado para a camada de saída, em um processo chamado competitivo.

Particularmente na rede neural MLP, o treinamento da rede acontece em duas etapas. Primeiro as amostras são recebidas pelos neurônios e depois acontece o ajuste da rede. Como já explicado, a cada amostra de entrada, a rede gera um resultado de saída. No segundo passo, este valor é comparado com aquele que se deseja predizer, neste caso, valores de Fe⁺², em um processo de treinamento supervisionado.

Durante o treinamento o objetivo principal da rede é adequar os valores de peso da rede a fim de convergir a série de cálculos não lineares às saídas desejadas. Desta forma, o sentido do cálculo de ajuste dos pesos é contrário ao caminho da informação propagada pelas amostras de entrada na rede, pois o início dos cálculos de ajuste acontece a partir da camada de saída em direção à camada de entrada. Por isso este ajuste é conhecido como *back propagation*, ou retropropagação de erros.

Consequentemente, neste estudo, a função de ativação adotada foi a função sigmoide, caracterizada por ser continuamente diferenciável e positiva, garantindo a possibilidade de ter função inversa (ser ajustada) e apresentar resultados que não gerem saltos muito grandes dado um intervalo pequeno de dados de entrada, o que desestabilizaria a rede.

Para avaliação do desempenho da rede, os dados de entrada são divididos em três grupos: treinamento, validação e teste. Os dados de treinamento são utilizados para definir os parâmetros dos pesos, enquanto o conjunto de validação, em geral composto por 10 a 25% das amostras disponíveis, representa uma avaliação não enviesada dos resultados, pois utiliza um segundo conjunto de dados independente do treinamento usado para predição (Zhao *et al.* 2015). Através dos resultados dos dados de validação a arquitetura da rede (número de neurônios em cada camada) pode ser ajustada.

Por fim, utiliza-se o conjunto de dados de teste, que apresenta a mesma probabilidade de distribuição dos dados de treinamento, embora independente

daquele. Este dado auxilia a identificação do *overfitting*, processo em que a rede passa a repetir resultados e perde a capacidade de aprender, ou generalizar os resultados para casos ainda não treinados.

Neste trabalho, o ajuste dos pesos foi aproximado pela função de Levenberg-Marquardt que apresenta bons resultados a um valor computacional menor do que o cálculo de inversão das funções, método matematicamente original. O erro dos ajustes foi medido a partir de valores do erro médio quadrático (MSE), critério usualmente adotado para as redes neurais supervisionadas.

Segundo Zhao *et al.* (2015) e Haykin (1999) os maiores desafios da rede neural são associados a adequada seleção de dados para o treinamento da rede, que deve compor uma gama extensa de possibilidades de valores e ocorrências (também para não serem considerados pontos outliers) e o correto ajuste da rede.

4.4 Resultados e Discussões

4.4.1 Aplicação do MODFLOW - 30 Cenários de K

As simulações de fluxo e do transporte de contaminantes, utilizando-se do *MODFLOW*, foram realizadas para 30 cenários de condutividade hidráulica, atribuindo-se para cada célula um valor de K e sua média estipulada como o valor K médio para cada cenário. A modelagem do fluxo de transporte considerou apenas as componentes de advecção e dispersão, não sendo considerados os processos de adsorção e decaimento. A predição dos valores de Fe⁺² com o método tradicional durou cerca de 1 hora por modelo, sendo necessárias 30 horas para simular todos os modelos. Vale ressaltar, contudo, que o *MODFLOW* gera informações de concentração para cada célula da malha modelada em cada passo de tempo t estipulado (1, 2 e 3 anos).

Com o *MODFLOW* foi possível verificar a correlação esperada, ou seja, quanto maior o valor médio de K de cada cenário, menores as concentrações finais de Fe⁺² dissolvido na área de pesquisa, e logo menor a massa dos contaminantes remanescente, e, consequentemente, maior o aporte da pluma para o rio Jundiaí, conforme pode ser visto na figura 4.5.



Figura 4.5 – Correlação entre valores médios de k e concentrações de Fe em 3 anos - MODFLOW

A concentração de Fe⁺² obtida variou de 570,36 μg/L a 1657,38 μg/L. Para as modelagens realizadas com o *MODFLOW*, a variabilidade encontrada nas concentrações do contaminante na água subterrânea frente aos cenários de condutividade hidráulica influencia de forma significativa a tomada de decisão em relação ao gerenciamento da área contaminada.

O valor mínimo é cerca de 3 vezes menor que o máximo e essa variação pode levar às considerações distintas sobre a utilização das águas subterrâneas, bem como às interpretações diferentes sobre o aporte da contaminação no rio Jundiaí. A figura 4.6 apresenta a variabilidade das concentrações estimadas para cada cenário de K.

O grupo de resultados com as concentrações médias (média aritmética das concentrações da malha) mais elevadas de Fe⁺² (entre 1050 μ g/L e 1660 μ g/L) significa menor aporte de contaminante para o rio, enquanto que os resultados com concentrações médias mais baixas (entre 570 μ g/L e 900 μ g/L) indicam maior aporte da pluma de contaminação à jusante da área de pesquisa.

A maioria dos poços de monitoramento da área possui valores negativos de potencial redox (18 dos 33 poços), característico de ambiente redutor, o que pode indicar pouca perda de massa ao longo do fluxo.



Figura 4.6 – Variação das concentrações de Fe estimadas em função dos cenários de k - MODFLOW

Percebe-se que a variabilidade encontrada nas concentrações de Fe⁺², em 3 anos de simulação, foi significativa e que a mesma é capaz de influenciar tomadas de decisões opostas no gerenciamento da área, referente à concentração máxima remanescente na área de estudo e à relação entre as águas subterrâneas contaminadas e seu possível aporte em corpos hídricos.

4.4.2 Treinamento de RNA Para os 30 Cenários

O conjunto de dados utilizados para o treinamento da rede MLP foi calculado a partir de 30 cenários de K (cenário 1 ao cenário 30), dos quais foram utilizados como variáveis os valores médios, o desvio padrão, e os percentis de 25, 50 e 75%, obtidos dos mapas de K com o propósito de predizer a concentração de Fe⁺².

Para esta aplicação, a configuração da arquitetura da rede foi definida com 5 neurônios na camada oculta, que convergiu em apenas 6 iterações, em menos de 1 segundo, tendo como resultado final a concentração média final do contaminante restante na área de estudo. A correlação entre os valores reais e esperados foi de 92%, valor médio da correlação dos dados utilizados para treinar e validar a técnica (Figura 4.7).

Note que com esta estrutura de rede, os valores de correlação dos dados de treinamento, teste e validação ficaram todos acima de 90%, demonstrando que sua arquitetura está adequada para esta predição.





4.4.3 100 Cenários de K e Possíveis Técnicas de Remediação

A partir do treinamento com MLP, 70 pontos de controle de concentração média do contaminante foram estimados, baseados no mesmo conjunto estatístico de valores de K, para os quais os valores de Fe⁺² eram desconhecidos.

A figura 4.8 apresenta a correlação entre os valores médios dos cenários de condutividade hidráulica e as concentrações médias de Fe⁺² resultantes. Como esperado, a correlação se mantêm e quanto menor os valores médios de condutividade, maiores as concentrações médias que permanecem na área após 3 anos de simulação.

