



**NICOLE** | **LATIN AMERICA**  
Latin America Network for Soil and Water Management

## POSITION PAPER: MODELAGEM APLICADA AO GERENCIAMENTO DE ÁREAS CONTAMINADAS

Outubro de 2023



**EKOS BRASIL**

## Position Paper

# Modelagem Aplicada ao Gerenciamento de Áreas Contaminadas

Fernando Mazo D’Affonseca<sup>1</sup>; Marcio Costa Alberto<sup>2</sup>; Rosialine Roedel<sup>3</sup>

<sup>1</sup> – Geólogo, Dr. ([fernando.mazo@fmdgeo.com.br](mailto:fernando.mazo@fmdgeo.com.br))

<sup>2</sup> – Geólogo, Dr. ([mralberto@geoinovacoes.com.br](mailto:mralberto@geoinovacoes.com.br))

<sup>3</sup> – Engenheira Ambiental ([roedel@uoguelph.ca](mailto:roedel@uoguelph.ca))

## Outubro • 2023

Documento desenvolvido em conjunto com o Grupo de Trabalho de Modelagem da rede NICOLE Latin America, revisado pelo Comitê Gestor da rede e publicado em outubro de 2023.

## I. Introdução

O Grupo de Trabalho (GT) de Modelagem da NICOLE Latin America tem como objetivo estimular a disseminação das diversas técnicas de modelagem matemática e de suas aplicações na Gestão de Áreas Contaminadas (GAC), contribuindo, assim, para a melhoria das estratégias de gestão praticadas no Brasil.

A aplicação de modelos matemáticos é de extrema relevância no aprimoramento da GAC e na busca da otimização do uso de recursos financeiros, servindo para embasar escopos de investigação, compreender e prever o comportamento de contaminantes em subsuperfície, definir ações de intervenção e elaborar projetos de remediação.

No entanto, várias das ferramentas de modelagem matemática disponíveis no mercado, bem como as suas funcionalidades e limitações, são pouco conhecidas no Brasil. Além disso, agregar a modelagem matemática à elaboração de modelos conceituais consistentes tem sido um grande desafio para os profissionais que atuam com GAC, visto que a modelagem matemática, quando empregada nos projetos, é frequentemente utilizada somente após a etapa final do diagnóstico ambiental, limitando o uso integral de suas capacidades.

Com o objetivo de elencar importantes temas relacionados ao desenvolvimento da modelagem matemática nas atividades da GAC e manifestar relevantes posicionamentos referentes ao assunto, a rede NICOLE Latin America, por intermédio do GT de Modelagem, discorre neste documento sobre alguns pontos dessa temática, tais como:

- O processo de modelagem deve agregar valor ao desenvolvimento do modelo conceitual durante as diversas etapas de investigação ambiental, subsidiar o processo de tomada de decisão baseado em risco, e embasar a elaboração de planos de intervenção;
- A modelagem deve ser um processo dinâmico, podendo ser retroalimentada e refinada em todas as etapas do projeto, conforme a geração de novos dados, informações e interpretações tornam-se disponíveis; e
- A modelagem aumenta substancialmente a efetividade das campanhas de investigação e dos projetos de remediação, além de otimizar os recursos financeiros e diminuir as incertezas e os riscos intrínsecos dos projetos da GAC.

## II. O que são modelos?

Modelos são quaisquer artifícios que representam uma aproximação de uma determinada situação real em campo (Anderson & Woessner, 1992), que é baseada nos dados disponíveis e no nível de compreensão dos processos analisados. Existem vários tipos de modelo, como o físico, o conceitual e o matemático.

Os modelos físicos são construídos com materiais semelhantes aos reais, porém, em uma escala reduzida. Eles são muito utilizados no ramo da engenharia, tais como para projetar barragens, açudes e eclusas, complementando cálculos matemáticos em projetos de alta complexidade.

Os modelos conceituais utilizam descrições, gráficos, tabelas, diagramas, desenhos e plantas para esclarecer a racionalidade sobre o sistema analisado, simplificando o problema estudado e organizando as ideias associadas aos processos observados em campo. Este tipo de modelo é reconhecido como a base do desenvolvimento de projetos de investigação e remediação ambiental na GAC.

