

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS

**Cadeias de Markov aplicadas à definição de camadas litológicas
para modelos numéricos de fluxo de águas subterrâneas**

RODRIGO MACIEL GROSSI

Dissertação apresentada ao Programa de
Pós-Graduação em Recursos Minerais e
Hidrogeologia, Instituto de Geociências,
Universidade de São Paulo, para a obtenção
do título de Mestre em Ciências

Área de concentração:
Hidrogeologia e Meio Ambiente

Orientadora:
Profa. Dra. Alexandra Vieira Suhogusoff

SÃO PAULO
2020

Autorizo a reprodução e a divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins e estudo e de pesquisa, desde que citada a fonte.

Serviço de Biblioteca e Documentação do IGc/USP

Ficha catalográfica gerada automaticamente com dados fornecidos pelo(a) autor(a)
via programa desenvolvido pela Seção Técnica de Informática do ICMC/USP

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de catalogação da publicação:

Sonia Regina Yole Guerra - CRB-8/4208 | Anderson de Santana - CRB-8/6658

Grossi, Rodrigo Maciel
Cadeias de Markov aplicadas à definição de camadas litológicas para modelos de fluxo de águas subterrâneas / Rodrigo Maciel Grossi; orientadora Alexandra Vieira Suhogusoff. -- São Paulo, 2020.
161 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Recursos Minerais e Hidrogeologia) -- Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo, 2020.

1. Geoestatística. 2. Sedimentologia. 3. Modelagem numérica de fluxo e águas subterrâneas. 4. Simulação estocástica. 5. Probabilidades de transição. I. Suhogusoff, Alexandra Vieira, orient.

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS

**Cadeias de Markov aplicadas à definição de camadas litológicas
para modelos numéricos de fluxo de águas subterrâneas**

RODRIGO MACIEL GROSSI

Orientadora: Profa. Dra. Alexandra Vieira Suhogusoff

Dissertação de Mestrado

Nº 863

COMISSÃO JULGADORA

Dra. Alexandra Vieira Suhogusoff

Dra. Tatiana Luiz dos Santos Tavares

Dra. Vanessa Almeida de Godoy

SÃO PAULO
2020

Agradecimentos

Aos meus pais e familiares, pelo incondicional voto de confiança recebido ao longo da execução de todo este trabalho. Aos professores, por dividir inestimável conteúdo e pelos incentivos à realização desta pesquisa. Aos funcionários da admirável biblioteca do instituto de geociências, e aos demais colaboradores, pela infraestrutura disponibilizada. E aos meus colegas revisores.

Agradeço o apoio financeiro recebido da agência de Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (Capes).

E em particular, agradeço também meu casal de orientadores, Alexandra, Luiz, pela liberdade que me concederam durante a realização da pesquisa e claro, pela paciência em sustentar todas as discussões que se fizeram necessárias.

Obrigado meus novos amigos da geologia.

This decade has lasted long enough, and the crisis in particular has become a habit, indeed almost a joke. Emotions are no longer deeply stirred by it; [at any particular outrage], we are upset for a shorter period each time. We are worried rather than frantic.

But worry is terribly insidious; besides taking the joy out of life, it prevents the victim from being detached and from observing what is happening to the human experiment. It tempts him to simplify, since through simplification he may find peace.

Nagging and stinging night and day, it is the undying worm, the worst of the foes. The only satisfactory release is to be found in the direction of complexity. The world won't work out [by itself], and the person who can realise this, and not just say it and lament it, has done as well as can be expected of him in the present year.

E.M. Foster, Two Cheers for Democracy (1939)

RESUMO

GROSSI, R. M. 2020. 161p. **Cadeias de Markov aplicadas à definição de camadas litológicas para modelos de fluxo de águas subterrâneas.** Dissertação (mestrado em Geociências) - Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo, 2020.

Um modelo numérico de fluxo de águas subterrâneas adquire reconhecimento como ferramenta de trabalho, ou simplesmente como uma ferramenta que ajuda a estruturar o raciocínio, na mesma medida de sua desenvoltura em lidar com o grande número de variáveis que se julgue partes complementares de um problema complexo, tais como todas aquelas relacionadas à gestão de passivos ambientais identificados em determinada porção de um aquífero. Esta pesquisa procura discutir as premissas utilizadas na definição do arcabouço geológico de uma simulação de fluxo, tendo como linha mestra de orientação a aptidão das cadeias de Markov como uma técnica estocástica ou probabilística de interpolação com superiores resultados em relação às abordagens tradicionais, das inferências geológicas manuais às técnicas determinísticas baseadas na variância espacial. O modelo numérico desenvolvido simula a retenção de partículas por uma barreira hidráulica nos contextos determinístico e estocástico-markoviano, para dados de uma área localizada no município de Guarulhos, São Paulo, região formada por depósitos sedimentares de reconhecidas altas taxas de heterogeneidade e anisotropia deposicional. Acredita-se que foram alcançados bons resultados para as realizações equiprováveis de blocos-diagrama advindas do entendimento e aplicação prática do algoritmo Tprogs, cujo funcionamento é calcado em uma análise dual de princípios tanto matemáticos, da geoestatística, quanto geológicos, da sedimentologia. De um mesmo modelo numérico de fluxo colocado sob iguais premissas de funcionamento, porém com a exclusiva variação da distribuição espacial, tridimensional, de suas camadas litológicas nas abordagens determinística (M_{BDD}) e estocástica (M_{BDE}), observou-se uma marcada diferença na componente vertical do traçado das partículas. Ao contrário da primeira abordagem determinística, a tendência de maior horizontalidade ou mais forte suporte das partículas no modelo estocástico-markoviano demonstrou, neste contexto, ser a melhor, senão a única opção para o dimensionamento da barreira hidráulica. Cômputos finais dentre as respostas equiprováveis de 20 simulações M_{BDE} , à crescentes incrementos de vazões de bombeamento, indicaram incrementos na eficácia da captação das partículas. De uma curva de probabilidades, de 56% para 72 m³/dia, 69% para 78 m³/dia e 94% para 84 m³/dia, estimou-se que 100% das partículas devam ser captadas por uma barreira hidráulica mínima, mais eficaz, com vazão total de 96 m³/dia.

ABSTRACT

GROSSI, R. M. 2020. 161p. **Markov chains applied to definite groundwater flow models lithological layers.** Master Dissertation in Geosciences - Institute of Geosciences, University of São Paulo, 2020.

A numerical groundwater flow model acquires its recognition as an important working device, or just an “instrument of thinking”, by the same measure which it shows some ability to deal with the large number of complementary variables interacting as parts of a complex problem, such as all related elements of a water management plan dealing with an environmental liability eventually present at a given portion of an aquifer. This research seeks to discuss the premises of the mathematical and geological framework developed by the Markov Chains' approach for a modflow simulation, as a supposed better stochastic interpolation approach in filling the model block-diagram when in comparison with the traditional interpolation techniques, as the manually made geological inferences for transections or related ones, based on the deterministic spatial variance. For a database of a brownfield at the city of Guarulhos, São Paulo state, Brazil, a region formed by sedimentary deposits of recognized high rates of heterogeneity and depositional anisotropy variations, the flow model simulates the retention of particles by a hydraulic containment barrier in the deterministic and stochastic-markovian contexts. Through the understanding and practical application of the Tprogs algorithm, whose operation is based on a dual analysis of both geostatistics and sedimentology principles, it is believed that reasonable better results have been achieved in the design of the block-diagrams required by the numerical simulation. Under the same operating premises of a unique numerical model, varying exclusively the three-dimensional distribution of these lithologies on the deterministic ($M_{BD}D$) and stochastic ($M_{BD}E$) approaches, a marked difference of the vertical component of those particle tracks was observed. Given the greater tendency or stronger horizontal support of particles in the stochastic-markovian model, this was the better, if not the unique, reliable approach in dimensioning the needed hydraulic containment system for a somewhat demanding calibration context. Among 20 equiprobable realizations $M_{BD}E$, increasing increments of pumping flows rates allowed the computation of increasing probabilities of efficiency in capturing all the particles. The final result is a probability curve of 56% ($72 \text{ m}^3/\text{day}$), 69% ($78 \text{ m}^3/\text{day}$), 94% ($84 \text{ m}^3/\text{day}$), and 100% of the particles captured by a minimum, more effective hydraulic barrier total flow of $96 \text{ m}^3/\text{day}$.

1. APRESENTAÇÃO	17
1.1. MÉTODOS DETERMINÍSTICO E ESTOCÁSTICO DE INTERPOLAÇÃO	19
1.1.1. As cadeias de Markov e seu significado	20
1.1.2. Correntes linhas de pesquisa do algoritmo Tprogs	21
2. OBJETIVOS	22
3. ÁREA DE ESTUDO	23
4. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	30
4.1. GEOESTATÍSTICA DE HIDROFÁCIES DESCONTÍNUAS	31
4.1.1. Cadeias de Markov	32
4.1.2. Transiograma(s) de caminhamento.....	33
4.1.3. Matriz gráfica de transiogramas.....	34
4.1.4. Lei de correlação de fácies de Walther	35
4.2. O ALGORÍTIMO Tprogs.....	36
4.2.1. Janelas de observação (Δh)	36
4.2.2. Variações da matriz gráfica de transiogramas Tprogs	37
4.2.3. Barras empilhadas: Uma mesma base de dados sob diferentes perspectivas	40
4.2.4. Particularidades do algoritmo Tprogs (estudos anteriores)	44
4.3. SEDIMENTOLOGIA.....	45
4.3.1. Categorização da base de dados.....	46
4.3.1.1. Hidrofácies como elementos de interpretação	47
4.3.1.2. Evolução de fácies sedimentares de sistemas sedimentares fluviais.....	48
4.3.2. Heterogeneidade, estacionariedade e anisotropia	50
4.4. SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE FLUXO (MODFLOW)	53
4.4.1. Módulos de interesse.....	53
4.4.2. Condições de contorno.....	54
4.4.2.1. Condição de contorno ‘cc Ibound’	55
4.4.2.2. Condição de contorno ‘cc GHB’	55
4.4.2.3. Condições de contorno ‘cc rios’, cc drenos e ‘cc stream’	56

4.4.3. Blocos-diagrama.....	57
4.4.3.1. Modelo de bloco-diagrama determinístico (M_{BDD})	57
4.4.3.2. Modelo bloco-diagrama estocástico (M_{BDE}).....	59
4.4.4. Calibração (parâmetros de controle)	61
4.4.4.1. Processo automatizado de calibração	62
4.4.4.2. Parâmetros de entrada de condições de contorno, K e seus limites.....	64
5. MATERIAIS E MÉTODOS	65
5.1. MODELO NUMÉRICO	67
5.2.1. Bloco-diagrama determinístico	70
5.2.2. Bloco-diagrama estocástico-markoviano	71
5.2.2.1. Inferências espaciais 3D, aplicação da lei de Walther.....	73
5.3. CARACTERIZAÇÃO HIDROGEOLÓGICA E CONDIÇÕES DE CONTORNO ..	75
5.3.1. Parametrização	78
5.3.1.1. Parâmetros das condições de contorno ‘cc stream’, ‘cc drenos’, ‘cc GHB’	78
5.3.1.2. Condutividades hidráulicas pré-calibração.....	80
5.3.2. Variáveis de referência I - Cargas hidráulicas.....	81
5.3.3. Variáveis de referência II - <i>Slug tests</i>	83
5.4. ESTRATÉGIA DE CALIBRAÇÃO.....	84
5.5. BARREIRA HIDRÁULICA.....	86
6. RESULTADOS.....	87
6.1. BALANÇO DE MASSA E CALIBRAÇÃO	87
6.1.1. Memorial de cálculo	91
6.2. SEGUNDA DISCRETIZAÇÃO, EM MAIOR DETALHE	93
6.2.1. Bloco-diagrama determinístico (M_{BDD}).....	94
6.2.2. Conjunto de blocos-diagrama estocástico markoviano (M_{BDE}).....	95
6.2.3. Barreira hidráulica: Contextos M_{BDD} versus M_{BDE}	99
6.2.3.1. Respostas equiprováveis M_{BDE}	101

7. DISCUSSÕES	103
8. CONCLUSÕES.....	106
REFERÊNCIAS	107
GLOSSÁRIO.....	112
ANEXO A.BASE DE DADOS	113
ANEXO B.ÁLGEBRA MATRICIAL DOS TRANSIÓGRAMAS DE MARKOV	134
B.1. O algoritmo Tprogs	134
B.1.1. Módulo GAMEAS - Transiograma experimental, dispositivo de pesquisa	136
B.1.2. Módulo MCMOD - Transiograma modelado, via taxas de transição	137
B.1.1.a. Potenciação dos índices da matriz de probabilidades $ T $	140
B.1.1.b. Coeficientes espectrais (Z_0) de taxas de transição $ R_d $ de $ R $	141
B.1.1.c. Taxas e probabilidades de transição	142
B.2. Probabilidades de transição a passos contínuos (MCMOD - ABC)	143
B.1.1.d. Matrizes de componentes espectrais (Z_1)	144
B.1.1.e. Remontagens: $ R_p $ e $ P $ a passos contínuos (h)	146
B.1.1.f. Abordagens independente $ T(\Delta h) $ versus condicionada $ P(h) $	147
B.3. Lei de Walther, inferências da direção z para o plano horizontal (x, y)	148
B.1.1.g. Módulo TSIM (co-krigagem / simulação indicadora sequencial)	150
B.1.1.h. Resultados finais, conjuntos de blocos-diagrama estocásticos equiprováveis	151
B.1.1.i. Rotina de interpolação TSIM	152
ANEXO C.CLASSIFICAÇÃO DE DEPÓSITOS SEDIMENTARES.....	153
C.1. Escalas de observação	153
C.2. Estratégias de classificação.....	154
C.3. Hierarquias, arquitetura deposicional e <i>bounding surfaces</i>	155
C.4. Estruturas de fácies de canais e de planície	157
C.5. Tendências de justaposição de hidrofácies	161

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Materiais recorrentes em profundidade (poços de observação nas extremidades):	19
Figura 2: (a) Poço de camadas recorrentes ABC; (b) Matriz probabilidades de transição ou cadeias de Markov	20
Figura 3: Gênese deposicional das formações da área de estudo. Adaptado de MAS (2005)	24
Figura 4: (a) Bacia hidrográfica do alto Tietê; (b) Área de estudo em maior e menor escala (adaptado de Fehidro,	24
Figura 5 (a) amostra de seção tipo (adaptado de Riccomini & Coimbra, 1992); (b) Associações de fácies fluviais,	25
Figura 6: (a) Depósitos “mais profundos” de rios entrelaçados da Formação Resende e	27
Figura 7: Arenitos de canais entrelaçados da Fm. Resende sob lamitos de leque aluvial (Riccomini, 1990).....	27
Figura 8: (a) Curvas de nível e microbacias de drenagem sobrepostas, (b) Foto destacando o elevado desnível	28
Figura 9: (a) Poços com descrições litológicas; (b) Detalhes: poços de diferentes nomenclaturas	29
Figura 10: Testemunhos de sondagens disponibilizados pela base de dados (pré-processados - categorização).....	29
Figura 11: Poço vertical, contagens de frequências e definição de probabilidades de transição ..	32
Figura 12: (a) Rotina amostragem de parte dos dados experimentais; (b) Transiograma gráfico $ T_{AA} $	33
Figura 13: (a) Transiogramas de todas as possíveis transições entre os eventos ABC de uma base de dados;.....	34
Figura 14: (a) Transiogramas experimental e modelado $ \Gamma_Z $ e transiogramas $ \Gamma_X $ $ \Gamma_Y $ de hidrofácies ABC,	35
Figura 15: Grau e ordem de dependência das janelas de observação (Δh) (Harbaugh & Carter, 1971).....	36
Figura 16: (a) Probabilidades ‘normais’ com janela de observação (Δh) de valor unitário de camadas 1 a 17.	37
Figura 17: Cadeias de Markov de máxima entropia $ T_\pi $ ou simplesmente $ M $	38
Figura 18: Probabilidades condicionais, atribuídas à forma imbricada das cadeias de Markov ...	38
Figura 19: Significado: Pr, probabilidades ou adeias de Markov de imbricadas $ P $	38
Figura 20: Taxas e Frequências de transição (destaque em verde); taxas r_j e comprimentos L_k (em azul); Barras empilhadas $ t_{jk} $ dedicados a interpretação e não processamento dos dados; diagonal de auto-variâncias nulas.	40
Figura 21: (a) Gráfico de barras de taxas, máxima entropia e frequências entre hidrofácies 1 a 5; (b) Sobrepostos na direção z, compararam-se seus respectivos transiogramas caminhamento: $\Gamma_Z A M F $	41
Figura 22: (a) Máxima entropia observadas (cálculo à priori); (b) Modeladas / induzidas (cálculo à posteriori).....	42

Figura 23: Padrão teórico dos quatro diferentes modos de processamento Tprogs; Nas diagonais principais alocam-se taxas de transição (r_j) e comprimentos médios (L_k) de cada hidrofácie (extraídas do transiograma).....	42
Figura 24: (a) Probabilidades (experimental vertical) e taxas (horizontal modelada / inferida) de hidrofácies 1 a 5 (padrões verdes em destaque); Off-values indicam que coeficientes de Walther não alteram padrões V → H.....	43
Figura 25: Ciclicidade de sistemas deposicionais (a) adaptado de Miall, 1996; (b) e de Sylvester <i>et. al.</i> , 2019)	45
Figura 26: Fácies fluviais ABC(D), função da ciclicidade de períodos de pré e pós alagamento	47
Figura 27: Modelo teórico geral de preenchimento de vales continentais, com depósitos de fácies fluviais sobrepostos ao longo do tempo, adaptado de Wright and Marriott (1993)	48
Figura 28: Depósitos característicos de cada litossomas (Miall, 2000), com matrizes quantificando as observações.....	49
Figura 29- Escalas de heterogeneidade (adaptado de Krause <i>et. al.</i> , 1987; e Shultz <i>et. al.</i> , 2017)	51
Figura 30: Direções preferenciais / procedência (adaptado de Leeder, 1993; e Leeder & Gawthorpe, 1987).	51
Figura 31: (a) Depósitos de rios meandrantes (Alen, 1964); (b) e de rios anastomosados (Smith & Putnam, 1980)	52
Figura 32. (a) Condutância de cursos d'água, <i>versus</i> (b) Condutância 'cc GHB' (Adaptado de Aquaveo, 2020)	56
Figura 33: (a) Exemplo sintético de 4 testemunhos de sondagem; Seções geológicas resultado da interpolação entre (b) 5 materiais; Solução mais apropriada: ou entre (c) 10 horizontes de deposição HUFs	58
Figura 34: Tarefas GAMEAS e MCMOD de definição dos ponderadores $ Tz Tx Ty $ para preenchimento dos blocos-diagrama ME a partir das hidrofácies observadas em profundidade (simulação condicionada TSIM)	59
Figura 35: (a, b) Análise STD, dados 1 a 20; (c _{1,2}) Intervalos de observação (IN_i) e níveis de confidência (Z_i)	63
Figura 36 (a) Proporções Tprogs; (b) Condutividades hidráulicas e percentuais sobre a hidrofáceis argilosa	64
Figura 37: Estrutura geral da simulação numérica de fluxo em modelos bloco-diagrama determinístico ($M_{BD}D$) e conjunto de blocos-diagrama estocásticos (M_{BDE})	66
Figura 38: (a) Percurso atual e retificado do Tietê; (b) E confluência com Rio Pinheiros 1930; (Wikipedia, 2020)	68
Figura 39: Poços dos aquíferos Taubaté (a) e São Paulo (b) em livre interpretação usando a palheta de cores do atual modelo numérico de fluxo (adaptado de MAS, 2005); (c) Amostra de poços da área em Guarulhos	69
Figura 40: Horizontes de deposição para (b) exemplos, amostra da base de dados; (c) interpolações, seções 2D	70
Figura 41: (a) Probabilidades p_j (%); (b) Comprimentos médios L_k (m) em função do comprimento da janela de	71
Figura 42: (a) Proporções p_j (%);(b) Comprimentos L_k (m) de poços rasos, intermediários e profundos	71

Figura 43: (a) Gráficos de barras das primeiras cadeias de Markov $ A_{0.1} A_{0.60} $ (b) Transiogramas experimental $ A_{(0.60)} $ (curvas pontilhadas (preta) e modelados $ A_{(0.60)} A_{(0.1)}$ (curvas contínuas) sobrepostas	72
Figura 44: Interpretações anisotropia deposicional (x' , y'); (a) De poços condicionantes, exemplo (expectativas) de porções: (b) Rasa, (c) Intermediária e (d) Profunda de bloco-diagrama interpolado Tprogs.	73
Figura 45 (a): $ Az \rightarrow FTx' Py' $ Output original Tprogs, com padrões em verde ressaltando subdivisão em porções rasas e profundas; (b _{1, 2, 3}) Gráfico de barras empilhadas (diagonais principais ressaltadas na cor azul ausentes na cor branca);	74
Figura 46: (a) Topografia da área de estudo; (b) Domínio modelado e discretização bloco-diagrama em planta	75
Figura 47: Condições de contorno utilizadas. Sobre mapa topográfico. Figura 3D com exagero vertical de 3x.	76
Figura 48: Modelo conceitual de fluxo; Condições contorno ‘cc GHB’ (de posições Z_i e vazões Q_i) estimadas para cada uma de suas células ao longo das bordas de fundo e base do modelo; Δh = carga hidráulica do rio Tietê	77
Figura 49: Distribuição espacial, horizontal das condições internas de contorno.....	78
Figura 50: (a) Curvas guia, (b) topografia aplicada a superfícies de elevação ‘cc stream’, ‘cc drenos’ e ‘cc GHB’	79
Figura 51a: Condutividades hidráulicas (KH, KV) iniciais K_{ABCDE} (m/dia); (b) amplitudes de variação	80
Figura 52: (a) Cargas hidráulicas médias (H) e (b) posições (Z) de uma em uma análise multinível da distribuição dos poços de observação sobre topografia de topo das 16 camadas numéricas do futuro modelo de fluxo; (c) Respectivos comprimentos das seções filtrantes de cada poço (resumo do anexo A.3).	82
Figura 53: (a) Disposição das posições (Z) no bloco-diagrama e (b) Variações médias das cargas hidráulicas para cada um dos quatro níveis de observação.	82
Figura 54: Posição em planta dos testes de bombeamento e de deslocamento (slug tests), para os níveis de realização dos testes 6.m, 16 e 18m, respectivamente (destaque em amarelo para orientação).	83
Figura 55: Condutividades hidráulicas (K) estimadas em campo para os níveis raso (vermelho), intermediário (verde) e profundo (azul). Distribuições normais STD escala logarítmica (eixo x); Eixo ‘y’, sem escala.....	83
Figura 56: Intervalos (ordem: menor para o maior), níveis de confidência e pesos, por nível de observação	85
Figura 57: Parâmetros $IN_{i(m)}$, $Z_{i(\%)}$, e $W_m(\%)$, para toda a base de dados (Ordenados por comprimento de filtro).....	85
Figura 58: (a) Balanço de massa $M_{MD}D$; (b) Balanço de massa de uma das realizações $M_{MD}E$..	87
Figura 59: Calibração $M_{BD}D$ e $M_{BD}E$. Legendas indicando o comprimento das seções filtrantes em níveis 1,2,3,4.....	88
Figura 60: Potenciometria comparada e traçador de partículas para os modelos $M_{BD}D$ e $M_{BD}E$, sob curvas topográficas à título de orientação.....	89

Figura 61: Hidrofácies, potociometria, e traçador de partículas, para as versões MBDD x MBDE	90
Figura 62: Condutividades calculadas em relação as amplitudes inicialmente estabelecidas e suas proporções	91
Figura 63: (a) Domínio modelado, ruas e avenidas sobre topografia (Guarugeo, 2020) de curvas de nível de planalto e planície nas cores laranja e preta; (b) Perfil de elevações acima e abaixo do nível de base (horizontal)	93
Figura 64: Discretizações: (a) Camadas de processamento numérico; (b) Unidades de fluxo (HUFs)	93
Figura 65: Bloco-diagrama e seções transversais MBDD, fruto de interpolações condicionadas aos 90 poços de observação, às seções transversais interpretadas (2D) de 22 horizontes de deposição HUFs	94
Figura 66: Bloco-diagrama e seções de transversais de uma das resoluções equiprováveis MBDE	95
Figura 67: Resoluções equiprováveis de iguais padrões estatísticos Tprogs do modelo MBDE ...	96
Figura 68: Potociometria MBDD (I) 3D, (II) planta, níveis: raso, intermediário e profundo; (III) Seções aa', bb'	97
Figura 69: Mapas potenciométricos máximo e mínimo de 17 realizações MBDE	98
Figura 70: Barreira hidráulica MBDD em planta (a, b) e perfil (c); Traçado das partículas sem bombeamento	99
Figura 71: Barreira hidráulica MBDE em planta (a, b) e perfil (c); Com bombeamento à $6 \text{ m}^3/\text{d}$ e 12 poços	100
Figura 72: (a) Fluxo MBDE em torno do cômputo MBDD; (b) Balanços de massa MBDE, por realização	100
Figura 73: Resoluções MBDE, exemplo de sucesso da barreira hidráulica, em (a) planta e (b) perfil; (suprimidas	101
Figura 74: Resoluções MBDE, exemplo de falha da barreira hidráulica, em (a) planta e (b) perfil. (suprimidas as	101
Figura 75: Visão Geral do algoritmo Tprogs, módulos análise de exploratória GAMEAS, processamento espacial MCMOD e co-krigagem / simulação indicadora TSIM.....	135
Figura 76: Frequências, probabilidades e matriz transiograma 2x2 $ \Gamma_{jk} T_{AA}, T_{AB}, T_{BB}, T_{BA} $	136
Figura 77: Extração das taxas $ R $ da matriz de probabilidades de transição $ T $	138
Figura 78: (a, b) - Teoria algébrica para extração de autovalores (λ) e autovetores	138
Figura 79: Componentes singulares da matriz original 2x2	139
Figura 80: Reconstrução de uma matriz quadrada $ A $ em formato canônico	139
Figura 81: Cômputo de forma canônica pela regra de multiplicação de valores decompostos ..	139
Figura 82: (a) Elementos $ t_{jk} $; (b) Autovalores λ_{ab} ; (c) Feição espacial da potenciação $ T ^n$ (Grossi et. al., 2018)	140
Figura 83: Montagem de componentes espectrais	141
Figura 84: Remontagem de $ R $ como $ Rd $	142
Figura 85: Potenciação de matrizes	142

Figura 86. Frequencias, probabilidades e taxas de transição para exemplo 3x3 (A ₈ B ₆ C ₄) ₃	143
Figura 87: Processamento de componentes espectrais da base de dados ABC.....	144
Figura 88: Produtórios da interpolação Lagrangiana	145
Figura 89: Equivalência entre.....	146
Figura 90: Probabilidade de transição $\Gamma_{AA}(h)$	146
Figura 91 Probabilidades $T_e(h)$ de apenas um transiograma na vertical (z), em números.	147
Figura 92: Curvas ajustada x experimental x potenciação (significado matemático)	147
Figura 93: Proporções (p_j) e comprimento ‘ L_k ’ de cadeias de Markov da direção ‘z’; Inferências de sua continuidade lateral com a adoção de coeficientes de Walther (Ω) na direção ‘x’	148
Figura 94: Trasiogramas experimental e ajustado $ \Gamma_z $; Trans. estimado $ \Gamma_x = 10 \Gamma_z $	149
Figura 95: Detalhe horizontal de bloco-diagrama 2D interpolado a partir de eventos ABC.	150
Figura 96: Compilação de [n] resultados de probabilidades em perfil 2D, evento por evento ...	150
Figura 97: Conjuntos i e ii como resultados de duas interpretações distintas (<i>soft data</i>) da mesma base de dados (<i>hard data</i>).	151
Figura 98: Hierarquia de sistemas deposicionais (Adaptado de Miall, 2014).....	153
Figura 99: Caracterização de litofácies (em microescala) e superfícies de 1 ^a , 2 ^a , e 3 ^a ordens....	154
Figura 100: Elementos arquitetônicos de um sistema fluvial (Kendall, 2008, Apud Miall, 2014)	155
Figura 101: Hierarquia de litossomas e <i>bounding surfaces</i> (adaptado de Miall, 1996).....	155
Figura 102: Hierarquia entre escalas de <i>bounding surfaces</i> (adaptado de Miall, 1996)	156
Figura 103: Comparação de fácie de acreção lateral / a jusante (Crowley, 1983)	158
Figura 104: Orientações preferenciais de mergulho de fácie (A) LA; (B) DA. (Adaptado de Miall, 2000).....	159
Figura 105: (a) Granodecrescência ascendente; (b) Granocrescência ascendente (Miall, 1981)	161

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1: Interpretação dos materiais dos perfis litológicos da base de dados como hidrofácies (Hf.).....	69
Tabela 2: Proporções p_j (%), comprimentos L_k (m) e multiplicadores de Walther (Ω_{j10}) nas direções x' e y'.....	73
Tabela 3: Parâmetros iniciais de entrada e suas amplitudes de variação, por condição de contorno	79
Tabela 4: Hidrofácies em proporções p_j (%) (herdadas do Tprogs); condutividades hidráulicas K; Magnitudes de hidrofáceis arenosas em relação a hidroáceis argilosa; Anisotropia vertical inicial (VAN _I); Amplitudes tolerada durante a calibração (Mín; Máx.): Unidade 3 m/d = 3.5×10^{-3} cm/s; e 0.0004 m/d = 4.63×10^{-7} cm /s.....	80
Tabela 5 Número de poços de monitoramento por disposição vertical e comprimento de filtro .	81
Tabela 6: (a) Balanço de massa M _{MD} D; (b) Balanço de massa de uma das realizações M _{MDE} ...	87
Tabela 7: Demonstrativo de calibração do modelo determinístico (MBDD).....	87
Tabela 8: Reflexo da calibração MBDD no modelo estocástico (MBDE).....	88
Tabela 9: Relações e proporções KH / KV, (a) iniciais e (b) calculadas (comparar com a Figura 36)	91
Tabela 10: (a) Parâmetros iniciais e calculados, por condição de contorno. (b) Sensibilidades por observação.....	92
Tabela 11: Proporções p_j (%) e comprimentos L_k (m) nas direções vertical z, lateral x' e axial y'	96
Tabela 12: Eficiência e eficácia da barreira hidráulica de grupo de realizações equiprováveis Tprogs	102
Tabela 13: Componentes espectrais calculados da matriz de taxas de transição R da Figura 86	145
Tabela 14: Litossomas de 3 ^a , 4 ^a e 5 ^a ordens de grandeza (mesoescala).....	155
Tabela 15: Nomenclatura padrão de litofácies de sistemas fluviais:	157
Tabela 16: Parâmetros de entrelaçamento de ambientes fluviais	160

1. APRESENTAÇÃO

Um modelo numérico de fluxo de águas subterrâneas figura como uma estratégica ferramenta de gestão na medida em que, como instrumento de trabalho, procura auxiliar na compreensão do comportamento hidráulico de um aquífero. Sua importância coloca-se na mesma proporção das necessidades de um projeto. A construção de um modelo numérico, uma versátil e confiável ferramenta ou plataforma de processamento, justifica-se principalmente quando há um grande número de informações de interesse a serem estudadas em detalhe.

Dentre uma miríade de variáveis de significativa importância na prática da simulação do fluxo por meios porosos, destaca-se o papel das litologias que representam as diferentes porções de um aquífero. Este trabalho situa-se no contexto da dificuldade de processamento e incertezas associadas à caracterização de suas camadas litológicas. Em estreita relação junto a distribuição espacial de parâmetros como a condutividade hidráulica, a atenção a este tipo de variável (K) é importante por seu grande potencial de influenciar os resultados como um todo.

Vistas não apenas como camadas plano-paralelas sobrepostas em profundidade, porém ainda como “pacotes de dados” de variada distribuição tridimensional, a reconstrução virtual do domínio a ser trabalhado a partir de descrições litológicas, já em si um grande desafio mesmo para bases de dados em densidade e espaçamento satisfatórios, ainda mais o é para ambientes de reconhecida complexidade.

Como forma de se analisar heterogeneidade e anisotropia, aspectos geneticamente relacionados a proveniência dos sedimentos de determinada região em específico, uma área física real na região de Guarulhos, São Paulo, foi tomada como estudo de caso. O objeto em pauta é comparar os métodos determinístico e estocástico-markoviano de interpolação utilizados na construção do bloco-diagrama do modelo, observando o resultado em simulações numéricas de fluxo. No caso, procura-se pela melhor configuração para litologias derivadas da combinação de depósitos flúvio-aluviais de origens e épocas geológicas distintas. Em termos da constituição sedimentar, a Bacia de São Paulo apresenta depósitos sedimentares distribuídos em condições particularmente heterogêneas (Ab' Saber, 1956; Bedani & Saad, 2009).

Blocos-diagrama são preenchidos por cadeias de Markov, uma técnica que procura estimar a heterogeneidade da variável K (condutividades hidráulicas), mediante referências geológicas (Fogg *et. al.*, 1998). Comparada aos métodos determinísticos tradicionais, esta opção estocástica, pautada por suas probabilidades de ocorrência, é promissora por oferecer respostas igualmente prováveis a um problema naturalmente complexo.

Cadeias de Markov descrevem, como probabilidades de transição, as chances de um evento ocorrer à medida em que o observador se distancia de um ponto de referência. São úteis como ferramentas pragmáticas e flexíveis de interpolação espacial. Apresentam respostas que contrastam com as elevadas cargas de aleatoriedade dos métodos determinísticos.

Esforços relacionados à replicação virtual da heterogeneidade e anisotropia do substrato a ser trabalhado na modelagem numérica de fluxo são bem-vindos, no sentido de se procurar pelo melhor entendimento de condições basilares do problema a ser simulado.

Como metodologia de estudo, conta-se com a habilidade do algoritmo Tprogs (*transitional probability software*, Carle, 1999) parte integrante do *software Groundwater Modeling System - GMS* 10.0 (Aquaveo, 2014), em entregar para simulação numérica um conjunto de sólidos com pacotes litoestratigráficos estruturados, preservando ordens de recorrência entre suas camadas, e que procuram replicar a ciclicidade natural do acúmulo de sedimentos ao longo do tempo geológico. Via cadeias de Markov, o algoritmo Tprogs considera tanto a base de dados (*hard data*), quanto conceitos da sedimentologia relacionados a fenômenos de deposição (*soft data*), de modo a preencher, a variadas distâncias entre pontos observados e estimados, o bloco-diagrama destinado ao modelo numérico de fluxo.

Pela forma com que o algoritmo Tprogs compatibiliza dados quantitativos e qualitativos para gerar um sem número de soluções geológicas plausíveis e estatisticamente equiprováveis, espera-se elevar os níveis de confidência de uma simulação numérica de fluxo.

Sistemas sedimentares, apesar de complexos, são organizados (Galloway, 1996). Na ‘geoestatística de hidrofácies descontínuas’ (de Marsily *et. al.*, 2005), a abordagem estocástico-markoviana coloca-se como útil na gestão de inerentes incertezas de ambientes geológicos mais heterogêneos (Harbaugh & Carter, 1971).

O algoritmo Tprogs trata os materiais sedimentares (areia, silte e argila) por hidrofácies: “pacotes de sedimentos interconectados, de propriedades hidráulicas similares entre si” (Anderson *et. al.*, 1999). Contextualiza os dados segundo sua gênese deposicional, e processa com rapidez diferentes resoluções, o que se torna uma grande vantagem diante da dificuldade ou pequena variabilidade de alternativas ‘blocos-diagrama’ providas pela interpolação tradicional. Tomando como base os padrões observados em profundidade, Tprogs estima a continuidade lateral das camadas, o que é conceitualmente viabilizado pela ‘lei de correlação de fácies de Walther’, na qual: sedimentos ocorrendo em conformidade em sucessões verticais assim também o fazem lateralmente, em ambientes sedimentares adjacentes (Reading, 1996).

1.1. MÉTODOS DETERMINÍSTICO E ESTOCÁSTICO DE INTERPOLAÇÃO

Procura-se destacar as consequências da adoção das estratégias de interpolação: bloco-diagrama determinístico (M_{BDD}) e bloco-diagrama estocástico-markoviano (M_{BDE}).

A diferença M_{BDD} x M_{BDE} está em um contraste fundamental: respeitada a mesma base de dados e sua ordem de processamento, enquanto nas rotinas determinísticas sempre vem a ser possível se retornar a um resultado já alcançado, nas rotinas estocásticas (que levam em conta as incertezas dos dados de entrada) os resultados não podem ser replicados, ainda que qualquer um destes (resultados) sejam estatisticamente equivalentes entre si. Um resultado determinístico, portanto, pode ser comparado às múltiplas realizações equiprováveis da abordagem estocástica.

Na Figura 1 observam-se exemplos das interpolações M_{BDD} e M_{BDE} a partir das mesmas sondagens ou descrições litológicas, contendo três materiais recorrentes em profundidade.



Figura 1: Materiais recorrentes em profundidade (poços de observação nas extremidades): Interpolação M_{BDD} (a); e Interpolações equiprováveis M_{BDE} (b_1 , b_2 , ..., b_n), de uma mesma seção transversal.

Na prática, procura-se replicar para o futuro modelo de fluxo, a mais provável forma de distribuição espacial do sistema sedimentar que se pretenda representar, em sua complexidade ou heterogeneidade natural, tomando-se esparsas sondagens unidireccionais como pontos fixos de condicionamento dentro de todo um domínio (não conhecido) a ser preenchido por uma combinação tridimensional de diferentes camadas litológicas.

Uma abordagem M_{BDD} é menos judiciosa porque depende de não raros ajustes manuais necessários à interpolação “assistida” de qualquer uma de suas soluções bloco-diagrama. Por depender de inferências espaciais subjetivas, fica comprometida a replicação deste tipo de modelo geológico, base de sustentação da simulação numérica de fluxo.

Já a abordagem probabilística ou estocástica M_{BDE} entrega blocos-diagrama que não se colocam apenas como soluções mais plausíveis para problemas complexos. A metodologia Tprogs, ao formalizar como informações prontamente auditáveis todas as variáveis e procedimentos utilizados em suas tomadas de decisão, disponibiliza um resultado prontamente rastreável, aberto a maiores discussões quanto a sua capacidade de representar a realidade.