Na figura 4.9 é possível verificar a variabilidade das concentrações médias de Fe⁺² resultantes para os 100 cenários de condutividade gerados na pesquisa. Notam-se dois grupos de resultados: (i) um com valores menores de concentrações (entre 550 μ g/L e 950 μ g/L) e (ii) outro com valores maiores (entre 1350 μ g/L e 1700 μ g/L). O primeiro indica maior aporte de contaminação para o rio Jundiaí, enquanto que o segundo menor migração da pluma para o mesmo em 3 anos de simulação.



Figura 4.8 – Correlação entre valores médios de k e concentrações de Fe em 3 anos – 100 cenários de k



Figura 4.9 – Variação das concentrações de Fe estimadas em função dos 100 cenários de k

A variabilidade dos resultados de Fe dissolvido em função dos cenários de K (Figura 4.9) pode ser considerada alta frente à tomada de decisão no decorrer do gerenciamento ambiental da área contaminada, quer dizer, a depender do uso do solo pretendido para a área, a concentração mínima encontrada de 570,36 μ g/L pode ser avaliada como legal para uso industrial, por exemplo, enquanto a máxima , de 1657, 38 μ g/L, não. Dessa forma, nota-se a influência da variabilidade de K na tomada de decisão para a gestão dos recursos hídricos subterrâneos contaminados.

O grupo (i) indica a necessidade de implantação de uma contenção hidráulica à jusante da pluma para evitar o aporte de contaminação no rio Jundiaí, enquanto que o grupo (ii) indica a necessidade de uma medida de remediação com o objetivo apenas de abater a concentração do contaminante na área *in situ*, sem a obrigação de contenção da pluma, podendo ser um bombeamento e tratamento no centro de maior concentração da contaminação.

A variabilidade na migração da pluma em função dos cenários de condutividade hidráulica é significativa podendo comprometer a tomada de decisão em relação à recuperação ambiental da área.

A pluma de Fe⁺² utilizada nessa pesquisa é apenas um exemplo, podendo ser considerada hipotética, sendo que a variabilidade de K é a principal variável que controla a migração de plumas de contaminação e influencia diretamente o comportamento da contaminação no decorrer do tempo e, consequentemente, na tomada de decisão para o bom gerenciamento ambiental da área.

Cada cenário de K modelado por redes neurais para a migração da pluma em 3 anos de simulação durou um tempo de apenas 2 segundos por cenário de condutividade hidráulica, enquanto que por meio do *MODFLOW* cada simulação levou cerca de 1 hora. Dessa forma, a técnica de RNA para prever o cenário ambiental de uma pluma de contaminantes se mostrou significativamente mais rápida em relação aos métodos tradicionais de simulação de fluxo e transporte de contaminantes.

4.5 Conclusões

A utilização de RNA para a simulação de fluxo e o transporte de contaminantes se mostrou adequada e confiável para a área de pesquisa. As correlações encontradas foram validadas com base nos resultados do treinamento da rede neural a partir das concentrações de Fe⁺² estimadas pelo *MODFLOW*, bem como no conceito hidrogeológico baseado em hidrofácies (Neuman, 1990), o qual relaciona diretamente litologia, condutividade hidráulica e transporte de contaminantes.

Todos os 100 cenários simulados por RNA foram realizados em um total de apenas 2 minutos e 20 segundos para a obtenção das concentrações do contaminante em 3 anos de simulação. O *MODFLOW* demorou 1 hora por cenário de K, ou seja, 30 horas no total para a mesma simulação. Numa situação de maior complexidade, a técnica RNA passa a ser fundamental para subsidiar a tomada de decisão mais rápida.

Os resultados das concentrações do contaminante indicaram tomadas de decisões distintas para o gerenciamento ambiental do local, ratificando a importância da variabilidade de K no comportamento da migração de uma pluma de contaminação, bem como de que modo remediá-la.

A presente pesquisa abordou a utilização de RNA para a previsão da migração de pluma de contaminação, técnica esta, ainda, pouca utilizada no Brasil, tanto na academia como no mercado ambiental.

No entanto, trabalhos futuros podem utilizar RNA para a previsão de técnicas de remediação de maneira quantitativa com a previsão e estimativa de taxas de bombeamento e/ou injeção, bem como de localização ideais de poços para a boa remediação da área otimizando tempo e consequentemente custos.

Capítulo 5 - Conclusões

O presente trabalho utilizou-se de técnicas geoestatísticas (análise de favorabilidade, redes de fraturas discretas e redes neurais artificiais) a fim de subsidiar a tomada de decisão no gerenciamento das águas subterrâneas. Os métodos foram aplicados nos seguintes temas: (i) disponibilidade hídrica; (ii) análise do fluxo subterrâneo em aquífero fraturado e (iii) contaminação dos recursos hídricos subterrâneos.

Para o aquífero Itapecuru na Ilha de São Luís/MA, em região portuária e industrial, foi possível mapear áreas mais favoráveis à exploração das águas subterrâneas a partir do método de favorabilidade, sendo que as porções norte, centro-leste e sudoeste, foram definidas como de maiores potenciais para a instalação de novos poços de captação com capacidade específica mínima de 1,00 m³/h/m.

Apesar das poucas informações provenientes do banco de dados utilizado, a pesquisa sobre o aquífero Itapecuru conseguiu apresentar novas possibilidades de oferta de água para uma região carente deste recurso natural, por meio das variáveis: porcentagem de arenitos, espessura de arenitos e médias das probabilidades de ocorrência de rochas reservatório.

Para a quantificação da incerteza hidrogeológica em uma mina a céu aberto, foi realizada a integração entre o modelo DFN (em inglês, *Discrete Fracture Network*) e o simulador de fluxo por meio do *MODFLOW*.

Essa integração permitiu a análise da incerteza com base nos dados de vazão de escoamento para o fundo de cava ao longo de 10 anos de operação da mina.

Na medida em que a lavra avança sobre regiões estruturais desconhecidas, ou seja, áreas sem o mapeamento das feições estruturais do aquífero fraturado, o risco de desaguamento para o fundo de cava aumenta e, consequentemente, os custos para a drenagem da mina também aumentam.

O trabalho no aquífero fraturado resultou em uma alta variabilidade de vazão de escoamento (m³/h) para o fundo de cava da mina frente às probabilidades de distribuição espacial, comprimentos, direções e aberturas de fraturas (50 modelos DFN) em 10 anos de lavra.

E, dessa forma, conseguiu demonstrar os riscos hidrogeológicos, com base nas vazões de escoamento, associados à falta de informações relacionadas ao mapeamento estrutural da mina.

O Capítulo 4 avaliou a incerteza relacionada à condutividade hidráulica (k) no deslocamento de uma pluma de contaminação em 3 anos de simulação.

Essa incerteza foi avaliada por meio de campos estocásticos de condutividade hidráulica (100 campos) e a simulação de fluxo e do transporte de contaminantes nestes campos utilizando-se de três técnicas: (i) resultado da simulação estocástica para cenários de k; (ii) *MODFLOW* e MT3D e (iii) redes neurais artificias (RNA).

O gerenciamento ambiental da área contaminada pesquisada muda significativamente frente à incerteza de k. Um grupo de resultados indicou a técnica de remediação por contenção hidráulica com o objetivo de conter a migração da pluma no sentido do rio Jundiaí.