Os modelos matemáticos simulam o sistema estudado através de um conjunto de equações que representam os processos governantes e as condições de contorno do modelo. Eles podem ser utilizados (i) num sentido interpretativo, para melhorar nossa habilidade de compreender os processos observados em campo, (ii) como uma estrutura capaz de juntar e organizar dados coletados em campo, (iii) como uma ferramenta capaz de formular e/ou verificar ideias a respeito da dinâmica do sistema avaliado, (iv) para prever cenários futuros, sob diversas situações e variantes, e (v) para selecionar, planejar e otimizar medidas de intervenção (Anderson & Woessner, 1992; D’Affonseca et al. 2008a).

Modelos matemáticos podem ser resolvidos de maneira analítica ou numérica. A seleção da metodologia de modelagem a ser aplicada depende dos objetivos a serem alcançados dentre outras condicionantes, tais como a escala do problema, a complexidade do sistema, os dados disponíveis e o tempo computacional necessário.

A aplicação de modelos analíticos é recomendada sob condições particulares, como para sistemas com geometrias simples e parâmetros constantes, ou como uma ferramenta inicial de análise de problemas mais complexos. Uma vantagem particular decorre do curto tempo computacional, que permite uma consideração sistemática da incerteza das variáveis, particularmente em situações que requerem elevada parametrização (D’Affonseca et al. 2008b). Para solucionar problemas complexos, onde se fazem necessárias melhores representações das heterogeneidades do sistema e das condições de contorno, um modelo numérico deve ser utilizado (Anderson et. al, 2015).

Nas últimas décadas, os métodos numéricos tornaram-se padrão para resolver problemas hidrogeológicos com modelos matemáticos. Ao contrário das soluções analíticas, os métodos numéricos podem ser aplicados a problemas envolvendo alto grau de heterogeneidade, geometrias complexas e uma variedade de intervenções técnicas, como bombeamento, drenagem ou injeção de água e solutos. Interfaces gráficas (softwares) comerciais e gratuitas simplificam e agilizam consideravelmente as tarefas de pré-processamento e pós-processamento. Isso torna o uso de modelos numéricos disponíveis para usuários que não possuem um forte conhecimento matemático. No entanto, é necessário um conhecimento básico dos métodos numéricos subjacentes para correta aplicação, ponderando as vantagens e desvantagens dentre os diversos métodos. Dependendo do problema específico em questão, a aplicação de certos métodos numéricos pode ser apropriada, enquanto o uso de outros pode levar a resultados incorretos (Knödel et al., 2007).

### III. Aplicação da Modelagem Matemática na GAC

Na GAC, modelos conceituais e matemáticos, independentemente de sua tipologia, são desenvolvidos para direcionar o processo de planejamento e tomada de decisão. As diferentes etapas das avaliações ambientais possibilitam o desenvolvimento do modelo conceitual, buscando reunir todas as informações possíveis sobre um determinado problema, indicando as principais lacunas a serem investigadas, e subsidiando inclusive o processo de modelagem matemática, que, no Brasil, geralmente é realizado após a conclusão do modelo conceitual. Recentemente, a NICOLE Latin America publicou um guia para elaboração de modelos conceituais no gerenciamento de áreas contaminadas, cujo conteúdo detalha os principais elementos que devem constar nos modelos conceituais e as ferramentas disponíveis para o desenvolvimento e visualização desses modelos (NICOLE, 2023).

Modelos matemáticos permitem avaliar o meio sob vários aspectos, incluindo a determinação das componentes de fluxo (e.g., cargas e gradientes hidráulicos, trajetórias do fluxo, balanço hídrico) e de transporte de solutos (e.g., evolução de plumas, comportamento de contaminantes, remoção de massa). Eles também exercem um papel fundamental na definição de zonas de restrição e planejamento de medidas de remediação e contenção, como o dimensionamento de sistemas de bombeamento e de poços de injeção, a definição da quantidade, localização, aspectos construtivos e a abrangência de poços de bombeamento/extração/injeção.

Para melhores resultados, os trabalhos de modelagem matemática deveriam começar nas etapas iniciais do projeto e serem concomitantes ao desenvolvimento do modelo conceitual, de forma que o potencial da modelagem matemática fosse plenamente explorado, maximizando assim a eficiência das campanhas de investigação e das medidas de intervenção planejadas.