1.1.1. As cadeias de Markov e seu significado

Dentre um amplo espectro de aplicações, da previsão do tempo ao mercado financeiro, as cadeias de Markov destacam-se por sua capacidade de expressar relações espaciais ou temporais difíceis de serem tratadas de outra maneira (Lin & Harbaugh, 1984). À semelhança das funções trigonométricas circulares (seno e cosseno, por exemplo), seu formato matricial encerra propriedades convenientes à interpretação de fenômenos cíclicos, úteis na descrição da recorrência entre os diferentes tipos de sedimentos observados em sondagens.

Alocam-se auto-variâncias na diagonal principal das cadeias de Markov $|T|$, enquanto variâncias cruzadas ‘off-values $|t_{jk}|$ ’, se diferentes de zero, apontam o grau de interdependência dos dados no espaço tridimensional (Young *et. al.*, 2010), como mostra a Figura 2.

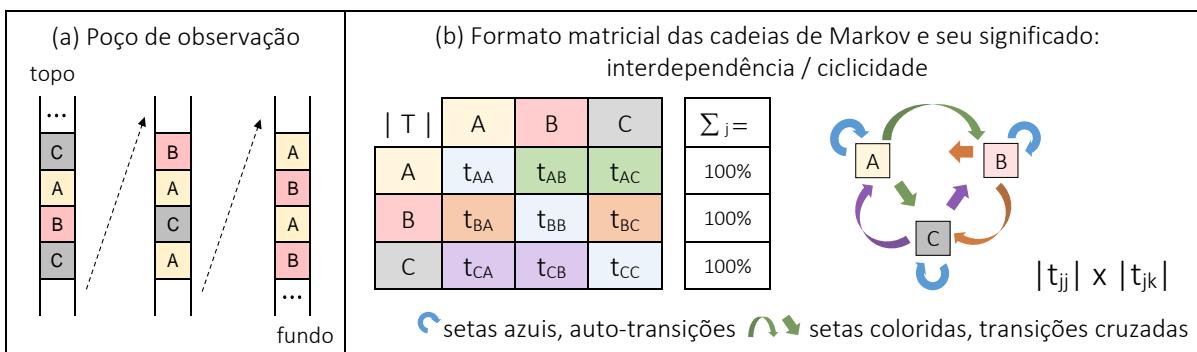


Figura 2: (a) Poço de camadas recorrentes ABC; (b) Matriz probabilidades de transição ou cadeias de Markov

A abordagem markoviana interessa como forma de interpretação dos sedimentos cujo acúmulo pode ser interpretado como respostas a “fenômenos de deposição”, que também ocorrem de maneira cíclica, sazonal. À título de ilustração, os sedimentos das margens e nas calhas de um rio seriam respostas à recorrência das enchentes em determinada estação do ano, registro de períodos chuvosos que, por sua vez, também acompanham a sazonalidade dos outros eventos, climáticos agora, como as chuvas do *El Niño* por exemplo.

Em termos matemáticos:

- Da estatística clássica, medidas como a média (μ) e desvio padrão (σ) são eventualmente suficientes para se estimarem as chances de um resultado dentre ‘n’ possibilidades;
- Na geoestatística de probabilidades de transição, entretanto, o processamento de dados regionalizados (variáveis teor e posição geográfica), via cadeias de Markov, depende da chamada matriz de covariâncias espaciais, capaz de expressar relações entre diferentes grupos de variáveis. No caso, os tipos de solo (A, B, C); e uma medida indireta de suas espessuras, pela recorrência destas últimas variáveis $|t_{jk}|$, observadas em profundidade.

1.1.2. Correntes linhas de pesquisa do algoritmo Tprogs

Apesar de bastante eficientes em ramos como os da pesquisa mineral, no contexto hidrogeológico as metodologias de simulação estocástica possuem dificuldades em lidar com a recorrente baixa densidade de dados junto às áreas que se pretende modelar (Carle, 2000).

Da simulação indicadora sequencial (SIS) baseada em variogramas espaciais, à recente simulação multiponto com imagens de treinamento (computacionalmente intensiva), é recorrente a dificuldade das atuais técnicas de interpolação em replicar maiores continuidades laterais, devido a elevada carga de entropia embutida em suas rotinas estatísticas.

A simulação não gaussiana de probabilidades de transição alinha a amostragem espacial às antigas cadeias de Markov. Desta forma o algoritmo Tprogs vem se mostrando bastante robusto na promoção de traçados mais fidedignos de contextos geológicos, por sua eficiência na replicação de expectativas de continuidade e justaposição dos depósitos sedimentares

Desenvolvido para análises de risco junto as incertezas geológicas, o algoritmo Tprogs advém de esforços do gerenciamento de um dos passivos ambientais mais investigados dos Estados Unidos, situado sob cunhas salinas do *Lawrence Livermore National Laboratory*, agência norte americana de pesquisa pioneira em energia nuclear (Fogg *et. al.*, 2000).

Dos principais conceitos desenvolvidos à época do lançamento do algoritmo Tprogs, de Fogg, 1986; Carle & Fogg, 1996; 1997; Carle *et. al.*, 1998; Weissmann *et. al.*, 1999; Weissmann & Fogg, 1999; Carle 1999; à trabalhos de Lee *et. al.*, (2007), dell' Arciprete *et. al.*, (2012) e ainda Fogg *et. al.*, (2000), são materiais essenciais para a compreensão dos amplos e elaborados princípios matemáticos e geológicos que regem esta metodologia, em grande parte também objeto da presente dissertação. Fogg *et. al.*, (2000), por exemplo, defende a grande influência do parâmetro condutância (vertical) entre camadas de fluxo, como grande diferencial da abordagem estocástica em relação a sua contraparte, as interpolações determinísticas.

Um panorama geral e atualizado da metodologia Tprogs aplicado a modelos de fluxo é apresentado por Traum *et. al.*, (USGS 2014), onde se discutem interpretações geológico-sedimentares como '*composites*' para cada domínio de fácies sedimentares preponderantes.

Esta pesquisa procura contribuir com o entendimento do algoritmo Tprogs e seu diálogo com a sedimentologia, via esforços empreendidos para a contenção de passivos ambientais presentes nas águas subterrâneas de um estudo de caso. Processa uma ampla base de dados, e procura contextualizar o problema dentro de um ambiente sedimentar de elevada complexidade.

2. OBJETIVOS

A construção de um modelo preditivo pauta-se por dados muitas vezes agregados ou em nível de detalhe pouco compatível com seu propósito, o que obriga o modelador a formalizar boa parte de suas decisões, no sentido de se resguardar quanto a cada premissa utilizada.

Se de um lado um modelo determinístico (M_{BDD}) torna-se defensável quando todas suas premissas são adequadamente justificadas, de outro lado somente um modelo estocástico (M_{BDE}) inclina-se à gestão das inerentes incertezas de ambientes geológicos de maior complexidade, dada sua desenvoltura para testar, paulatinamente, as premissas adotadas na construção daquele que se configura como um resultado plural, ou seja, de uma distribuição de resultados equiprováveis, com média e desvio padrão prontamente quantificáveis.

Dentre as diferentes classes de atributos que podem ser aportados como funções probabilísticas, o presente trabalho se atém ao atributo litologia.

2.1 Objetivo geral

O objetivo geral desse trabalho é avaliar, para uma porção do aquífero livre situado na região de Guarulhos, SP, as diferenças nas previsões realizadas por um modelo determinístico e seu equivalente estocástico-markoviano, a partir da comparação das eficiências de captura de partículas de uma barreira hidráulica implementada em os contextos M_{BDD} e M_{BDE} . O modelo estocástico-markoviano empregará ‘n’ configurações litoestratigráficas Tprogs, gerando, acredita-se, ‘n’ trajetórias de partículas e consequentes possibilidades de capturas pela barreira hidráulica. Ao passo que o modelo determinístico, por basear-se em apenas uma configuração litoestratigráfica, irá gerar somente um resultado.

2.2. Objetivos específicos

Dentre os objetivos específicos junto ao estudo de caso na região de Guarulhos, SP, citam-se:

- Entendimento dos processos de interpolação estocástica-markoviana, quanto às suas premissas matemáticas e sedimentológicas;
- Implementação dos modelos blocos-diagrama e da simulação numérica de fluxo junto às condições geológicas e hidrogeológicas pertinentes.

3. ÁREA DE ESTUDO

Situada no município de Guarulhos, vizinho à cidade de São Paulo, ou ainda, como parte integrante da zona leste da região metropolitana de São Paulo (RMSP), destaca-se a similar gênese deposicional entre grande parte dos sedimentos que se encontram na área de estudo, e os sedimentos encontrados no vale do Paraíba (aquíferos São Paulo x Taubaté Figura 3a).

Tratam-se de depósitos sedimentares oriundos de diferentes fases de desenvolvimento do Rift Continental do Sudeste Brasileiro (RCSB - Riccomini, 1990), assentados sobre formações cristalinas resumidas como um aquífero fraturado de similar comportamento hidráulico, este constituído de rochas metamórficas e ígneas Pré-cambrianas de localizadas ocorrências de rochas intrusivas mais jovens, do início do Fanerozóico ao período Cretáceo.

Pertencente a uma pequena parte da bacia hidrográfica do alto Tietê (Figura 3a), a porção centro-sul do município de Guarulhos (antes dividido pela falha do Jaguari) é constituída por sedimentos Paleógenos e aluviões quaternários, assim como localizados afloramentos de graníticos (Oliveira *et. al.*, 2005). Já a área de estudos em si, situa-se nas porções topograficamente menos elevadas dentro da sub-bacia do canal de circunvalação de Guarulhos (Mattes *et. al.*, 2008). Devido à sua proximidade junto à várzea do rio Tietê, aqui se considera que os sedimentos da área de estudo são bastante susceptíveis à retrabalhos pelo comportamento das águas da atual, e da remota bacia de drenagem do vale do rio Tietê.

Pré-cenozoico, o embasamento fraturado (Figura 3a) apresenta mais baixo potencial de abastecimento de águas subterrâneas do que aqueles constituídos por formações granulares. Ainda assim é um grande provedor de águas para à RMSP, dada sua extensa área de cobertura.

O aquífero Taubaté, de 3400 km² de extensão e até 400 m de espessura saturada, situa-se sobre um dos mais importantes eixos de atividades econômicas do Brasil. Engastado ao embasamento, possui altitudes predominantes de 600 a 700 m, portando em cotas topográficas mais baixas que a bacia de São Paulo (850 m), ambos consideravelmente abaixo da superfície cristalina média (1100 m) entre as serras da Cantareira em São Paulo, e Quebra-Cangalha já em Pindamonhangaba (Ab' Saber, 1956). Trata-se de um aquífero sedimentar do tipo multicamadas, com alternância de sedimentos arenosos ou aquíferos, fácies fluvial argilosas ou confinantes e fácies lacustre ou planície de inundação (DAEE, 1977).

O aquífero São Paulo, constituído de rochas sedimentares, ocupa uma área de pouco menos de 1000 km². Com espessura média de 100 m, pode chegar a 250 m em suas partes mais

profundas. Neste contexto a parte do centro sul de Guarulhos possui baixa vazão explotável ($10 \text{ m}^3/\text{h}$), quando comparada aos $40 \text{ m}^3/\text{h}$ às demais regiões mais produtivas (MAS, 2005).

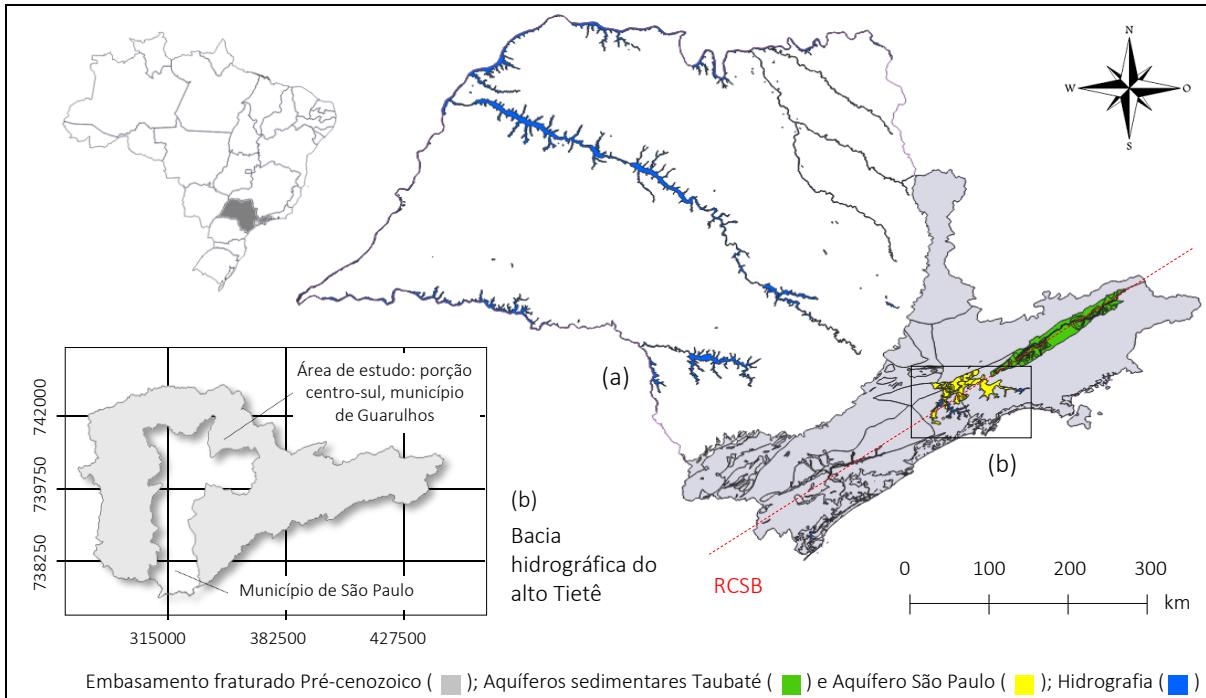


Figura 3: Gênese deposicional das formações da área de estudo. Adaptado de MAS (2005)

Na Figura 4 observam-se dois tipos de depósitos da Formação Resende, lamitos seixosos (de leque aluvial) e depósitos de planície fluvial entrelaçada, ambos associados à depósitos arenoso-argilosos quaternários mais recentes (Fehidro, 1998). Porém não se descarta a presença de outras formações, como a Fm. Pindamonhangaba, a Fm. Tremembé, a Fm. Itaquaquecetuba e a própria Fm. São Paulo, que se destaca mais na região da Avenida paulista (Takiya, 1991, 1997; Mancini, 1995; Bertolo, 1996; Rodriguez, 1998, 1997; Sant'Anna, 1999).

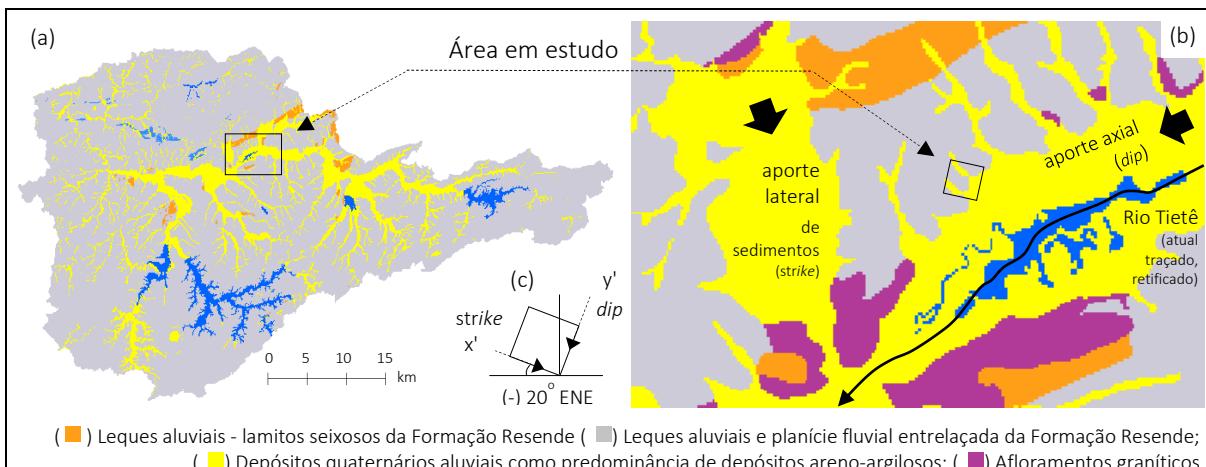


Figura 4: (a) Bacia hidrográfica do alto Tietê; (b) Área de estudo em maior e menor escala (adaptado de Fehidro, 1998); (c) Convenção: eixos de orientação do bloco-diagrama, com direções prioritárias de aporte de sedimentos

Devido aos termos de confidencialidade da base de dados, a localização exata da área de estudo não pôde ser especificada. Ressalta-se, entretanto, que a ausência desta informação não traz prejuízo ao desenvolvimento deste trabalho, na medida em que foram respeitadas as mesmas proporções de espaçamento dos dados base de dados originalmente georreferenciada (informação que se encontra em anexo).

Ainda na Figura 4, em consonância com conceitos sedimentológicos de anisotropia deposicional horizontal aplicável aos sedimentos encontrados na área de estudo, e também, pela demanda de orientação espacial da metodologia Tprogs, foi adotada uma angulação de -20° E-NE como forma de orientação do domínio destinado à modelagem numérica de fluxo. Citar tal convenção (Figura 4c) neste momento de apresentações iniciais é necessário para facilitar a procura pelo entendimento do alcance dos diferentes depósitos predominantes na área de estudo. No caso: seja na direção principal, axial, ou de interflúvio ao longo do eixo de maior comprimento do vale do rio Tietê (a ser denominado eixo y'); Seja na direção do lateral, ou perpendicular (eixo x'), complementar, que se refere ao fluxo de sedimentos pela encosta da serra da Cantareira (por exemplo), originando fácies com características mais marcantes de leque aluvial (Diniz & Duarte, 1996; Diniz, 1996, 2008). Vêm do algoritmo Tprogs a convenção para as direções de deposição axial (*dip y'*) e lateral (*strike x'*).

Algumas feições características das formações de interesse podem ser depreendidas do modelo sedimentológico conceitual originalmente desenvolvido para uma seção-tipo regional, descrita por Riccomini (1990) para uma linha traçada entre a serra da Cantareira e a serra do Mar, cruzando o rio Tietê da zona oeste à zona sul da capital São Paulo (Figura 5a).

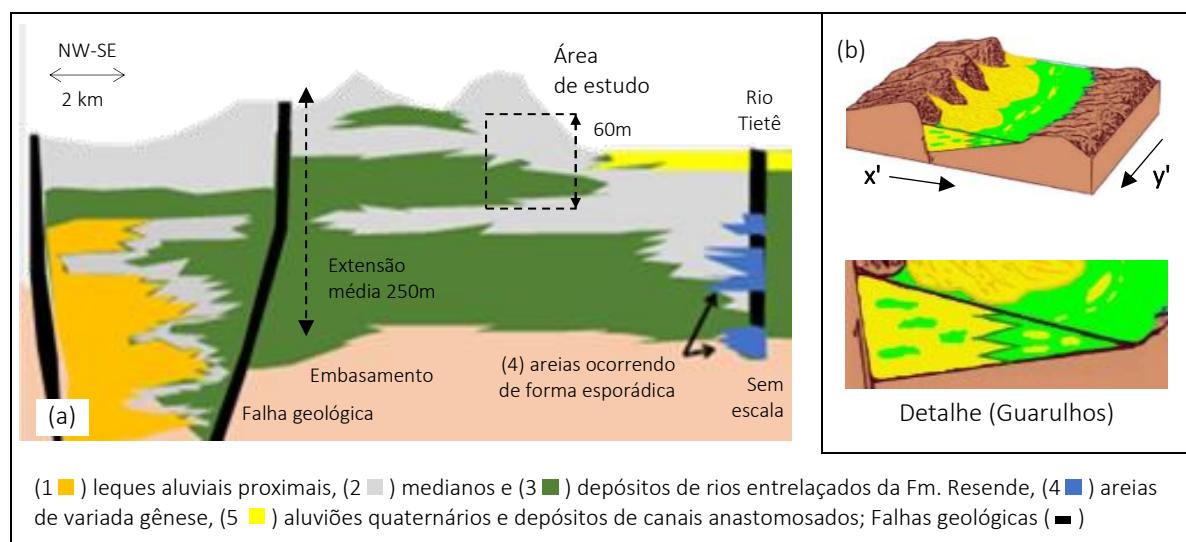


Figura 5 (a) amostra de seção tipo (adaptado de Riccomini & Coimbra, 1992); (b) Associações de fácies fluviais, em verde y' e aluviais, em amarelo x' (adaptado de Bedani, 2009). Municípios de São Paulo e Guarulhos

Como característica geral marcante, ainda por Riccomini & Coimbra (1992), 80% em volume dos depósitos do aquífero São Paulo constituem-se de leques aluviais proximais, medianos, e de depósitos de rios entrelaçados da Formação Resende (Figura 5a; cores 1, 2, 3). Conglomerados de leques aluviais distais intercalados com depósitos de areias grossas de variada gênese fluvial ocorrem nas imediações das baixadas (Figura 5a, cor 4). Aluviões de canais anastomosados quaternários chegam a poucos metros de espessura (Figura 5a, cor 5).

Defende-se que o mesmo conjunto de formações sedimentares da seção tipo de São Paulo (Figura 5a) também pode ser aplicada à região de Guarulhos. Pela convenção adotada com relação aos eixos de anisotropia horizontal do aporte sedimentar, trata-se da coexistência de dois sistemas deposicionais interdigitados (Figura 5b), por Bedani & Saad (2009):

- Um primeiro sistema deposicional para depósitos fluviais e aluviais de aporte orientado na direção axial y', de características lacustrinas, para a região centro-sul do município;
- E um segundo sistema deposicional do tipo 'leque fluvial', predominante nas partes norte e central do município, e apresentando sedimentos que desceram a encosta por fluxo de massa com e sem presença de água. A direção lateral x' orienta a proveniência deste tipo sedimento, em relação ao eixo de maior extensão do vale do rio Tietê.

Em maiores profundidades, de ocorrência ligada às formações geológicas observadas no vale do rio Paraíba, terraços de rios entrelaçados da Formação Resende de direção originalmente axial passam a interagir com fácies fluviais arenoso-argilosas orientadas tanto na direção complementar (lateral, advindos da Serra da Cantareira), quanto nesta mesma direção principal. Este último conjunto de fácies já ligado a retrabalhos e novos aportes mais recentes, provenientes do rio Tietê.

Características lacustrinas são defendidas por Bedani & Saad (2009), para a porção centro sul do município de Guarulhos. Em particular à ocorrência dos afloramentos graníticos observados na Figura 4b: Tais afloramentos proporcionariam um ancestral condicionamento do fluxo (de água e de sedimentos) no eixo de maior competência da bacia de drenagem, proporcionando ganhos de velocidade de escoamento e geração dos massivos depósitos arenosos (de leito, de rios entrelaçados) pelo *flushing effect* (Schumm, 2005). A partir de seu gradual assoreamento, e persistindo tal condição de estrangulamento, os granitos passam à obstáculos barrando o caminho dos sedimentos mais recentes. Novos ajustes geomorfológicos de meandramento e de anastomose de rios de menor declividade (Schumm, 1999) formariam então condições para o acúmulo das fácies argilosas observadas.

Para ilustrar o que vem sendo narrado seguem alguns afloramentos dos aquíferos Taubaté e São Paulo, localizados em alguns cortes da rodovia Presidente Dutra. Na Figura 6a, observam-se característicos depósitos de um sistema particularmente competente em termos de transporte de sedimentos, portanto capaz de carregar cascalhos e areias mais grossas formando massivos e alongados depósitos ao longo de seus canais. Estes são normalmente associados a períodos climáticos mais húmidos e observados em maiores profundidades, considerados como mais antigos, à exemplo das areias da Formação Resende (Ramos, 2003).

Depósitos de rios meandrantes são um exemplo de rios menos competentes no transporte de sedimentos. São formados por características fácies mais argilosas de planície aluvial, cortadas esporadicamente por canais (agora arenosos) em variado grau de dispersão, como no exemplo da Formação Floriano (Figura 6b) por Ramos (2003).

E ainda, como um possível exemplo da variação entre as direções preferenciais axial e lateral de fluxo e deposição de sedimentos, a Figura 7 destacada um depósito de canal (arenoso) escavado sobre material coluvionar de época geológica distinta (Riccomini, 1990).

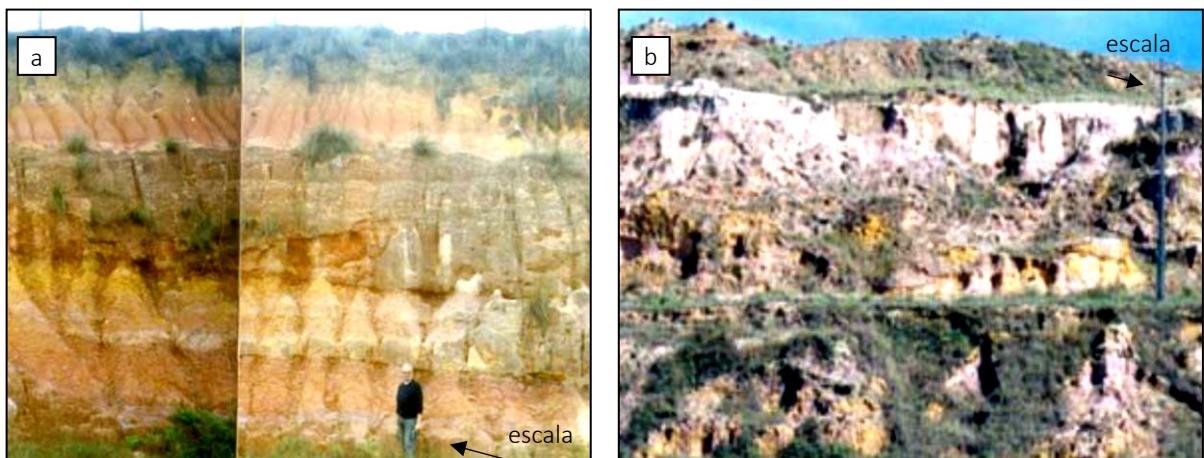


Figura 6: (a) Depósitos “mais profundos” de rios entrelaçados da Formação Resende e (b) depósitos “mais rasos” de rios meandrantes da Formação Floriano (Ramos, 2003)



Figura 7: Arenitos de canais entrelaçados da Fm. Resende sob lamitos de leque aluvial (Riccomini, 1990)

Elementos de maior interesse para um futuro modelo numérico de fluxo são destacados na Figura 8a. São eles: Curvas de nível (métricas); Traçado dos mais importantes córregos da região, em sua maioria já foram canalizados; Traçado de três divisores de água de interflívio (topos 1, 2, 3) destacando duas sub-bacias de drenagem; E traçado do divisor de águas de leito fluvial, no caso o próprio canal de circunvalação de Guarulhos (Figura 8c), obra de engenharia que reescavou um já existente paleocanal do rio Tietê, criando condições de macrodrenagem, como observado em paralelo a rodovia Presidente Dutra, que corta a região.

Outro elemento de interesse configura-se como uma fotografia que enfatiza o grande desnível topográfico da área será objeto do modelo numérico de fluxo (Figura 8b)

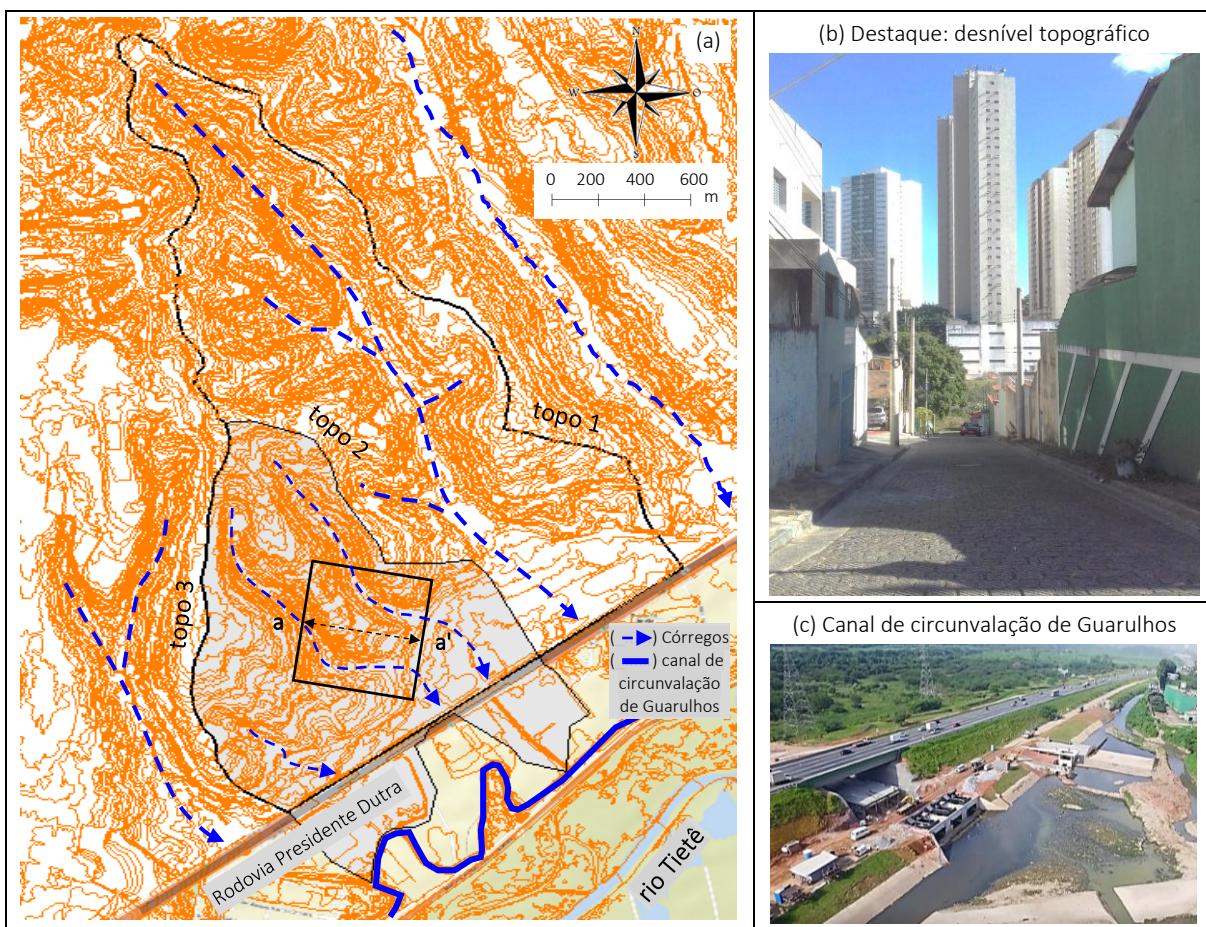
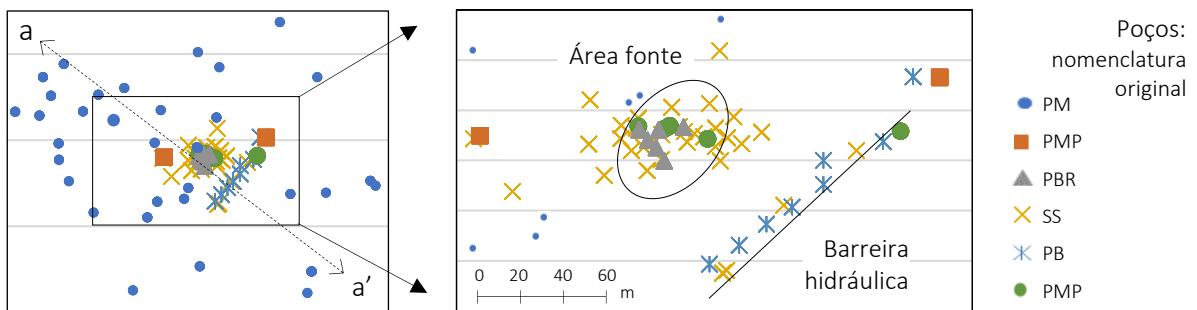


Figura 8: (a) Curvas de nível e microbacias de drenagem sobrepostas, (b) Foto destacando o elevado desnível da área a ser modelada; (c) canal de circunvalação de Guarulhos (Foto: fonte: paulitec, 2000)

Com relação a base de dados disponibilizada, em uma análise que já evolui para a caracterização geológica das litologias observadas, destacam-se três materiais ou tipos de sedimentos que ocorrem com mais frequência entre os perfis litológicos pré-processados de um heterogêneo conjunto de poços de observação, monitoramento e sondagens (os anexos A.1 e 0

contém os dados originais e pós-processados). De seus posicionamentos relativos em planta (Figura 9a), os materiais observados nesta base de dados estão dispostos na Figura 10.

Além das diferentes nomenclaturas originais (Figura 9) se convencionou chamar de área fonte a região mais adensada de poços de investigação. Também se convencionou apontar o local onde está disposta uma barreira hidráulica interpretada como um dispositivo de remediação ambiental instalado no local. A disposição linear dos poços PB com extensas seções filtrantes (Figura 9b), como poços de bombeamento, justifica esta última observação.



Referente à seção transversal aa' (Figura 9a) a Figura 10 apresenta as litologias de interesse. Cabem aqui duas questões quanto a sua categorização ou pré-processamento.

Foi suprimido da base de dados original o material aterro superficial, por sua ocorrência em apenas algumas das descrições litológicas, e pelo motivo deste material (aterro) não contribuir para a análise sedimentológica a ser desenvolvida, haja vista que, como se verá, maior atenção foi dedicada às porções mais profundas do aquífero durante a implementação do modelo numérico de fluxo. Também foi suprimido o material argila compacta profunda. Sua ocorrência eventual na base de dados seria apenas um indicativo das partes finais de uma escavação, informação que, de qualquer maneira, foi respeitada pelo modelo de fluxo.

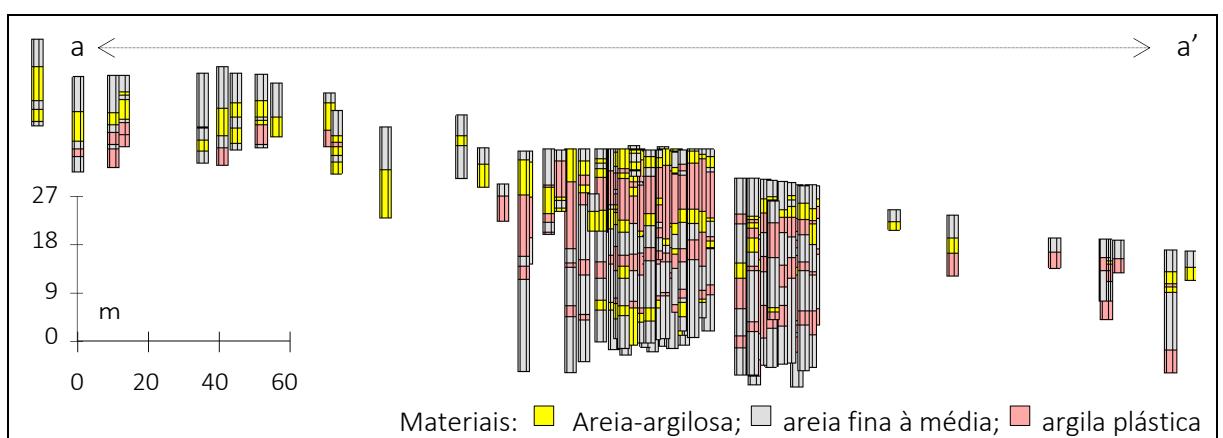


Figura 10: Testemunhos de sondagens disponibilizados pela base de dados (pré-processados - categorização)

4. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Um modelo numérico de fluxo de águas subterrâneas resolve simultaneamente um conjunto de equações diferenciais aplicadas a todas as células dentro das fronteiras entendidas como domínio ou extensão física (área ou volume) do problema a ser resolvido. Este domínio passa por uma subdivisão ou discretização em partes menores, em função da resolução espacial requerida pela questão abordada, precisão e tempo disponível para seu processamento.

Blocos-diagrama, como representação do arcabouço litoestratigráfico da litologia observada, contém os sólidos ou superfícies que delimitam as diferentes formas de distribuição dos sedimentos a serem representados no modelo numérico. Parâmetros hidrogeológicos são então atrelados à posição física ou distribuição espacial destes sedimentos, materiais, ou no caso, hidrofácies, ao longo do bloco-diagrama. Ao se definir parâmetros como condutividade hidráulica, porosidade, etc., o comportamento hidráulico de diferentes porções do modelo passa a se comportar de acordo com a distribuição, pré-determinada, destas hidrofácies.

Como solução final a ser alcançada por um modelo numérico de águas subterrâneas, um conjunto de mapas potenciométricos sobrepostos são capazes de apontar a distribuição espacial das cargas hidráulicas de qualquer ponto de interesse, dentro do domínio simulado.

No conjunto, uma solução numérica parte de células de referência como condições de contorno das fronteiras do problema, sendo algumas destas células tomadas como condições internas de contorno. Estas últimas possuem a função de representar condições específicas de estresse hídrico, definindo o traçado longitudinal e largura de rios ou a capacidade de infiltração das determinadas células superficiais do modelo, por exemplo.

A representatividade de uma simulação em relação à um modelo conceitual pré-definido (incluso sua relação com volumes reais de chuvas e infiltração, por exemplo) é aferida pelo processo de calibração, no qual as cargas hidráulicas observadas são comparadas às calculadas. Em termos de processamento matemático optou-se pelo algoritmo Modflow, um conhecido e confiável código aberto, cedido pela Serviço Geológico norte americano (USGS).

Esta revisão pauta-se por uma detida descrição das rotinas de interpolação da presente proposta estocástica Markoviana (modelo M_{BDE}) nos termos matemáticos e sedimentológicos utilizados pelo algoritmo Tprogs. Descrevem-se também os procedimentos determinísticos de interpolação (modelo MBDD). Uma vez definidos os contextos geológicos, este trabalho passa a concentrar suas atenções a fundamentação e implantação da simulação numérica de fluxo.

4.1. GEOESTATÍSTICA DE HIDROFÁCIES DESCONTÍNUAS

Na geomatemática de Krumbein ou geoestatística de Matheron (Lanzarini, 1995), pela teoria das variáveis regionalizadas considera-se um intervalo amostral não só por valores (dados), como também pela posição georreferenciada de origem destes dados, como metadados.