Enquanto que o outro grupo de resultados recomendou o método de bombeamento e tratamento no centro de massa da pluma de contaminação a fim de apenas diminuir as concentrações dos contaminantes dentro da área de pesquisa, uma vez que não indicou aporte para o rio Jundiaí.

A técnica de redes neurais artificias se mostrou bem mais rápida que a modelagem por *MODFLOW*, exigindo um esforço computacional significativamente menor que esta última.

Dessa forma, esta ferramenta de análise pode ser incorporada com maior frequência no dia a dia dos consultores ambientais com o objetivo de subsidiar tomadas decisões rápidas no gerenciamento ambiental de áreas contaminadas.

Ademais, a RNA ainda é muito pouco utilizada na área de hidrogeologia no Brasil, sendo bastante aplicada nas pesquisas internacionais relacionadas às contaminações das águas subterrâneas.

Considera-se que as técnicas geoestatísticas e estatísticas utilizadas nesta pesquisa podem ser utilizadas como ferramentas de apoio às tomadas de decisões no gerenciamento dos recursos hídricos subterrâneos com baixo custo financeiro e em curto prazo.

Além disso, em 11 anos trabalhando no mercado de consultoria ambiental e hidrogeológica, é notável a pouca utilização de métodos quantitativos nas áreas de geoestatística e estatística em projetos hidrogeológicos.

Em uma situação com necessidade de tomada de decisão rápida, sem tempo suficiente para aquisição de novos dados de campo, estas técnicas podem ser úteis e contribuir para uma decisão ágil e eficiente frente às incertezas hidrogeológicas.

Capítulo 6 - Referências

Capítulo 1 - Introdução

Ahmed, I., Nazzal, Y., Zaidi, F.K., Al-Arifi, N.S.N., Ghrefat, H., Naeem, M., 2015. Hydrogeological vulnerability and pollution risk mapping of groundwater in the Saq and overlying aquifers using the DRASTIC model and GIS techniques. Environ. Earth Sci. 74 (2), 1303e1318.

Ayer, Joaquim Ernesto Bernardes; Garofalo Danilo Francisco Trovo ;Pereira, Sueli Yoshinaga. Uso de geotecnologias na avaliação da favorabilidade hidrogeológica em aquíferos fraturados. ÁGUAS SUBTERRÂNEAS, v. 31, p. 154, 2017.

Brito, F.; Souza, J. Expansão urbana nas grandes metrópoles: o significado das migrações intrametropolitanas e da mobilidade pendular na reprodução da pobreza. Revista Perspectiva, Fundação Seade, jan. 2006.

Câmara, G., Davis, C., Monteiro, A.M.V. Introdução à Ciência da Geoinformação. São José dos Campos, INPE, 2001 (2a. edição, revista e ampliada).

Demirci, G.; Aksoy, A. Change in optimal pump-and-treat remediation design and cost for different correlation lengths os spatially variable hydraulic conductivity field. Quaterly Journal of Engineering and Hydrogeology, 44, 469-480, The Geological Society of London, 2011.

Deutsch, C. V. Geoestatistical reservoir modeling. New York: Oxford University Press, 2002. 376 p.

Dverstop, B., and J. Andersson, Application of the discrete fracture network concept with filed data: Possibilities of model calibration and validation, Water Resour. Res., 25(3), 540 – 550, 1989.

Gégo, E. L.; M. Hankins, G. S. Johnson. An evaluation of methodologies for generation of stochastic hydraulic conductivity fields in highly heterogeneous aquifers. Stochastic Environmental Research and Risk Assessment 15, 47-64, Springer – Verlag, 2001.

Güler C, Kurt MA, Alpaslan M, Akbulut C. Assessment of the impact of anthropogenic activities on the groundwater hydrology and chemistry in Tarsus coastal plain (Mersin, SE Turkey) using fuzzy clustering, multivariate statistics and GIS techniques. J Hydrol 2012;414–415:435–51.

Isaaks, E. H.; Srivastava, R. M. Applied Geostatistics. Oxford University Press, 561p, 1989.

Jiang, X. W., L. Wan, X. S. Wang, S. H. Liang, and B. X. Hu (2009), Estimation of fracture normal stiffness using a transmissivity-depth correlation, Int. J. Rock Mech. Min. Sci., 46, 51 – 58, doi:10.1016/j.ijrmms.2008.03.007.

Journel, A.G. The Place of Non-parametric geostatistics. In: G. Verly et al. (Ed.). Geostatistics for Natural Resources Characterization, Part I. D. Reidel Publishing Co., Dordrecht, 307-335,1984.

Kolsi, S.H., Bouri, S., Hachicha, W., Dhia, H.B., 2013. Implementation and evaluation of multivariate analysis for groundwater hydrochemistry assessment in arid environments: a case study of Hajeb Elyoun–Jelma, Central Tunisia. Environ. Earth Sci. 70 (5), 2215–2224.

Lei, Q., Latham, J.-P., Tsang, C.-F., 2017a. The use of discrete fracture networks for modelling coupled geomechanical and hydrological behaviour of fractured rocks. Comput. Geotech. 85, 151 – 176.

Madrucci et al., 2008. Groundwater favorability map using GIS multicriteria data analysis on crystalline terrain, Sa^o Paulo State, Brazil. Journal of Hydrology (2008) 357, 153–173.

Matiatos, I., Alexopoulos, A., Ath, G., 2014. Multivariate statistical analysis of the hydrogeochemical and isotopic composition of the groundwater resources in northeastern Peloponnesus (Greece). Sci. Total Environ. 476–477, 577–590.

Niedzielski Andrea, Francisco Augusto Análise da Favorabilidade hidrogeológica do Aqüífero Multicamada Taubaté na Região Sudoeste da Bacia Homônima/Francisco Augusto de Souza Niedzielski Machado Andrea. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013. XIII, 91 p.: il.; 29,7 cm.

N. Pendock & V. Nedeljkovic (1997) Integrating geophysical data sets using probabilistic methods, International Journal of Remote Sensing, 18:7, 1627-1635, DOI: 10.1080/014311697218331

Pinto M. R., Farias C. A. S.; Martins E. S. P. R., Castro M. A. H., Redes Neurais Artificias e Algoritmos Evolucionários Multi-População na Otimização Multi-Objetivo da Remediação de Águas Subterrâneas. Águas Subterrâneas (2014) 28(1): 95-104.

Qin, R.,Wu, Y., Xu, Z., Xie, D., Zhang, C., 2013. Assessing the impact of natural and anthropogenic activities on groundwater quality in coastal alluvial aquifers of the lower Liaohe River Plain, NE China. Appl. Geochem. 31, 142–158.
Remy, N., Boucher, A. Wu, J. 2004. Applied Geostatistics with SGeMS. Cambridge University Press. 264p.

Reis, Alan, 1992- Desenvolvimento da ferramenta computacional Fratcond, para modelagem de aquíferos fraturados, utilizando redes de fraturas discretas e condutos equivalentes / Alan Reis. - 2018. 220 f. : il.

Sanchez-Martoz F, Jime´nez ER, Pulido BA (2001) Mapping groundwater quality variables using PCA and geostatistics: a case study of Bajo Andarax, southeastern Spain. Hydrol Sci J 46(2): 227–242

Sharp Jr., J. M. 1993 – Fractured aquifers/reservoirs: approaches, problems and apportunities. Memoires of the XXIV Congress of IAH. Oslo, 23-38.