A aplicação da modelagem matemática neste processo é de suma importância pois reflete na redução das incertezas associadas ao modelo conceitual, à medida que ocorre o avanço nas campanhas de investigação, permitindo que as hipóteses levantadas pelo modelo conceitual, que se baseiam principalmente em interpretações, sejam gradativamente testadas, aprimoradas e justificadas dentro de uma estrutura quantitativa e de base científica.

Adicionalmente, os modelos matemáticos podem nos alertar sobre fenômenos ainda não considerados e identificar, através de análises de incerteza e sensibilidade, áreas onde mais investigações são necessárias. Desta forma, é pouco recomendável realizar a modelagem matemática somente após a conclusão do modelo conceitual, quando geralmente não há mais tempo ou recursos disponíveis para investigações adicionais.

### IV. Gerenciamento Baseado em Risco

Para entender os riscos representados por uma contaminação no subsolo, é essencial ter uma compreensão integral e uma quantificação apropriada das taxas de liberação e

do destino dos contaminantes, assim como das mudanças espaciais e temporais dos processos envolvidos (D’Affonseca et al., 2011).

Atualmente, os procedimentos da GAC do Estado de São Paulo são exemplos para os demais estados brasileiros e contemplam a realização de modelagem matemática para a definição de zonas de restrição de uso da água subterrânea e delimitação de zonas de intervenção baseadas no risco à saúde humana.

A ferramenta da modelagem matemática deve ser aplicada no gerenciamento de áreas contaminadas nas seguintes situações:

- 1) Quando a área contaminada apresentar risco confirmado à saúde humana ou ao meio ambiente, decorrente de: a. Incêndios, explosões e liberações de substâncias tóxicas; b. Migração de contaminantes para águas superficiais ou subterrâneas; c. Exposição a vapores de substâncias voláteis; d. Exposição a substâncias carcinogênicas ou mutagênicas; e. Exposição a substâncias que possam causar efeitos adversos ao ecossistema.
- 2) Nas situações em que os contaminantes gerados possam atingir corpos d’água superficiais ou subterrâneos, determinando a ultrapassagem dos padrões legais aplicáveis, comprovadas por modelagem do transporte dos contaminantes (artigo 36 do Decreto nº 59.263/2013, conforme DD da CETESB nº. 38/2017/C1).

A modelagem matemática deve ser empregada para previsão do comportamento temporal das plumas de contaminação e avaliar potenciais alterações nos cenários de exposição, incluindo a alteração da qualidade de recursos hídricos superficiais e subterrâneos. Caso sejam identificados riscos à saúde humana, a modelagem deverá subsidiar a definição da necessidade de adoção de medidas de contenção ou remediação.

Ainda no âmbito da DD, fica evidente que a modelagem matemática tridimensional é imprescindível e deve ser utilizada para avaliar os processos de transporte e atenuação dos contaminantes, sob condições de fluxo natural ou alterado por possível influência de bombeamento de poços de captação, ou outras atividades antrópicas.

Caso seja necessária a definição de perímetro de restrição de uso de água subterrânea, a DD exige que sejam usados modelos para “especificar o(s) aquífero(s), os volumes de cada aquífero (a área e a profundidade) e o tempo de vigência da medida, cuja estimativa deverá se basear nos resultados obtidos nas etapas de investigação da área, assim como pelo uso de modelagem matemática de fluxo e transporte das substâncias químicas de interesse”.

Ademais, a definição de zonas de restrição de uso de água subterrânea, com uso das ferramentas de modelagem matemática, pode ser estendida para além da GAC, e empregada na elaboração e atualização de mapas de zoneamento hídrico subterrâneo, que podem ser utilizados a nível de gestão pública, integrando planos diretores de planejamento urbano nos níveis federal, estadual e municipal.

## V. Ciclo de Vida da Modelagem

É raso considerar que a modelagem deva ser usada apenas para subsidiar a avaliação de riscos à saúde humana, uma vez que a mesma pode ser utilizada desde os passos iniciais, ou seja, desde as primeiras investigações ambientais, para dar suporte ao processo de gerenciamento como um todo, direcionando inclusive os instrumentos de investigação subseqüentes.