A exemplo da regressão linear calcada na variância ou dispersão dos dados ao redor da média (Equação 1), as estimativas de krigagem da geoestatística fazem uso da variância espacial (Equação 2) em suas rotinas de ponderação ou interpolação (Yamamoto, 2000):

$$\text{var}(X) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \quad \text{Equação 1}$$

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

Equação 1: Esperança matemática do quadrado da diferença entre ‘n’ de teores (x_i) e a sua média;
Equação 2: Esperança do quadrado da diferença entre teores, suas posições relativas $Z(x+h)$ e médias $Z(x)$

Cadeias de Markov ou probabilidades de transição $|t_{jk}|$, por sua vez, também representam relações entre distâncias físicas de dados georreferenciados. Por definição, seus termos $|T_{jk}|$ igualam-se à variância espacial de geoestatística clássica (Equação 3), de Carle (1999):

$$2\gamma_{jk}(h) = p_j [2t_{jk}(0) - t_{jk}(h) - t_{jk}(-h)] \quad \text{Equação 3}$$

Equação 3: Relação entre cadeias de Markov e variância espacial. Onde: ‘ γ_{jk} ’ = variância espacial eventos ‘j e k’ e proporções ‘ p_j '; e ‘ t_{jk} ’ = probabilidades de transição para uma janela de amostragem de comprimento ‘h’

Entre krigagem determinística de memória infinitamente longa e simulação estocástica desprovida de qualquer memória em absoluto, e em extensão como alternativa a variância espacial ($2\gamma_{jk}$), destaca-se o caráter semi-estocástico da simulação indicadora sequencial (SIS) das cadeias de Markov $|T_{jk}|$ (Harbaugh & Carter, 1971).

O entendimento dos mecanismos de interpolação baseados na co-krigagem de cadeias de Markov pautam-se tanto pelos princípios matemáticos do algoritmo Tprogs, quanto pela fundamentação sedimentológica aplicada. Os primeiros são apresentados a seguir. Já os métodos interpretação relativos à sedimentologia, no caso de depósitos provenientes de rios e de leques aluviais, de acordo com as características da presente base de dados, são apresentados na sequência. Maiores detalhes de ambos (métodos) são descritos no Anexo B e no Anexo C.

O algoritmo Tprogs é depende dos seguintes conceitos: I: Matriz de cadeias de Markov; II: Transiograma de caminhamento a serem entendidos como ponderadores da geoestatística; III: Matriz gráfica de transiogramas; IV: Lei de correlação de fácies de Walther.

Como probabilidades de transição entre uma e outra litologia, Tprogs processa eventos separados por distâncias pré-definidas, ou seja, trata das possibilidades de ocorrência de uma ou outra litologia no espaço, a diferentes distâncias ou janelas de observação (Δh).

4.1.1. Cadeias de Markov

Conceito I: Cadeias de Markov demonstram a interdependência de padrões matemáticos em uma amostra unidimensional, a exemplo do poço vertical de litotipos A, B e C (Figura 11):

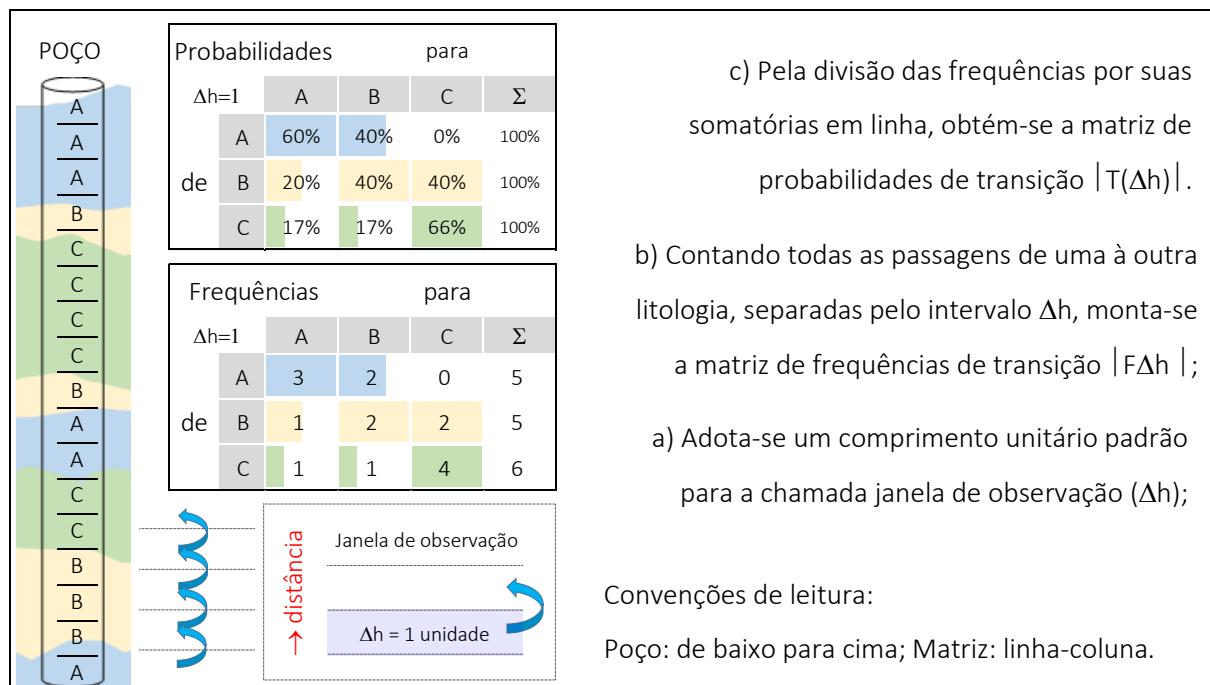


Figura 11: Poço vertical, contagens de frequências e definição de probabilidades de transição

Diante do que foi exposto na Figura 11 pode-se elaborar a seguinte pergunta: - Qual a chance da camada B ocorrer dois intervalos ($\Delta h = 2$ unidades) acima da camada C?

Resposta: Ainda que com pouca representatividade estatística, devido ao pequeno intervalo amostral, a solução vem do processo de potenciação ou exponenciação: $|T|^* |T|$.

$$|T|^2 = \begin{bmatrix} 60\% & 40\% & 0\% \\ 20\% & 40\% & 40\% \\ 17\% & 17\% & 67\% \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 60\% & 40\% & 0\% \\ 20\% & 40\% & 40\% \\ 17\% & 17\% & 67\% \end{bmatrix} \quad |T|^2 = \begin{bmatrix} 44\% & 40\% & 16\% \\ 27\% & 31\% & 43\% \\ 24\% & 24\% & 51\% \end{bmatrix} \quad \text{Equação 4}$$

De todos os caminhos entre BC,
observando a regra de multiplicação
matricial, linha x coluna, ($L_k \times C_j$):

$$|T(\Delta h_2)|_{B \rightarrow C} = |L_{B1}C_{A3}| + |L_{B2}C_{B3}| + |L_{B3}C_{C3}| = \\ (20\% \times 0\%) + (40\% \times 40\%) + (40\% \times 67\%) = 43\%$$

4.1.2. Transiograma(s) de caminhamento

Conceito II: Um transiograma Tprogs é uma matriz ‘de matrizes’ de probabilidades de transição. Trata-se de uma matriz gráfica, de dados experimentais e modelados (Figura 12):

- Traçam-se frequências de transição $|F_{jk}(\Delta h^*n)|$, da contagem $|F_{AA}|$ (Figura 12a);
- Desta, derivam-se curvas de probabilidades de transição $|\Gamma| |T_{AA}| |$ (Figura 12b).

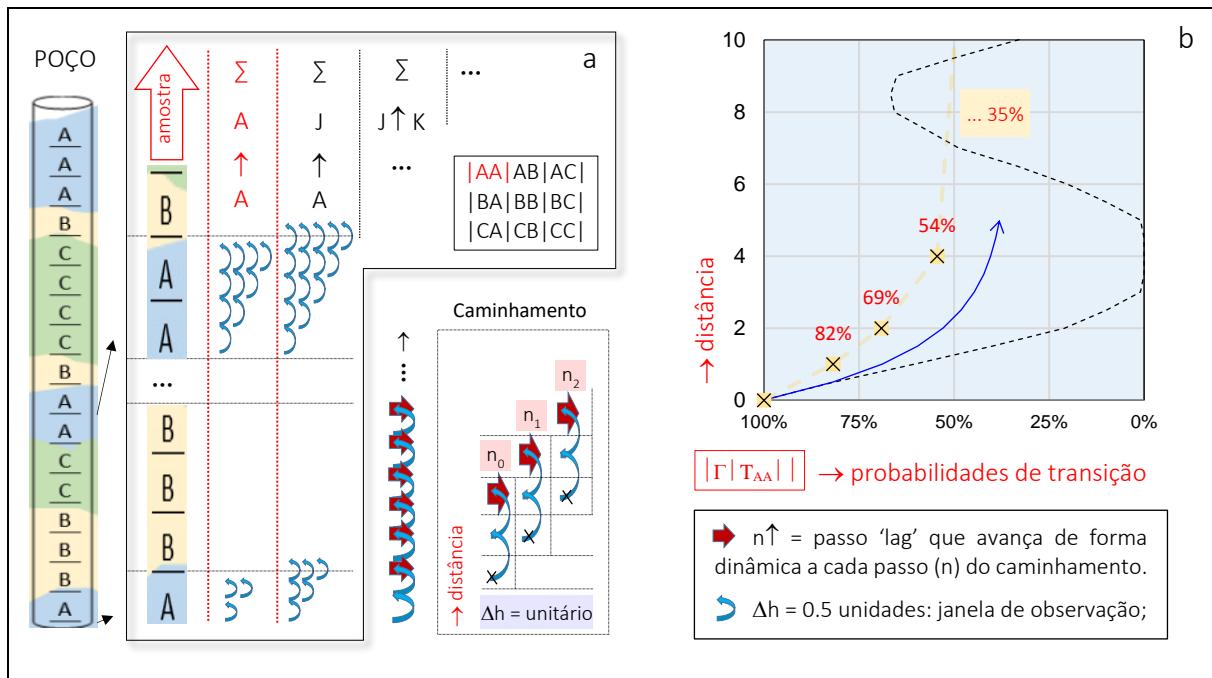


Figura 12: (a) Rotina amostragem de parte dos dados experimentais; (b) Transiograma gráfico $|T_{AA}|$

Tal amostragem (espacial) se move para cima até percorrer toda a base de dados, não de lado como apontado em perspectiva (Figura 12a). Já a curva modelada Tprogs (Figura 12b em azul), concorre com o procedimento de potenciação há pouco descrito (Equação 4). Assim, o gráfico $|T_{AA}|$ evolui até sua máxima potenciação (anexo B.1.1.e), como em $|T_{AA}|^{exp}$:

$$\begin{bmatrix} |T|^0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \therefore \begin{bmatrix} |T|^1 \\ 82\% & 8\% & 13\% \\ 16\% & 75\% & 9\% \\ 8\% & 13\% & 79\% \end{bmatrix} \therefore \begin{bmatrix} |T|^2 \\ 69\% & 14\% & 22\% \\ 25\% & 59\% & 16\% \\ 15\% & 20\% & 65\% \end{bmatrix} \therefore \begin{bmatrix} |T|^4 \\ 54\% & 22\% & 31\% \\ 35\% & 42\% & 25\% \\ 25\% & 27\% & 49\% \end{bmatrix} \therefore \begin{bmatrix} |T|^{exp} \\ 35\% & 29\% & 35\% \\ 35\% & 29\% & 35\% \\ 35\% & 29\% & 35\% \end{bmatrix}$$

O algoritmo Tprogs usa probabilidades marginais $|t_{jk}|$ (%) que evoluem no espaço à medida que se aumentam a distância entre os pontos observado e estimado.

No limite ou no patamar de suas inferências $|t^{exp}| = 35\%$ (Figura 12b), a potenciação retorna proporções médias ‘ p_j (%)’ coluna a coluna, evento por evento, das ocorrências de cada litologia presente na sequência estratigráfica ou poço de observação.

4.1.3. Matriz gráfica de transiogramas

Conceito III: pela matriz gráfica de transiogramas (ainda que para eixos ‘x, y’ invertidos em relação à anterior Figura 12b), observam-se todas as possíveis transições $|T_{jk}|$ entre as litologias ABC. Uma só matriz gráfica $|\Gamma_{JK}|$ contém todas as informações de interesse.

Na diagonal principal do transiograma gráfico (Figura 13a), probabilidades de transição partem de 100% (AA, BB, CC) e decrescem na direção do caminhamento. Fora desta diagonal principal, transições cruzadas $|T_{jk}|$ partem de 0% e crescem na medida em que um evento (materiais, litologia, hidrofáceis) se aproxima do próximo (AB, AC; BA, BC; CA, CB), porque as observações são tomadas entre dois pontos separados pela distância Δh . Sobrepostas às curvas pretas pontilhadas, as curvas azuis (contínuas) replicam os dados experimentais com uma única função matemática, chamada de curva modelada.

A Figura 13b, do modelo teórico de Carle (1999) observam-se na origem, para o menor intervalo de observação ($h \rightarrow 0$), as proporções médias ‘ $p_j (%)$ ’ de cada litologia $|T_j|$ em relação às demais. No eixo complementar (x), projetado do patamar da auto-transição tendendo ao infinito $|\Gamma_{jj}|T(h \rightarrow \infty)|$, se extraem seus comprimentos $L_{k,z}(m)$. E ainda na Figura 13b, segue uma rápida alusão às taxas de transição *transition rates* (α, r, π), como coeficiente de inclinação das curvas de probabilidades por intervalo ou janela de observação Δh ou ∂h_z .

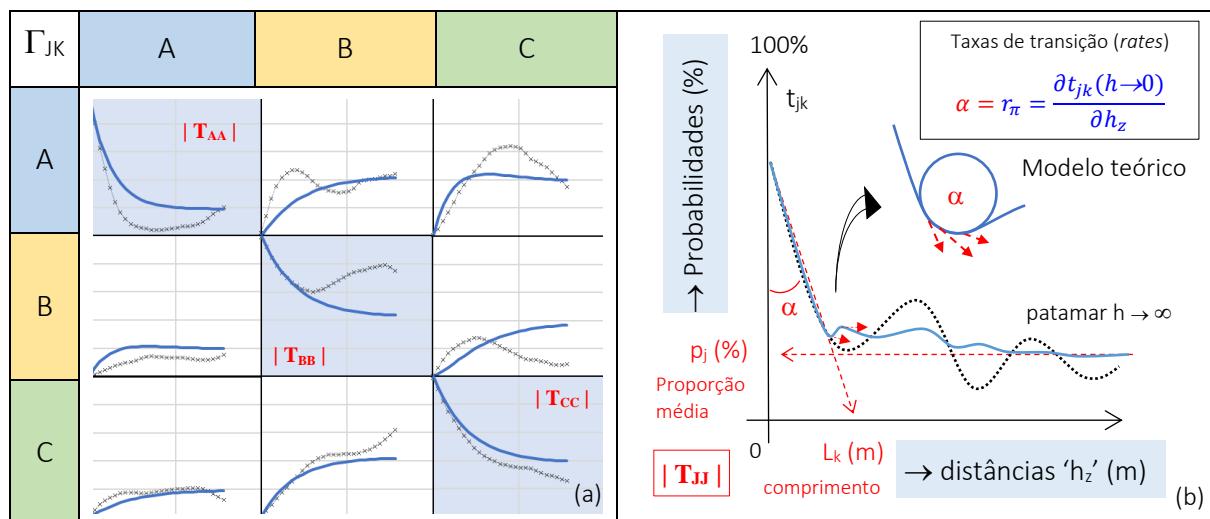


Figura 13: (a) Transiogramas de todas as possíveis transições entre os eventos ABC de uma base de dados;
(b) Modelo teórico (adaptado de Carle, 1999), taxas de transição ($\alpha = r = \pi$) obtidas graficamente.

Desta abstração matemática de padrões, tendências ou contrastes entre os eventos de um conjunto limitado de dados, um modelo de fluxo pode vir a se beneficiar pelo estruturamento de seus sólidos, junto às ordens preferenciais de recorrência das suas sequências estratigráficas.

4.1.4. Lei de correlação de fácies de Walther

Conceito IV: “Fácies de depósitos sedimentares que ocorrem em sucessões verticais concordantes também ocorrem em ambientes laterais adjacentes (Winge, M. et. al., 2001)”; A partir da lei de correlação de fácies de Walther, uma das mais antigas regras da geologia, a partir dos padrões verificados em uma direção (normalmente vertical ‘z’), inferências espaciais podem ser feitas para as demais duas componentes de direções do plano cartesiano horizontal.

Até o momento trabalhou-se com os dados de apenas um poço, embora esta análise se dê entre vários poços simultaneamente. A tomada de dados (1D) se deu na direção ‘vertical z’, ainda que esta ‘análise exploratória’ possa ser feita para qualquer direção ‘ ϕ ’ de interesse.

Uma vez processada a base de dados (*hard data*), expectativas de acúmulo dos depósitos de uma região sob escrutínio procuram ser combinadas aos padrões observados como premissas geológicas de ‘*soft data*’. Tratam-se dos coeficientes de Walther (Ω_j), necessários a promoção de mudança de escala (*upscaleing*) de forma individual para cada direção e ou litologia de interesse. Langousis et. al. (2018) estima como válidos os coeficientes $10 < \Omega_j < 100$. Com o algoritmo Tprogs usa por ‘*default*’ $\Omega_{j(z)} = 10\Omega_j(x, y)$, doravante adota-se a simbologia Ω_{j10} .

A conexão entre ‘*hard e soft data*’ é realizada para novos transiogramas que procuram repetir os padrões anteriormente definidos. A Figura 14 sintetiza (sobrepostos) os transiogramas experimental e modelado na direção (z), assim como suas versões agora apenas modeladas ou inferidas, também sobrepostas, um para cada direção de mergulho (y’) ou perpendicular (x’):

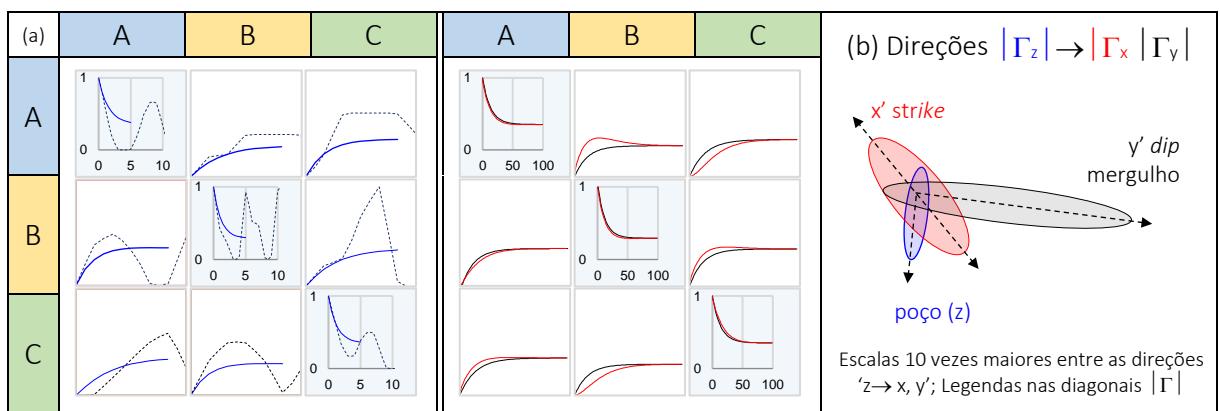


Figura 14: (a) Transiogramas experimental e modelado $|\Gamma_z|$ e transiogramas $|\Gamma_x| |\Gamma_y|$ de hidrofácies ABC, com coeficientes de Walther (Ω_{j10}); (b) Elipsoides / escala de influência de futura interpolação

O método permite o manejo direto de qualquer um de seus parâmetros, e procura replicar factíveis episódios de acúmulo e anisotropia deposicional, na simulação litoestratigráfica. Atenção para as diferentes escalas (eixo x) dos transiogramas gráficos da anterior Figura 14.

4.2. O ALGORÍTIMO Tprogs

4.2.1. Janelas de observação (Δh)

Assim como em métodos tradicionais, um resultado Tprogs depende do significado das cadeias de Markov. No contexto geológico, em relação aos desafios de se descrever diferentes materiais sedimentares acumulados ao longo do tempo, independentemente da técnica de prospecção de dados em campo, probabilidades de transição variam de acordo com o comprimento da janela de observação (Δh), fato que se constituía em uma das principais desvantagens da abordagem markoviana. A janela de observação aponta como o modelador “foca” sua visão naquilo que pode ser extraído do conjunto de informações sob análise:

- Dentre suas possibilidades de interpretação, historicamente procurou-se pautar a escolha de Δh pela melhor significância estatística de diferentes distribuições (de resultados em função de Δh), com a aplicação de testes como o qui-quadrado ‘ χ^2 ’ (Davis, 1973);
- Ante a morosidade das rotinas ‘ χ^2 ’, Tprogs dispõe de um rápido mecanismo de comparação de diferentes resultados, embutido em seu transiograma gráfico.

O algoritmo Tprogs inova com o uso do caminhamento da análise variográfica da geoestatística clássica. Sua matriz transiograma, encadeada a mudança de passos ‘n’, trata transições de simples ordem de observação e múltiplo grau de dependência (Figura 15).

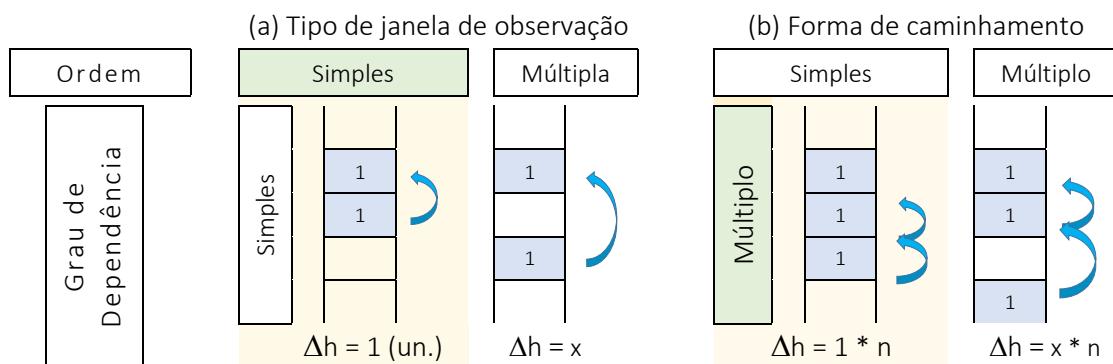


Figura 15: Grau e ordem de dependência das janelas de observação (Δh) (Harbaugh & Carter, 1971).

Variando-se (Δh) e coeficientes de Walther (Ωj_{10}), busca-se atribuir significados àquilo que, antes observado, será repassado às demais direções cartesianas (do bloco-diagrama 3D). O comprimento da janela de observação (Δh) deve ser proporcional às dimensões das estruturas (em si uma expectativa) sob análise (Fleckenstein & Fogg, 2005). Justificativas para a adoção de determinada magnitude para estes dois tipos de parâmetros podem ser procuradas em uma biblioteca de conceitos da sedimentologia, a ser discutida no item 0 e no Anexo C.

4.2.2. Variações da matriz gráfica de transiogramas Tprogs

A metodologia Tprogs disponibiliza quatro (+1) tipos de matrizes de probabilidades de transição. Somadas às independentes possibilidades de manejo de até cinco ponderadores de suas hidrofácies e três direções cartesianas, tratam-se 60 possíveis configurações básicas.

Sempre a partir da apenas uma primeira cadeia de Markov na origem do caminhamento $|\Gamma|T|_n \rightarrow 0|$, vinculada à Δh , pode-se assumir um dos seguintes modos de processamento:

- $|P|$ Probabilidades imbricadas;
- $|M|$ Probabilidades de máxima entropia;
- $|FT|$ Frequências Totais;
- $|R|$ Taxas de transição (*rates*), com possibilidade de ajuste a passos discretos $|A|$.

Para contornar as laboriosas rotinas matemáticas do algoritmo original de Carle (1999), recorreu-se uma combinação de antigas abordagens markovianas (algumas inalteradas desde sua formulação no século XVIII) e simples exemplos fictícios, processados em MS Excel.

Mesmo que se parte de uma baixa significância estatística (limitada quantidade de eventos / observações), seja uma base de dados de dois tipos de amostragem Δh (Figura 16ab): Uma primeira de frequências discretas $|F_{DIS}|$ contabiliza as probabilidades de transição entre pares equi-espaçados $|T(\Delta h_{\text{unitário}})|$. Porém os dados originais de campo acompanham, não raro, o mesmo ritmo de passagem de uma à outra camada segundo a evolução das sondagens, (Figura 16b $|T(\Delta h_{\text{não unitário}})|$) a amostragem “virtual, matricial” gera probabilidades de transição imbricadas $|P_{IMB}|$. Destaque, para a nulidade da diagonal principal de suas matrizes.

(a) $\Delta h = 1$		Amostragem discreta T_{DIS}		(b) $\Delta \neq 1$		Amostragem imbricada P_{IMB}				
	$ T $	A	B	C	\sum_j	$ P $	A	B	C	\sum_i
	1	60%	40%	0%	1	A	-	100%	0%	1
	2	20%	40%	40%	1	B	33%	-	67%	1
	3	17%	17%	67%	1	C	50%	50%	-	1
	4									
	5									
	6									
	7									
	8									
	9									
	10									
	11									
	12									
	13									
	14									
	15									
	16									
17										
	$ F $	A	B	C	\sum_j	$ F $	A	B	C	\sum_i
	A	3	2	0	5	A	-	2	0	2
	B	1	2	2	5	B	1	-	2	2
	C	1	1	4	6	C	1	1	-	2

Figura 16: (a) Probabilidades ‘normais’ com janela de observação (Δh) de valor unitário de camadas 1 a 17.
(b) Probabilidades ‘imbricadas’ com janela de observação (Δh) de valor, igual comprimento das litologias;

Probabilidades de máxima entropia ou aleatoriedade $|M|$ podem ser calculadas a partir amostragem imbricada, em um procedimento capaz de remover qualquer padrão dentre potenciais interrelações contidas na matriz original $|T|$. Seu cálculo propriamente dito toma frequências de transição ($t_{\pi_{jk}}$) divididas por seu somatório (antes subtraído do conjugado complementar) em linha (Walker, 1979). Comparar $|M|$ (Figura 17) com $|P|$ (Figura 16b).

frequências unitárias (f_{jk}), de máxima entropia				Matriz de máxima entropia $ M $
$t\pi_{(jk)}$	$f_{\sum j} / (\sum f_{\text{total}} - f_{\sum k})$	$t\pi_{ba} = 50\%$	$t\pi_{bc} = 45\%$	$\Sigma =$
$t\pi_{ab} = (5/(16 - 5)) = 45\%$				95%
$t\pi_{ac} = (5/(16 - 6)) = 50\%$		$t\pi_{ca} = 55\%$		95%
		$t\pi_{cb} = 55\%$		110%
				= 3

Figura 17: Cadeias de Markov de máxima entropia $|T_\pi|$ ou simplesmente $|M|$

De tão manifesta importância quanto a matriz de máxima entropia $|M|$, uma consequência da abordagem de transições imbricadas $|P|$ à luz do cálculo bayesiano de probabilidades condicionadas (Ross, 1988) é a entrega de resultados úteis à análise de processos geológicos de sedimentação, conquanto se faça compreensível seu significado (Figura 18):

Poço / amostra	$P(A, B) = P(B A) * P(A)$ $P(A, B) = P(A B) * P(B)$	$P(B A) = \frac{P(A, B)}{P(A)}$
A A A B B C C C B B A A C C B B A A	01 (Δh variável) amostragem a cada mudança litológica	Probabilidade condicional (Bayes)
	02 (Δh = unitário) amostragem a intervalos constantes	Probabilidade independente

Figura 18: Probabilidades condicionais, atribuídas à forma imbricada das cadeias de Markov

O cálculo bayesiano toma seus eventos como interdependentes (Figura 19), ou seja, condiciona a ocorrência de um evento a outro [.] precedente ‘ $P(B|A)$ ’, no espaço, ou no tempo:

$p_{jk}(h) = \Pr\{ \text{de 'k' ocorrer em 'x + h' se 'j' ocorreu em 'x'} \}$	
De Carle (1999): um índice $ t_{jk}(h) $ expressa: a probabilidade da litologia ‘k’ ocorrer na posição ‘ $x + h$ ’, desde que a litologia ‘j’ tenha sido anteriormente observada na posição ‘ x ’	

Figura 19: Significado: (Pr) probabilidades ou cadeias de Markov de imbricadas $|P|$

No modo imbricado, a diagonal principal (*embedded multi-story stages*) da matriz transiograma é nula. Tprogs, porém, ocupa esse espaço com os comprimentos médios (L_k) das camadas observadas, misturando unidades métricas com probabilidades (e taxas) de transição.

O imbricamento procura expressar naturais tendências de justaposição dos fenômenos observados em campo, à exemplo da granodecrescência ascendente (anexo C.5), onde se veem camadas de textura mais grossa (areias de base) passando a texturas mais finas (argilas de topo), como tradução depósitos formados pelo transporte seletivo de sedimentos mais pesados pelas águas em condições climáticas mais úmidas, seguidos por argilas e siltes sobrenadantes de tempo seco.

Frequências de transição totais $|FT|$ não são normalizadas em linha (Equação 5) mas sim pelo inteiro teor de suas matrizes (Davis, 1973; Carle, 1999), o que dilui seu condicionamento bayesiano (Equação 6). Não confundir $|FT|$ com a contagem inicial do início do processo $|f_{jk}|$.

$\sum_{k=1}^K t_{jk}(h) = 1 \quad \forall j$	Equação 5
$\Pr\{ 'k' \text{ ocorrer acima e de } 'j' \text{ ocorrer abaixo em } 'x + h' \mid \text{se } 'j' \text{ ocorreu em } 'x' \}$	Equação 6

Taxas de transição $|R|$ tratam diretamente os coeficientes angulares (em radianos) ou *transition rates*. Expressam as transições por intervalo de medição (Δh). Suas auto-transições e transições cruzadas possuem sinais trocados (+/-). E taxas ajustadas $|A|$, ocorrem finalmente quando se procura ajustar o transiograma modelado em uma segunda oportunidade de alteração do Δh . Esta é a versão que melhor representa os padrões de base de dados de maiores densidades de poços (Carle, 1999).

O objetivo último a ser alcançado é definir os ponderadores da interpolação requisitados pela rotina de co-krigagem (não discutida neste trabalho). Rotinas estas que se encarregam de transmitir o que foi observado, e decorrente interpretação sedimentológica, para todo e qualquer ponto de um conjunto de blocos-diagrama equiprováveis Tprogs. Observar-se que a metodologia transforma uma janela de observação discreta em uma amostragem à passos contínuos ($\Delta h \rightarrow h$), como demonstrado no anexo B.1.1.d. E novamente, apenas uma matriz de na origem (Equação 7) é processada pela potenciação SVD (Anexo B).

$\partial t_{jk}(h \rightarrow 0) / \partial h_z$	Onde ($h \rightarrow 0$) = início do caminhamento	Equação 7
---	---	-----------

4.2.3. Barras empilhadas: Uma mesma base de dados sob diferentes perspectivas

Tendências descritas pelos índices situados em lados opostos da diagonal principal, como correlações cruzadas de *off-values*, seja em uma cadeia de Markov ou no transiograma de caminhamento Tprogs, comportam-se como covariâncias espaciais capazes de expressar o caráter estocástico ou probabilístico de variáveis regionalizadas (Figura 2).

Se de um lado o algoritmo Tprogs possui indiscutível versatilidade por abranger as mais diversas situações, de outro lado é da opinião do autor que peca pela falta de um mecanismo de comparação de suas diferentes variações e aplicabilidades. Por este motivo este trabalho conta com gráficos de barras empilhadas, computados pela transformação direta dos índices de correlação cruzada $|t_{jk}|$ da matriz basilar $|T(h \rightarrow 0)|$ em porcentagens de seu somatório em linha. Tal método não ignora a diagonal de auto-transições, elas não existem no formato imbricado.

O exemplo da Figura 20 dedica-se à comparação dos padrões $|t_{jk}|$ de uma mesma base de dados, no caso tomados como taxas ajustadas $|A|$ e frequências de transição $|F|$:

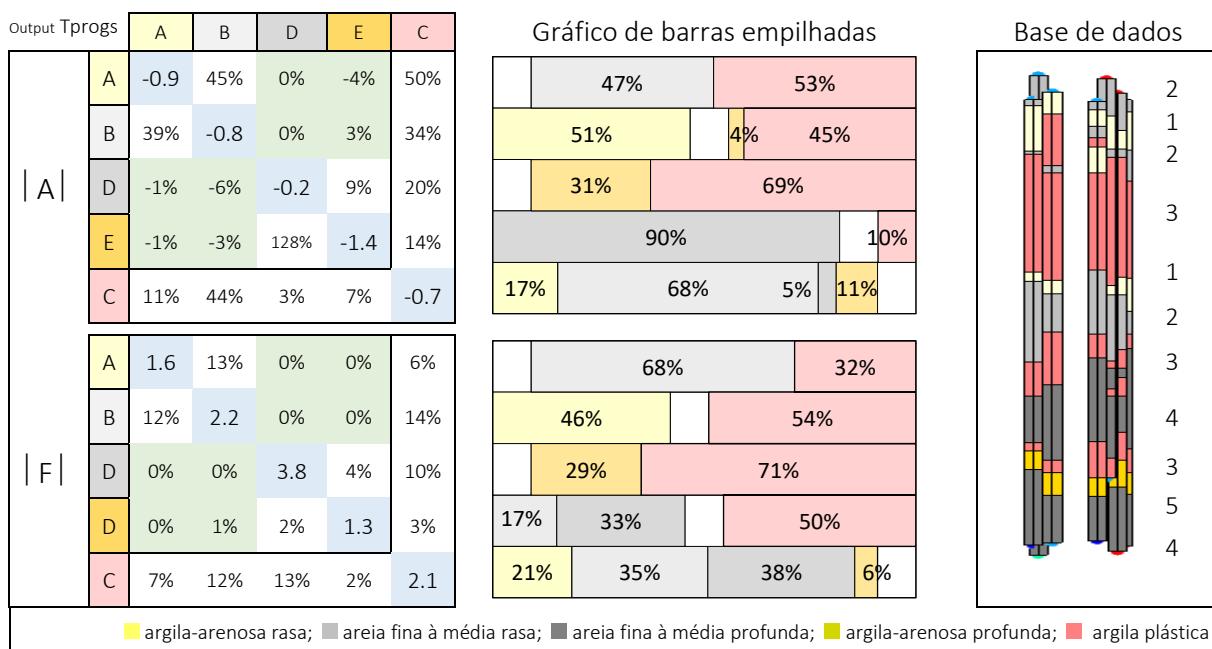


Figura 20: Taxas e Frequências de transição (destaque em verde); taxas r_j e comprimentos L_k (em azul); Barras empilhadas $|t_{jk}|$ dedicados a interpretação e não processamento dos dados; diagonal de auto-variâncias nulas.

Já se pensando em seu significado geológico (anexo B.2), o exemplo da Figura 20 destaca as hidrofácies arenosas superiores |1| e |2| sendo apartadas dos canais fluviais inferiores |4| e |5| (destaques na cor verde), acima e abaixo da diagonal principal destacada em azul. De onde se verifica como os padrões matemáticos descrevem a recorrência de tal base de dados.

Pela convenção (linhas A, B, D, E, C - coluna) e barras empilhadas $|A|$ na Figura 20:

- De $|A|$ as estimativas para a próxima camada são as hidrofácies: $|B(47\%)|, |C(53\%)|$;
- De $|B|$ destacam-se as probabilidades: $|A(51\%)|, |E(4\%)|, |C(45\%)|$;
- De $|D|$ destacam-se as probabilidades: $|E(31\%)|, |C(69\%)|$;
- De $|E|$ destacam-se as probabilidades: $|D(90\%)|, |C(10\%)|$;
- De $|C|$ destacam-se as probabilidades: $|A(17\%)|, |B(68\%)|, |D(5\%)|, |E(11\%)|$.
- Norma: Hf_C, de *background* (anexo B.1.1.f), fica à margem nas matrizes Tprogs.

Da mesma base de dados, de cadeias de Markov nos modos de taxas $|A(h)|$, frequências $|F(h)|$ e máxima entropia $|M(h)|$ a Figura 21 destaca, em sobreposição, a matriz gráfica dos respectivos transiogramas de caminhamento, já em sua forma modelada. Trata-se de uma comparação (também por barras empilhadas) dos dados originais (Tprogs), estes referentes ainda à apenas em uma das direções cartesianas (vertical, base-topo) de observação.

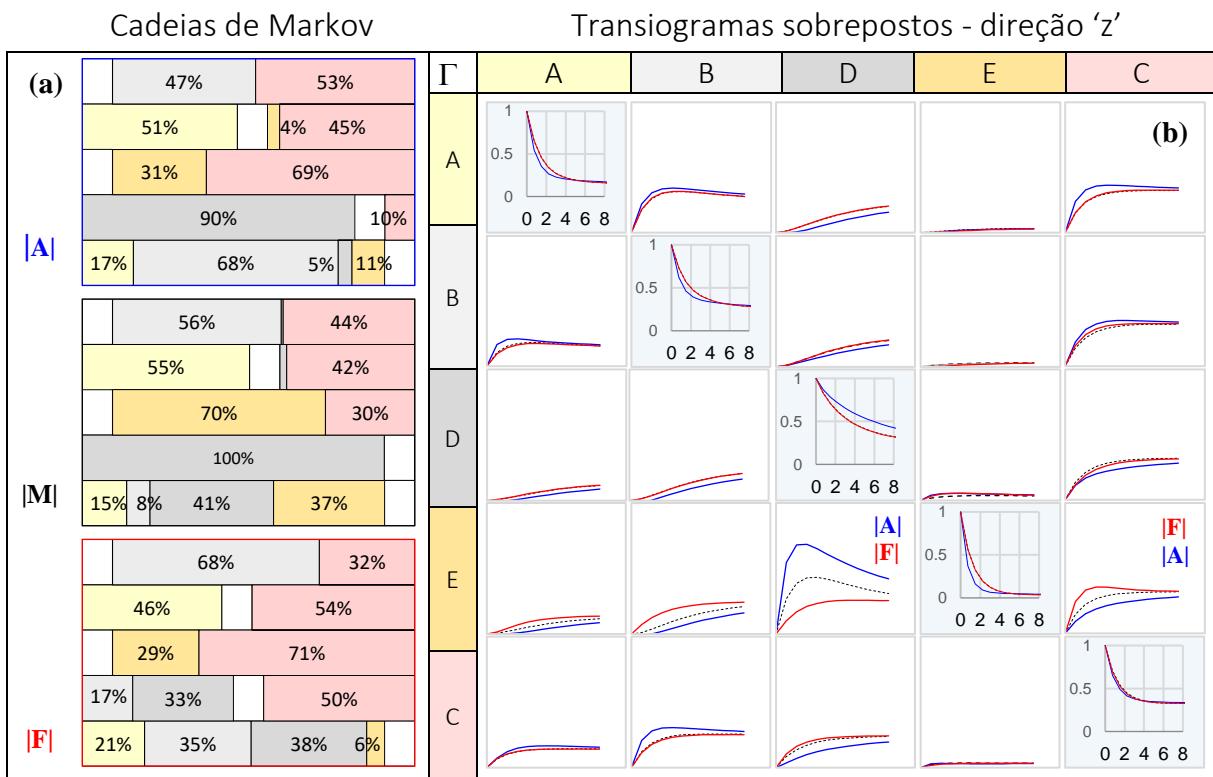


Figura 21: (a) Gráfico de barras de taxas, máxima entropia e frequências entre hidrofácies 1 a 5; (b) Sobrepostos na direção z, comparam-se seus respectivos transiogramas caminhamento: $\Gamma_z |A|M|F|$

Após uma primeira comparação em porcentagem no gráfico de barras, verificam-se seus padrões pela sobreposição dos transiogramas de caminhamento (Figura 21b). Tais curvas dos transiogramas contêm as probabilidades de transição $|A|M|F|$, como descrição do derradeiro comportamento dos padrões a serem interpolados, para diferentes distâncias ($\Delta h * n$).