Sophiya e Syed. 2013. Assessment of vulnerability to seawater intrusion and potential remediation measures for coastal aquifers: a case study from eastern India. Environ Earth Sci (2013) 70:1197–1209.

S. Ranjithan and J. W. Eheart. 1993. Neural Network-Based Screening for Groundwater Reclamation Under Uncertainty. Water Resources Research, Vol. 29, N^o. 3, Pages 563-574.

Vidal, A.C.; Rostirolla, S.P.; Chang, C.H.; Martini, M.L., 2006, Estudo da Relação Entre Lineamentos Estruturais e a Exploração de Água Subterrânea por Meio da Análise de Favorabilidade. Revista Águas Subterrâneas, v.20, n.2, p.27-38.

Capítulo 2 - Análise de Favorabilidade para Exploração de Água Subterrânea em Aquífero Costeiro, Estado do Maranhão

Água subterrâneas / Allan R. Freeze, John A. Cherry; tradução de Everton de Oliveira [et al.]; Everton de Oliveira (Coord.). – São Paulo (SP): Everton de Oliveira, 2017. 698 p.: il; 30cm.

Almeida, F.F.M. 1967. Origem e evolução da Plataforma Brasileira. Rio de Janeiro: DNPM/DGM.Boletim, 241.

Almeida, F.F.M.; Brito Neves, B.B. de; Fuck, R.A. Províncias estruturais brasileiras. In: SIMPÓSIO DE GEOLOGIA DO NORDESTE, 8, 1977, Campina Grande. Atas. Campina Grande: SBG, 1977. 499 p. il. (Boletim do Núcleo Nordeste da SBG, 6, p. 363-391). Araújo C.C. & Macedo, A.B. 2002. Multicriteria geologic data analysis for mineral favorability mapping: application to a metal sulphide mineralized area Ribeira Valley Metallogenic Province, Brazil. Nat. Res. Research, 11:29-43.

Bonham-Carter, G. F. 1994. Geographic Information Systems for Geoscientists – Modelling with GIS. Computer Methods in the Geosciences, Vol. 13. 1° edition, Canada, Pegamon Press, 398p.

CPRM (1994) Programa Levantamentos Geológicos Básicos do Brasil – São Luís (Folha AS.23-Z-A), Cururupu (Folha AS.23-X-C), estado do maranhão, Escala 1:250.000. Programa Grande Carajás, Brasília. 185pp + apêndices.

Darnault, C.J.G., and I.G. Godinez, 2008. Coastal aquifers and saltwater intrusion. In Overexploitation and Contamination of Shared Groundwater Resources, 185–201. Springer Science+Business Media B.V.

Felgueiras C.A, Druck S., Monteiro A.M.V. 2002. Análise espacial de superfícies: o enfoque da geoestatística por indicação. Ministério da ciência e tecnologia/ INPE, 25p.

Goovaerts P. 1997. Geostatistics for natural resources evaluation. Oxford University Press, 483 pp.

Harris, D.V., Zurcher, L., Stanley, M., Marlow, J., Pan, G., 2003. A comparative analysis of favorability mappings by weights of evidence, probabilistic neural networks, discriminant analysis and logistic regression. Natural Resources Research 12 (4), 241e255.

Hirata, R. et al. Água Subterrânea: reserva estratégica ou emergencial. In Bicudo, C. E. M. et al. (orgs.). Águas no Brasil: Análises estratégicas. Academia Brasileira de Ciência, São Paulo. 2010. p. 149-161.

Journel, A.G. The Place of Non-parametric geostatistics. In: G. Verly et al. (Ed.). Geostatistics for Natural Resources Characterization, Part I. D. Reidel Publishing Co., Dordrecht, 307-335,1984.

Lee, S., Kim, Y.S., Oh, H.J., 2012. Application of a weights-of-evidence method and GIS to regional groundwater productivity potential mapping. J. Environ. Manage. 96 (1), 91–105.

Liu Chen-Wuing; Jang Cheng-Shin; Liao Chung-Min. Evaluation of arsenic contamination potential using indicator kriging in the Yun-Lin aquifer (Taiwan). Science of the Environment 321, 173-188, 2004.

Madrucci, V. Prospecção de água subterrânea em terreno cristalino utilizando-se análise integrada de dados de sensoriamento remoto, geofísicos e técnicas de geoprocessamento, região de Lindóia, SP. São Paulo, 2004. Tese. Instituto de Geociências - USP.

Madrucci et al., 2008. Groundwater favorability map using GIS multicriteria data analysis on crystalline terrain, São Paulo State, Brazil. Journal of Hydrology (2008) 357, 153–173.

Michel Moreaux and Arnaud Reynaud. 2006. Urban freshwater needs and spatial cost externalities for coastal aquifers: A theoretical approach. Regional Science and Urban Economics, 2006, vol. 36, issue 2, 163-186.

Post, V. e Abarca, E. Preface: Saltwater and fresh water interactions in coastal aquifers. Hydrogeology Journal, v.18, n.1, p.1-4, Dez. 2009.

Raines, G.L., 1999. Evaluation of weights of evidence to predict epithermal-gold deposits in the Great basin of the Western United States. Natural Resources Research 8 (4), 257e276.

Rostirolla, S. P. 1996. Avaliação de favorabilidade em exploração: um enfoque metodológico. Tese de Doutoramento IGCE/UNESP. Rio Claro 164p.

Rostirolla, S. P. 1997. Alguns aspectos da avaliação de favorabilidade em geologia exploratória. Ver.Brás. Geoc., 27(4): 327-338.

Santos & Leal, 2013. Gerenciamento de Recursos Hídricos no Estado do Maranhão – Brasil. Observatorium: Revista Eletrônica de Geografia, v.5, n.13, p. 39-65, jun. 2013.

Teixeira, S. G.; Souza Filho, P. W. M. (2009) - Mapeamento de ambientes costeiros tropicais (Golfão Maranhense, Brasil) utilizando imagens de sensores remotos orbitais. Revista Brasileira de Geofísica, 27: 69-82.

Vidal, A. C. 2002. Estudo hidrogeológico do Aqüífero Tubarão na área de afloramento da porção central do Estado de São Paulo. Tese de Doutoramento IGCE/UNESP. Rio Claro-SP 109p.

Vidal, A.C.; Rostirolla, S.P.; Chang, C.H.; Martini, M.L., 2006, Estudo da Relação Entre Lineamentos Estruturais e a Exploração de Água Subterrânea por Meio da Análise de Favorabilidade. Revista Águas Subterrâneas, v.20, n.2, p.27-38.

Capítulo 3 - Integração de Redes de Fraturas Discretas e Simulador de Fluxo Para Quantificação da Incerteza Hidrogeológica

Andersson, J. and Dverstorp, B., Conditional simulations of fluid flow in threedimensional networks of discrete fractures. Water Resources Research, 1987;23(10):1876–1886.

Berkowitz, B., Characterizing flow and transport in fractured geological media: A review. Advances in Water Resources, 2002;25(8–12):861–884.

Bour, O. and Davy, P., Clustering and size distributions of fault patterns: Theory and measurements. Geophysical Research Letters, 1999;26:2001–4.

Cacas, M. C., Ledoux, E., de Marsily, G., Tille, B., Barbreau, A., Durand, E., Feuga, B. and Peaudecerf, P. Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network: Calibration and validation. I. The flow model. Water Resources Research, 1990;26(3):47 489.