Compreender a geologia é o início e a espinha dorsal de qualquer projeto de gestão de águas subterrâneas, visto que a distribuição espacial das cargas hidráulicas, dos vetores de velocidade e das trajetórias de fluxo das águas subterrâneas, é controlada pelas propriedades e pelo arranjo das entidades litológicas. Modelos matemáticos construídos meramente a partir de interpretações hidráulicas, i.e., desconsiderando fatores geológicos, são invariavelmente equivocados e pouco confiáveis (D’Affonseca et al. 2020).

O processo de modelagem deve ser dinâmico, ou seja, o modelo deve ser retroalimentado com dados recém adquiridos, de modo a subsidiar todo o processo de gestão e atualizar as premissas adotadas. Por exemplo, o levantamento de dados refinados de recarga do aquífero e condutividades hidráulicas, bem como condições estruturais geológicas do aquífero podem alterar os resultados do modelo matemático construído, levando a resultados diferentes daqueles inicialmente obtidos.

Dessa forma, de tempos em tempos, ao analisar os erros do modelo matemático, ou seja, a diferença entre os valores calculados e os observados em campo, como cargas hidráulicas, vazões ou concentrações, o modelador deve ser capaz de identificar possíveis lacunas de conhecimento ou conceitualizações inadequadas sobre todos os aspectos relevantes aos objetivos do projeto, sejam eles geológicos, hidrogeológicos e hidrogeoquímicos, permitindo o refinamento do modelo conceitual e, por consequência, a tomada de decisão em relação a remediação, monitoramento e ações complementares de investigação.

Por exemplo, a modelagem matemática é fundamental na interpretação de concentrações medidas em campo, permitindo estimar a origem, o trajeto e os processos atuantes que ocorrem durante o transporte dos contaminantes, assim como eventuais processos de diluição dentro dos poços, especialmente os de filtro longo (Höyng et al. 2015).

Naturalmente, ao tentar reduzir os erros do modelo matemático durante o processo de calibração, o modelador é frequentemente levado a formular, testar e sugerir novas ideias, o que exige que ele tenha um sólido conhecimento matemático, geológico, hidrogeológico e hidrogeoquímico. Esse processo é valiosíssimo, pois permite que as hipóteses do modelo conceitual sejam validadas ou reformuladas pelo modelo matemático, o que garante a redução de custos desnecessários e de erros operacionais.

As ferramentas de modelagem devem ser aplicadas mesmo após a definição e implementação do projeto de remediação, onde os cenários futuros de tempo de funcionamento dos sistemas, otimização e avaliação de eficácia, podem ser continuamente refinados com novos dados de monitoramento. Ademais, em situações

em que surjam dados de fontes, antes desconhecidas, de contaminação e caracterização de novas plumas de contaminação, não previstas no projeto inicial, pode haver necessidade de adequação e ajuste do modelo conceitual e do sistema de remediação.

## **VI. Abordagem Econômica na Modelagem**

Quando um modelo matemático é construído e executado a partir de dados confiáveis, de premissas plausíveis e defensáveis, e de um conjunto adequado de equações, a modelagem matemática torna-se uma ferramenta poderosa e indispensável para avaliar condições atuais e futuras, e um excelente investimento no planejamento de ações, sejam elas de investigação, contenção ou remediação.

Iniciar a modelagem matemática concomitantemente com o desenvolvimento do modelo conceitual permite que ajustes e revisões sejam feitos, evitando tomadas de decisões equivocadas e intervenções ineficientes com baixo custo-benefício. Ressalta-se que um modelo matemático baseado em um modelo conceitual incorreto levará invariavelmente a previsões falhas, independentemente do quão boa seja a métrica calibração do modelo (Bredehoeft, 2003).

Modelos matemáticos deveriam ser aplicados para definir o design ideal de sistemas de contenção e remediação de águas subterrâneas contaminadas. Projetos de remediação otimizados com modelagem matemática podem gerar uma economia de custos de até 50%, em comparação com um projeto baseado em práticas comuns (Elshall et al. 2020).

O montante de investimento aplicado em modelagem matemática gera um retorno considerável em custos evitados com análises mais simples, que não exploram sistematicamente todas as possíveis variantes do sistema.

### **Considerando o exposto, o Grupo de Trabalho de Modelagem da rede NICOLE Latin America concorda que:**

Em suma, o objetivo da modelagem matemática é estimar e prever os efeitos das substâncias químicas de interesse nos receptores sensíveis, definir as zonas de proteção e as metas de remediação, e subsidiar os projetos de intervenção. Essa ferramenta é fundamental para uma gestão eficiente e efetiva de áreas contaminadas, permitindo a tomada de decisões informadas e embasadas em dados e análises científicas.