É imperioso se ter em mente ao menos duas especificidades da metodologia Tprogs:

- Alocam-se dois tipos de informação dentro da mesma matriz e seus transiogramas:
 - Comprimentos médios ‘ $L_k(m)$ ’ ocorrem na diagonal principal (em azul), e ocupam um espaço originalmente vazio na amostragem imbricada tradicional (Walker, 1979);
 - Enquanto os demais valores (*off-values*) apontam, as informações de efetivo interesse para os dispositivos de co-krigagem 3D, para o preenchimento do bloco-diagrama;
- Outra característica basilar é a diferença entre máximas entropia observada e modelada Tprogs, úteis na transferência de padrões de uma para outra direção ‘ $Z \rightarrow x, y$ ’.

Um transiograma (matematicamente) modelado deriva-se de um primeiro, experimental (suprimido da Figura 21). Este é apenas descritivo (ver dispositivo de pesquisa no anexo B.1.1).

Da transferência de padrões da lei de Walther ($L_H = 10L_V$ Langousis *et. al.*, 2018), segue um exemplo de diferenças entre dados observados (experimentais) e modelados (Figura 22):

M observado					M modelado				
A	B	D	E	C	A	B	D	E	C
1.6	147%	8%	3%	100%	16	1	1	1	1
159%	2.2	7%	55%	105%	1	22	1	1	1
0%	0%	3.8	199%	137%	1	1	38	1	1
0%	0%	470%	1.3	52%	1	1	1	13	1
82%	39%	194%	175%	2.6	1	1	1	1	26
					57%	39%			
					49%	17%	32%		
					59%	41%			
					90%	10%			
					17%	8%	40%	36%	

Figura 22: (a) Máxima entropia observadas (cálculo à priori); (b) Modeladas / induzidas (cálculo à posteriori).

Cada modo de processamento $|P| M | F | R |$ soma diferentes proporções de *off-values* $|t_{jk}|$ em linha (Figura 23). A soma das taxas de transição cruzadas dos modos $|R| A |$ equivalem ao inverso de suas auto-transições (Equação 8), porque o somatório de cada linha, como matriz quadrada de determinante igual a zero (anexo B.1.2) é nulo (Equação 9).

$ R & A $ Taxas \sum zero					$ P $ Probabilidades \sum 5					$ F $ Frequências \sum 1					$Máxima$ entropia \sum 20													
- r	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	L	25%	25%	25%	25%	25%	1	L	5%	5%	5%	5%	20%	1	1	1	1	1	4
25%	- r	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	1	1	5%	5%	5%	5%	20%	1	1	1	1	1	4
25%	25%	- r	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	1	1	5%	5%	5%	5%	20%	1	1	1	1	1	4
25%	25%	25%	- r	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	1	1	5%	5%	5%	5%	20%	1	1	1	1	1	4
25%	25%	25%	25%	- r	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	25%	1	1	5%	5%	5%	5%	20%	1	1	1	1	1	4

Figura 23: Padrão teórico dos quatro diferentes modos de processamento Tprogs; Nas diagonais principais alocam-se taxas de transição (r_j) e comprimentos médios (L_k) de cada hidrofácie (extraídas do transiograma)

$$r_{jj} = - \sum_{k \neq j}^K r_{jk} \quad \text{Equação 8}$$

$$\sum_{k=1}^K r_{jk}(h) = 0 \quad \forall j \quad \text{Equação 9}$$

Novamente, voltando a primeira referência das cadeias de Markov deste texto (Figura 2), probabilidades de transição cruzadas (*off-values* $j \rightarrow k$), como covariâncias espaciais e expressão estatísticas de posição das informações dentro da base de dados, ditam como será o comportamento das interpolações durante a co-krigagem / simulação SIS; Enquanto junto às proporções médias $p_j(\%)$, surgem os comprimentos $L_k(m)$ na diagonal principal ($j \rightarrow j$) de auto-transições do método Tprogs, apenas como informações que descrevem uma base de dados.

Uma vez modelados, os padrões experimentais podem ser repassados de uma para outra direção cartesiana, via simples multiplicação seus índices matriciais (Figura 24).

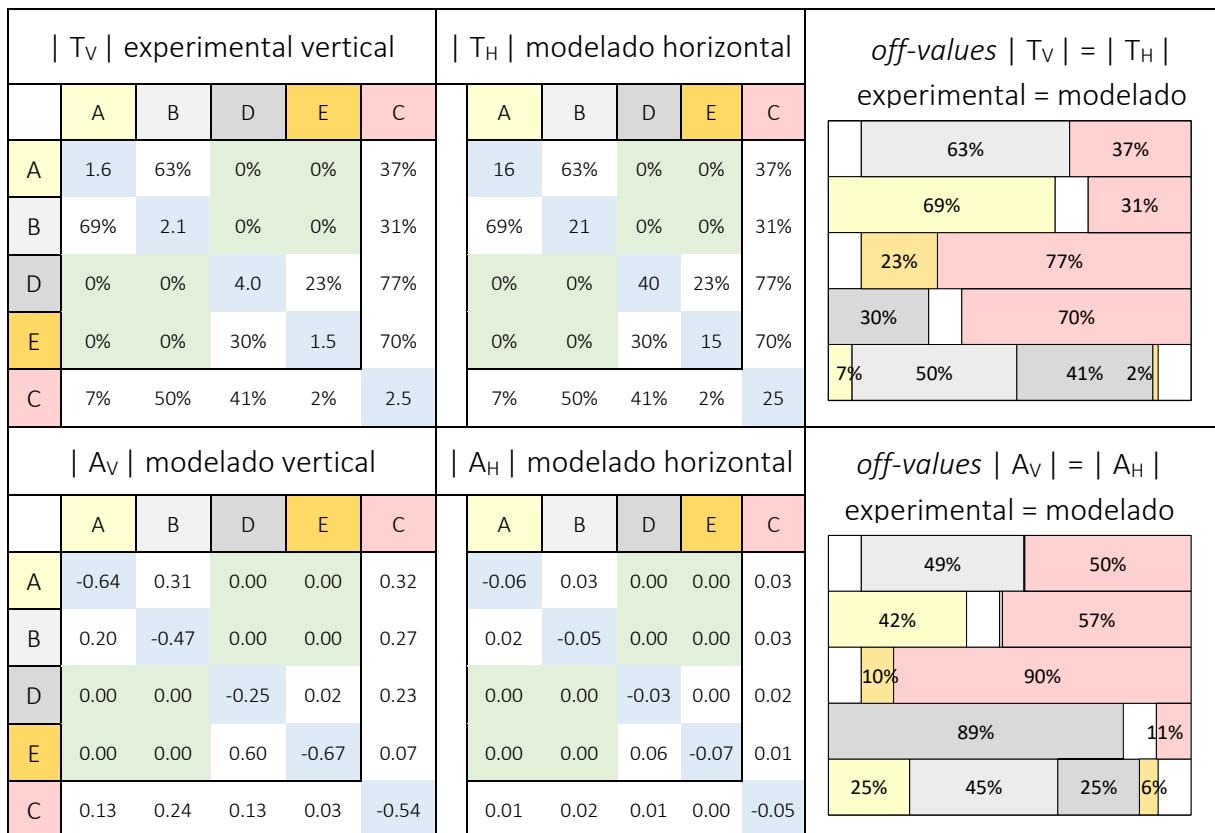


Figura 24: (a) Probabilidades (experimental vertical) e taxas (horizontal modelada / inferida) de hidrofácies 1 a 5 (padrões verdes em destaque); Off-values indicam que coeficientes de Walther não alteram padrões $V \rightarrow H$.

A cadeia de Markov $|P|M|F|R|$ mais apropriada caso a caso depende de seu significado sedimentológico. Primeiro os gráficos de barras e padrões $p_j(\%)$ e $L_k(m)$ apontam o que pode ser extraído de uma base de dados. Observa-se então o primeiro transiograma de caminhamento. Por fim, para as três direções cartesianas e até cinco hidrofácies, ajustam-se novos transiogramas. Tarefa última que precisa ser justificada por argumentos da sedimentologia, de forma condizente com as expectativas de acúmulo de sedimentos na região em estudo.

O item 4.3 contém alguns fundamentos sedimentológicos a serem respeitados.

4.2.4. Particularidades do algoritmo Tprogs (estudos anteriores)

Seguem trabalhos com foco em detalhes do algoritmo Tprogs e códigos associados:

Langousis *et. al.*, (Nature, 2018) aponta limites de utilização de coeficientes de Walther ‘ Ω ’ nas inferências de continuidades espaciais 3D a partir de dados 1D. Mostra o quanto um sólido Tprogs pode se aproximar de um modelo sintético previamente elaborado.

Sartore (2013) replicou o algoritmo Tprogs na linguagem R (spMC package).

Jones *et. al.*, (2005) adaptou as rotinas de interpolação Tprogs ao pacote HUF (*Hydrogeologic Unit Flow*). Ao separar as discretizações entre domínio numérico e domínio litoestratigráfico removeu uma das principais fontes de instabilidade ligadas ao conceito de ‘molhabilidade’ das células de fluxo durante o processamento Modflow 2000.

Carle *et. al.*, (2006), autor do método Tprogs, aprimora a descrição e aplica sua solução a um modelo de transporte para contaminação por nitrato.

Outros trabalhos focam mais na aplicação do algoritmo Tprogs em estudos de caso. Fleckenstein & Fogg *et. al.*, (2005) utilizando a simulação numérica (de zonas insaturadas inclusive), procuram descrever como heterogeneidades de uma planície aluvial interagem na distribuição das condutâncias da condição de contorno ‘rio’, refletidas como carga e descarga de um aquífero livre. Tais autores destacam boas noções dos modos de funcionamento Tprogs, com destaque para a escolha de janela de observação ‘ Δh ’ e coeficientes de Walther ‘ Ω ’.

Engdahl *et. al.*, (2010), pela dificuldade de se aglutinar o comportamento estatístico de diferentes formações em um só produto de suas realizações, propõem a abordagem ‘InMod’. Procuram processar um conjunto de “eventos” de distintas gêneses sedimentares, primeiro identificando de modo determinístico o traçado de superfícies erosionais e ou marcas de estratificação cruzada mais evidentes como ‘*bounding surfaces*’ via GPR (*ground penetrating radar*). Em um segundo momento, de maneira estocástica, “preenchem” o espaço entre as superfícies estabelecidas com o esperado padrão de heterogeneidade estocástico Tprogs.

He *et. al.*, (2013), de bases de dados de naturezas distintas e nos mesmos moldes de Engdahl & Weissmann *et. al.*, (2010), procuram interpretar dados geofísicos tomados por via aérea a partir de informações mais detalhadas observadas em furos de sondagem. Ao aportar ao Tprogs dados mensurados em campo nas direções três direções cartesianas, esta abordagem não faz uso das inferências espaciais propostas pela lei de Walther.

4.3. SEDIMENTOLOGIA

No contexto hidrogeológico, o método Tprogs depende de conceitos sedimentológicos como forma imprescindível de atribuir significado a qualquer padrão matemático destacado.

Interpretações (*soft data*) são incorporadas à base de dados (*hard data*) em uma análise dual que aglutina tanto os dados de campo (comprimentos, proporções, recorrência e tendências de justaposição de hidrofácies), quanto sua interpretação, principalmente nas direções x' e y' normalmente não amostradas e relacionadas às continuidades laterais das camadas litológicas.

A exemplo das tradicionais funções seno, cosseno e tangente, um transiograma é processado com uma função trigonométrica cíclica (Figura 13b). Ao se tomar a sazonalidade ou recorrência dos processos sedimentares (Figura 25), aventa-se a serventia do código Tprogs.

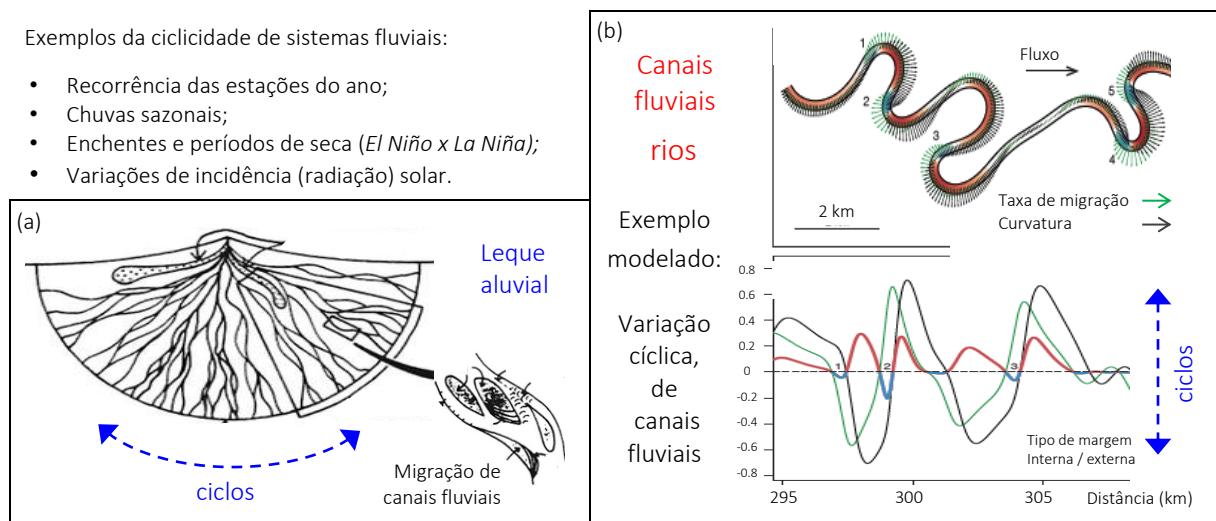


Figura 25: Ciclicidade de sistemas deposicionais (a) adaptado de Miall, 1996; (b) e de Sylvester *et. al.*, 2019)

Como uma análise dedicada a um ambiente deposicional em específico, para o presente estudo de caso pauta-se pelo entendimento geológico de sistemas fluviais de caráter continental, de ‘depósitos de planícies de deposição’ em consonância com ‘depósitos de leques aluviais’. Se utiliza como unidade de comparação (categoria) o termo hidrofácie, definido como “corpos uniformes e características formas subjacentes, sobrejacentes e laterais” (Winge, 2001).

Diferentes tipos de depósitos (sobrepostos) podem pertencer a um ou mais aquíferos. Os entendimentos sedimentológicos aplicáveis começam pelo conceito de categorização (item 4.3.1) e terminam por discutir conceitos de heterogeneidade, estacionariedade e anisotropia (item 4.3.2). Já a configuração final Tprogs utilizada no estudo de caso para traduzir as observações de *soft data* em termos quantitativos, como probabilidades de transição, se encontram na seção Materiais e Métodos (item 5.2.2) e seção Resultados (item 6.2.2).

4.3.1. Categorização da base de dados

Uma base de dados pode ser contínua ou discreta. Amostras regulares geram uma base de dados de natureza contínua (metro a metro, por exemplo). Amostras pontuais, coletadas de acordo com sua própria ocorrência em profundidade (mais frequentes, inclusive, com dados de camadas de diferentes espessuras) são classificadas como de natureza discreta (categórica).

Como incertezas já vêm associadas aos dados em sua própria amostragem, a categorização procura entender como as informações originais foram processadas antes de chegar ao modelador. Desta maneira, procura-se por oportunidades de pré-processamento da própria base de dados (*hard data*) ainda antes de se iniciar qualquer fase de construção do modelo litológico, o que será realizado nas consequentes fases de interpolação. A amostragem indicadora Tprogs (binária, categórica) já disponibiliza, de início, rotinas para o entendimento dos dados pela visualização de proporções ($p_j(%)$) e comprimentos médios ($L_{k(m)}$) (Figura 13).

Geometria, compartmentalização, estrutura, gradiente textural e estratificação formam a arquitetura litológica de um pacote estratigráfico (Miall, 1985; Galloway, 1996). E destas classificações derivam-se sugestões de como fácies de um sistema deposicional podem servir como balizas ou marcos de interpretação e interpolação quantitativa de uma base de dados.

Distintas estruturas deposicionais podem ser identificadas segundo a constituição, granulometria, angulosidade e tipos de acamamento de seus depósitos (Fogg, 1986). Marcas de ondas, de correntes e bioturbações podem ajudar na separação entre camadas discordantes. Pode-se depreender ângulos de deposição em relação à superfície topográfica, diferenças entre estruturas graduais (ascendente ou descendente) ou de deposição (acrescionárias ou planares), etc. Tais julgamentos faciológicos estão normalmente fora do escopo de modelagens de fluxo, ainda que se saiba que o conhecimento do processo deposicional pode proporcionar valiosas contribuições para a idealização de qualquer modelo (hidro)geológico conceitual (Fogg *et. al.*, 1998). Um dos focos do presente trabalho é justamente reforçar a importância desta abordagem.

Diferentes combinações dos básicos materiais (areia, silte e argila) são vistos como litofácies, litossomas, e até como ocorrências de formações geológicas dependendo da área de cobertura de um modelo numérico (ver anexo C.1- Escalas de observação).

O método Tprogs utiliza dados categorizados em hidrofácies, como artifício para proporcionar ao modelo de fluxo, informações já interpretadas e previsíveis dentro de um modelo teórico de sedimentação em específico (Maples, 2010).

4.3.1.1. Hidrofácies como elementos de interpretação

O comportamento característico de três categorias de hidrofácies de sistemas fluviais, (associadas a uma quarta categoria de fácies coluvionar) exemplifica de forma elucidativa como se iniciar uma descrição litológica favorável ao entendimento de mecanismos de acúmulo / erosão de sedimentos, entre cíclicos períodos de seca e inundaçao (Figura 26).

(A) Fácies de Canal - *Channel*, constituída de areia e conglomerados, depositam-se ao longo dos canais fluviais. Passível de retrabalho, predomina como depósitos de fundo;

(B) Fácies Planície de Inundaçao - *Floodplain*, preenchem a maior parte de uma bacia sedimentar; seus sedimentos finos e argilosos são depositados ao longo de extensos períodos de tempo, apenas quando as águas dos rios, que os transportam em suspensão, são capazes de transpor os altos taludes das margens em períodos de enchente;

(C) Fácies de Diques Marginais - *Levee*, de constituição arenosa, derivam-se do transbordamento de canais durante as cheias. Formam depósitos alongados margeando os canais, depositando-se rapidamente por gravidade (maior peso específico e consequente desaceleração pela presença de vegetação após sua transposição acima do talude);

(D) Fácies de Coluvião - *Debris flow*, formado por depósitos diversos e sem orientação definida, derivam-se de fluxos gravitacionais, voçorocas e afins. Formam conspícuos depósitos de granulometria indefinida de materiais finos a matacões não selecionados. Possuem orientações normalmente perpendiculares a direção de maior comprimento dos vales, portanto dispõem-se de maneira transversal em relação as demais hidrofácies de um sistema fluvial associado.

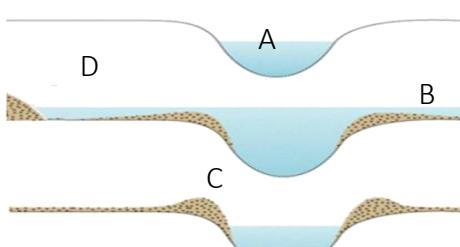
Planície Aluvial	Nomenclatura - Materiais
Pré alagamento	A - Fácies de Canal - Areia e cascalho
	B - Fácies Planície de Inundaçao - Argila e silte
	C - Fácies Dique Marginal - Areia fina, e argila
Pós alagamento	D - Fácies Coluvionario - Areia e silte

Figura 26: Fácies fluviais ABC(D), função da ciclicidade de períodos de pré e pós alagamento

4.3.1.2. Evolução de fácies sedimentares de sistemas sedimentares fluviais

Um arranjo teórico de canais fluviais, arenosos, dispersos e sobrepostos em uma matriz argilosa (planícies), exemplifica o assoreamento de toda uma bacia hidrográfica ao longo de expressivos intervalos de tempo. De baixo para cima, pode-se relacionar três principais tipos de sistemas fluviais que não ocorrem necessariamente nesta ordem (Figura 27).

- Rios entrelaçados (braided) são competentes no transporte de areia e cascalho. Antigos e profundos, formam depósitos bem definidos por suas grandes extensões no fundo de vales anteriormente entalhados no embasamento. Seus depósitos podem ocorrer também intercalados por fácies argilosas, sendo estas uma demarcação de descontinuidades que, por sua vez, podem representar períodos erosão ou não deposição - de extensão variada;
- Rios meandrantes (meandering) carregam sedimentos finos e coesivos (argilosos). Com margens estáveis, reforçadas quando da presença de vegetação, criam condições mais ou menos sinuosas segundo a necessidade de vencer obstáculos de escoamento. Canais mais estáveis são mais propícios ao avulsionamento horizontal;
- Rios anastomosados (anabranching or anastomosed), exemplo extremo de depósitos lenticulares das planícies de baixa declividade, comum nas porções finais (exutórios) de bacias hidrográficas. Canais de maior estabilidade (sistemas I e II), diversamente espaçados em função da estabilidade de suas margens (presença de vegetação) e ou competência de escavação do curso d'água (tipo de solo, e carga de sedimentos presentes nos rios) ocorrem isolados por extensas planícies de aluvião.

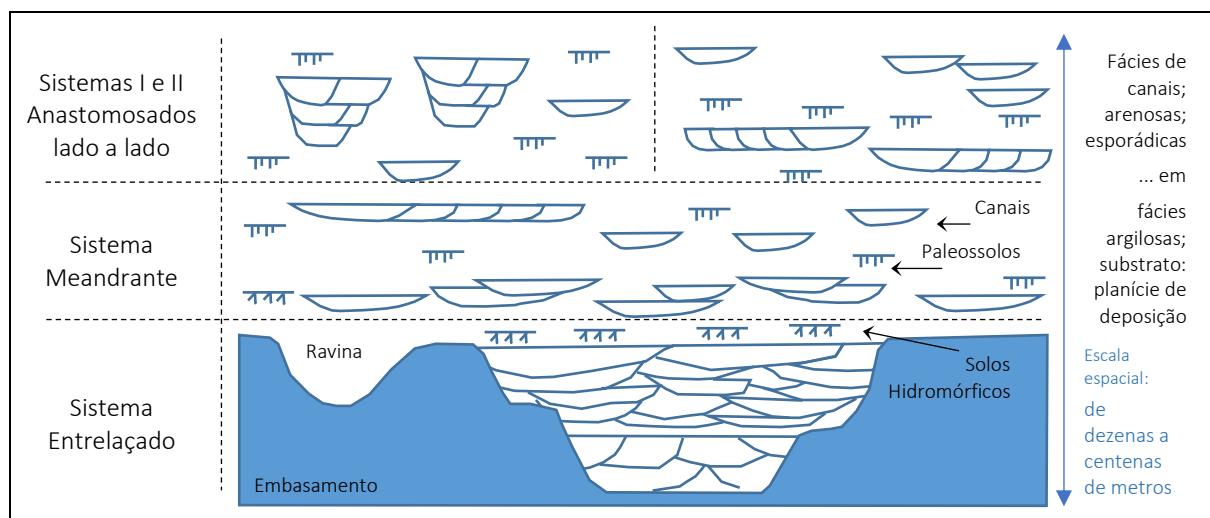


Figura 27: Modelo teórico geral de preenchimento de vales continentais, com depósitos de fácies fluviais sobrepostos ao longo do tempo, adaptado de Wright and Marriott (1993)

De duas dezenas de modelos fluviais conceituais já estabelecidos por Miall (1996), destacam-se alguns exemplos mais extremos, dispostos na Figura 28 segundo a ordem teórica de assoreamento de ambientes progressivamente menos energéticos.

Em consonância com os conceitos de análise arquitetônica das estruturas sedimentares (Miall, 2000), assim como de hierarquias e *bounding surfaces* (ver anexo C.3), procura-se evitar o processamento de dados de naturezas distintas, como destacam quatro distintas matrizes de probabilidade de transição de valores, ainda que fictícios, seriam dedicados a cada um dos quatro sistemas sedimentares apresentados (Figura 28).

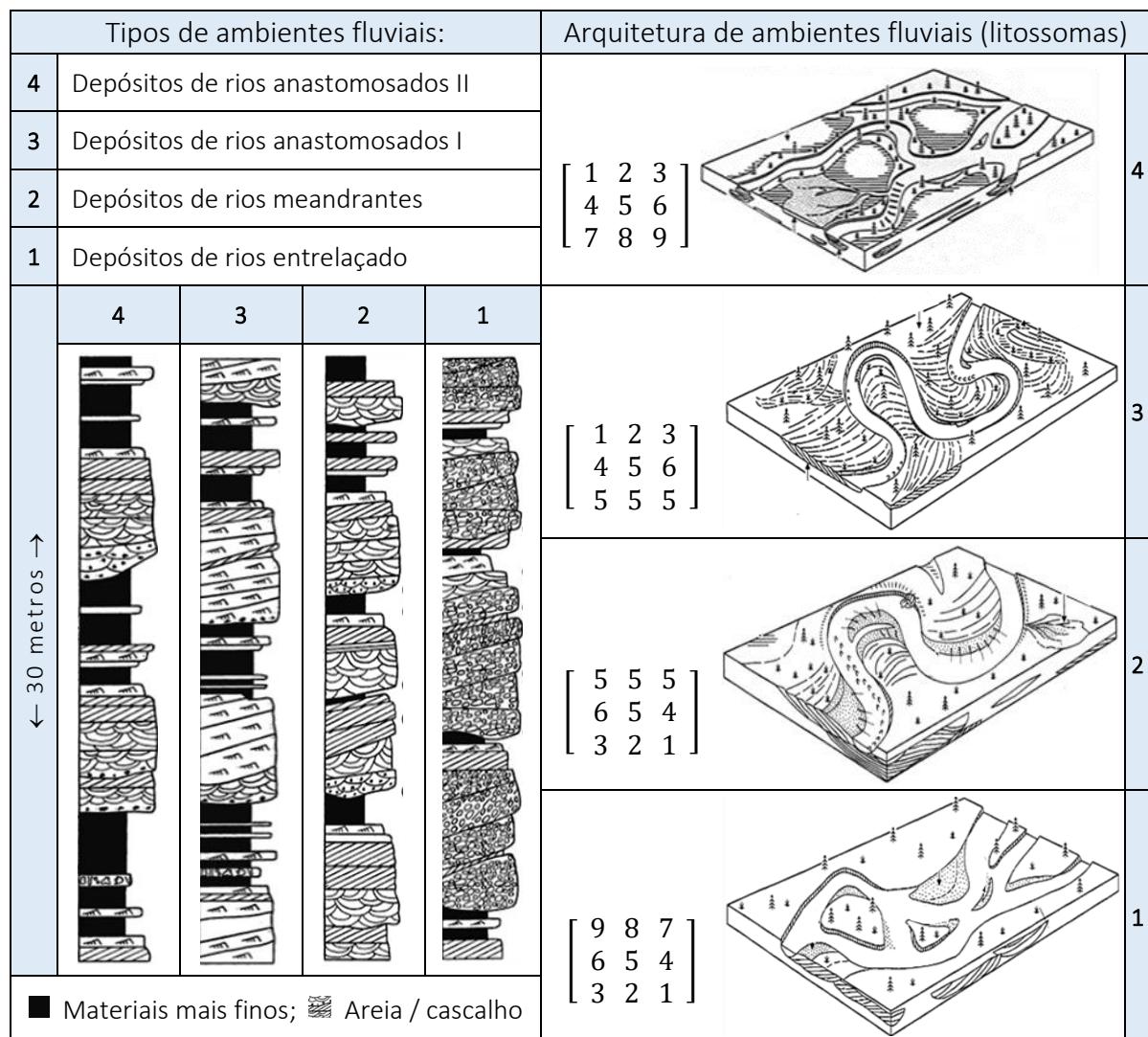


Figura 28: Depósitos característicos de cada litossomas (Miall, 2000), com matrizes quantificando as observações

Na prática, deve-se ter o cuidado para não comparar dados de estratos geneticamente incompatíveis. O processamento Tprogs depende antes de premissas muitas vezes não prontamente disponíveis, a serem depreendidas de uma análise sedimentológica na qual procura-se identificar discordâncias de separação entre sistemas deposicionais distintos, tais

como descontinuidades erosivas, de não-deposição, contatos graduais concordantes, etc. Na presença de elementos que permitam tais separações, como em análises que identifiquem paleossolos e ou solos hidromórficos (Figura 29 - Traum *et. al.*, 2014), pode-se pensar no traçado de superfícies tridimensionais que subdividam os sistemas a serem trabalhados de forma independente. Engdahl & Weissmann *et. al.*, (2010) descrevem um exemplo de simulações litoestratigráficas sobrepostas, uma para cada formação em específico.

“Na natureza, qualquer mudança nos parâmetros de um sedimento [dentre as cílicas possibilidades de alteração da intensidade do intemperismo, ou em resposta a eventos tectônicos, por exemplo] produz também mudanças de suas taxas de deposição” (Schwarzacher, 1975). Ciclos dentro de ciclos de deposição ocorrem em profundidade, na forma de independentes pacotes sedimentares sobrepostos (Weissmann & Fogg, 1999) e também lateralmente, como rege a lei de correlação de fácies de Walther.

Desde que aplicado dentro de um mesmo sistema sedimentar, o transiograma de Carle (1999) se dispõe a identificar padrões de deposição, o que é facilitado (acredita-se) quando se trabalha poços mais rassos. No presente estudo de caso, procura-se o significado de padrões sob diferentes janelas de observação e tipos de cadeias de Markov, neste último caso com destaque para a comparação de matrizes em formato imbricado e de máxima entropia (ver item 4.2.2).

4.3.2. Heterogeneidade, estacionariedade e anisotropia

Fenômenos de deposição e acúmulo de fácies sedimentares dependem de eventos climáticos específicos. “Depósitos de aluvião”, por exemplo, ocorrem não como atividades diárias da água corrente, mas como acontecimentos periódicos de sedimentação em larga escala, de distintas épocas de inundações (Suguio, 2003) separadas por grandes intervalos de tempo. Portanto escolhas de ‘ Δh ’ e de métodos de interpolação, formas de se entender a complexidade ou heterogeneidade de um local, devem respeitar o princípio da estacionariedade das informações dentro de uma base de dados (Harbaugh & Carter, 1971).

A estacionariedade se refere a escala de observação das sondagens em profundidade (Figura 29), características que levam uma média e desvio padrão para diferentes conjuntos de observações. Limites ao processamento dos dados devem ser impostos para evitar a comparação de dados de natureza distinta, como no caso da falta de argumentos para se justificar a comparação de hidrofáceis ou sistemas sedimentares que possam ou não estar relacionados.

Por anisotropia, denotam-se direções preferenciais de transporte e acamamento.

Um padrão de referência pela razão entre a extensão física da região a ser caracterizada e as dimensões médias das diferentes estruturas sedimentares presentes em determinado local sob investigação ajuda a determinar os citados limites para a estacionariedade (Figura 29).

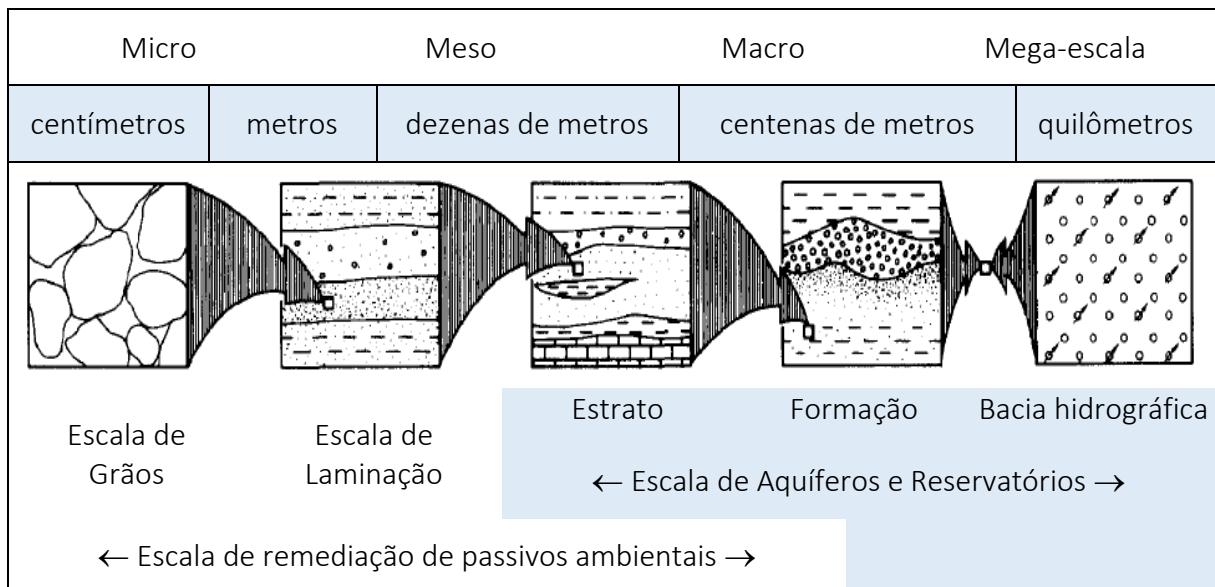


Figura 29- Escalas de heterogeneidade (adaptado de Krause *et. al.*, 1987; e Shultz *et. al.*, 2017)

Voltando a relação à anisotropia, Leeder (1993) recomenda a comparação de bacias de drenagem com bacias de deposição (Figura 30). Processos erosivos, intemperismo e transporte proporcionais a sua área de drenagem, assim como a taxas de subsidência e soerguimento tectônico (pelo próprio peso dos sedimentos em deposição) ditam o acúmulo de sedimentos no primeiro caso. Já as bacias de deposição destacam-se por variáveis como: espaço e taxas de remoção, assim como taxas de acomodação relacionadas às cíclicas variações de nível de base, que são sensíveis variações do nível do lençol freático regional no tempo geológico.

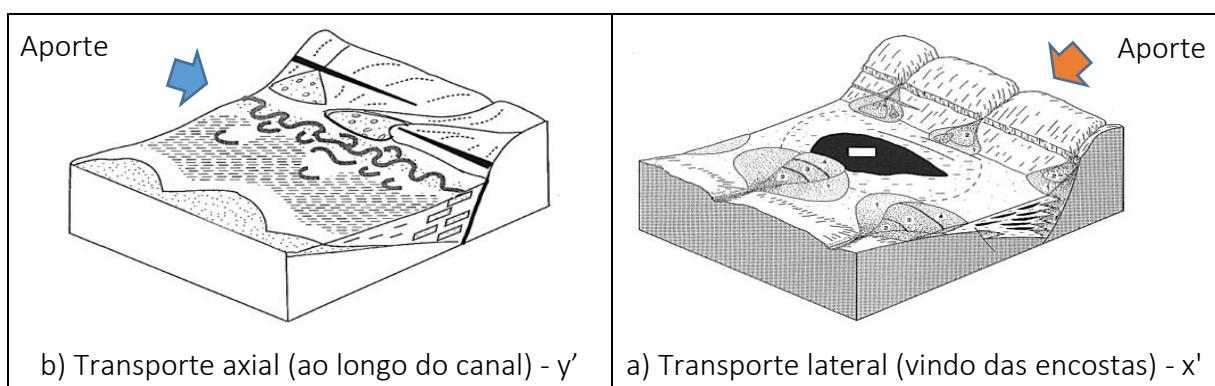


Figura 30: Direções preferenciais / procedência (adaptado de Leeder, 1993; e Leeder & Gawthorpe, 1987).

Pode-se procurar por contrastes, por exemplo, como a granodecrescência ascendente (*fining upward*), e granocrescência ascendente (*coarsening upward*) (ver anexo C.5).

Do evidente contraste entre as direções preferenciais de deslocamento e alocação das fácies dos sistemas de leques aluviais (Figura 30a) contra fácies de sistemas fluviais (Figura 30b) deriva-se a necessidade de se justificar a escolha dos coeficientes de Walther (Ω_x , Ω_y).

Expectativas quanto a dimensão das hidrofácies em (profundidade ‘z’) e suas extensões ou continuidades laterais precisam ser pensadas em termos da gênese deposicional do sistema sedimentar em análise, tais como o modal de transporte e direções de fluxo de cada tipo de sedimentos. Por exemplo: cascalhos e areias (mais grossas) viriam da direção de mergulho *dip y'*, formando depósitos alongados e mais ou menos extensos na mesma medida de sua presença como material de fundo nos cursos d’água. Já os depósitos mais finos, de sedimentos sobrenadantes teriam condições de ir até exutórios das bacias, e de deixar os cursos d’água de um rio em períodos de enchente (agora na direção *strike x'*). A Figura 31 procura ilustrar os típicos formatos de depósitos de rios de margens de menor e maior estabilidade, por exemplo.