Deutsch, C. V. Geoestatistical reservoir modeling. New York: Oxford University Press, 2002. 376 p.

Freeze, R.A. and Cherry, J.A., 1979. Groundwater. Prentice-Hall, 604 p.

Heath, R C. 1983. Basic ground-water hydrology. Water Supply Paper. U.S. Geological Survey.

Inmet – Instituto Nacional de Meteorologia. Dados Meteorológicos – Estação Meteorológica de Observação de Superfície Convencional. Disponívelemhttp://www.inmet.gov.br/portal/index.php?r=estacoes/estacoesConvenc ionais, acessado em junho de 2015.

Keller AA, Roberts PV, Blunt MJ (1999) Effect of fracture aperture variations on the dispersion of contaminants. Water Resour Res 35(1):55–63.

Le Borgne, T., O. Bour, F. L. Paillet, and J. P. Caudal (2006), Assessment of preferential flow path connectivity, and hydraulic properties at singleborehole and cross-borehole scales in a fractured aquifer, J. Hydrol. Amsterdam, 328(1–2), 347–359, doi:10.1016/j.jhydrol.2005.12.029.

Lei, Q., Latham, J.-P., Tsang, C.-F., 2017a. The use of discrete fracture networks for modelling coupled geomechanical and hydrological behaviour of fractured rocks. Comput. Geotech. 85, 151 – 176.

Long, J. C. S., Remer, J. S., Wilson, C. R. and Witherspoon, P.A., Porous media equivalents For networks of discontinuous fractures. Water Resources research, 1982;18(3):645–658.

Long, J. C. S. and Billaux, D. M., From field data to fracture network modeling: An example incorporating spatial structure. Water Resources Research, 1987;23(7):1201–1216.

Moreno L., Tsang, Y. W., Tsang, C.-F., Hale, F. V. and Neretnieks, I., Flow and tracer transport in a single fracture: A stochastic model and its relation to some field observations. Water Resources Research 1988;24(12):2033–2048.

Niemi A, Kontio K, Kuusela-Lahtinen A. Hydraulic characterization and upscaling of fracture networks based on multi-scale well test data. Water Resour Res 2000;36(12):3481–98.

Odling, N. E., Gillespie, P. A., Bourgine, B., Castaing, C., Chile's, J. P. and Christiansen, N. P., Variations in fracture system geometry and their implications for fluid flow in fractured hydrocarbon reservoirs. Petroleum Geoscience, 1999;5:373–384.

Pardo-Iguzquiza, Eulogio; Dowd, Peter Alan; Baltuille, J. M.; Chica-Olmo, M. Geostatistical modelling of a coal seam for resource risk assessment International Journal of Coal Geology, 2013; 112:134-140.

Pires, A. C. A gagarinita e fases associadas no Granito Madeira (Pitinga, Amazonas). Dissertação de Metrado da UFRGS. Porto Alegre, 2005.

Reis, A.; Alamy Filho, J. E. Desenvolvimento de um gerador estocástico de fraturas para modelagem de aquíferos fraturados – módulo I da ferramenta Fratcond. Águas Subterrâneas, v. 32, n. 2, p. 181-190, 2018.

R. Dimitrakopoulos and Li, S. (2000). Conditional simulation of faults and uncertainty assessment in longwall coal mining. In: W J Kleingeld and D G Krige, 6th International Geostatistics Congress Proceedings. 6th International Geostatistics Congress, Cape Town, South Africa, (1-12). 10-14, April, 2000.

Robinson, P. C., Connectivity, flow and transport in network models of fractured media. Ph.D. Thesis, St. Catherine's College, Oxford University, UK, 1984.

Srivastava, R. Mohan. "Geostatistics: a toolkit for data analysis, spatial prediction and risk management in the coal industry."International Journal of Coal Geology 112 (2013): 2-13.

Sun H Q, Bao Si-yuan, Li Lin, Liao Tai-ping. Predicting coal mining faults using combined rock relationships. Mining Science and Technology, 2009. 0745–0749.

Tsang, Y. W., Tsang, C.-F., Neretnieks, I. and Moreno, L., Flow and tracer transport in fractured media: A variable aperture channel model and its properties. Water Resources Research, 1988;24(12): 2049–2060.

U.S. Geological Survey, Office of Groundwater. Status os *MODFLOW* Versions and *MODFLOW*-Related Programs Available on USGS Web Pages. Janeiro de 2011. Disponível em: http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/modflow-status- 2011Jan.pdf.

Vedana, L. A. Balanço geoquímico de massa entre as fácies do Granito Madeira – Pitinga (AM). Dissertação de Metrado da UFRGS. Porto Alegre, 2010.

Yu, Q., Tanaka, M. and Ohnishi, Y., An inverse method for the model of water flow in discrete fracture network. Proc. of 34th Japan National Conf. on Geotechnical Engineering, Tokyo. pp. 1303–1304, 1999.

Zimmerman, R. W. and Bodvarsson, G. S., Effective transmissivity of twodimensional fracture networks. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and Geomechanics Abstracts, 1996;33(4):433–436.

Capítulo 4 - Aplicação de Redes Neurais Artificiais Para Simulação de Fluxo e Transporte de Contaminantes Sob Incerteza de K

Ahlfeld, D.P., Mulvey, J.M., and Pinder G.F., Contaminated Groundwater Remediation Design Using Simulation, Optimization, and Sensitivity Theory 2, Analysis of a Field Site, Water Resources Research, Vol. 24, N^o 3, 443-452p. 1988.

Alberto, C.M; Chang, H.K. Os Desafios da Remediação por Bombeamento e Tratamento em Domínios Geológicos Complexos: O Uso de Modelos Estocásticos Para Auxiliar na Determinação da Zona de Captura. Águas Subterrâneas, v.25, n.1, p.121-142, 2011.

Bayer, P., and Finkel, M., Optimization of concentration control by evolution strategies: Formulation, application, and assessment of remedial solutions. Water Resources Research, Vol. 43, W02410. 2007.

CETESB – Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. Texto explicativo. Relação de áreas contaminadas e reabilitadas no Estado de São Paulo. 2018.

Chen-Wuing, L., Jang Cheng-Shin, J., Chung-Min, L., Evaluation of arsenic contamination potential using indicator kriging in the Yun-Lin aquifer (Taiwan), Science of the Environment 321, 173-188p. 2004.

Coppola, E., Szidarovszky, F., Poulton, M., and Charles, E., Artificial neural network approach for predicting transient water levels in a multilayered groundwater system under variable state, pumping, and climate conditions. Journal of Hydrologic Engineering 8, Nº 6, 348–359p. 2003.

Costanzo e Vidal, Análise de Incerteza de Cenários de Bombeamento e Tratamento em Áreas Contaminadas. Águas Subterrâneas 29(1). 13-29p. 2014.

Flach, G. P, Harris, M. K., Smits, A. D, Syms, F.H. Modeling aquifer heterogeneity using cone penetration testing data and stochastic upscaling methods. The American Association of Petroleum Geologists/Division of Environmental Geosciences. Environmental Geosciences, V.12, Nº 1, PP. 1-15, 2005.

Gorelick, S. M., Sensitivity analysis of optimal groundwater contaminant capture curves: spatial variability and robust solutions, paper presented at the Conference and Exposition: Solving Groundwater Problems with Models, Natl. Water Well Assoc., Denver, Colo., Feb. 10-12, 1987.