Em específico, a modelagem matemática pode:

- direcionar o processo de planejamento e tomada de decisão;
- maximizar a eficiência das campanhas de investigação e das medidas de intervenção planejadas;
- reduzir as incertezas associadas ao modelo conceitual;
- alertar sobre fenômenos ainda não considerados e identificar, através de análises de incerteza e sensibilidade, áreas onde mais investigações são necessárias;



- subsidiar a elaboração de projetos de remediação; e
- otimizar o uso de recursos para o correto gerenciamento ambiental das áreas.

Desta forma, o GT altamente recomenda realizar a modelagem matemática desde o início do gerenciamento de áreas contaminadas, ou seja, a partir da avaliação ambiental preliminar, para que seja possível gerar um modelo conceitual mais eficiente, reduzindo, assim, o tempo e investimento de recursos financeiros aplicados, operacionais e humanos, auxiliando a melhor gestão da exposição de riscos associados à presença de contaminantes nos solos e águas subterrâneas.

## Referências

Anderson, M.P.; Woessner, W.W.; Hunt, R. J. (2015), Applied Groundwater Modeling: Simulation of Flow and Advective Transport. VitalSource Bookshelf, (2nd Edition). Elsevier S & T, 2015.

Anderson, M.P. & Woessner, W.W. (1992), Applied Groundwater Modeling: Simulation of Flow and advective Transport. Academic Press, Inc. Harcourt Brace Jovanovich Publisher, San Diego.

Bredehoeft, J.D. (2003), From models to performance assessment: The conceptualization problem. Ground Water, 41: 571-577.

D’Affonseca, F.M., Blum, P., Finkel, M., Melzer R., Grathwohl, P. (2008a), Field scale characterisation and modelling of contaminant release from a coal tar source zone. Journal of Contaminant Hydrology, 102(1-2), 120-139. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2008.03.011>

D’Affonseca, F.M., Park, S., Finkel, M., Blum, P. (2008b) Quantification of natural and technically enhanced NAPL source depletion: analytical vs. numerical models. IAHS Pub. (324), 380–387. ISBN: 978-1-901502-79-4

D’Affonseca, F.M., Prommer, H., Finkel, M., Blum, P., Grathwohl, P. (2011), Modelling of the long-term and transient evolution of biogeochemical and isotopic signatures in coal tar contaminated aquifers. Water Resources Research, DOI: 10.1029/2010WR009108.

D’Affonseca, F.M., Finkel, M., Cirpka, O.A. (2020) Combining implicit geological modeling, field surveys, and hydrogeological modeling to describe groundwater flow in a karst aquifer, Hydrogeology Journal. <https://doi.org/10.1007/s10040-020-02220-z>

Elshall, A.S, Ye, M., Finkel, M. (2020) Evaluating two multi-model simulation-optimization approaches for managing groundwater contaminant plumes, Journal of Hydrology. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2020.125427>

Höyng, D., Prommer, H., Blum, P., Grathwohl, P., D’Affonseca, F. M., (2015) Evolution of carbon isotope signatures during reactive transport of hydrocarbons in heterogeneous aquifers, Journal of Contaminant Hydrology, Volume 174, 10-27, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jconhyd.2014.12.005>.

Knödel, K., Lange, G., Gerhard, H.-J. (2007) Environmental Geology: Handbook of Field Methods and Case Studies. Federal Institute for Geosciences and Natural Resources, Hannover. ISBN 978-3-540-74669-0, Springer Berlin Heidelberg New York.

NICOLE, Latin America (edi). Soares, L.C. R., Vianna, M. M. G., Bertolo, R. A. (org.) (2023). Guia de Modelo Conceitual no Gerenciamento de Áreas Contaminadas. NICOLE Latin America. Disponível em: [http://nicolelatinamerica.com/wp-content/uploads/2023/08/Guia\\_-GMCA\\_-com-recortes.pdf](http://nicolelatinamerica.com/wp-content/uploads/2023/08/Guia_-GMCA_-com-recortes.pdf). Acesso em: 02 de outubro de 2023.