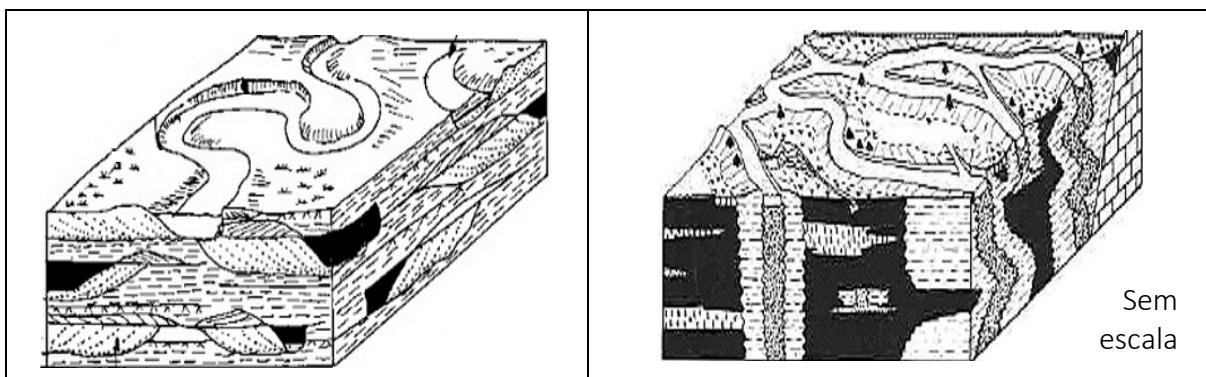


Figura 31: (a) Depósitos de rios meandrantes (Alen, 1964); (b) e de rios anastomosados (Smith & Putnam, 1980)

Deve-se considerar a evolução de uma ou mais formações geológicas. Como sistemas dinâmicos, os rios sofrem metamorfoses no aporte e remobilização de sedimentos ao longo de seu percurso (Schumm, 1999); Depósitos de rios entrelaçados confundem-se, por exemplo, com depósitos à montante de rios meandrantes de elevada carga de água e de sedimentos grossos (Carle & Fogg, 1996; 97; Carle *et. al.*, 1998; Weissmann & Fogg, 1999; Carle, 1999; Fogg *et. al.*, 2000; Lee *et. al.*, 2007).

Sem dúvida seria ideal se ter acesso a uma análise pormenorizada, que procure identificar e dimensionar a provável disposição espacial de unidades de fluxo em contraposição às camadas selantes e ou de armazenamento. Na falta de mais informações (da base de dados) providas, por exemplo, pela descrição de afloramentos em campo, a parte sedimentológica deste projeto pautou-se pelas amplas discussões já documentadas em literatura, quanto ao aquífero São Paulo e formações geológicas associadas, do aquífero Taubaté.

4.4. SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE FLUXO (MODFLOW)

Uma vez preenchido o bloco-diagrama com os materiais que representam as camadas litológicas, parte-se para a simulação numérica de fluxo.

Seu processamento é realizado pelo algoritmo USGS Modflow (Harbaugh *et. al.*, 2000), código escolhido para o presente estudo de caso por sua facilidade de acesso (licença disponibilizada pelo laboratório do presente instituto de pesquisa - CEPAS|USP), e principalmente, porque até o presente momento (ano de 2020) esta é a única interface visual que contém algoritmo de interesse, Tprogs.

O código Modflow utiliza-se de propriedades matemáticas para resolução do “problema inverso”, ou seja, para o processamento polinomial das imensas matrizes geradas em consequência da alocação das equações de continuidade de Laplace e velocidade de Darcy, a cada um dos elementos infinitesimais da discretização do domínio a ser simulado (Equação 10).

$$K \left(\frac{\partial[\partial_h / \partial_x]}{\partial x} + \frac{\partial[\partial_h / \partial_y]}{\partial y} + \frac{\partial[\partial_h / \partial_z]}{\partial z} \right) = 0$$

Equação 10

Onde: K = condutividade hidráulica
 $\partial_h / \partial_{x,y,z}$ = gradiente hidráulico (Darcy)
 $\partial / \partial_{x,y,z}$ = conservação de massa (Laplace) Domenico & Schwartz (1990)

Como resultado, geram-se mapas potenciométricos sobrepostos (2D), um para cada camada numérica de processamento. Os resultados relativos a diferentes seções da área modelada (em planta), um resultado para cada camada numérica em profundidade, são então aglutinados e juntos se traduzem uma visualização 3D.

4.4.1. Módulos de interesse

Assim como ocorre com o algoritmo geoestatístico de interpolação de cadeias de Markov (Tprogs), amplamente documentado neste trabalho, inúmeros outros módulos de processamento podem ser utilizados pelo modelo, de acordo com seus objetivos e necessidades.

Dentre os módulos em destaque neste projeto, seguem os módulos MODPATH para rastreamento de partículas. E o módulo PEST (*Parameter independent estimation software*), para administração de incertezas relacionadas as possibilidades de variação dos parâmetros de entrada de um projeto.

O módulo MODPATH, ou mais especificamente a ferramenta ‘*particle tracking*’, baseia-se nas distâncias entre linhas equipotenciais ($\nabla\phi$) calculadas pelo modelo. Destas pode-se derivar velocidades deslocamento para qualquer ponto de interesse. Desta maneira, mesmo em se tratando de uma simulação em estado estacionário, podem-se calcular posições e velocidades (perpendiculares as linhas equipotenciais) para uma partícula virtual, traçador ou marcador do fluxo advectivo (Vaz & Grossi, 2016), apontando a direção de tubos de fluxo ($\Delta\psi$).

O módulo PEST procura-se automatizar a escolha dos melhores parâmetros de entrada para determinado modelo conceitual. Procura-se determinar a melhor distribuição de variáveis para diferentes condições de contorno. Em um modelo ou simulação numérica, a “representação matemática de fenômenos físicos” depende de cálculos aproximados que comprovem a validade de um conceito pré-definido, quanto ao comportamento de determinada porção de um aquífero. Tais condições de contorno se colocam como argumentos necessários ao estabelecimento das bases de organização de determinado modelo conceitual (de fluxo).

Na calibração a procura pela melhor combinação de parâmetros que satisfaçam as demandas do modelo conceitual (replicar as cargas hidráulicas observadas, por exemplo) podem ser feitas manualmente, por tentativa e erro. A calibração manual possui condições de gerar um resultado satisfatório, apesar de deixar posta a questão dos muitos resultados plausíveis que podem ser alcançados com diferentes combinações de parâmetros de entrada, dificultando a avaliação de um resultado.

Um passo à frente, pode-se proceder a adoção de sistemas automatizados como o PEST, que aportam e testam automaticamente diferentes variações de cada conjunto de parâmetros de uma condição de contorno (Doherty, 2018). Ao procurar de forma metódica o melhor caminho dentre muitas das possíveis combinações de dados de entrada e suas faixas de variação, e por sua eficiência de processamento, tal abordagem procura passar uma maior credibilidade.

4.4.2. Condições de contorno

Dentre as opções de condições de contorno (cc) existentes na literatura, seguem descrições gerais daquelas utilizadas no presente projeto.

Em ordem de maior evidencia ou de dificuldade encontrada em sua implementação, as condições de contorno de interesse são ‘cc *Ibound*’, ‘cc *GHB*’, ‘cc *stream*’ e ‘cc rios’.

4.4.2.1. Condição de contorno ‘cc Ibound’

A condição de contorno ‘cc *Ibound*’, pelo menos no software Aquaveo GMS, permite que se classifiquem todas as células de um modelo com índices de células ativas ou inativas (1, 0). As células ativas podem se colocar ainda como células de carga potenciométrica fixa ou variável, de índices (1, -1).

A contribuição da célula de índice ‘cc *Ibound* = -1’ está na possibilidade de se alcançar certo grau de liberdade para a definição da carga hidráulica de, por exemplo, células fronteiriças de um modelo. Quando definidas como carga variável, esta condição de contorno aporta informação ao cálculo numérico apenas na primeira de suas interações, sendo suas células recalculadas pelo próprio modelo ao longo de seu processamento.

Diferente da clássica condição de contorno ‘cc *CHD*’ *Time-Variant Specified-Head* (Harbaugh *et. al.*, 2000), que pode variar no tempo, a carga potenciométrica de uma célula *Ibound*, em um modelo estacionário, varia dentro de suas próprias iterações. Ou seja, se o modelo conceitual estiver bem definido, permite-se o ajuste de cargas iniciais das bordas do modelo numérico, diminuindo as dificuldades de definição desta propriedade.

Como uma carga hidráulica variável, longe de um divisor de águas, este recurso elimina a obrigação de se estender o modelo até um ponto de carga potenciométrica indubitavelmente conhecida. Desta maneira, trabalham-se com menores extensões de área modelada, o que proporciona maiores ganhos de eficiência ao direcionar a capacidade de processamento para um modelo com um número maior, de células (menores).

4.4.2.2. Condição de contorno ‘cc *GHB*’

Por definição a grandeza da ‘cc *GHB*’ depende de sua condutância, e da diferença entre as cargas hidráulicas do modelo e um ponto referencial a distância (Harbaugh *et. al.*, 2000).

O fluxo estimado (Q_i) é primeiro mediado pela condutância (C) do material que se encontra entre o modelo e um ponto de referência à parte, fora do domínio de interesse. E como a resistência a percolação é proporcional à distância a ser percorrida (pela água, entre os dois pontos pré-estabelecidos (no começo deste parágrafo), este parâmetro depende desta distância (L) estimada entre o modelo e determinado ponto de carga conhecida (um rio, por exemplo).

Trata-se de um cálculo análogo às estimativas de infiltração que precisam atravessar determinada espessura de sedimentos encontrados na base dos cursos d’água (Figura 32).

Como em um sistema de vasos comunicantes, a vazão estimada (Q) a deixar ou ingressar o domínio modelado é definida em função de um equilíbrio a ser estabelecido de um lado, pelas condições de aporte de água ao modelo (de outras condições de contorno), e de outro lado, por sua atuação ('cc *GHB*') como contrapeso ou coluna d'água (referencial) das cargas (Δh) que necessitam percorrer determinada distância (L), de condutância (C), até chegar à área modelada.

A equação de Darcy (Equação 11a) aponta como uma condutância 'C' (Equação 11b) é utilizada para definir as vazões (Equação 11c) de entrada e saída das células de 'cc *GHB*'.

$\frac{Q}{A} = q = \frac{K\Delta h}{\Delta L} \quad a$	$C = \frac{K}{L} \times A \quad b$	$Q = C\Delta h \quad c$	Equação 11
--	------------------------------------	-------------------------	------------

Q = vazão; A = área da seção; q = velocidade de Darcy; K = condutividade hidráulica $\Delta h/\Delta l$ = gradiente hidráulico; C = condutância entre modelo e ponto referencial à uma distância L (Figura 32).

Trata-se de um raciocínio equivalente ao procedimento empregado no cálculo da condutância (fluxo vertical) de um curso d'água qualquer (Figura 32a), de comprimento (L), leito de espessura (e) e largura (ℓ). A equivalência entre esta última e a condutância horizontal 'cc *GHB*' de cada célula do modelo e um ponto de referência, é ilustrada na Figura 32b.

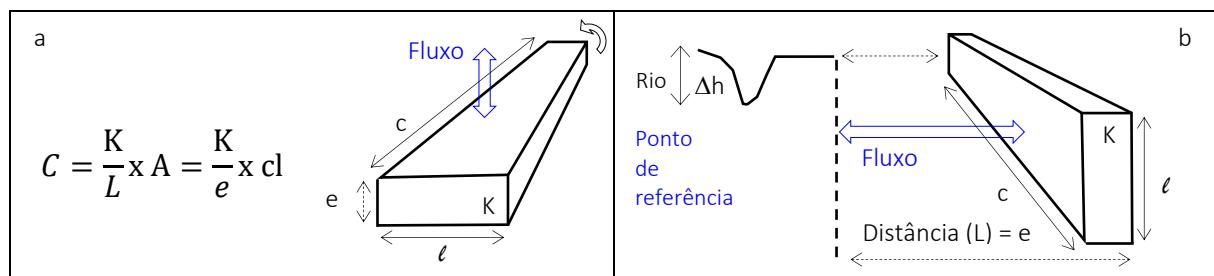


Figura 32. (a) Condutância de cursos d'água, *versus* (b) Condutância 'cc *GHB*' (Adaptado de Aquaveo, 2020)

4.4.2.3. Condições de contorno 'cc rios', 'cc drenos' e 'cc stream'

As conhecidas condições de contorno 'cc rios e drenos' são utilizadas para alterar a carga hidráulica de determinada célula do modelo em função da condutância de seus canais. Enquanto 'cc rios' permitem tanto o aporte como a retirada das cargas hidráulicas (Δh) em certa porção do domínio modelado, 'cc dreno' possui a específica função de retirar tais cargas (água) do modelo, ou seja, suas vazões são necessariamente negativas. A condição de contorno que simula a passagem de um rio também depende da carga de coluna d'água ao longo de todo seu percurso. Em específico, 'cc dreno' mostrou-se eficiente como forma de representação da rede de captação de águas pluviais (Rodriguez *et. al.*, 2020).

Condições de contorno de ‘cc recarga’ direta por infiltração das águas das chuvas e ‘cc evapotranspiração’ atuam na superfície e até certa profundidade. Taxas de infiltração e estimativas de remoção de água do modelo por parte destas condições de contorno podem depender da subdivisão da área polígonos de tamanhos pré-estabelecidos ou, no caso da recarga principalmente, da aplicação de técnica de pontos piloto (*pilot points*). Esta última determina qual vazão de ingresso faz mais sentido em determinada região do modelo em planta.

Células da condição de contorno ‘cc stream’ traduzem o aporte e excepcionalmente remoção de água do domínio simulado, em função da relação entre sua posição física (x, y, z) e a elevação do lençol freático modelado. Eventuais vazamentos da tubulação de água e coleta de esgoto, são, desta maneira, simuladas para as zonas saturada e não saturada, sem condicionar as cargas potenciométricas a sua efetiva cota altimétrica. Como uma rede de canais interligados, ‘cc stream’ deriva-se da fórmula de *Manning* para cálculo da velocidade de escoamento em canais e tubulações. Nesta configuração utilizam-se os elementos comprimento, largura, sinuosidade e rugosidade de seus canais, assim como uma vazão de aporte inicial, distribuída ao longo dos percursos de canais *stream*, de condutância de fundo (C). Como uma rede de canais interligados esta condição de contorno permite a infiltração de uma quantidade de água proporcional ao volume inicial estimado e o comprimento de determinado trecho percorrido. Esta condição de contorno pode ser útil para modelar o aporte de água em zonas urbanas, de solo impermeabilizado.

4.4.3. Blocos-diagrama

4.4.3.1. Modelo de bloco-diagrama determinístico (MBD)

Na abordagem determinística, algoritmos de interpolação como o inverso do quadrado das distâncias, vizinho natural mais próximo ou krigagem espacial, quando os dados assim o permitem e não raro auxiliados por ajustes manuais na definição de suas seções geológicas 2D, transmitem dos dados conhecidos à toda uma região desconhecida do sólido / bloco-diagrama.

A partir de determinado número de seções transversais delineadas entre quantos poços de observação se julguem necessários para a adequada caracterização de uma área, chega-se ao sólido ou bloco-diagrama que sustentará as equações do modelo de fluxo.

Na Figura 33 “horizontes de deposição” (Lemon & Jones, 2002) são apresentados junto às unidades hidrogeológicas de fluxo (HUFs - Jones *et. al.*, 2005). Aqui, procura-se incrementar a “resolução” para melhor definição das continuidades laterais e verticais de uma hidrofácie.

As HUFs permitem a acomodação de diferentes hidrofácies em uma mesma célula de fluxo. A maior resolução espacial melhora a caracterização das heterogeneidades (e propriedades hidráulicas K, por exemplo), sem comprometer a eficiência do modelo numérico.

Na prática (Figura 33), partindo do horizonte ‘0’ na base de todos os poços, ordenam-se as ocorrências litológicas de um conjunto dados, com o escalonamento dos ‘eventos de deposição’ (fundamento sedimentológico). Esta técnica procura definir como “ligar os pontos” com maior assertividade, entre dois poços de observação, na construção das seções geológicas.

O exemplo sintético da Figura 33 ilustra a diferença entre as continuidades laterais do método “tradicional” e as continuidades descritas por ‘horizontes de deposição’. Neste segundo caso, seria como se fosse possível aglutinar todos os eventos (hidrofácie) observados na base de dados (em cada poço) em uma única sequência de litologias (em um ponto x, y). No presente exemplo traria um único poço com 10 horizontes de deposição (variável z). Um poço de 22 horizontes é ilustrado na Figura 40a, já no contexto do presente estudo de caso.

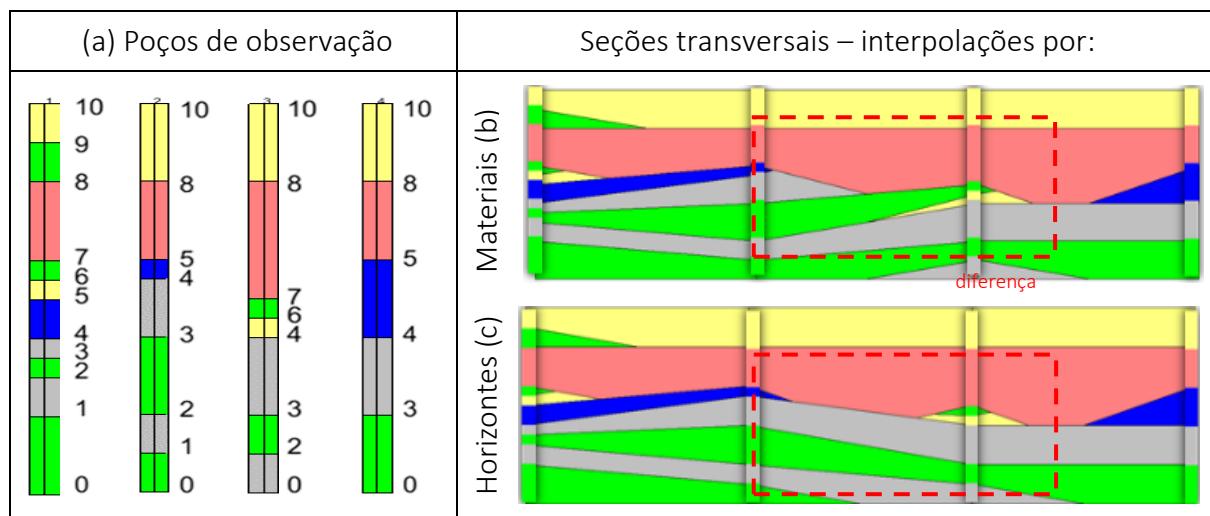


Figura 33: (a) Exemplo sintético de 4 testemunhos de sondagem; Seções geológicas resultado da interpolação entre (b) 5 materiais; Solução mais apropriada: ou entre (c) 10 horizontes de deposição HUFs

Inúmeras realizações determinísticas também podem gerar um resultado probabilístico, não fosse a morosidade de implantação, muitas vezes atrelada à interpretação visual das muitas seções transversais (2D) necessárias a construção de um único bloco-diagrama. Simulações automatizadas em modo também determinístico são uma alternativa, pela variância espacial de distribuições de K log-normal, por exemplo (Sá, 2016), porém com altas cargas de entropia.

Em contraposição, estocásticas, as cadeias de Markov Tprogs geram de modo eficiente e com pretensas vantagens quali-quantitativas (como se verá na sequência), quantos blocos-diagrama equiprováveis se julguem necessários para o tratamento estatístico dos resultados.

4.4.3.2. Modelo bloco-diagrama estocástico (MBDE)

Como estratégia de interpolação em substituição a um suposto melhor bloco-diagrama de natureza determinística, este trabalho propõe analisar o resultado conjunto de um grande número de blocos-diagrama de natureza estocástica, equiprovável Tprogs.

Uma discussão sobre as diferenças entre as abordagens determinística e estocástica na definição do bloco-diagrama utilizado pelo modelo de fluxo mostra-se importante, posto o desafio de se interpretar extensas bases de dados, de natureza complexa, como no presente caso de litologias com maiores chances de carregar formas de anisotropias vertical e horizontal.

O conjunto de blocos-diagrama estocástico Tprogs depende de uma primeira fase de processamento unidirecional (1D), da qual segue direto para inferências espaciais 3D. Tratam-se das sub-rotinas de processamento GAMEAS, MCMOD e TSIM (Figura 34 e anexo B.1.1).

- O módulo GAMEAS faz uma primeira análise exploratória, trazendo uma noção geral de como o resultado 3D poderá ser alcançado em termos quantitativos, ou seja, expressa as proporções ‘ $p_j(\%)$ ’ e comprimentos ‘ $L_k(m)$ ’ médios das hidrofácies a serem geradas;
- A partir da geologia e sedimentologia da área, o módulo MCMOD transfere os padrões matemáticos de uma para das demais direções do plano cartesiano;
- O módulo TSIM cuida da transferência dos padrões matemáticos para o bloco-diagrama.

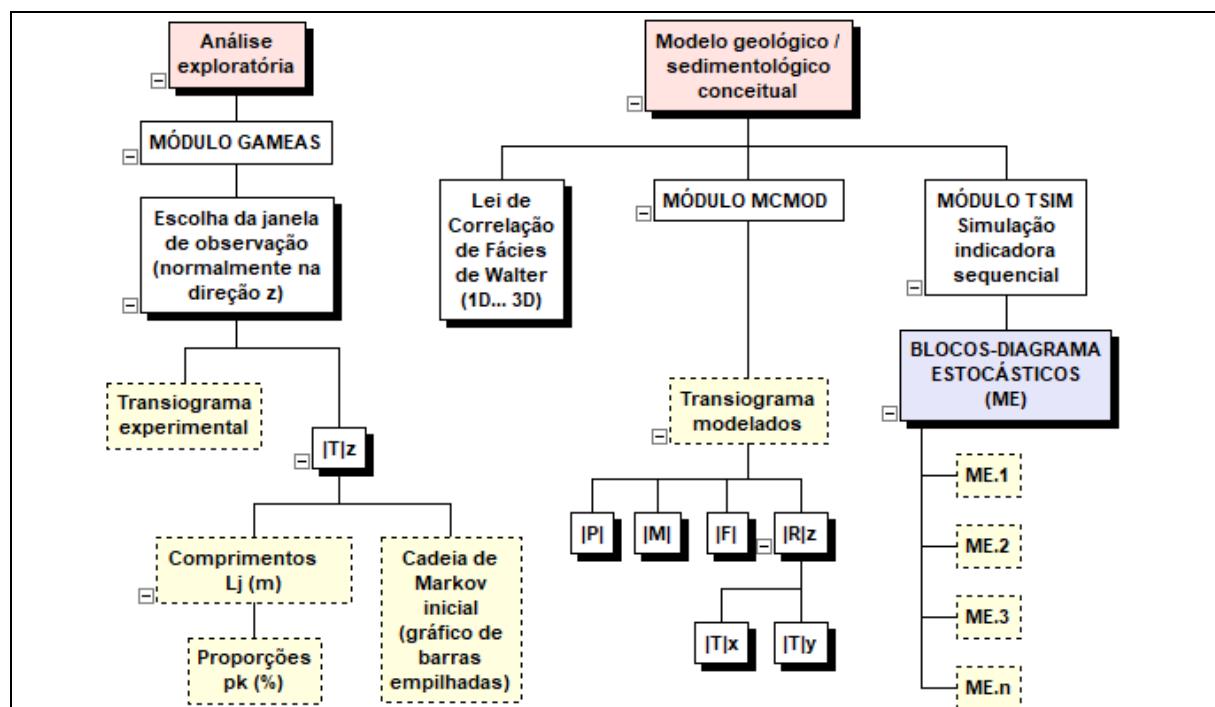


Figura 34: Tarefas GAMEAS e MCMOD de definição dos ponderadores $|T_z|T_x|T_y|$ para preenchimento dos blocos-diagrama ME a partir das hidrofácies observadas em profundidade (simulação condicionada TSIM)

A partir dos primeiros padrões p_j (%) e L_k (m) identificados na análise exploratória, coloca-se a possibilidade de alteração direta tanto do transiograma que descreveu os dados na direção original, vertical, $|\Gamma_z|$, quanto dos dois demais transiogramas a serem modelados para os planos *strike-dip* (direções lateral e de mergulho) $|\Gamma_x| \Gamma_y|$, necessários a definição do conjunto de ponderadores da co-krigagem e da simulação indicadora sequencial Tprogs.

Na análise exploratória (GAMEAS) procura-se dar significado geológico a uma média dos padrões matemáticos observados na base de dados. Porém “apesar do sólido fundamento matemático, um resultado Tprogs pode ser completamente destituído de qualquer significado geológico” (Carle, 1999). Portanto o modelador deve procurar separar ‘padrões de recorrência’ de ‘flutuações aleatórias’, como forma de se correlacionar índices de proporcionalidade e interdependência entre probabilidades (elementos da matriz $|t_{jk}|$), procurando pela representação das ‘cíclicas’ relações do fenômeno espacial sob análise.

Na geoestatística de fácie descontínuas (de Marsily *et. al.*, 2005), chega-se a um resultado híbrido pensado para honrar quantitativamente os dados (*hard data*), ao mesmo tempo em que se respeitam expectativas qualitativas de deposição de fácie advindas de um modelo conceitual deposicional pensado em específico de uma área de interesse (*soft data* MCMOD).

Na prática, os fundamentos da lei de Walther (Ω) permitem que, a critério de argumentos do modelador, se façam alterações de proporções p_j (%), continuidades L_k (m), recorrências e justaposição $|t_{jk}|$ em qualquer uma das direções ou eixos cartesianos de interesse.

Nesta sub-rotina (MCMOD), procura-se viabilizar a replicação de particularidades dos sistemas sedimentares, com destaque para as anisotropias deposicionais (Weissmann & Fogg 1999; Langousis *et. al.*, 2018).

E finalmente, as curvas de probabilidades de transição (transiogramas MCMOD) são então utilizadas como índices ponderadores das equiprováveis interpolações e extrapolações que tomarão lugar com a co-krigagem condicionada e simulação indicadora sequencial TSIM.

A simulação indicadora sequencial TSIM determina quais serão as hidrofácies de cada unidade infinitesimal dentro de um bloco-diagrama equiprovável (de cada unidade discretizada em todos os blocos-diagrama). Por se entender que é mais importante entender como se constroem os transiogramas do algoritmo Tprogs, assim como sua aplicação prática (do que entender a interpolação), optou-se em se focar nesta primeira parte da metodologia. Ainda assim, uma introdução sobre a co-krigagem TISIM (utilizada) encontra-se no anexo 0.

4.4.4. Calibração (parâmetros de controle)

Durante sua implementação, definem-se metas de acurácia e precisão. Resultados consistentes ou acurados, como forma de se calibrar um modelo, advém da procura pelo menor erro absoluto médio EAM entre cargas observadas e calculadas (procura-se pelo menor resíduo, na aferição do erro quadrático médio EQM (m) (Equação 13) e do erro quadrático médio EQMN normalizado (%) (Equação 14).

O EQM (m) pode variar de maneira proporcional ao gradiente hidráulico do problema ou região sob análise. Já um erro EQMN, cuja meta é se chegar em 10% no mínimo, figura como objetivo mandatório (Spitz & Moreno, 1996).

Um modelo é preciso quando expressa um balanço de massa satisfatório (Equação 15), pela simples contabilização dos fluxos de entrada e de saída, ou seja, os somatórios das vazões de todas as suas condições de contorno. O balanço de massa mede a eficiência do cálculo numérico, parâmetro cuja precisão não admite valores maiores que uma pequena discrepância (1%) de massas ou valores de entrada e de saída (Spitz & Moreno, 1996).

Erro absoluto médio EAM (m)	$EAM = \left \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n Res_t \right $	n = nº de medições por parâmetro (t)	Equação 12
Resíduos (m)	$Res = (H^{Obs.} - H^{Cal.})$	$H^{Obs.}$ = Cargas observadas $H^{Cal.}$ = Cargas calculadas	
Erro médio quadrático EQM (m)	$EQM = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (Res)_t^2}$		Equação 13
EMQ (%) Normalizado	$EQMN = EMQ / (H_{max}^{Obs.} - H_{min}^{Obs.})$		Equação 14
Balanço de Massa	$\sum \text{vazões}_{(\text{entrada})} - \sum \text{vazões}_{(\text{saída})}$		Equação 15

4.4.4.1. Processo automatizado de calibração

Na calibração, toma lugar um sistema de retroalimentação de parâmetros de entrada de diferentes condições de contorno. Pautados por resultados parciais, realizam-se ajustes na magnitude destes parâmetros de entrada, na medida em que se procura por uma resposta consolidada dentro do contexto em que o projeto se situa.

Em tese qualquer calibração de um modelo numérico, seja ela feita de forma manual ou automatizada, ocorre via probabilidades condicionais do cálculo bayesiano (Figura 18), ou seja, parâmetros de entrada são escolhidos com base sem sua influência junto ao resultado almejado.

Na calibração automatizada PEST, avalia-se de forma eficaz qual o erro mínimo para um contexto inicialmente estabelecido. Seu rápido processamento de diferentes combinações de parâmetros e combinações de condições de contorno permite que se avalie, com agilidade, qual o modelo conceitual mais acertado para responder ao problema colocado.

PEST depende dos pesos (W_m) dos parâmetros de entrada dentro da chamada função objetivo Φ (Equação 16), somatório do quadrado dos resíduos (parâmetros calculados *versus* parâmetros observados, cargas hidráulicas, por exemplo). Tal função objetivo (Equação 16) é fundamentalmente bayesiana, já que cada um de seus parâmetros carrega, necessariamente, certa capacidade de influenciar o próprio objetivo a ser alcançado Φ . Os pesos de cada um dos parâmetros observados (Equação 17) é inversamente proporcionais ao desvio padrão (σ) dos dados de referência (Young *et. al.*, 2010).

Função objetivo PEST	$\Phi = \sum_m ((Res._m)W_m)^2$	Onde: W_m = pesos	Equação 16
----------------------	---------------------------------	---------------------	------------

Ao tratar-se da variável ‘ σ ’, ligada a curva de distribuição normal (STD - Equação 18), pode-se observar como os pesos de cada atributo se colocam como índices *Z-score*, intervalo de observação $IN_{i(m)}$, e níveis de confidência $Z_i(%)$.

Pesos da função objetivo ‘ Φ ’	$W_m = 1/(IN * Z_{i(%)})$	Onde: x_i = Valores observados μ = Média σ = Desvio padrão	Equação 17
STD - (<i>Z-score</i>)	$STD = \frac{(x_i - \mu)}{\sigma}$		Equação 18

A escolha de Φ , assim como do quanto é necessário que a calibração se aproxime deste alvo é subjetiva (Doherty *et. al.*, 2010). Na falta de um procedimento estruturado, intervalos de observação podem ser estimados pela multiplicação $IN_{i(un.)} = Z_{score} * \sigma$ (como ordem das observações na curva STD). Ao se descrever os níveis de confidência ($Z_i(%)$) de tais

“observações”, gera-se a curva de distribuição normal. Esta última, como uma função matemática de ‘acumulação’ é calculada para apenas metade de chamada curva normal ou curva gaussiana, sua outra metade é apenas “espelhada” (Figura 35 c_{1,2}).

Uma exemplificação de uso e significado de todas as variáveis envolvidas na descrição de uma base de dados é apresentada para uma amostra sintética de média $\mu = 10.5$ e desvio padrão $\sigma = 5.8$ (Figura 35ab). Este exemplo descreve como se colocar iguais chances de ocorrência para os números 1 a 20, distribuídos homogeneamente, como dados de referência.

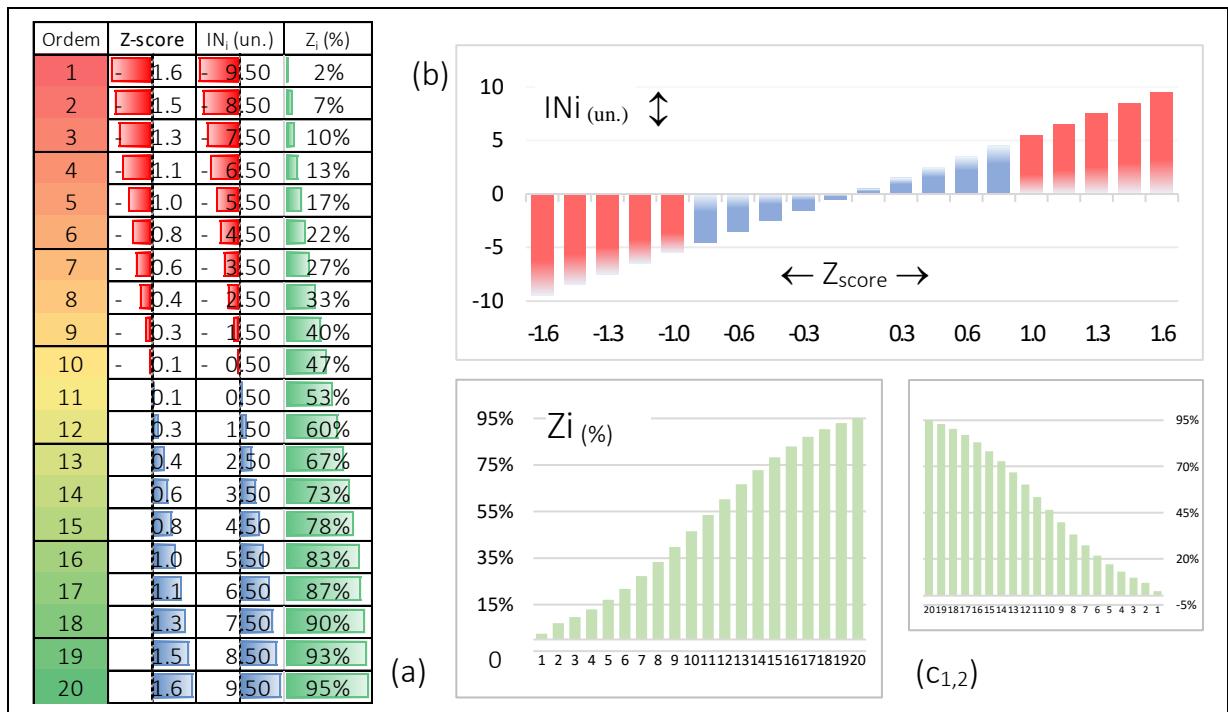


Figura 35: (a, b) Análise STD, dados 1 a 20; (c_{1,2}) Intervalos de observação (IN_i) e níveis de confidência (Z_i)

Uma análise STD pode ser fundamental para calibração PEST. Na função objetivo Φ , de um lado os pesos das observações (Δh , por exemplo) interagem como sensibilidades do modelo a estas variáveis (W_m). De outro, quanto às consequências da variação de cada parâmetro de entrada em subsequentes iterações PEST, suas sensibilidades também são passíveis de serem calculadas, quanto a perseguição do alvo (Φ) previamente estabelecido.

PEST usa ‘regularizações’ *Singular Value Decomposition*, módulos *SVD* e *SVD-Assist*. Procedimentos similares aos Tprogs (anexos B.1.1.b e B.1.1.d). Super-parâmetros autovalores e autovetores (*eigenvectors and eigenvalues*) da função polinomial a ser resolvida, substituem os parâmetros originais por seus componentes escalares (em menor número), o que viabiliza a resolução de problemas com centenas e até milhares de variáveis (Doherty *et. al.*, 2010).

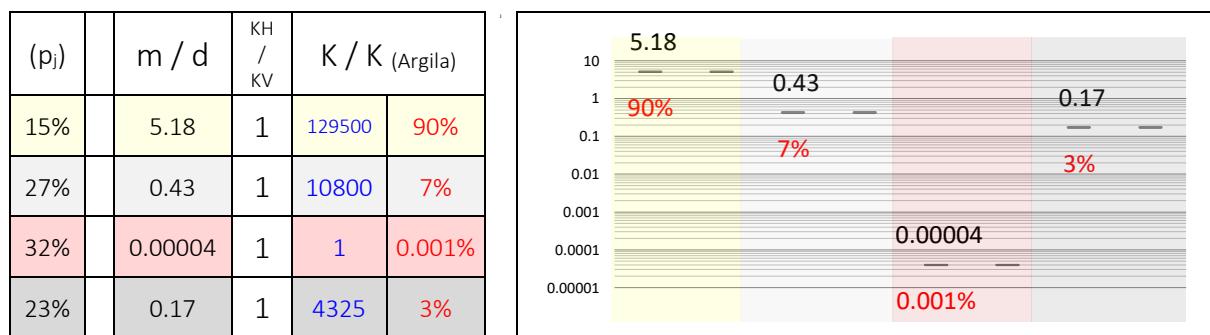
4.4.4.2. Parâmetros de entrada de condições de contorno, K e seus limites

Diferentes grupos de variáveis são classificados por suas funções no modelo numérico.

Células ‘cc drenos’ dependem de suas posições e condutâncias. Subdivididas ao longo de seus percursos, cada um de seus trechos dependem de posições horizontais e verticais (elevação da base do leito), assim como da indicação de qual é a resistência ao fluxo de recarga do aquífero, à infiltração. Células das condições de contorno ‘cc rios’ e ‘cc stream’ vão além, dependendo também da altura da coluna d’água (carga hidráulica) estimada e ou medida em cada local de sua ocorrência. Estimativas iniciais de elevação (posição vertical) também são necessárias para as condições de contorno ‘cc Ibound’, ‘cc CHD’ e ‘cc GHB’.

Para o conjunto de parâmetros ‘K’, condutividades hidráulicas são estabelecidas para cada hidrofáceis previamente distribuída de forma tridimensional ao longo do domínio modelado. Fogg *et. al.* (2000) estabelecem alguns limites para as condutividades de três hidrofáceis arenosas (canais fluviais, leque aluvial e diques laterais), contra uma hidrofáceis argilosa (planícies aluviais). A Figura 36 compara tais proporções.

Os citados autores partem das proporções quanto as distribuições físicas de quatro tipos de hidrofáceis $p_j(\%)$ Tprogs (Figura 36) e assumem a mesma magnitude de os parâmetros K nos planos horizontal e vertical de fluxo ($KH / KV = 1$). Como condutividades hidráulicas são inversamente proporcionais à resistência à percolação, um pouco além comparar-se as magnitudes entre hidrofáceis mais e menos permeáveis ($K / K_{(ARG)}$). Estes últimos parâmetros, traduzidos em porcentagens, procuram destacar as proporções destas ‘velocidades de Darcy’.



Hidrofáceis arenosas Canais fluviais; Dique lateral e Leque aluvial; versus hidrofáceis argilosa de Planície aluvial

Figura 36 (a) Proporções Tprogs; (b) Condutividades hidráulicas e percentuais sobre a hidrofáceis argilosa

Dada a discrepância em escalas da hidrofáceis argilosa (Figura 36b) em relação às demais, vale observar que uma pequena alteração de valores desta primeira hidrofáceis (de aquitardes, de planície aluvial) pode gerar significativas modificações nas relações de fluxo.