Gungor-Demirci, G.; Aksoy, A. Change in optimal pump-and-treat remediation design and cost for different correlation lengths os spatially variable hydraulic conductivity field. Quaterly Journal of Engineering and Hydrogeology, 44, 469-480, The Geological Society of London, 2011.

Hassan, A.E., Pohlmann, K.F., and Champan, J.B., Uncertainty analysis of radionuclide transport in a fractured coastal aquifer with geothermal effects. Transport in Porous Media 43, 107–136p. 2001.

Haykin, S.: Neural Networks: a comprehensive foundation (2^e Eds), Bookman, McMaster University, Hamilton, Ontario, Canada, 900p. 2008.

Haykin, S., Neural Networks (2) Prentice Hall. Virginia, USA, 842p. 1999.

Johnson, V.M., and Rogers, L.L., Accuracy of Neural Network Approximators in Simulation Optimization, J of Water Res. Planning & Mgt., ASCE, Vol. 126, Nº 2, 48-56p. 2000.

Journel, A.G.; Alabert, F.G., Focusing on spatial connectivity of extreme-valued attributes: Stochastic indicator models of reservoir heterogeneities. SPE Paper N^o 18324 presented at the 63rd Annual Technical Conference and Exhibition of the Society of Petroleum Engineers. Houston, TX, 1988.

Lee, M.K.; Saunders, J.A; Wolf, L.W. Effects of geologic heterogeneities on pumpand-treat and in situ bioremediation: A stochastic analysis. Environmental Engineering Science, 17, 183–189, 2000. Liu Chen-Wuing; Jang Cheng-Shin; Liao Chung-Min. Evaluation of arsenic contamination potential using indicator kriging in the Yun-Lin aquifer (Taiwan). Science of the Environment 321, 173-188, 2004.

Maskey, S., Dibike, Y.B., Jonoski, A., and Solomatine, D.P., Groundwater model approximation with artificial neural network for selecting optimal pumping strategy for plume removal, in AI Methods in Civil Engineering Applications, edited by O. Schleider and A. Zijderveld, 67 – 80p, Cottbus. 2000.

Massmann, J., and Freeze, R.A., Groundwater Contamination from Waste Management Sites: The Interaction between Risk-Based Engineering Design and Regulatory Policy, 1, Methodology, Water Resources Research, Vol.32, Nº 2, 351-367p. 1987a.

Massmann, J., and Freeze, R.A., Groundwater Contamination from Waste Management Sites: The Interaction between Risk-Based Engineering Design and Regulatory Policy, 2, Results", Water Resources Research, Vol.32, Nº 2, 368-380p. 1987b.

Meyer, P.D. and Brill, E.D., A Method for Locating Wells in a Groundwater Monitoring Network Under Conditions of Uncertainty, Water Resources Research, Vol. 24, N^o 8, 1277-1282p. 1988.

Morgan, D.R., Decision making under uncertainty using a new chance constrain programming technique: A groundwater reclamation application Ph.D. dissertation Dep. of Civ. Eng., Univ. of III. at Urbana-Champaign. 1990.

Neuman, S.P. Universal scaling of hydraulic conductivities and dispersivities in geological media, Water Resour. Res., 26(8): 1749-1758p. 1990.

Nikolos, I.K., Stergiadi, M., Papadopoulou, M.P., Karatzas, G.P., Artificial neural networks an alternative approach to groundwater numerical modeling and environmental design. Hydrol Process; 22(17): 3337–48p. 2007.

Poulton, M.M., Multi-Layer Perceptrons and Back-Propagation Learning. Handbook of Geophysical Exploration, Seismic Exploration, Vol. 30, 27-53p. Computational Neural Networks for Geophysical Data Processing. Pergamon, Tucson, USA. 2001.

Ranjithan, S., and Eheart, J.W., Neural Network-Based Screening for Groundwater Reclamation Under Uncertainty. Water Resources Research, Vol. 29, Nº. 3, 563-574p. 1993.

Rahman, M.R., Eheart, J.W., and Valocchi, A.J., Aquifer remediation design under parameter uncertainty, paper presented at the Spring Meeting, AGU, Baltimore. 1990.

Rao, S., Handaveswara, B.S., Bhallamudi, S.M., Srivivasulu, V., Optimal groundwater management in deltaic regions using simulated annealing and neural networks Water Resour. Manage., 17, 409-428p. 2003.

Remy, N., Boucher, A., Wu, J., Applied Geostatistics with SGeMS, Cambridge University Press, 264p. 2004.

Ricciardi, K.L.; Pinder, G.F.; Karatzas, G.P. Efficient groundwater remediation system design subject to uncertainty using robust optimization. Journal of Water Resources Planning Management, ASCE, 133, 253–263p. 2007.

Rogers, L.L., and Dowla, F.U., Optimization of Groundwater Remediation Using Artificial Neural Networks With Parallel Solute Transport Modeling, Water Res. Research, Vol. 30, Nº2, 457-481p. 1994

Samani, M., Gohri-Moghadam, M., Safavi, A.A., A simple neural network model for the determination of aquifer parameters. Journal Hydrology 340 (1-2), 1-11p. 2007.

USGS - United States Geological Survey, Office of Groundwater: Status of MODFLOW Versions and MODFLOW-Related Programs Available on USGS Web Pages. Disponível em: http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/modflow-status-2011Jan.pdf. 2011.

Vinyals, O., and Le, Q.V., A neural conversational model. In: 31st International Conference on Machine Learning, Lille, France. JMLR: W&CP, vol. 37. 2015.

Wagner, B.J., and Gorelick S.M., Optimal groundwater quality management under parameter uncertainty, Water Resources Research, Vol.23, Nº.7, 1162-1174p. 1987.

Wagner, B.J., and Gorelick, S. M., Reliable aquifer remediation in the presence of spatially variable hydraulic conductivity: from data to design, Water Resour. Res., 25(10), 2211-2226p. 1989.

WALM Engenharia e Tecnologia Ambiental, Investigação Ambiental Detalhada da Fábrica da Itautec. 2012.

Yamamoto, J.K., Landim, P.M. B., Geoestatística: conceitos + aplicações. São Paulo: Oficina de Textos. 2013.

Zhao T., Jayaram V., Roy A., Marfurt K.J., A comparison of classification techniques for seismic facies recognition. Interpretation, v.3, 4. SAE29-SAE58. 2015.