5. MATERIAIS E MÉTODOS

Este trabalho implementa um único modelo de fluxo (*modflow*) sob idênticas condições de funcionamento e como representação de uma mesma e única realidade, porém construídos por duas diferentes estratégias de interpolação ou preenchimento de seus bloco-diagrama:

- Trata-se de um primeiro modelo cujo bloco-diagrama é interpolado, a partir dos poços de observação, pela abordagem determinística tradicional (M_{BDD});
- E trata-se de segundo modelo cujo conjunto equiprovável de blocos-diagrama é interpolado pela rotina estocástica-markoviana Tprogs (M_{BDE}).

Procura-se verificar a eficiência das tais estratégias de interpolação condicionada das litologias presentes na base de dados, e que definem o arcabouço geológico onde se passam as simulações numéricas de fluxo.

No primeiro modelo, procura-se pela melhor realização determinística, tradicional, do bloco-diagrama sob a qual alocaram-se condições de contorno aplicáveis. Suas definições iniciais incluem a interpretação (seções geológicas) e o tratamento (manual) da base de dados. Quanto a simulação de fluxo, apenas no modelo M_{BDD} se foram satisfeitas as condições de balanço de massa e calibração (M_{BDD}). Uma vez definido um padrão de funcionamento, condições de contorno, premissas de processamento do modelo (*solver*), e dimensionamento de uma barreira hidráulica em termos de custo e eficiência operacional para captação de eventuais contaminantes, passa-se ao segundo modelo, estocástico-markoviano (M_{BDE}).

Uma primeira simulação de fluxo foi implementada para dimensões “regionais”. Na sequência, para a mesma discretização e também para um segundo modelo de células em menor escala (de menor discretização), construiu-se um conjunto de 20 blocos-diagrama regidos por um só conjunto de padrões Tprogs, sob os quais foram aplicadas as mesmas condições de fluxo (mesmo modelo conceitual) e parâmetros já calibrados do modelo original, de base (M_{BDD}).

A alteração dos blocos-diagrama M_{BDD} x M_{BDE} se reflete, principalmente, na distribuição espacial das condutividades hidráulicas (K) de suas cinco hidrofácies e duas direções de fluxo (KH , KV), cujos valores em foram mantidos de M_{BDD} para M_{BDE} .

Para cada uma das realizações equiprováveis M_{BDE} foi então avaliada a eficiência operacional de uma barreira hidráulica idêntica a barreira que se procurou dimensionar originalmente, para o primeiro contexto determinístico.

Segue a estrutura geral das tarefas implementadas (Figura 37):

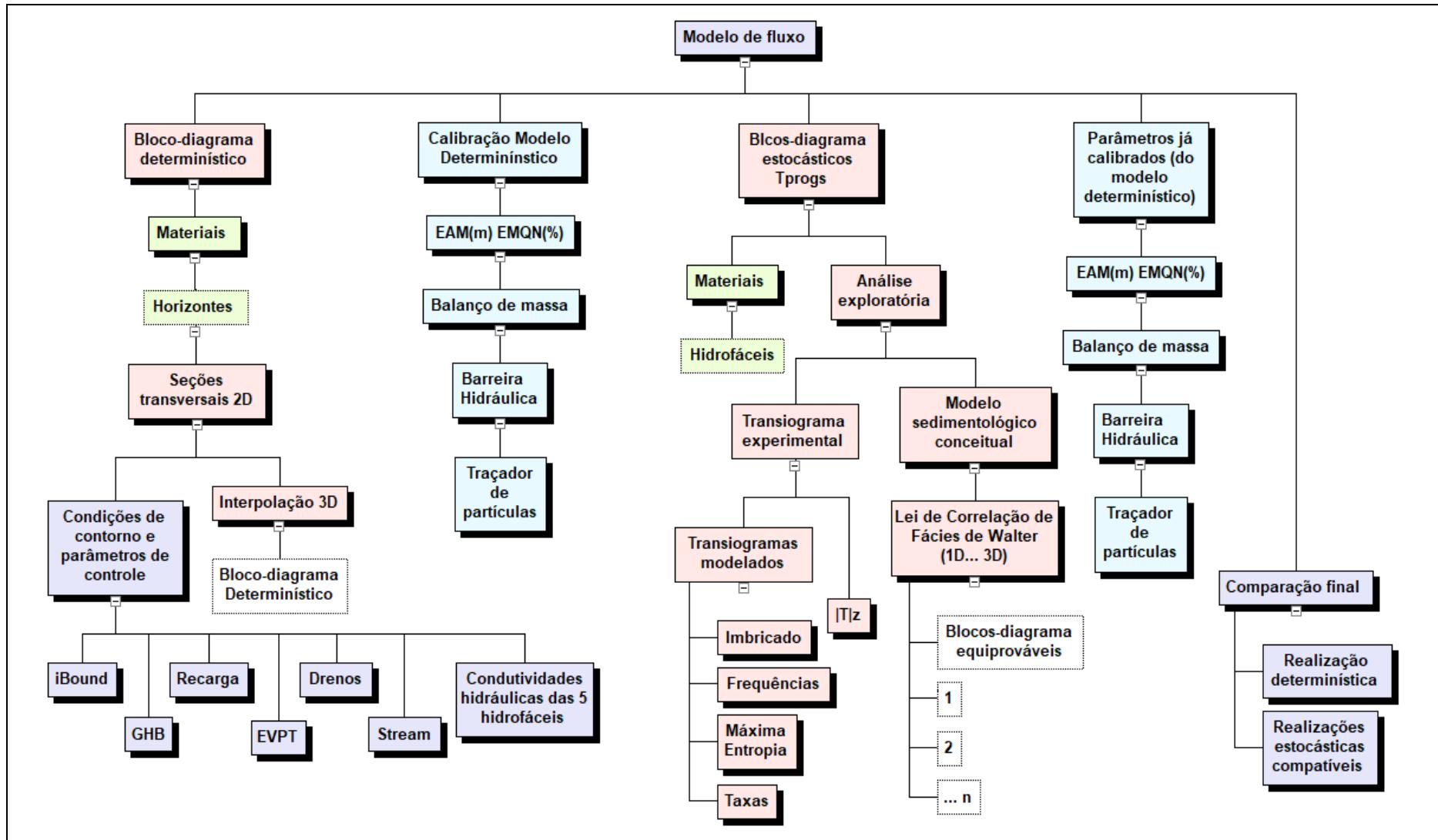


Figura 37: Estrutura geral da simulação numérica de fluxo em modelos bloco-diagrama determinístico ($M_{BD}D$) e conjunto de blocos-diagrama estocásticos (M_{BDE})

5.1. MODELO NUMÉRICO

O objetivo do presente modelo numérico é simular as direções de fluxo das águas subterrâneas para os predefinidos contextos litológicos observados no subsequente item 5.2, ou seja, para os contextos litológicos determinístico (M_{BDD}) e estocástico-markoviano (M_{BDE}).

O modelo dedica-se à verificação das consequências, junto ao fluxo advectivo de águas subterrâneas, de diferentes formas de distribuição espacial das condutividades hidráulicas horizontais, (e verticais, por extensão VANI) das cinco hidrofáceis presentes na área em estudo.

Para abordar os potenciais caminhos de percolação de pretensos contaminantes, optou-se por fazer uso de uma simples abordagem através da ferramenta traçador de partículas (*particle tracking*). No caso as partículas são vistas como “marcadores” da movimentação da água subterrânea, segundo sua propriedade de seguir de forma perpendicular a orientação das linhas potenciométricas calculadas pelo modelo. Desta maneira procurou-se chegar a uma definição inicial do potencial de dispersão do citado passivo ambiental, assim como sua remediação, via poços de bombeamento em linha, na forma de uma barreira hidráulica.

O modelo numérico assume um estado estacionário (*steady state*), ou seja, não se atém às especificidades da simulação transitória. Ao assumir como constantes as variações de estresse hídrico (condições de contorno) para dentro e fora do modelo ao longo do tempo, quedam simplificados os procedimentos e configurações da simulação. Parâmetros como porosidade efetiva e coeficientes de armazenagem, por exemplo, não são necessários.

Como rotina de processamento, destacam-se as seguintes configurações:

As simulações M_{BDD} e M_{BDE} utilizam o mesmo pacote numérico ModFlow-2000 PCG2 (GMS 10.0 Aquaveo, 2014), e métodos pré-condicionantes das equações matriciais (NPCOND) polinomial e ‘*modified incomplete Cholesky*’. Deu-se prioridade segundo método, mais robusto em relação à fatoração polinomial, porém muitas vezes se recorreu ao método polinomial pela sua rapidez e entrega de resultados razoavelmente satisfatórios. Procurou-se adotou-se maiores possíveis critérios de variação de carga HCLOSE (m) e resíduos RCLOSE (m^3/d), e valores concernentes com o objetivo se diminuir ao máximo o erro do balanço de massa.

O primeiro modelo, polinomial, utiliza HCLOSE = 0.5 e RCLOSE = 2.5. Já o segundo, de malha mais fechada: *Cholesky* HCLOSE = 10 e RCLOSE = 50. E iterações MXITER \geq 30.

Cada calibração de 7 iterações NOPTMAX PEST demoraram em média 15 minutos, para um processador AMD de 3.40 GHz com seis núcleos físicos, e outros seis virtuais.

5.2. BLOCOS-DIAGRAMA

A definição do arcabouço geológico do modelo de fluxo depende de interpolações e extrapolações condicionadas as inúmeras descrições litológicas disponibilizadas (anexo A.2).

Uma primeira fase de reavaliação ou categorização da base de dados, precedente às abordagens determinística e estocástica, foi implementada visando a aplicação dos conceitos de heterogeneidade, anisotropia e estacionariedade (item 4.3.2). Desta maneira buscou-se identificar ordens preferenciais de recorrências litológicas, como produtos sedimentares de distintos eventos deposicionais. Destas, verificou-se suas implicações junto ao modelo de fluxo.

Para ilustrar as dificuldades envolvidas nesta tarefa, citam-se as variações de percurso do rio Tietê ao longo de um pequeno intervalo de tempo (Figura 38^a). A observação do antigo trajeto do rio pinheiros (Figura 38b) na confluência com o rio Tietê já próximo ao município de Osasco (na alça do “cebola”), também é útil para justificar a necessidade de se aplicar análises de hierarquia deposicional para dados (litologias) referentes a diferentes regimes fluviais.

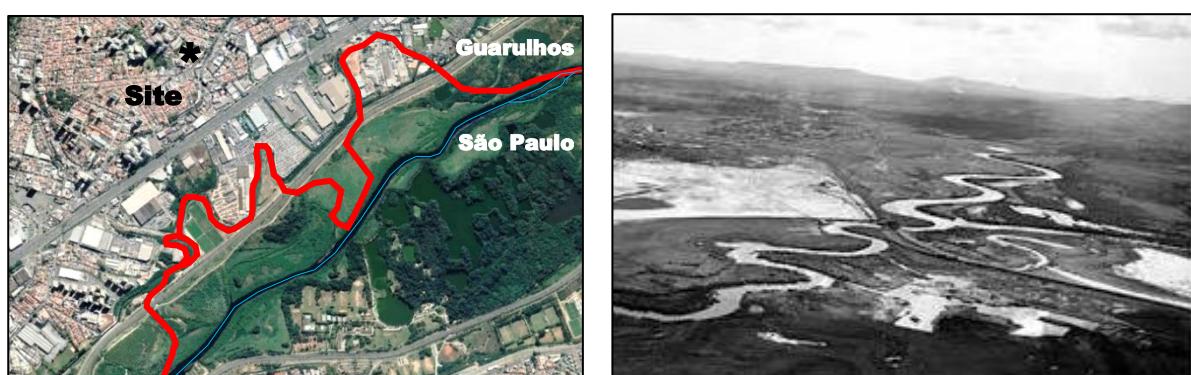


Figura 38: (a) Percurso atual e retificado do Tietê; (b) E confluência com Rio Pinheiros 1930; (Wikipedia, 2020)

A área de estudo pertencente ao aquífero São Paulo, descrito como uma sequência sedimentar com predominância de camadas argilosas intercaladas por lentes de areia. De modo complementar, levou-se em consideração a natureza de aquíferos multicamadas, das formações sedimentares que se encontram no aquífero Taubaté.

Em respeito ao conceito de estacionariedade (Figura 29), compararam-se as escalas de observação entre os perfis representativos dos aquíferos Taubaté (Figura 39^a) e São Paulo (Figura 39b), junto a uma amostra das litologias descritas para os poços mais profundos da base de dados do presente projeto (Figura 39c). O intuito desta comparação não é correlacionar litologias de diferentes bases de dados. Procurou-se apenas por uma comparação de tais informações em uma mesma escala ‘vertical’ de observação.

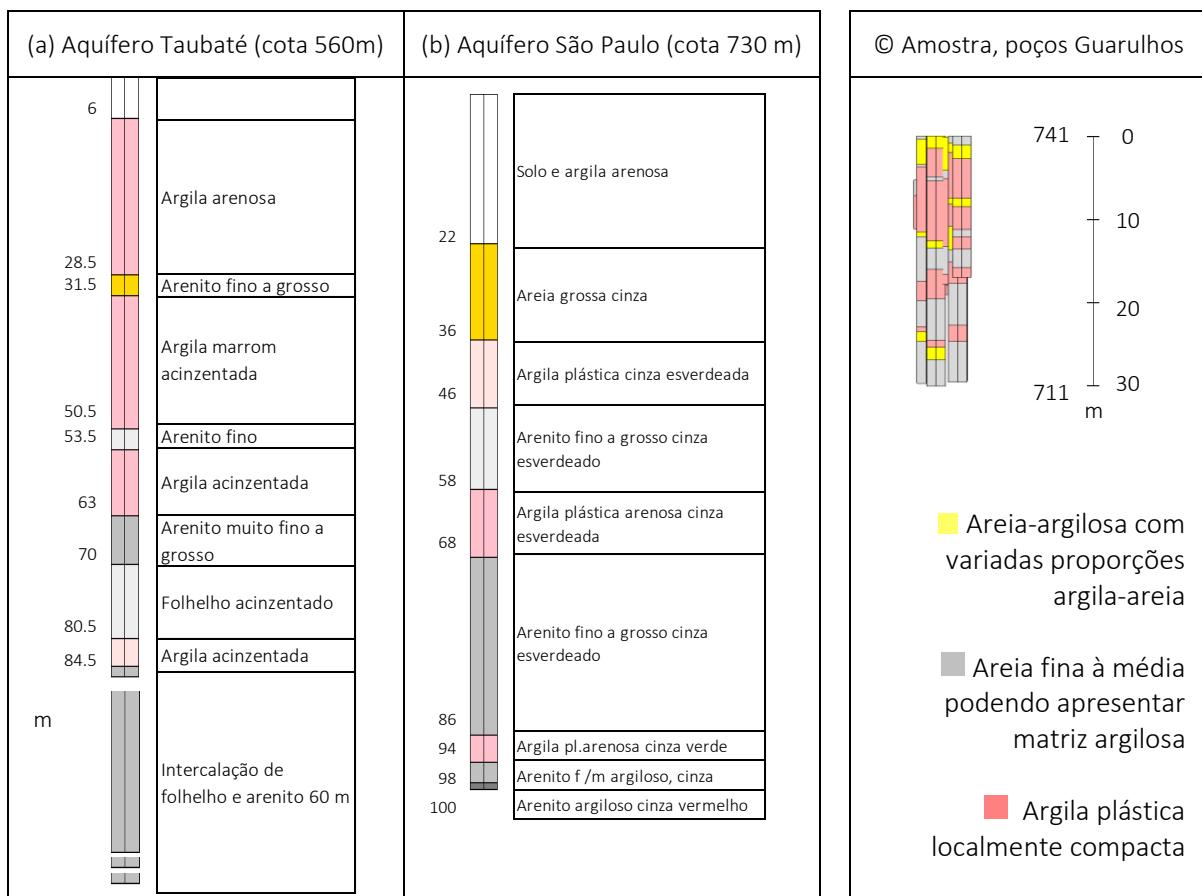
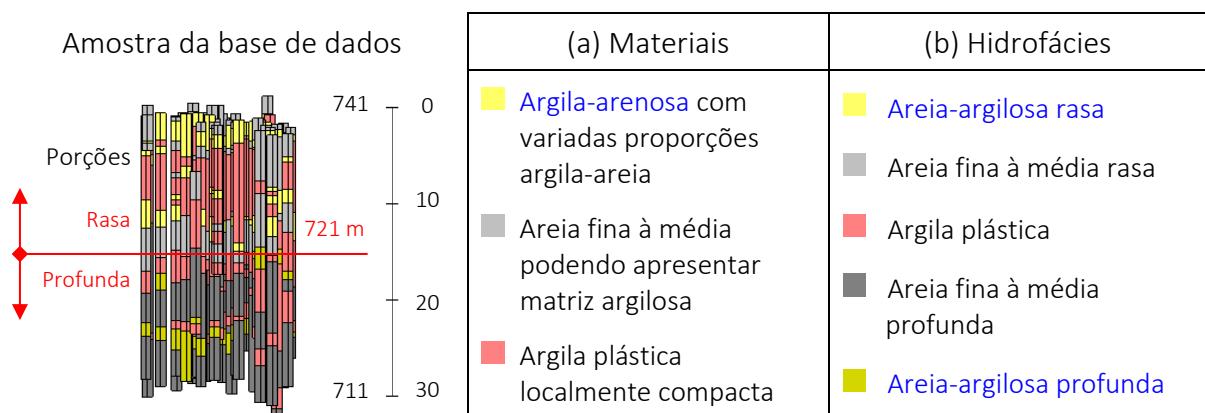


Figura 39: Poços dos aquíferos Taubaté (a) e São Paulo (b) em livre interpretação usando a palheta de cores do atual modelo numérico de fluxo (adaptado de MAS, 2005); (c) Amostra de poços da área em Guarulhos

Os materiais de nomenclatura original (M_1 ; M_2 ; M_3) passam a hidrofácies ‘ $H_f 1$; $H_f 2$; $H_f 3$; $H_f 4$; $H_f 5$ ’ (Tabela 1a, b), em uma abordagem que procura aumentar o grau de liberdade de manipulação das litologias a serem processadas, sem desrespeitar a estacionariedade da base de dados. Devido à baixa proporção de argila-arenosa (Figura 41), defende-se como mais adequado tratá-la por areia-argilosa, o que, desta forma, é mais coerente à sua interpretação como canais fluviais (esporádicos) dispersos em matriz argilosa (de planície aluvial).

Tabela 1: Interpretação dos materiais dos perfis litológicos da base de dados como hidrofácies (H_f).



Não se conhece a profundidade exata pela qual as hidrofácies rasas passam a profundas. Entretanto, as recorrentes camadas argilosas (Hf_3) e níveis potenciométricos distintos (Figura 52) permitiram o entendimento da possível existência de aquíferos sobrepostos, ou pelo menos de aquíferos suspensos. A cota de 721m foi utilizada para induzir a adoção de dois sistemas sedimentares distintos, como se paleossolos tivessem sido identificados na região. Um exemplo mais criterioso desta abordagem encontra-se no trabalho de Engdahl *et. al.*, (2010).

5.2.1. Bloco-diagrama determinístico

Em etapa subsequente à categorização das descrições litológicas, utilizou-se o recurso horizontes de deposição (Lemon & Jones, 2002) que procura definir a melhor configuração de cada uma das seções transversais necessárias à interpolação do bloco-diagrama determinístico.

No limite deste raciocínio, para uma análise conjunta dos 90 poços da base de dados (seriam 1.521 m de sondagem se fosse uma só amostragem contínua), foram definidos 22 ‘horizontes’ de diferentes eventos de deposição (Figura 40a a, b). Deste ordenamento da recorrência das cinco hidrofácies em pauta, entre cada par de poços de descrições litológicas, se procedeu às simples interpolações 2D pelo inverso do quadrado das distâncias (Figura 40c).

Ajustes manuais foram então aplicados às seções 2D para corrigir distorções, como a opção por aumentar a extensão de camadas pouco pronunciadas. Destas, realizou-se a interpolação 3D utilizando a métrica do vizinho natural mais próximo e função nodal gradiente, consideradas pelo melhor resultado por critério visual do M_{BDD} (resultados no item 6.2.1).

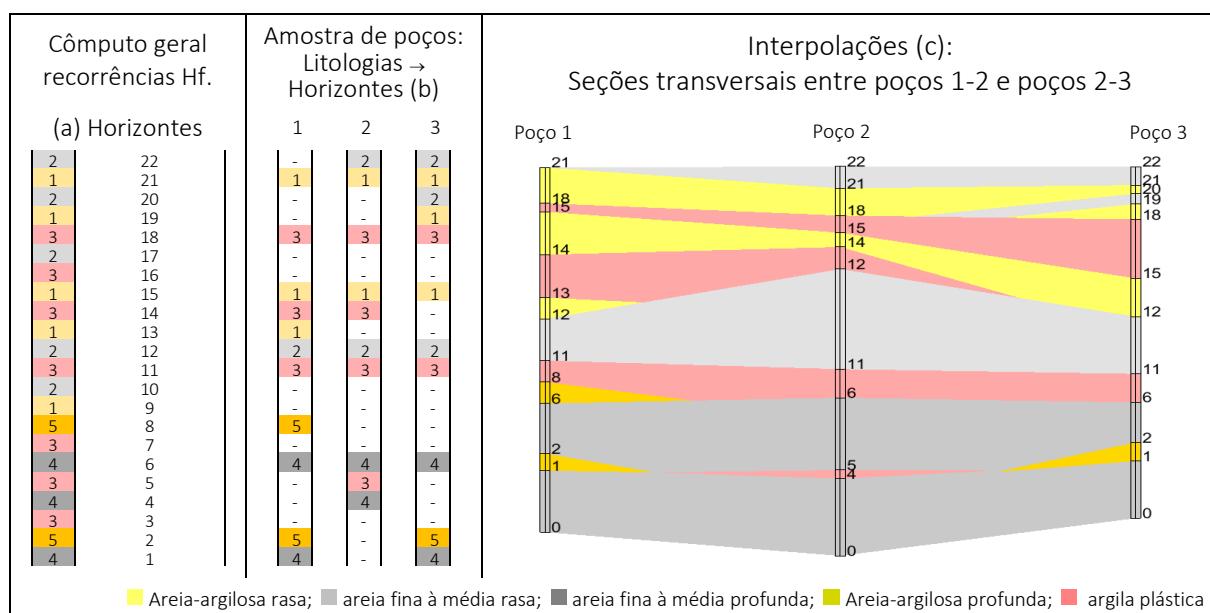


Figura 40: Horizontes de deposição para (b) exemplos, amostra da base de dados; (c) interpolações, seções 2D

5.2.2. Bloco-diagramma estocástico-markoviano

Em uma primeira análise exploratória 1D, de todos os poços da base de dados tomados em conjunto, procura-se visualizar como os comprimentos L_k (m) de cada uma de suas cinco hidrofácies variam em função do comprimento da janela de observação ‘ Δh ’ Tprogs.

Na Figura 41, comparando-se até quando as diferenças se fazem presentes ao se variar a amplitude entre um e outro ponto de referência (Δh), procurou-se uma forma de se entender os padrões a serem trabalhados. Tais propriedades são retiradas graficamente do transiograma experimental como definido inicialmente no método Tprogs (Figura 13).

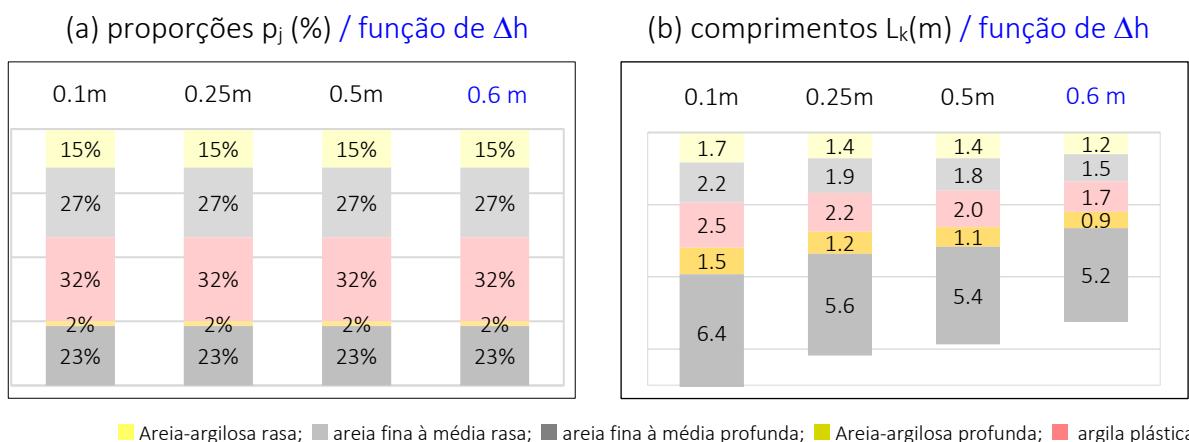


Figura 41: (a) Probabilidades p_j (%); (b) Comprimentos médios L_k (m) em função do comprimento da janela de observação utilizando modos de amostragem discreta e imbricada.

Ainda em um esforço para extrair tendências que explicitem algum padrão matemático, agora apenas na janela de observação que se julgou mais apropriada ($\Delta h = 0.6$ m), processou-se os extratos raso (1 a 6 m), intermediário (6 a 15 m) e profundo (15 a 25 m) desta base de dados (anexo A.2). A Figura 42 ilustra uma proporcional alteração destas variáveis quando se subdivide a base de dados por comprimento médio de seus poços.

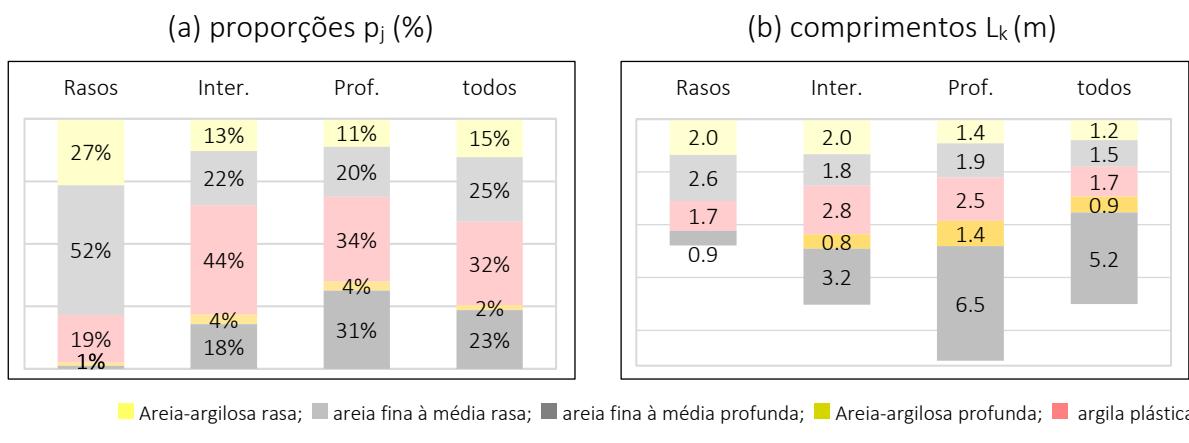


Figura 42: (a) Proporções p_j (%); (b) Comprimentos L_k (m) de poços rasos, intermediários e profundos

Neste processo de escolha da melhor janela de amostragem GAMEAS:

- Δh pequeno tende a exagerar índices da diagonal principal (extensões das hidrofácies);
- Δh grande tende a ignorar a presença de hidrofácies de menor espessura.

De forma concomitante, outras duas maneiras de se visualizar os padrões matemáticos que vêm sendo trabalhados estão nos gráficos de barras (*off-values* da primeira cadeia de Markov $\Delta h \rightarrow 0$) e nas matrizes gráficas de transiogramas de caminhamento.

Seguem comparações das informações supracitadas para o menor e maior comprimento das janelas de observação de $\Delta h = 0.1$ e 0.60 m (Figura 43)

E ainda, dentre os diferentes entendimentos das variações das cadeias de Markov Tprogs $|P|M|FT|R|$, esta mesma figura aponta matrizes de taxas de transição em modo imbricado $|A|$ (ver também o item 4.2.2):

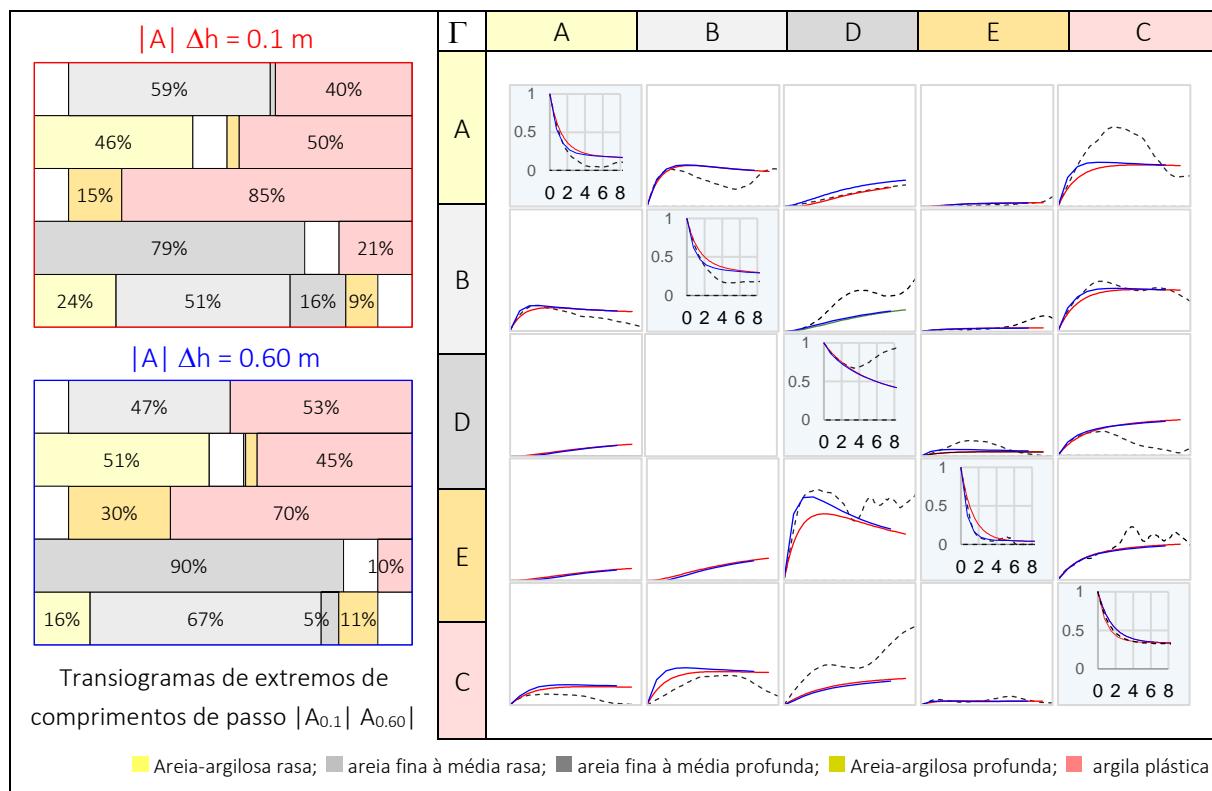


Figura 43: (a) Gráficos de barras das primeiras cadeias de Markov $|A_{0.1}|A_{0.60}|$ (b) Transiogramas experimental $|A_{(0.60)}|$ (curvas pontilhadas (preta) e modelados $|A_{(0.60)}|A_{(0.1)}|$ (curvas contínuas) sobrepostas

Em uma última palavra para justificar escolha do intervalo $\Delta h = 0.60$ m vem tanto das comparações apresentada neste item, quanto dos conceitos sedimentológicos que o presente autor entende como aplicáveis para a área de estudo. Trata-se de uma premissa adotada para construção do modelo M_{BDE}.

5.2.2.1. Inferências espaciais 3D, aplicação da lei de Walther

A partir das definições iniciais de proporções $p_j(\%)$ e comprimentos $L_k(m)$ para a janela de observação de $\Delta h = 0.60$ m, cada hidrofácie ($H_f.$) foi manipulada de modo independente pelos chamados coeficientes de correlação de fácie de Walther (Ω_{j10} , Langousis *et. al.*, 2018).

Agentes multiplicadores ou parâmetros de controle nas proporções ‘ Ω_{j10} ’, como expectativas de acúmulo das hidrofácies foram definidos nas direções axial y' e lateral x' de deposição (Tabela 2). Exemplos: (A) $H_f.$ 1, de espessura 1.2 m passará, nesta configuração, a ter 23 e 69 m de continuidades laterais nas direções (*strike and dip*) x' e y' . (B) $H_f.$ 5, como fácie de canal, foram colocadas para receber grande continuidade na direção y' .

Não obstante à primeira premissa intervalo de observação (Δh), optou-se por três outras premissas na definição da forma de se representar os padrões observados (*hard data*), como *soft data* da análise sedimentológica. Nesta Tabela 2 optou-se pelas variantes $|Az|FTx|Py|$ de suas cadeias de Markov. $|Az|$ pela alta densidade de dados analisada (Carle, 1999), e $|FTx|Py|$ por se acreditar como menos e mais confiantes na replicação dos padrões nestas direções.

Tabela 2: Proporções $p_j(\%)$, comprimentos $L_k(m)$ e multiplicadores de Walther (Ω_{j10}) nas direções x' e y' .

Hidrofácie		Proporções p_j	$ Az \rightarrow L_k$	$ FTx' \Omega_{j10}$	$Lx' (m)$	$ Py' \Omega_{j10}$	$Ly' (m)$
Hf. A	Areia-argilosa rasa	15%	1.2	2	23	6	69
Hf. B	Areia fina rasa	27%	1.5	7	102	7	102
Hf. D	Areia fina profunda	23%	5.2	2	105	2	105
Hf. E	Areia-argilosa profunda	2%	0.9	2.5	23	15	139
Hf. C	Argila plástica	32%	1.7	-	108	-	94

A Figura 44 mostra como espera-se que um M_{BDE} seja preenchido pelo módulo Tprogs TSIM, enquanto a Figura 45 resume todos dados utilizados para cada uma de suas realizações.

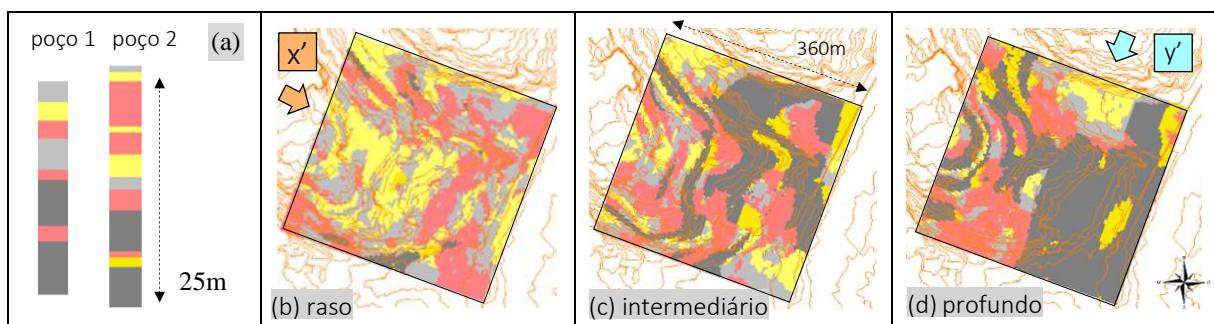


Figura 44: Interpretações anisotropia deposicional (x' , y'); (a) De poços condicionantes, exemplo (expectativas) de porções: (b) Rasa, (c) Intermediária e (d) Profunda de bloco-diagrama interpolado Tprogs.

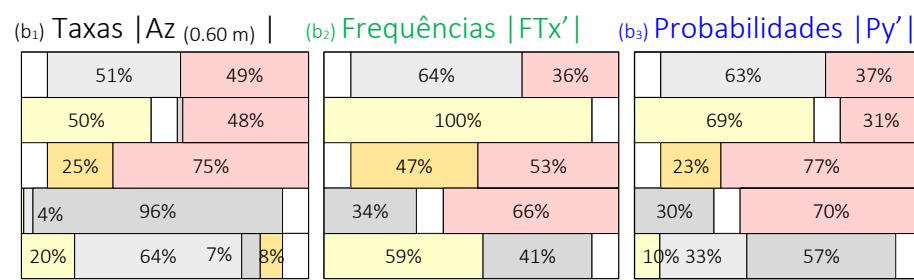
Padrões modelados, dados originais Tprogs $|Az| \rightarrow |FTx'| |Py'|$

(a)	A	B	D	E	C
A	-0.87	0.45	-0.01	-0.01	0.44
B	0.35	-0.69	0.01	-0.01	0.34
D	-0.01	-0.04	-0.19	0.06	0.18
E	0.01	0.04	1.18	-1.08	-0.15
C	0.12	0.38	0.04	0.05	-0.60

	A	B	D	E	C
	23	27%	0%	0%	15%
	25%	102	0%	0%	-8%
	0%	0%	105	7%	8%
	0%	0%	2%	23	4%
	18%	-10%	12%	0%	108

	A	B	D	E	C
	69	63%	0%	0%	37%
	69%	102	0%	0%	31%
	0%	0%	105	23%	77%
	0%	0%	30%	139	70%
	11%	37%	63%	-10%	94

Interpretação: gráfico de barras para as três direções cartesianas



(d)

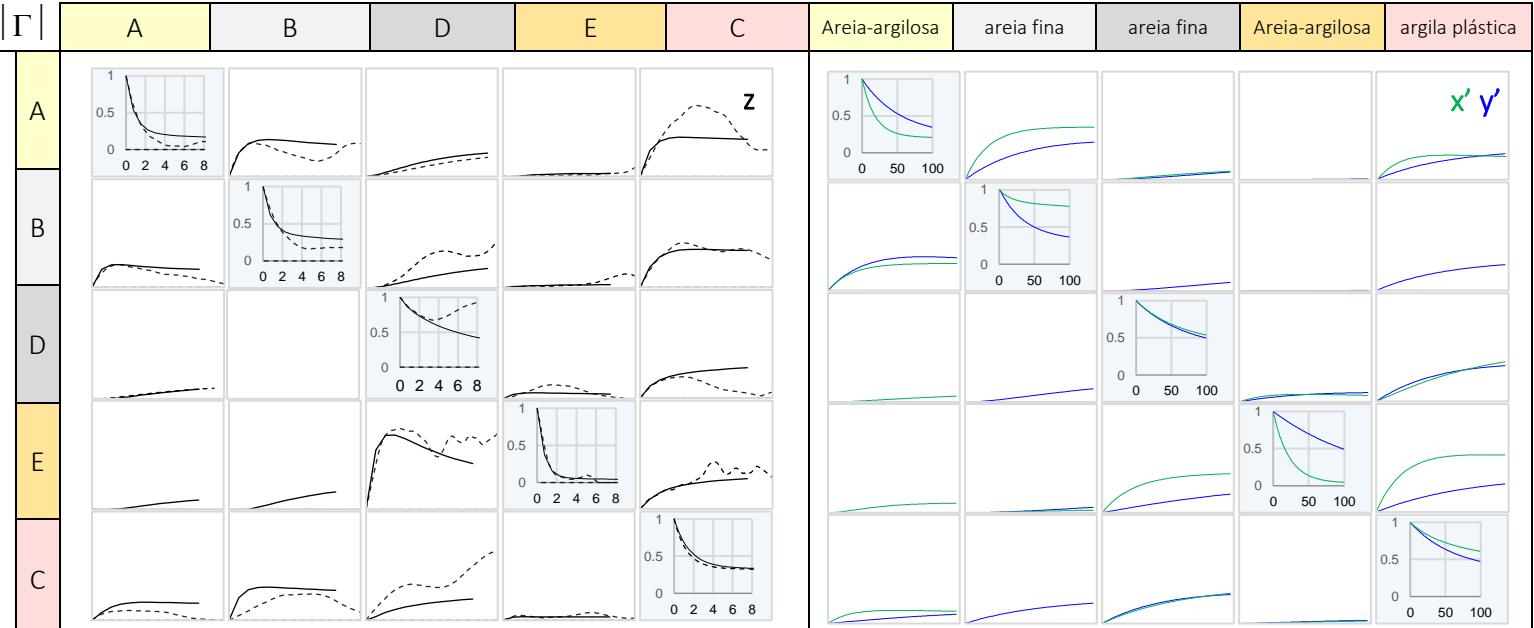


Figura 45 (a): $|Az| \rightarrow |FTx'| |Py'|$ Output original Tprogs, com padrões em verde ressaltando subdivisão em porções rasas e profundas; (b_{1, 2, 3}) Gráfico de barras empilhadas (diagonais principais ressaltadas na cor azul ausentes na cor branca);

Figura 45 (c): Proporções p_j (%) e comprimentos médios L_k (m) observadas na vertical; interpretação sedimentológica ($\Omega j 10x, \Omega j 10y$);

Figura 45 (d): $|\Gamma|Rz(h)|$ Transiogramas sobrepostos experimental e modelado (vertical); $|\Gamma|FTx'(h)|Py'(h)|$ Transiogramas modelados do plano horizontal complementar.

5.3. CARACTERIZAÇÃO HIDROGEOLÓGICA E CONDIÇÕES DE CONTORNO

A área de interesse possui marcantes amplitudes topográficas (Figura 46a), fato que se reflete, ainda que em uma menor monta, nas amplitudes das cargas hidráulicas observadas nos poços de monitoramento, assim como naquelas a serem modeladas.

Circunscrevendo o domínio idealizado para este projeto, a Figura 46b detalha duas condições de contorno para células com cargas hidráulicas conhecidas. A curva topográfica de 758m foi utilizada para guiar a primeira condição de carga fixa ‘cc CHD’, junto a média das cargas hidráulicas (744 m) de 8 poços mais a montante. Já a condição de contorno a jusante foi adotada como coincidente com o traçado da rodovia presidente Dutra, e por extensão da drenagem que acompanha tão importante via de acesso ao município de São Paulo. Esta última condição de contorno localiza-se a apenas alguns metros do canal de circunvalação de Guarulhos e foi colocada para compartilhar, a mesma cota potenciométrica (Figura 50).

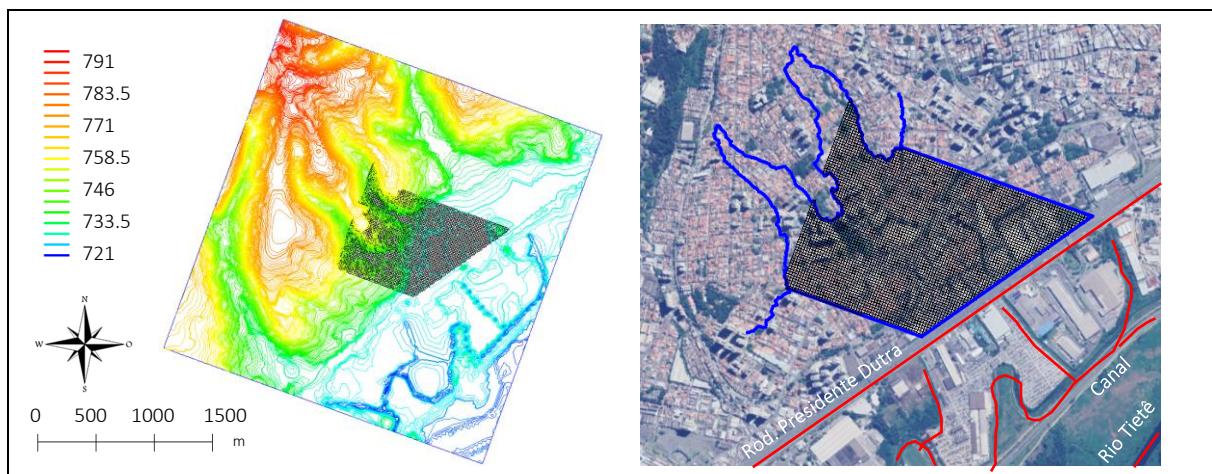


Figura 46: (a) Topografia da área de estudo; (b) Domínio modelado e discretização bloco-diagrama em planta

Duas outras condições de contorno (e uma variação desta segunda) formam utilizadas para as regiões fronteiriças da área modelada. A condição de carga variável ‘cc *Ibound*’ carrega a mesma carga hidráulica da conhecida ‘cc *CHD*’ à montante preenchendo os espaços entre esta última e as células de fronteira em ângulo reto, nas laterais do domínio estabelecido. De forma complementares, condições de contorno ‘cc *GHB*’ se localizam nas laterais e fundo do domínio modelado, onde um fluxo “conhecido” é dependente de uma relação entre a carga hidráulica modelada e outra estimada para a região de entorno (variável passível de calibração).

Dadas a grande declividade em área urbana densamente povoada, e suas altas taxas de impermeabilização, não foram utilizadas condições de recarga e evapotranspiração. Em contrapartida, pela profusão de cursos d’água, assim como pela extensa área de planalto à

montante da área de estudo, considerou-se a utilização de um tipo alternativo de recarga artificial em zona não saturada, com a condição de contorno ‘cc stream’. Apesar de ajudar na manutenção das cargas hidráulicas dos poços rasos, principalmente daqueles localizados nas porções mais altas do modelo (níveis rasos I e II, de poços superficiais a montante) observa-se uma contribuição limitada desta condição de contorno na calibração. Uma feição interessante que justifica sua utilização é a distância de mais de 1,5 Km entre o divisor de águas de topo de morro e o terreno investigado (ver seta na Figura 47). As vazões iniciais ‘cc stream’ foram dimensionadas ($\approx 20 \text{ m}^3/\text{d}$ em média) garantir o suprimento de água durante todo seu percurso.

Há expectativa para elevada capacidade específica de produção de água para as partes mais profundas do aquífero, como destaca Diniz & Duarte (1996) em levantamento de potencial hidrogeológico da vizinha bacia hidrográfica do rio Baquirivu-Guaçu. Outra condição de considerável potencial de influenciar os resultados é a obra de drenagem implantada nas áreas de várzea próximas a região de interesse, junto à Rodovia Presidente Dutra e a marginal Tietê.

A média histórica de precipitações, por volta de 1600 mm/ano para os anos de 2013 e 2015 (CIIAGRO, 2020), ajuda na estimativa dos volumes a serem alcançados na calibração.

Complementa este descriptivo, as condições ‘cc drenos’, colocadas em grande quantidade como forma a induzir o forte rebaixamento do lençol freático na região observado na região, como advoga a presença do (paleo) canal de circunvalação de Guarulhos, reescavado como forma de controle de enchentes na região.

A Figura 47 ilustra todas condições de contorno utilizadas.

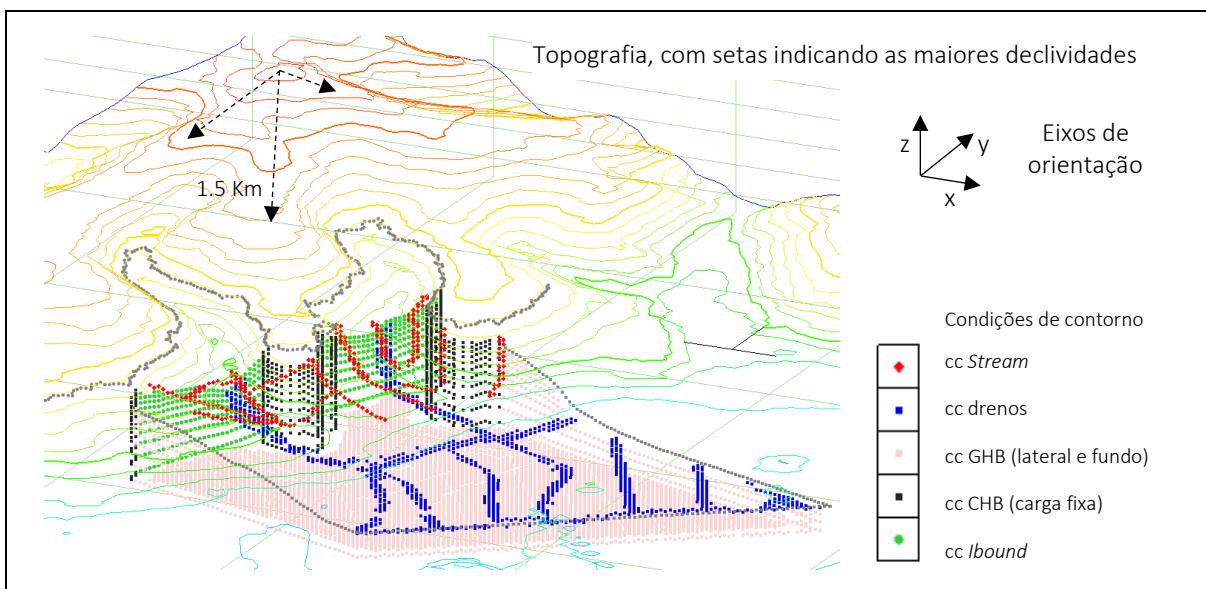


Figura 47: Condições de contorno utilizadas. Sobre mapa topográfico. Figura 3D com exagero vertical de 3x.

O domínio do bloco-diagrama utilizado pelo modelo numérico possui 100 x 100 células de 12 x 12 m de lado, distribuídas por 1,4 km² de área em planta (Figura 46b). Em um segundo momento, outro domínio de menor porte foi estabelecido para detalhar o problema (item 0).

Uma seção transversal na direção de maior para a menor topografia aponta, em termos gerais, o modelo conceitual aplicado (Figura 48). Além do considerável rebaixamento proporcionado pelos drenos, parte da carga hidráulica / fluxo é capaz de deixar o domínio modelado pelas suas bordas e fundo, como se observa pela inclinação das linhas equipotenciais na base da Figura 48. Responsável por esta função, a condição de contorno ‘cc GHB’ é mediada pela condutância e a distância (L) entre domínio modelado e um ponto referencial de carga conhecida. Entende-se que este ponto referência não seja a carga hidráulica Δh do rio Tietê, mais sim uma obra de drenagem vários metros abaixo deste rio (20m), sendo implementada para captação de esgotos e revitalização da área. O rio Tietê passaria então a ser, no máximo, localmente influente.

O cenário mimetiza um manto de alteração relativamente permeável. O uso da ‘cc GHB’ foi necessário dada a necessidade de calibrar o fluxo horizontal ou lateral raso e o fluxo vertical descendente, profundo, em um só modelo numérico, tendo em vista as altas cargas hidráulicas observadas em poços rasos e, simultaneamente, as baixas cargas de poços profundos.

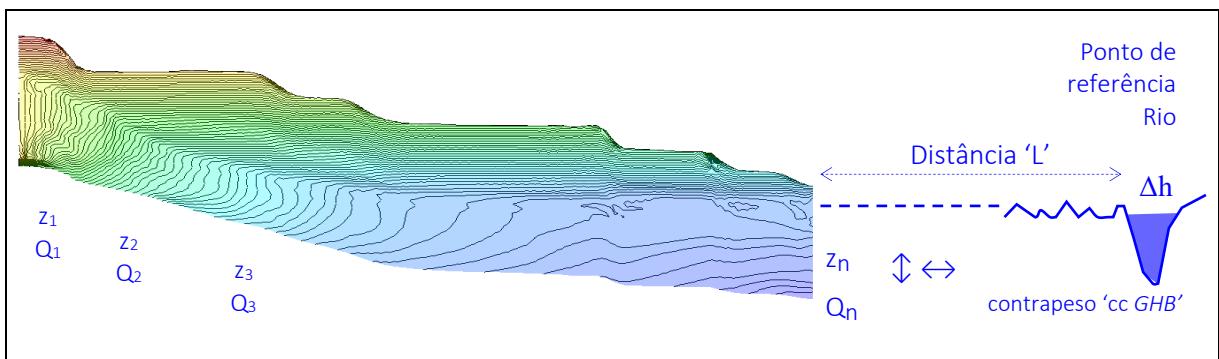


Figura 48: Modelo conceitual de fluxo; Condições contorno ‘cc GHB’ (de posições Z_i e vazões Q_i) estimadas para cada uma de suas células ao longo das bordas de fundo e base do modelo; Δh = carga hidráulica do rio Tietê

O contraste entre os altos níveis d’água dos poços superficiais, a despeito dos baixos níveis dos poços profundos, levou a proposição da existência de descargas a maiores profundidades, para além do domínio circunscrito pelo modelo. Destaca-se que o fluxo vertical modelado veio prioritariamente do posicionamento (cota vertical) de trechos dos drenos, distribuídos em planta (Figura 49 e Figura 50). Como complemento, foi estabelecida uma comunicação hidráulica ‘limitada’ entre o domínio simulado e o embasamento e ou rocha alterada, mais permeável (fraturada) abaixo do domínio modelado.

5.3.1. Parametrização

Como estratégia geral, procurou-se multiplicar a quantidade de variáveis utilizadas de forma a proporcionar maior liberdade à satisfação das demandas de calibração (Young *et. al.*, 2010). Cada parâmetro ou variável de entrada pertence a uma ou outra condição de contorno.

As imprescindíveis simplificações (Doherty *et. al.*, 2010) quanto a quantidade e distribuição espacial das condições de contorno utilizadas (*calibration constraints*) são descritas a seguir. Os limites ou amplitudes de cada uma das variáveis implementadas (*knowledge constraints*) vieram de bases de dados de referência, coletados em campo (itens 5.2 e 5.3.2), ou de informações predefinidas pela literatura (item 4.4.4.2, por exemplo).

5.3.1.1. Parâmetros das condições de contorno ‘cc stream’, ‘cc drenos’, ‘cc GHB’

São quatro grupos de células passíveis de calibração (Figura 49) ‘cc stream’ (células s1-20), ‘cc drenos’ (células d1-16) e ‘cc GHB’ (células GHB1-9). Como segmentos de reta, ‘cc stream’ e ‘cc drenos’ acompanham o traçado das ruas e avenidas existentes no local, chegando a se sobrepor na região mais a montante. Em inspeção presencial, foi constado o vazamento de esgoto a céu aberto nas porções mais altas do terreno, demonstrando plenas condições de existências de recarga pontuais ‘cc stream’.

À propósito, na Figura 49b são apresentadas as espessuras de cada uma das células do modelo em relação suas respectivas topografias de topo e base. Salienta-se que a implementação da abordagem HUFs (*Hydrogeologic-Unit Flow package*) permite diferentes condutividades hidráulicas dentro de uma única célula ou camada de processamento numérico.

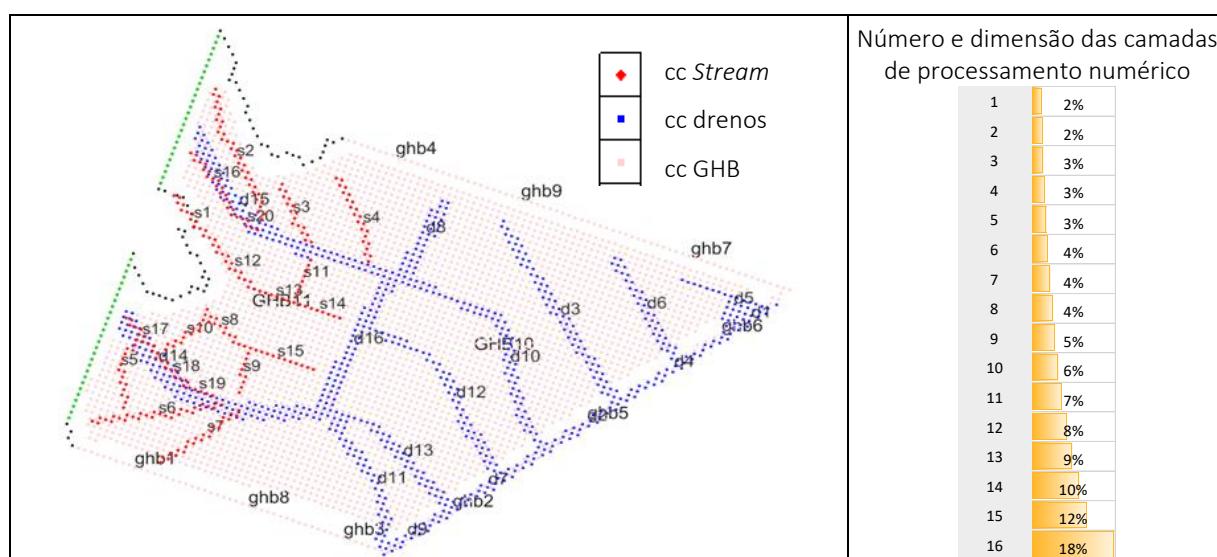


Figura 49: Distribuição espacial, horizontal das condições internas de contorno

Considerável número drenos foram necessários para rebaixar o aquífero. A Figura 50 mostra a topografia de orientação das superfícies que entregam suas cotas de elevação.

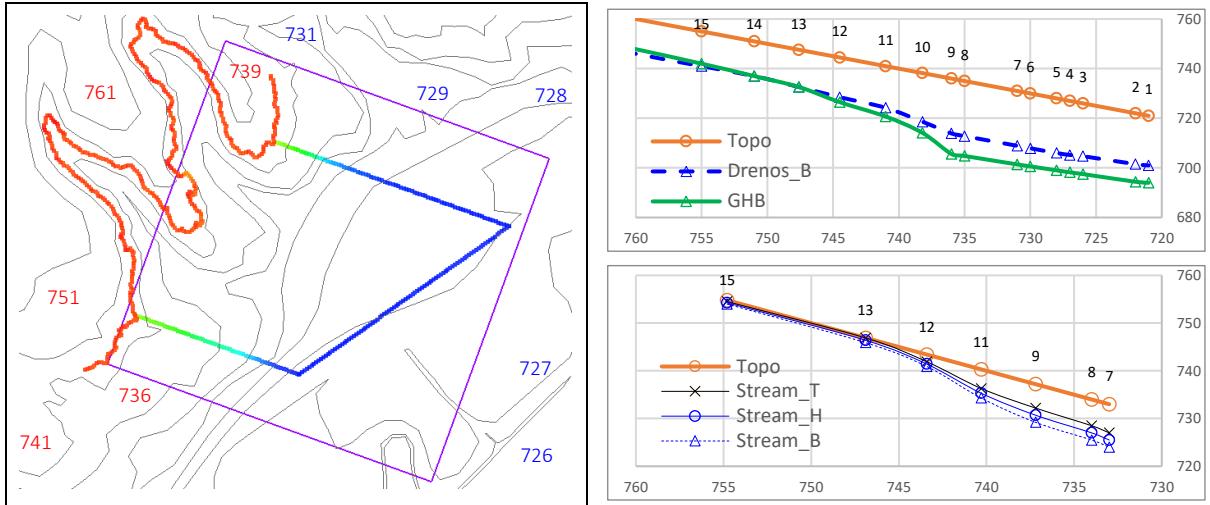


Figura 50: (a) Curvas guia, (b) topografia aplicada a superfícies de elevação ‘cc stream’, ‘cc drenos’ e ‘cc GHB’

Uma vez alocadas, tais condições de contorno recebem suas condutâncias de fundo. Amplitudes de variação foram pensadas para cada grupo de células, segundo tipo de condição de contorno. À princípio, o modelo segue as magnitudes apresentadas na Tabela 3:

Tabela 3: Parâmetros iniciais de entrada e suas amplitudes de variação, por condição de contorno

Condição ‘cc’	Identificação	Valor	Mínimo	Máximo	Unidade
Stream (STR)	1 a 20	0.1	0.01	2	(m ² /d) / m
Drenos (DRN)	1 a 17	1.00	0.2	80	(m ² /d) / m ²
GHB (lateral)	1 a 8	1	0.01	5	(m/d) / m
GHB (fundo)	9, 10	1.0E-04	1E-05	1E-03	(m ² /d) / m ²
KH	1 a 5	KH, condutividades hidráulicas (item 5.3.1.2)			(m/d)
VANI	1 a 5	Vertical anisotropy (KH/ KV), item 5.3.1.2			

O modelo tem uma base plana e cota mínima de 685m de profundidade. São 76m e 41m de espessura máxima para maior e menor cota topográfica, espaço para suficiente para acomodar a recarga necessária de forma a calibrar os poços rasos e profundos.

A implementação da ‘cc GHB’ estabelece uma comunicação hidráulica limitada entre o domínio simulado e seu entorno. Porém a presente atuação ‘cc GHB’ é apenas marginal. A replicação da forte tendência de fluxo descendente observada em poços multiníveis, neste modelo, se deve majoritariamente a adequada alocação das cotas da ‘cc drenos’ (Figura 50).

5.3.1.2. Condutividades hidráulicas pré-calibração

As condutividades hidráulicas ‘K (m/dia)’ foram atreladas a cada uma das hidrofácies antes espacialmente distribuidas de forma tridimensional nos contextos M_{BDD} e M_{BDE}. Herdaram portanto a mesma espacialização e por este motivo não houve necessidade da transformação logomial. Este modelo não faz uso de redistribuições do parâmetro K com ‘pilot points’ PEST.

Na Tabela 4, o parâmetro K das cinco hidrofácies partem de estimativas bibliográficas (Fogg *et. al.*, 2000) e de campo (item 5.3.3). A partir das verificadas das proporções p_j (%) Tprogs, o modelo parte da isotropia vertical (KH/ KV = 1). Esta tabela também aponta uma medida de relações de ‘predisposição ao fluxo’, calculada como proporções de hidrofáceis arenosas / Hf. argilosa. A Figura 51 compara estes parâmetros e suas amplitude de calibração em forma gráfica. Os parâmetros VANI imprimem isotropias verticais, iniciais, à simulação.

Existe a expectativa de que quanto maior a amplitude entre os parâmetros K, maior seja o potencial de variação das direções de fluxo advectivo. Constatou-se que quanto maior as amplitudes adotadas, menor a capacidade de convergência do modelo numérico, ou seja, maior a dificuldade de demonstrar o potencial de variação do trajeto das partículas.

Tabela 4: Hidrofácies (Hf.) em proporções p_j (%) (herdadas do Tprogs); condutividades hidráulicas K; Magnitudes de hidrofáceis arenosas em relação a argilosa; Anisotropia vertical inicial (VANI); Amplitudes toleradas na calibração (Mín; Máx.): Unidade 3 m/d = 3.5×10^{-3} cm/s; 0.0004 m/d = 4.63×10^{-7} cm/s

Hidrofácie (Hf.)		p _j (%) Tprog	K (m/d)			Proporções			VANI/ (entrada)	Amplitudes VANI (KH / KV), efetivas e em porcentagens								
			3	7500	76%	0.3	750	8%		0.0004	1	0.016	25%	1	0.03	0.6	50%	200%
A - Areia argilosa		15%	3	7500	76%	0.3	750	8%	1	0.0004	1	0.016	25%	1	0.03	0.6	50%	200%
B - Areia fina		27%	0.3	750	8%	0.0004	1	0.01%	1	0.00004	0.00016	0.0016	25%	1	0.0003	0.06	50%	1000%
C - Argila plástica		32%	0.0004	1	0.01%	0.06	150	2%	1	0.00004	0.00016	0.0016	25%	1	0.00004	0.006	50%	1000%
D - Areia fina		23%	0.06	150	2%	0.6	1500	15%	1	0.01	0.01	0.11	57%	1	0.012	1.2	50%	500%
E - Areia argilosa		2%	0.6	1500	15%				1	0.12	1.2	1.2	50%	1	0.12	1.2	50%	500%

KH KV	A	B	C	D	E		A	B	C	D	E
	3 3	0.3 0.3	0.1 0.1	0.6 0.6			6 6	0.6 0.6	0.11 0.11	1.2 1.2	
	76% 76%	8% 8%	2% 2%	15% 15%			2 2	0.03 0.03	0.016 0.016	0.12 0.12	
	0.0004 0.0004	0.0004 0.0004	0.0001 0.0001	0.01% 0.01%			0.00004 0.00004	0.00004 0.00004	0.01 0.01		

■ Areia-argilosa rasa; ■ areia fina à média rasa; ■ argila plástica, ■ areia fina à média profunda; ■ Areia-argilosa profunda;

Figura 51a: Condutividades hidráulicas (KH, KV) iniciais K_{ABCDE} (m/dia); (b) amplitudes de variação

5.3.2. Variáveis de referência I - Cargas hidráulicas

Uma segunda base de dados, dedicada ao modelo numérico de fluxo, contém as cargas hidráulicas observadas em poços de monitoramento. Segue dados quantitativos das informações disponibilizadas por extrato ou profundidades relativas (poços rasos 1 e 2, intermediários e profundos, Tabela 5), assim como pelo comprimento das seções filtrantes de seus poços. Esta primeira subdivisão em quatro níveis de observação da potociometria em campo procura facilitar o entendimento do problema, não sendo, necessariamente, mantida em vistas das demandas da calibração.

Tabela 5 Número de poços de monitoramento por disposição vertical e comprimento de filtro

profundidade poços	filtros comprimentos	Número de poços por comprimento de filtro										Total
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
Rasos 1 (mais elevados)	1	3	9	3			1	2	1			20
Rasos 2 (menos elevados)			18	21	7	2	2	2				52
Intermediários	15	5	6		1	2		1		8	38	
Profundos	8	3	1	1	6			2				21

Uma das grandes preocupações do modelo de fluxo em construção é a necessidade de se replicar poços multiníveis com muita água nos níveis rasos ao mesmo tempo em que apresentam pouca água nos níveis profundos. Outra informação que ajuda a contextualizar o problema, é a considerável diferença de espaçamento entre as curvas de nível de altos e baixos topográficos, onde verificam-se incisões (ou retracções erosivas) sobre os naturais caminhos de drenagem no domínio de interesse (Figura 46A). Esta constatação já contém uma primeira alusão a necessidade de se trabalhar o modelo numérico em suas porções rasa e profunda.

A Figura 52 e anexo A.3, procuram ilustrar este desafio. No caso, o valores médios das cargas hidráulicas observadas (H) nos quatro níveis de comparação (Figura 52a), foram ponderados em função das posições (Z) de cada informação (Figura 52b), referente a metade dos comprimentos das seções filtrantes de cada poço (Figura 52c). Estas ilustrações contam, ainda com as cotas de base das camadas do modelo numérico.

Poços de filtros extensos atravessam inúmeras linhas equipotenciais de carga, portanto seu valor medido pode eventualmente representar mal as cargas que existem de fato no aquífero. Por este motivo a rotina de calibração a ser implementada no modelo de fluxo, como se verá, utiliza uma estratégia de ponderação, tomando como mais confiáveis as aferições de poços de monitoramento de seções filtrantes menores (Figura 57).

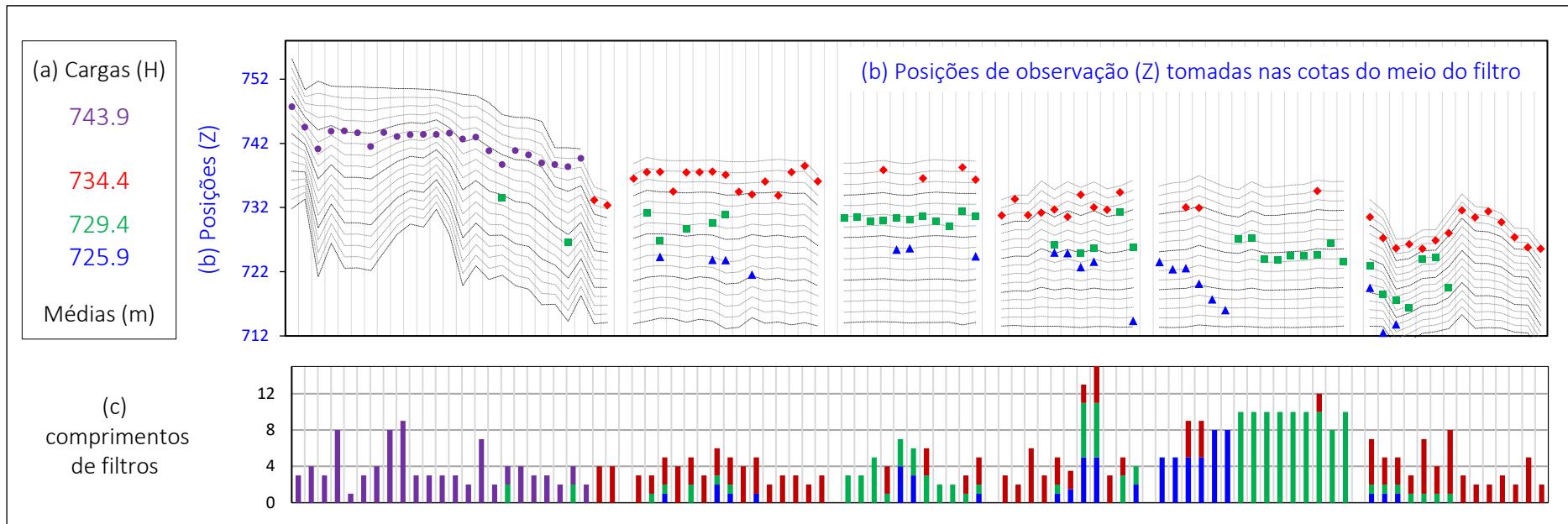


Figura 52: (a) Cargas hidráulicas médias (H) e (b) posições (Z) de uma em uma análise multinível da distribuição dos poços de observação sobre topografia de topo das 16 camadas numéricas do futuro modelo de fluxo; (c) Respectivos comprimentos das seções filtrantes de cada poço (resumo do anexo A.3).

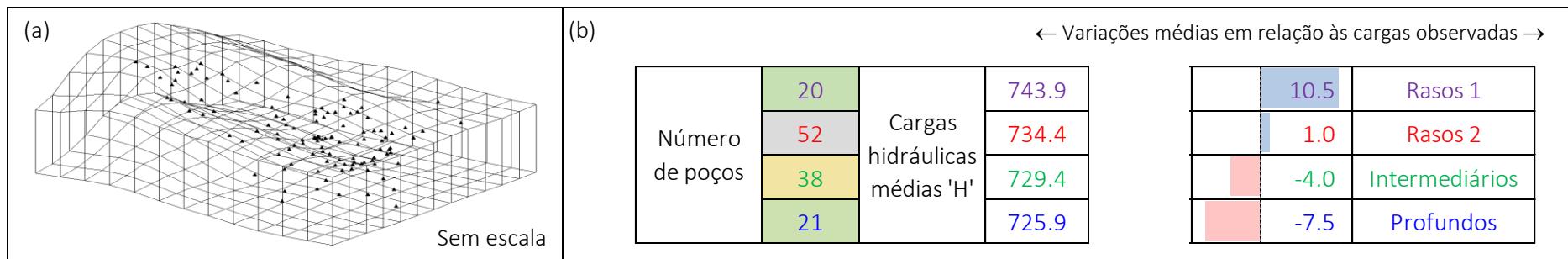


Figura 53: (a) Disposição das posições (Z) no bloco-diagrama e (b) Variações médias das cargas hidráulicas para cada um dos quatro níveis de observação.

5.3.3. Variáveis de referência II - *Slug tests*

Uma estimativa de campo das condutividades hidráulicas (K) vem de 28 testes de bombeamento e deslocamento (*slug tests*), realizados por duas empresas diferentes na área de estudo. Tratam-se de estimativas realizadas para três níveis de profundidade em média, em poços de observação à 6.6, 16 e 18 m. Ver base de dados no anexo A.4.

A Figura 54 aponta os locais de realização dos testes, enquanto a Figura 55 dispõe a ordem das grandezas observadas, por nível de níveis de profundidade média.

Não se sabe em que condições estes testes de bombeamento e ou deslocamento foram realizados. Ainda assim, interessa à modelagem numérica destacar a progressiva diminuição de K na medida em que se aprofundam o local de coleta destas informações. Em teoria, estes valores referem-se a um volume geral influenciado pelo *slug test*, ou seja, as magnitudes K encontradas não se referem ao valor deste parâmetro para uma hidrofácie em específico.

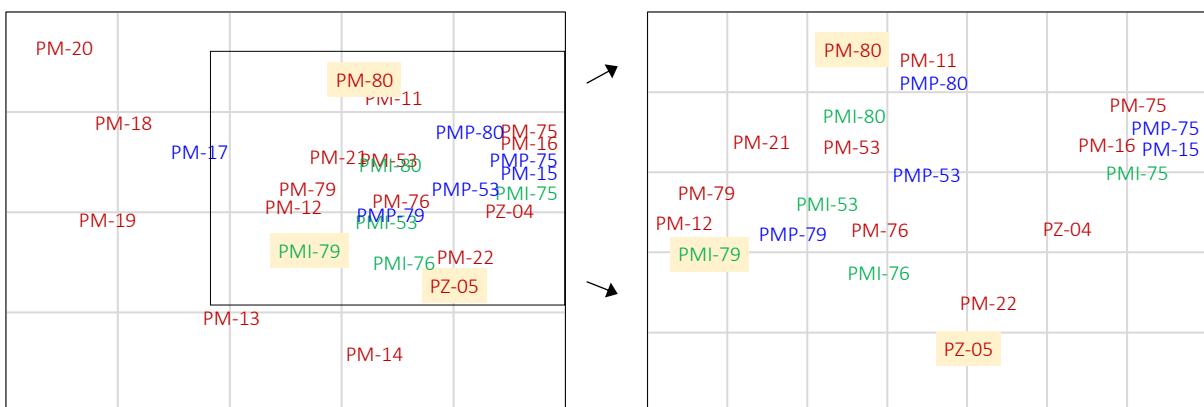


Figura 54: Posição em planta dos testes de bombeamento e de deslocamento (*slug tests*), para os níveis de realização dos testes 6.m, 16 e 18m, respectivamente (destaque em amarelo para orientação).

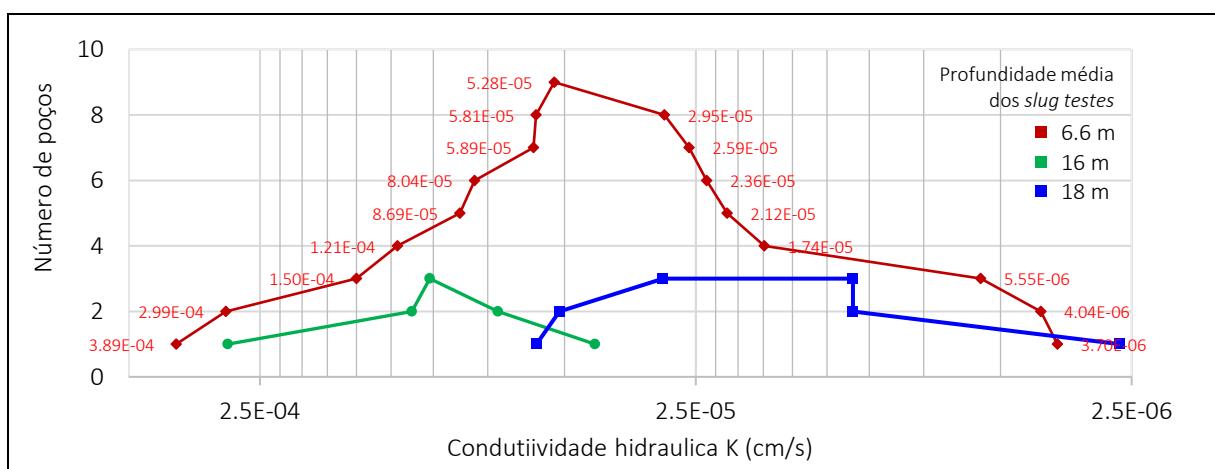


Figura 55: Condutividades hidráulicas (K) estimadas em campo para os níveis raso (vermelho), intermediário (verde) e profundo (azul). Distribuições normais STD escala logarítmica (eixo x); Eixo 'y', sem escala.

5.4. ESTRATÉGIA DE CALIBRAÇÃO

Elaboraram-se quatro curvas STD para definir a função objetivo PEST (Equação 16). A ponderação dos intervalos de observação $IN_{i(m)}$, e correlacionáveis níveis de confidência $Z_{i(%)}$, das cargas potenciométricas observadas foi a única forma de manipulação dos dados de referência. Não se realizou nenhuma outra alteração das cargas hidráulicas (H_i) ou elevações de referência (Z_i) efetivamente observadas em campo. Valores discrepantes (*outliers*) ou qualquer demanda de calibração (neutralização de alguma informação que restrinja a liberdade das estimativas PEST, por exemplo) foram manejados exclusivamente por este procedimento.