ANEXOS

ANEXO 01

PERFIS DOS POÇOS UTILIZADOS NO CAPÍTULO 2



LOCAL : São Luis - MA COORDENADAS: S: 02° 33' 21,9" W: 44° 21' 29,6" Sigla: MNA-10 Data: Dezembro/2009 Descrição Litologica Revest. Prof. (m) Tampa do poço Laje de proteção + Tubo de ferro 5" (1,50m) 2.00 Arenito muito fino, siltico, roseo 4,00 Arenito muito fino, siltico, creme 8,00 Arenito muito fino, siltico, roseo 10,00 12,00 Siltito argiloso, amarelado 16,00 Argilito amarelado 19,00 Argilito marron-esverdeado 21,00 Arenito muito fino, amarelado 22,00 Argilito marron-esverdeado 25,00 Argilito arroxoado 30,00 Argilito siltoso, amarronzado 33,00 Siltito argiloso-arenoso, amarronzado 37,00 Siltito argilo-arenoso creme-amarronzado 48,00 ALCONKS Siltito arenoso-argiloso, cinza-amarronzado 51,00 Argilito cinza 54,00 56,00 Argilito siltoso, cinza. 60.00 LEGENDA DADOS HIDRÁULICOS Nível Estático : 10,50 m Nível Dinâmico : 0,00 m Vazão : 0,00m³/h 🛄 Cimentação Tubos de PVC geomecánico DN 60 S 2" Filtro de PVC geomecânico DN 60 S 2*, ranhura 0,75mm Selamento de aquifero



122





E	PERFIL·LITOLÓGICO·E·CONSTRUTIVO· DO·POÇO·P01a																	
E	PERFIL·DO·POÇOα								RFIL·DO·POÇOα PROF.·¶ (m)¤		PERFIL· LITOL.¤	CÓDIGO	DESCRIÇÃO: LITOLÓGICO					
c	a I	C	<u>с</u> 3	c r	1	3	3	c 3	a	c	c	c	r	a	0 ¤	α	α	0,002,00-solo <u>areno</u> -argiloso, <u>avermelhado</u> ¤
O	۵	Ø	0	0 0	1	2 3	2 3	0	2	Q	Q	Ø	0	0	o	0.—2.m¤	a	2,00 10,00-arenito argiloso, fino, vermelhoa
Ø	۵	Ø	0	2 2	1	2 3	2 3	0	2	0	Q	Ø	0	0	o	۵	۵	10,00 14.00-arenito argiloso, grosseiro, verm.
o	۵	Ø	a s	2 0	3	2 3	2 3	0	α	Ø	Ø	Ø	0	0	o	۵	Tubo Liso	α
Ø	۵	Ø	0 3	2 0	3	2 3	2 3	0	2	۵	Ø	Ø	0	0	o	۵	٥	14,0032,00-argilito,ocre¤
Ø	۵	Ø	03	2 0	3	2 3	2 3	0	α	Ø	Ø	Ø	0	Ø	54¤	۵	۵	2
Ø	۵	Ø						(α	Ø	Ø	Ø	0	Ø	o	۵	Filtro	32,0058,00-argilito arenoso, fino, vermelho
Ø	۵	D	20	2		B		Č (Q	Ø	Q	Ø	0	Ø	57¤	۵	a	<u>α</u>
Ø	۵	Ø	0	2 0	C	2 3	2 3	0	Q	Q	Q	Ø	0	Ø	o	۵	Tubo Lisoo	58,0074,00-arenito, mal selecionado, vermino
Q	۵	Ø	Q 3	2 0	3	2 3	2 3	0	Q	٥	Ø	Ø	0	Q	62¤	Fm.¤	Filtro	٥
Q	۵	Ø	80			8		1	Q	Q	Q	Ø	0	0	Q	۵	۵	٥
Q	۵		80					1	2	۵	Ø	۵	0	0	66 0	۵	٥	74,0078,00-argilito arenoso, avermelhado¤
Q	۵	Ø	03	2 0	3	2 3	2 3	0	α	Q	Ø	Ø	0	Ø	o	Itapecuru	۵	2
Ø	۵	Ø	Q 3	2 0	3	2 3	2 3	0	Q	Ø	Ø	Ø	0	Q	o	۵	Tubo Lisoo	0
Q	۵	Ø	α 3	2 0	3	2 3	2 3	0	Q	٥	Ø	Ø	0	0	90 0	۵	۵	٥
Q	۵	D	8			\$3	8	1	α	۵	Ø	Ø	0	0	o	۵	Filtro	٥
Ø	۵	D	ê D					8	α	Ø	Ø	Ø	0	Ø	94¤	۵	۵	٥
Ø	۵	Ø	a s	2 0	1	2 3	2 3	0	α	Ø	Ø	Ø	0	Ø	o	۵	Tubo Lisoo	78,0086,00-arenitosiltoso, cinza¤
Q	۵	Ø	Q 3	2 0	3	2 3	2 3	0	Q	٥	Ø	۵	0	Q	98a	۵	۵	ß
Q	۵	D	2	8				1	α	Ø	Ø	Ø	0	0	o	۵	Filtro	٥
Q	۵	Ø						(0	Ø	Ø	Ø	0	Q	102¤	۵	٥	٥
Q	۵	Ø	03	2 0	1	2 3	2 3	0 0	Q	۵	Q	Ø	0	0	Q	۵	Tubo Lisoo	٥
Q	۵	Ø	Q 3	2 0	3	2 3	2 3	0	0	Ø	Ø	Ø	0	Q	114¤	۵	٥	86,00116,00-arenito silte-argiloso, conza¤
Ø	Q	Ø	80					8	Q	Q	Ø	Ø	0	Q	Q	۵	Filtro	٥
Q	۵	Ø						2	Q	Ø	Q	Ø	0	Q	122º	۵	a	٥
Ø	Q	Ø	03	2 0	3	2 3	2 3	0	Q	Ø	Ø	Ø	0	Q	Q	۵	0	٥
Ø	۵	Ø	Q 3	2 10	3	2 3	2 3	0	Q	Ø	Q	0	0	Q	۵	۵	Tubo Lisoo	٥
Q	Q	Ø	α 3	2 10	3	2 3	2 3	0	Q	Q	Q	0	0	Q	127,70¤	۵	٥	0
	1		-		1										-	-	-	



	PERFIL·LITOLÓGICO·E·CONSTRUTIVO· DO·POCO·-·Tudya									
• P	ERFIL	·DO·	POÇ	Ö	x		PROF. ¶ (m)¤	PERFIL· LITOL.¤	CÓDIGO o	DESCRIÇÃO: LITOLÓGICO
ααρα	αααρ	x a	a a	z	z	α	c 0¤	۵	۵	0,00~-2,00-solo areno-argiloso, avermelhado¤
ααα	ααασ	χα	α	c	z	α	٥	Solo-2·m¤	۵	a a a a a a a a a a a a a a a a a a a
ααα	αααο	z z	x a	c	z	χα	٥	٥	۵	2,00~10,00 arenito argiloso, fino, vermelho¤
ααα	αααο	x x	x a	r	z	χα	٥	٥	۵	10
ααα	αααο	z z	מ מ	x	z	χα	٥	٥	Tubo¤	10,00~14.00 arenito argiloso, grosseiro, verm.¤
ααα	αααο	x x	x a	n	z	χα	٥	٥	Liso¤	2
ααα	αααο	x x	x a	c	z	α	٥	٥	۵	14,00~-32,00 argilito, ocre¤
ααα	αααο	x x	α	C C	z	χα	٥	٥	۵	a
ααα	αααο	n n	α	p	z	α	٥	۵	۵	32,00~58,00 argilito arenoso, fino, <u>vermelho</u> ¤
ααα	αααο	n a	n a	D	z	α	٥	٥	۵	æ
ααα	αααο	n n	מ מ	x	z	χα	3 9 0	٥	۵	a
ααα	c a s s			r	z	χα	٥	Fm.0	۵	a
ααα				r	z	α	٥	٥	۵	¤
ααα	d a a a			r	z	α	٥	Itapecuruo	۵	a
ααα				D	z	Ŋ	۵	۵	۵	58,00~74,00 arenito, mal selecionado, vermelho
ααα	d 🗖 🖬 🛛			C	z	α	۵	۵	۵	α
ααα				r	z	α	٥	۵	۵	74,00~78,00 argilito arenoso, avermelhado a
ααα				r	z	χα	٥	٥	Filtro	¤
ααα	delete			r	z	α	٥	٥	۵	a
ααα	duna			r	z	α	۵	٥	۵	78,00-86,00 arenito <u>siltoso, cinza</u> ¤
ααα	d a a a			r	z	α	۵	۵	۵	a
ααα				c	z	α	٥	٥	۵	a
ααα	dela			r	z	χα	٥	٥	۵	86,00 - 116,00 arenito <u>silte</u> -argiloso, <u>conza</u> ¤
ααα	duar			r	z	α	٥	٥	۵	a
ααα	c a a a			c	z:	Ŋ	۵	۵	۵	116,00 - 130,00 arenito argiloso, cinza¤
ααα				C	z c	D X	٥	۵	۵	a
ααα				r	z	Ø	۵	۵	۵	130,00~142,00 arenito siltoso, cinza¤
ααα				r	z	χα	٥	۵	۵	a
ααα	datat			r	z	χα	1430	٥	۵	142,00 - 150,00 argilito plástico, cinza.¤







PERFIL DO POÇO

LOCAL : São Luis - MA COORDENADAS: S: 02° 34' 27,4" W: 44° 19' 38,8" Sigla: MNA-04 Data: Fevereiro/2010 Descrição Litologica Revest. Prof. (m) Tampa do poço Lajo de proteção - Tubo de ferro 6" (1,50m) Arenito muito fino, siltico, bege claro Argila com arenito, rosa claro 10,00 Calcário, verde claro 15,00 15,00 23,00 Argilito siltico avermelhado 32,00 Arenito bastante litificado, vermelho - esbranquiçado 38,00 Argilito avermelhado 43,00 Argila - silte, cinza escuro 47,00 Arenito grosso, com porções de argila 56,00 Argilito com porções de areia 60,00 LEGENDA DADOS HIDRÁULICOS Cimentação Nível Estático: 25,30 m Pré-filtro (cascalho) Tubos de PVC Geomecânico DN 60 \$ 2* Nível Dinâmico : 00,00 m Vazão : 00,00 m³/h Filtro de PVC Geomecânico DN 60 S 2" ranhura 0,5mm Selamento de aquiferoo





PERFIL DO POÇO



SIGLA: P-10E



PERFIL CONSTRUTIVO DA FILMAGEM







PERFIL DO POÇO

LOCAL : São Luis - MA.

SIGLA DO POÇO: P-04



LEGENDA

PROTECÃO SANITÁRIA

TUBOS PVC GEOMECĂNICO DN 1545 x 4 m

FILTRO PVC GEOMECĂNICO DN 1545 x 4 m x 0.75mm

Pré-filtro



PERFIL RECONSTITUTIVO DE FILMAGEM

÷.

De (m)	A (m)	LITOLOGIA
0,00	2,00	solo areno-argiloso, avermelhado
2,00	10,00	arenito argiloso, fino, vermelho
10,00	14,00	arenito argiloso, grosseiro, vermelho
14,00	32,00	argilito, ocre
32,00	58,00	argilito arenoso, fino, vermelho
58,00	74,00	arenito, mal selecionado, vermelho
74,00	78,00	argilito arenoso, avermelhado
78,00	86,00	arenito siltoso, cinza
86,00	116,00	arenito silte-argiloso, conza
116,00	130,00	arenito argiloso, cinza
130,00	142,00	arenito siltoso, cinza
142,00	150,00	argilito plástico, cinza.
	İ	
	İ	
	İ	
	1	
	1	
	1	

III - PERFIL GEOLÓGICO - P-05

IV - ESTRATIGRÁFICO

De (m)	A (m)	Grupo ou Formação	Código
0,00	2,00	FM Quartenário	
2,00	150,00	FMItapecuru	
		•	

III - PERFIL GE DLÓGICO - P-06

De (m)	A (m)	LITOLOGIA
0,00	2,00	solo areno-argiloso, avermelhado
2,00	10,00	arenito argiloso, fino, vermelho
10,00	14,00	arenito argiloso, grosseiro, vermelho
14,00	32,00	argilito, ocre
32,00	58,00	argilito arenoso, fino, vermelho
58,00	74,00	arenito, mal selecionado, vermelho
74,00	78,00	argilito arenoso, avermelhado
78,00	86,00	arenito siltoso, cinza
86,00	116,00	arenito silte-argiloso, conza
116,00	130,00	arenito argiloso, cinza
130,00	142,00	arenito siltoso, cinza
142,00	150,00	argilito plástico, cinza.

IV - ESTRATIGRÁFICO

De (m)	A (m)	Grupo ou Formação	Código
0,00	2,00	FM Quartenário	
2,00	150,00	FM Itapecuru	
	i	1	

PERFIL DO POÇO

LOCAL : São Luis - MA.

SIGLA DO POÇO: P-07

0,00

REVESTIMENTO Tubo de ferro galvanizado 6" Filtro em Aço Inox Johnson 6"



LEGENDA

PROTECÃO SANITÁRIA

TUBOS DE FERRO GALVANIZADO de 6" pol.

FILTRO DE ACO INOX JOHNSON de 6*.ranbura 0.75mm

部語 Pré-filtro

1

1

De (m)	A (m)	LITOLOGIA
0,00	2,00	solo areno-argiloso, avermelhado
2,00	10,00	arenito argiloso, fino, vermelho
10,00	14,00	arenito argiloso, grosseiro, vermelho
14,00	32,00	argilito, ocre
32,00	58,00	argilito arenoso, fino, vermelho
58,00	74,00	arenito, mal selecionado, vermelho
74,00	78,00	argilito arenoso, avermelhado
78,00	86,00	arenito siltoso, cinza
86,00	116,00	arenito silte-argiloso, conza
116,00	127,70	arenito siltoso, cinza

III - PERFIL GEOLÓGICO PROVÁVEL - P12

IV - ESTRATIGRÁFICO

De (m)	A (m)	Grupo ou Formaç	ão Código
0,00	2,00	FM Quartenário	
2,00	127,70	FM Itapecuru	
	1	i	
De (m)	A (m)	LITOLOGIA	
--------	-------	---------------------------------------	
0,00	2,00	solo areno-argiloso, avermelhado	
2,00	10,00	arenito argiloso, fino, vermelho	
10,00	14,00	arenito argiloso, grosseiro, vermelho	
14,00	32,00	argilito, ocre	
32,00	58,00	argilito arenoso, fino, vermelho	
58,00	74,00	arenito, mal selecionado, vermelho	
74,00	78,00	argilito arenoso, avermelhado	
78,00	86,00	arenito siltoso, cinza	
86,00	96,00	arenito silte-argiloso, conza	
I			
I			

III - PERFIL GEOLÓGICO PROVÁVEL - P-08

IV - ESTRATIGRÁFICO

De (m)	A (m)	Grupo ou Formação	Código
0,00	2,00	FM Quartenário	
2,00	96,00	FM Itapecuru	
	1	1	1

ANEXO 02

PERFIS DOS POÇOS UTILIZADOS NO CAPÍTULO 4

















152

Cap de Fundo

3,0

Profundidade_

da Sondagem





-1,03 0,0 1,0 3,0 Profundidade (m) 4,0 5,0 6,0 7,0 8,0 9,0E





3,0

Profundidade.

da Sondagem









Profundidade,

da Sondagem

3,0





3,0

da Sondagem