Apesar do grande número de observações de referência, não se teve acesso as datas das campanhas de monitoramento. Para contornar o problema da variação do lençol freático ao longo do tempo, fato não só potencial, mas até esperado, procurou atribuir um comportamento similar às cargas hidráulicas observadas de poços razoavelmente próximos, e no mesmo nível potenciométrico. Neste intuito, intervalos de observação ($IN_{i(m)}$) foram colocados como proporcionais ao desvio padrão entre os poços de cada um de quatro níveis potenciométricos (Figura 56 e Figura 57). Uma correção de relativa importância foi acrescentar aos índices ' $IN_{i(m)}$ ' um valor proporcional ao comprimento de suas seções filtrantes, principalmente com relação àquelas mais longas, cuja majoração foi de, no mínimo, o mesmo comprimento de suas seções filtrantes. Destaca-se também que ($IN_{i(m)}$) tem profunda relação com a espessura média das camadas numéricas do modelo. Os níveis de confidência vieram da curva STD (Figura 35).

A Figura 56 compara os parâmetros ' $IN_{i(m)}$, $Z_{i(%)}$ ' junto aos pesos ($W_{m(%)}$) (Equação 17). Nesta figura, os quatro conjuntos de elementos 'Xi' estão arranjados em ordem crescente de suas amplitudes 'Zscore'. As informações 'comprimentos de filtro' e 'número de identificação dos poços' constam nos cabeçários superior e inferior deste conjunto de gráficos.

Depois da primeira análise, a Figura 57 mostra a mesma base de dados, agora agrupada. Os pesos das quatro funções objetivo foram nivelados pela multiplicação de seus níveis de confidência ($Z_{i(%)}$) por 2, 0.8, 0.5 e 0.8. E a ainda na Figura 57, o já conhecido conjunto de informações vêm agora apresentado pela ordem da menor para a maior seção filtrante. Desta forma, procura-se destacar como os poços de filtros mais extensos são neutralizados, permitindo focar a calibração automatizada àqueles de filtro menores (Figura 57C). Os intervalos mínimos foram limitados a 1.6, 1.6, 1.3 e 2.5m.

Pela dificuldade inata de se definir o valor de qualquer função objetivo, este procedimento variou os parâmetros $IN_{(m)}$, $Z_{i(%)}$ ao longo de diferentes fases da calibração.

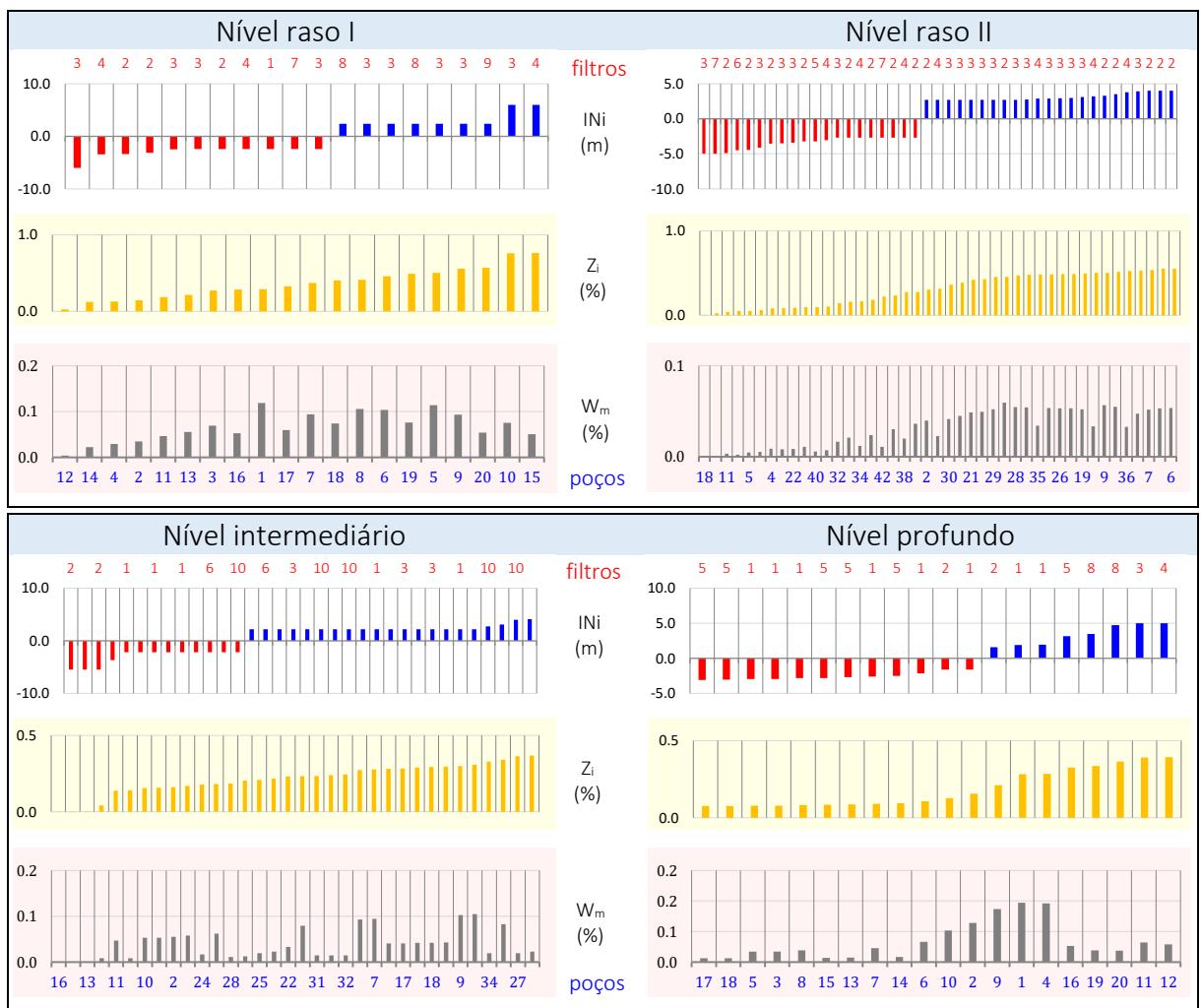


Figura 56: Intervalos (ordem: menor para o maior), níveis de confidência e pesos, por nível de observação

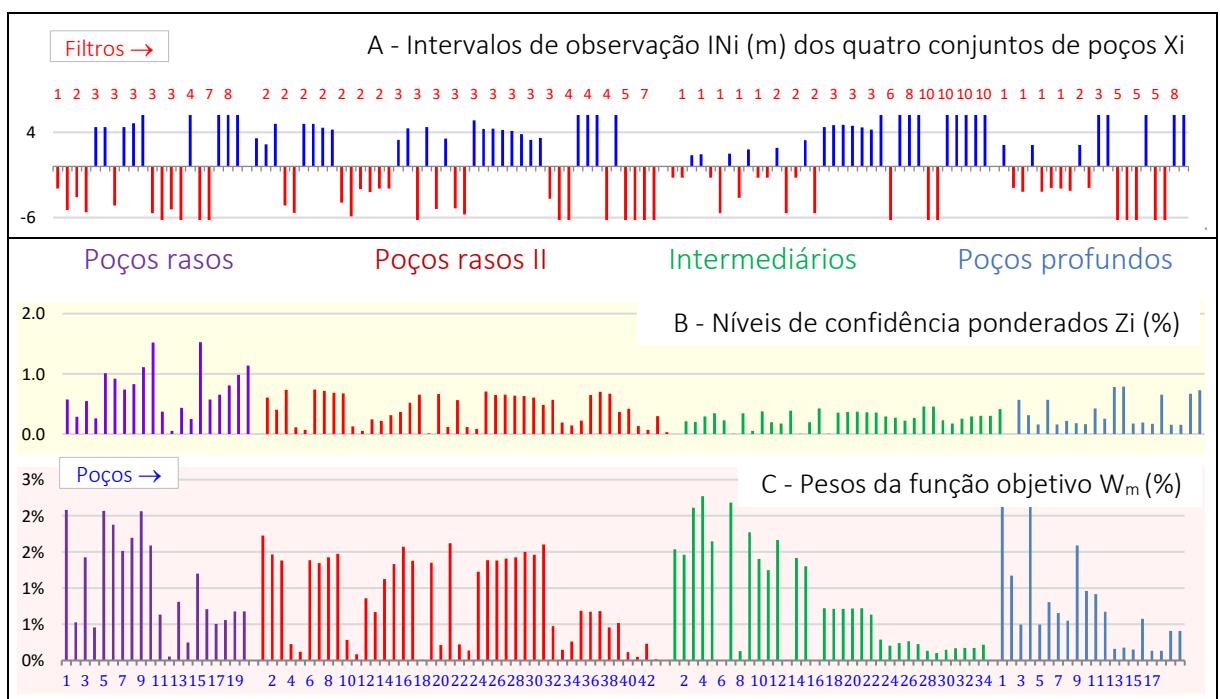


Figura 57: Parâmetros $IN_i (m)$, $Z_i (%)$, e $W_m (%)$, para toda a base de dados (Ordenados por comprimento de filtro)

5.5. BARREIRA HIDRÁULICA

Uma vez satisfeitas as condições de balanço de massa e calibração, procedeu-se a instalação e dimensionamento da barreira hidráulica.

Uma primeira barreira hidráulica M_{BDD} foi idealizada como um obstáculo à dispersão de preensos contaminantes observados da área fonte, esta última identificada pela presença de grande densidade de poços descrevendo com maior detalhe a área central do modelo (Figura 10). Este projeto procurou simular uma barreira hidráulica com a mesma configuração da barreira hidráulica original, como observado na base de dados (Figura 9 e Figura 52d).

Tratam-se de 12 poços, um poço em cada uma das células do modelo numérico, cuja discretização (bloco-diagrama) de quatro por quatro metros em planta foi definida para evitar que as partículas não passassem entre cones de rebaixamento provocados pelo bombeamento.

Os poços estão alinhados de forma perpendicular a linha de maior declividade do terreno, e o conjunto possui a considerável extensão de 48m, definido também em função da grande dispersão do traçado das partículas no modelo antes de iniciado o bombeamento. Seus filtros partem da porção insaturada no topo do terreno e se estendem até o fundo do modelo, poucos metros além do poço de observação mais profundo, como consta na base de dados.

As partículas, como uma mera representação do fluxo advectivo que passa a representar a contaminação são 5 em número, uma por célula do modelo em planta. Orientadas em uma linha paralela a barreira hidráulica, sobre a área fonte. Sua profundidade está vinculada por orientação da própria simulação, na medida em que acompanham a cota potenciométrica (NA) mais alta, iniciando seu percurso por volta da 9^a camada do modelo de 16 camadas numéricas.

Depois de esgotadas as possibilidades de dimensionamento M_{BDD}, procedeu-se com a mesma configuração da barreira hidráulica junto ao modelo estocástico-markoviano (M_{BDE}). Sua eficiência nos contextos M_{BDD} e M_{BDE} foi testada para diferentes vazões de bombeamento.

Com o intuito de se garantir a comparação dos resultados M_{MBD} *versus* M_{MBE}, não se alterou qualquer parâmetro de modelagem, e neste mesmo sentido, optou-se por não se proceder à recalibração de qualquer uma das novas realizações equiprováveis Tprogs.

Para processamento, na mesma medida em que se automatizou PEST do modelo M_{BDD}, optou-se pela modelagem estocástica inversa *Modflow* (GMS 10.0, 2014) com parâmetro NOPTMAX = -2 para o cenário M_{BDE}. Desta forma se garantiu a utilização da rotina original assim como automatização do processamento dos blocos-diagrama equiprováveis Tprogs.

6. RESULTADOS

6.1. BALANÇO DE MASSA E CALIBRAÇÃO

A Tabela 6a apresenta o balanço de massa da realização M_{BDD}, a ser comparado ao balanço de massa de uma das melhores realizações M_{BDE} (Tabela 6b e Figura 58). Procurou-se por uma discrepância razoavelmente próxima a 1% (modelo M_{BDD}). Os balanços M_{BDE} variaram em torno de 350 a 600% em média, para suas vazões totais de entrada e saída.

Tabela 6: (a) Balanço de massa M_{MDD}; (b) Balanço de massa de uma das realizações M_{MDE}

Condições de contorno (m ³ /dia)	M _{BDD}	Entradas	Saídas	M _{BDE}	Entradas	Saídas
	IBOUND	1972.2	-99.8	IBOUND	4923.4	-118.2
	Drenos	0.0	-1496.6	Drenos	0.0	-4700.0
	GHB	120.5	-608.1	GHB	1103.9	-3343.0
	Stream	83.1	-47.2	Stream	87.5	-22.5
	BALANÇO	1972.2	-99.8	BALANÇO	5,665.25	-12988
	TOTAL		3,43 %	TOTAL		29 %

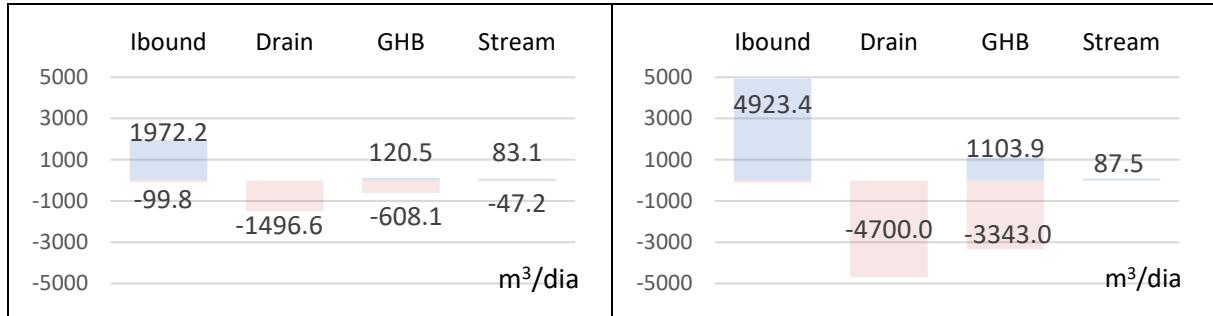


Figura 58: (a) Balanço de massa M_{MDD}; (b) Balanço de massa de uma das realizações M_{MDE}

Na calibração, procurou-se a representação do maior número possível de poços, dentro de um universo de 117 observações. A meta foi alcançar erro EMQN < 10%. Seguem resultados para 90% dos 65 poços de seções filtrantes menores que 3m (Tabela 7, Tabela 8, Figura 59).

Tabela 7: Demonstrativo de calibração do modelo determinístico (M_{BDD})

Dados de referência	Poços (m)	Rasos 1	Rasos 2	Inter.	Prof.	TOTAL
	Cargas Obs. máxima	747.7	740.6	735.8	731.2	747.7
	Cargas Obs. mínima	740.0	728.2	723.0	720.5	720.5
	(H _{max} ^{Obs.} - H _{min} ^{Obs.})	7.6	12.4	12.8	10.8	27.2
	Nº de poços	11	27	18	9	65
Resultados da rotina de cálculo M _{BDD}	Aproveitamento dos resultados	90%	90%	90%	90%	90%
	EAM (m)	0.7	1.0	1.7	1.9	1.3
	EMQN (%)	21%	14%	27%	43%	10%
	Cargas calculadas (médias)	742.5	735.1	730.3	724.4	

Tabela 8: Reflexo da calibração $M_{BD}D$ no modelo estocástico (M_{BDE})

Dados de referência	Poços (m)	Rasos 1	Rasos 2	Inter.	Prof.	TOTAL
	Cargas Obs. máxima	747.7	740.6	735.8	731.2	747.7
	Cargas Obs. mínima	740.0	728.2	723.0	720.5	720.5
	$(H_{\max}^{\text{Obs.}} - H_{\min}^{\text{Obs.}})$	7.6	12.4	12.8	10.8	27.2
	Nº de poços	11	27	18	9	65
Resultados da rotina de cálculo M_{BDE}	Aproveitamento dos resultados	90%	90%	90%	90%	90%
	EAM (m)	0.7	1.0	1.7	1.9	1.3
	EMQN (%)	21%	14%	27%	43%	10%
	Cargas calculadas (médias)	742.5	735.1	730.3	724.4	

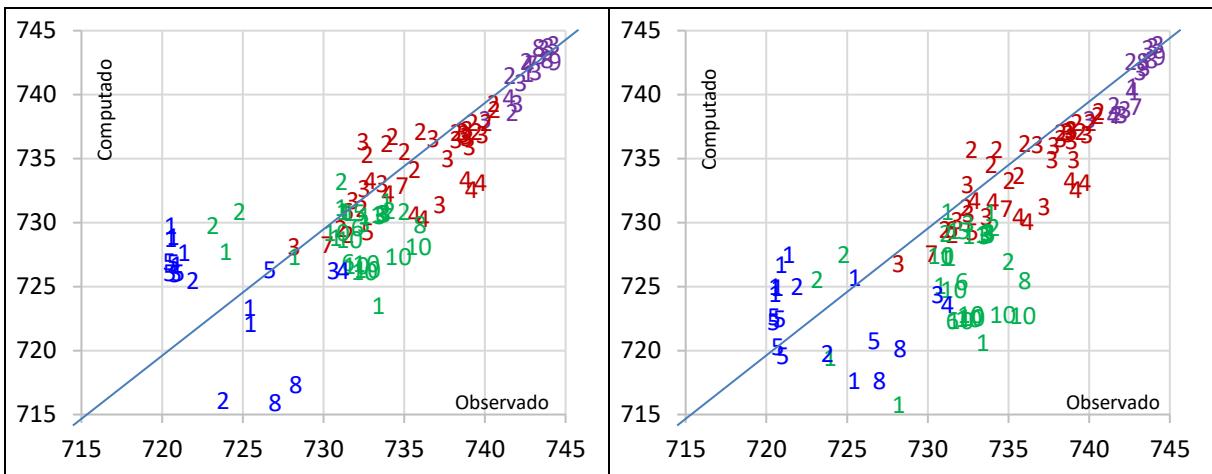


Figura 59: Calibração $M_{BD}D$ e M_{BDE} . Legendas indicando o comprimento das seções filtrantes em níveis 1,2,3,4.

De forma a explicitar a disparidade entre as cargas observadas e modeladas para os poços diferentes comprimentos de filtros, optou-se por apresentar 100% da base de dados na Figura 59. Por serem menos representativos e muitas vezes por atrapalhar o direcionamento da calibração, os poços de filtros mais extensos (8 e 10 metros) foram retirados do cálculo EMQN.

Não foram realizadas novas calibrações individuais de cada modelo M_{BDE} , na medida em que se optou tão somente pela implementação Tprogs sem nenhuma outra alteração nas simulações. Verificou-se grande compatibilidade entre os resultados das diferentes realizações estocásticas entre si, e em relação à anterior realização determinística.

A aparente similar potenciometria $M_{BD}D$ e M_{BDE} (Figura 60) não se manteve em uma análise mais detalhada dos traçados das partículas (Figura 61). Houve significativa variação das direções verticais do fluxo advectivo. Observa-se, claramente, porque a barreira hidráulica pode ser ineficiente no primeiro contexto, dada a maior sustentação do fluxo horizontal em qualquer uma das realizações M_{BDE} . Esta diferença foi menos significativa em planta, pelo menos para as pequenas dimensões deste estudo de caso. Porém acredita-se que pode vir a ser para modelos mais regionalizados ou com maiores amplitudes K (ver item 6.1.1).

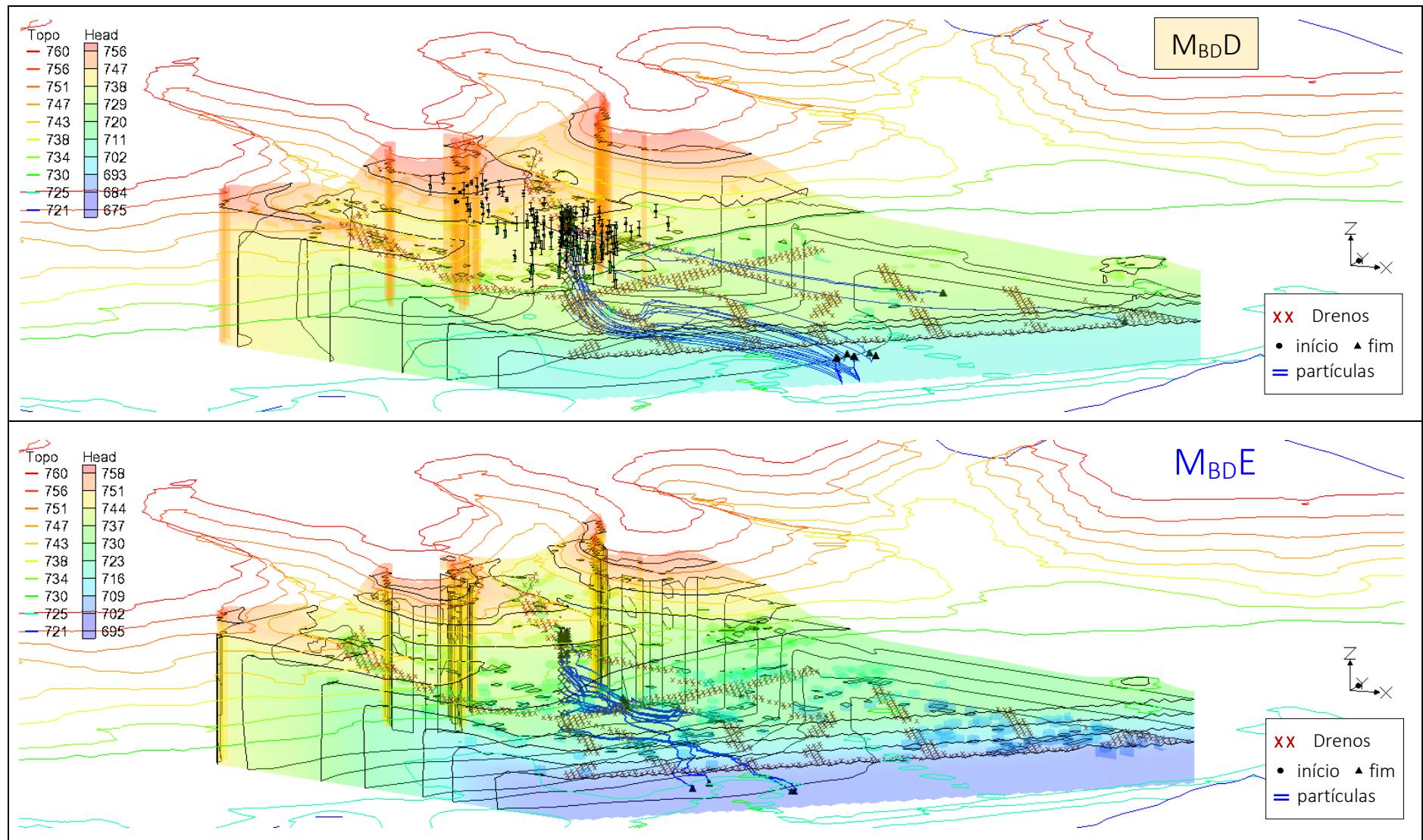


Figura 60: Potenciometria comparada e traçador de partículas para os modelos M_{BDD} e M_{BDE} , sob curvas topográficas à título de orientação

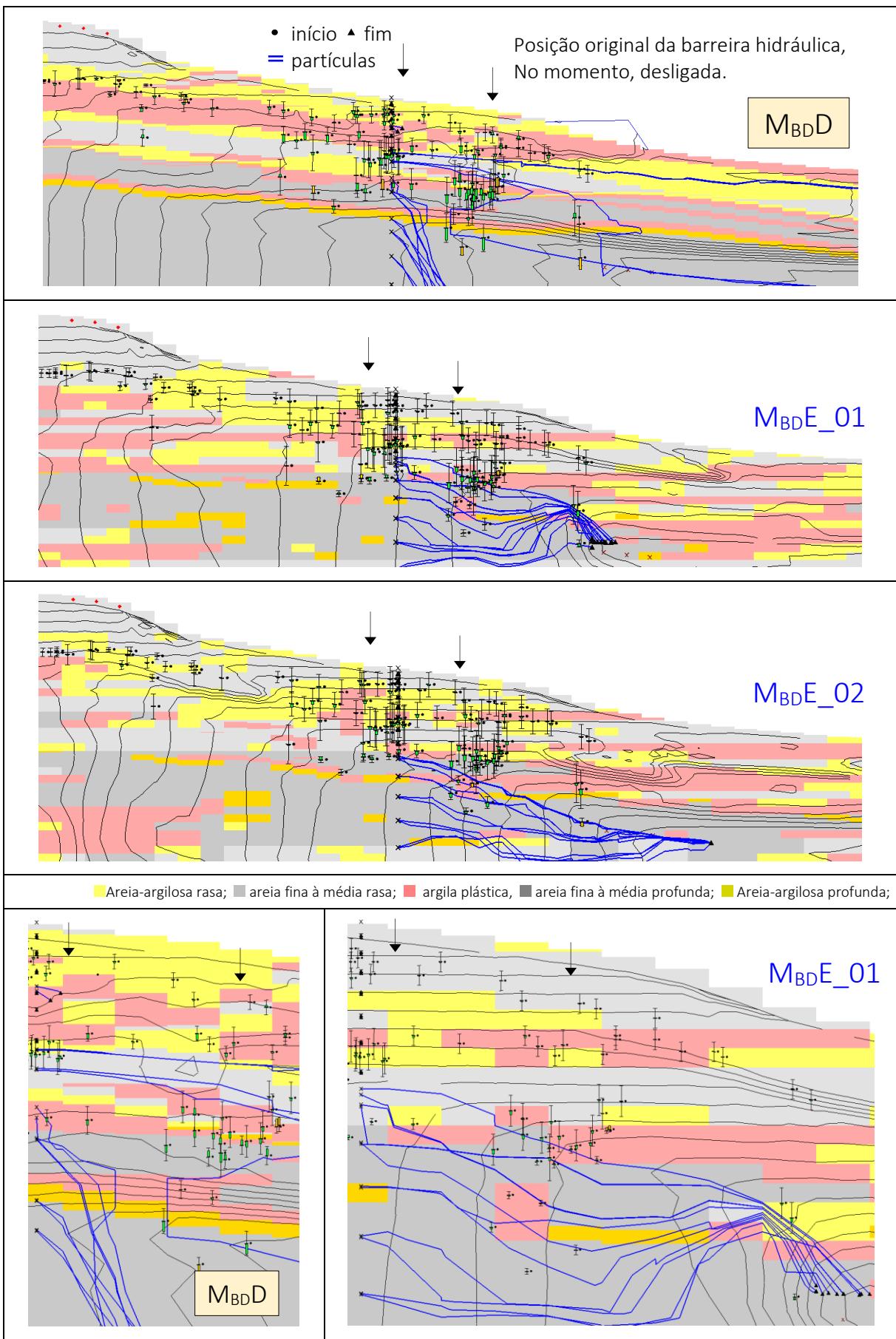


Figura 61: Hidrofácies, potenciometria, e traçador de partículas, para as versões M_{BDD} x M_{BDE}

6.1.1. Memorial de cálculo

Este item presta contas quanto aos valores iniciais, finais, amplitudes de variação e índices associados a calibração de todos os parâmetros utilizados. Tratam-se de parâmetros referentes a apenas a primeira simulação determinística MBD.

As condutâncias de ‘cc stream’, ‘cc drenos’ e ‘cc GHB’, estão apresentadas na Tabela 10. Esta tabela conta também as vazões calculadas, resultados da modelagem, para cada um destes indicadores, assim como suas sensibilidades, no que diz respeito a influência das variações de cada um destes parâmetros na calibração automatizada PEST. A Tabela 10 conta ainda com as condutividades hidráulicas das cinco hidrofácies do modelo, nas direções horizontal e vertical de fluxo. As sensibilidades do modelo em relação aos pontos de referência (poços de observação) foram calculadas com os resíduos entre cargas observadas e modeladas.

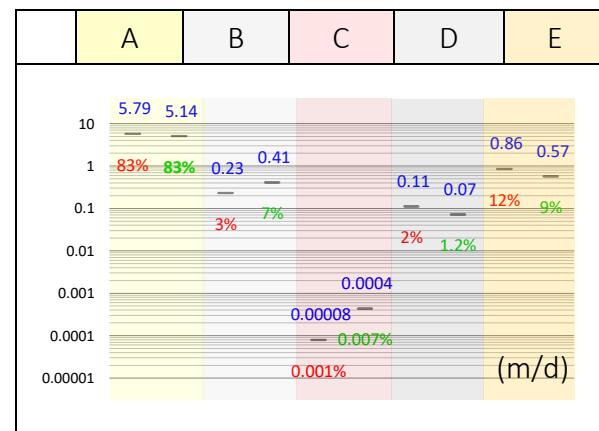
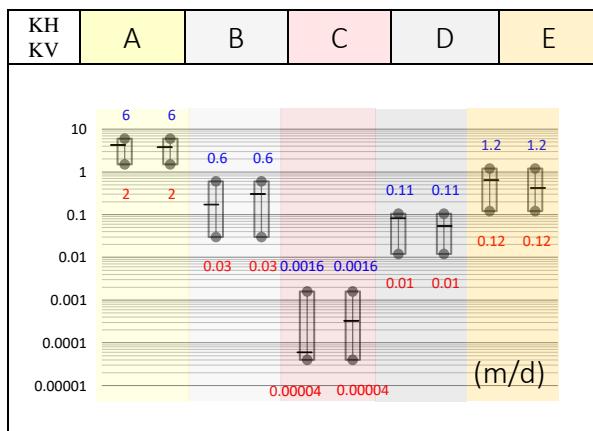
Os parâmetros K (condutividades hidráulicas) merecem um maior detalhamento.

Das proporções iniciais de isotropia vertical inicialmente estabelecidas (Tabela 9a, onde o parâmetro $VANI = 1$ (Figura 62a), verifica-se o quanto se deu a variação das condutividades hidráulicas (Tabela 9b). Seguem valores efetivos e suas proporções pós calibração (Figura 62b).

Tabela 9: Relações e proporções KH / KV, (a) iniciais e (b) calculadas (comparar com a Figura 36)

$VANI$	Proporções pré calibração			
KH / KV	H	V	H (%)	V (%)
1.00	7500	7500	76%	76%
1.00	750	750	8%	8%
1.00	1	1	0.01%	0.01%
1.00	150	150	1.5%	1.5%
1.00	1500	1500	15%	15%

$VANI$	Proporções calibradas			
KH / KV	H	V	H (%)	V (%)
1.13	72371	11746	83%	83%
0.56	2892	949	3%	7%
0.18	1	1	0.0011%	0.0071%
1.53	1394	167	1.6%	1.2%
1.51	10751	1306	12%	9%



■ Areia-argilosa rasa; ■ areia fina à média rasa; ■ argila plástica, ■ areia fina à média profunda; ■ Areia-argilosa profunda

Figura 62: Condutividades calculadas em relação as amplitudes inicialmente estabelecidas e suas proporções

Tabela 10: (a) Parâmetros iniciais e calculados, por condição de contorno. (b) Sensibilidades por observação.

'cc'	Valor / Amplitude			Valor e % variação		Sensibilidades	Vazões	(b) Sensibilidade OBS.			
KA_H	3.00	1.50	6.00	5.79	193%	0.0%	0.00%	1	70.9%	63	0.1%
KA_V	3.00	1.50	6.00	5.14	171%	0.0%	0.00%	2	7.3%	64	0.1%
KB_H	0.30	0.03	0.60	0.23	77%	99.8%	5.24%	3	0.0%	65	0.0%
KB_V	0.30	0.03	0.60	0.41	138%	0.0%	0.00%	4	0.8%	66	0.1%
KC_H	4.0E-04	4.0E-05	1.6E-03	0.00008	20%	0.0%	0.00%	5	0.0%	67	0.2%
KC_V	4.0E-04	4.0E-05	1.6E-03	0.00044	109%	0.0%	0.00%	6	8.6%	68	0.1%
KD_H	0.06	0.01	0.09	0.11	186%	0.0%	0.00%	7	15.8%	69	0.7%
KD_V	0.06	0.01	0.09	0.07	122%	0.0%	0.00%	8	5.2%	70	0.1%
KE_H	0.60	0.12	1.20	0.86	143%	0.0%	0.00%	9	0.4%	71	0.8%
KE_V	0.60	0.12	1.20	0.57	95%	0.0%	0.00%	10	0.0%	72	0.1%
VANI_A	1.00	0.50	2.00	0.58	58%	0.0%	0.00%	11	21.1%	73	0.1%
VANI_B	1.00	0.50	10.00	0.72	72%	0.0%	0.00%	12	1.2%	74	0.3%
VANI_C	1.00	0.25	10.00	0.91	91%	0.0%	0.00%	13	7.1%	75	0.1%
VANI_D	1.00	0.67	5.00	0.82	82%	0.0%	0.00%	14	4.7%	76	0.1%
VANI_E	1.00	0.50	5.00	1.05	105%	0.0%	0.00%	15	4.7%	77	0.0%
GHB_01	1.00	0.37	13.42	5.41	541%	1.1%	0.06%	16	2.6%	78	0.1%
GHB_02	1.00	0.37	13.42	4.68	468%	1.1%	0.06%	17	2.6%	79	0.1%
GHB_03	1.00	0.37	13.42	4.72	472%	25.6%	1.34%	18	20.9%	80	0.2%
GHB_04	1.00	0.37	13.42	7.45	745%	0.6%	0.03%	19	0.0%	81	0.2%
GHB_05	1.00	0.37	13.42	4.71	471%	0.0%	0.00%	20	4.3%	82	0.1%
GHB_06	1.00	0.37	13.42	3.67	367%	0.0%	0.00%	21	0.2%	83	0.1%
GHB_07	1.00	0.37	13.42	4.95	495%	49.6%	2.60%	22	0.8%	84	0.1%
GHB_08	1.00	0.37	13.42	7.43	743%	0.3%	0.01%	23	0.1%	85	0.4%
GHB_09	1.00	0.37	13.42	4.74	474%	21.9%	1.15%	24	0.1%	86	0.1%
STR_01	0.10	8.8E-07	5.56	0.0009	1%	0.0%	0.00%	25	0.2%	87	0.6%
STR_02	0.10	8.8E-07	5.56	0.115	115%	0.1%	0.00%	26	0.0%	88	0.1%
STR_03	0.10	8.8E-07	5.56	1.237	1237%	0.0%	0.00%	27	0.5%	89	0.1%
STR_04	0.10	8.8E-07	5.56	0.037	37%	0.0%	0.00%	28	0.0%	90	0.1%
STR_05	0.10	8.8E-07	5.56	0.048	48%	0.0%	0.00%	29	0.4%	91	0.4%
STR_06	0.10	8.8E-07	5.56	0.121	121%	0.1%	0.00%	30	0.0%	92	0.2%
STR_07	0.10	8.8E-07	5.56	0.086	86%	0.4%	0.02%	31	0.9%	93	0.5%
STR_08	0.10	8.8E-07	5.56	0.098	98%	68.4%	3.59%	32	0.0%	94	0.5%
STR_09	0.10	8.8E-07	5.56	0.066	66%	0.1%	0.01%	33	0.0%	95	0.4%
STR_10	0.10	8.8E-07	5.56	0.127	127%	0.0%	0.00%	34	0.0%	96	0.2%
STR_11	0.10	8.8E-07	5.56	0.092	92%	0.1%	0.01%	35	0.1%	97	0.2%
STR_12	0.10	8.8E-07	5.56	0.062	62%	0.8%	0.04%	36	0.0%	98	44.8%
STR_13	0.10	8.8E-07	5.56	0.054	54%	0.6%	0.03%	37	0.1%	99	10.2%
STR_14	0.10	8.8E-07	5.56	0.063	63%	0.3%	0.01%	38	0.1%	100	46.0%
STR_15	0.10	8.8E-07	5.56	0.154	154%	0.6%	0.03%	39	0.2%	101	25.2%
STR_16	0.10	8.8E-07	5.56	0.082	82%	0.0%	0.00%	40	0.2%	102	9.6%
STR_17	0.10	8.8E-07	5.56	0.138	138%	26.9%	1.41%	41	0.1%	103	18.1%
STR_18	0.10	8.8E-07	5.56	0.099	99%	0.2%	0.01%	42	0.1%	104	31.9%
STR_19	0.10	8.8E-07	5.56	0.099	99%	1.1%	0.06%	43	3.4%	105	47.3%
STR_20	0.10	8.8E-07	5.56	0.057	57%	0.1%	0.01%	44	0.0%	106	19.8%
DRN_01	20.00	0.02	93.37	36.75	184%	0.0%	0.00%	45	0.2%	107	35.9%
DRN_02	20.00	0.02	93.37	51.92	260%	0.0%	0.00%	46	0.1%	108	207.7%
DRN_03	20.00	0.02	93.37	39.51	198%	0.0%	0.00%	47	0.1%	109	8.7%
DRN_04	20.00	0.02	93.37	39.82	199%	0.0%	0.00%	48	0.1%	110	46.8%
DRN_05	20.00	0.02	93.37	14.63	73%	56.7%	2.98%	49	0.2%	111	33.4%
DRN_06	20.00	0.02	93.37	58.32	292%	0.2%	0.01%	50	0.1%	112	8.0%
DRN_07	20.00	0.02	93.37	59.63	298%	0.1%	0.00%	51	0.2%	113	60.6%
DRN_08	20.00	0.02	93.37	84.20	421%	0.6%	0.03%	52	2.8%	114	46.6%
DRN_09	20.00	0.02	93.37	27.79	139%	15.4%	0.81%	53	0.0%	115	34.0%
DRN_10	20.00	0.02	93.37	1.87	9%	13.0%	0.68%	54	0.0%	116	28.8%
DRN_11	20.00	0.02	93.37	10.73	54%	14.0%	0.74%	55	0.1%	117	36.3%
DRN_12	20.00	0.02	93.37	39.27	196%	0.0%	0.00%	56	0.1%		
DRN_13	20.00	0.02	93.37	52.55	263%	0.0%	0.00%	57	0.7%		
DRN_14	20.00	0.02	93.37	66.03	330%	0.0%	0.00%	58	1.5%		
DRN_15	20.00	0.02	93.37	23.03	115%	0.0%	0.00%	59	0.0%		
DRN_16	20.00	0.02	93.37	37.09	185%	0.0%	0.00%	60	0.1%		
GHB_10	1.0E-04	2.6E-13	9.0E-04	2.60E-08	0.0026%	4.5%	0.23%	61	0.0%		
GHB_11	1.0E-04	2.6E-13	9.0E-04	9.00E-06	9%	95.5%	5.01%	62	0.2%		

6.2. SEGUNDA DISCRETIZAÇÃO, EM MAIOR DETALHE

Um novo domínio do bloco-diagrama utiliza 90×90 células de 4×4 m de lado. Assim como o primeiro, este segundo modelo mais localizado conta também com 64 unidades hidrogeológicas de fluxo (HUFs). Trata-se de uma discretização vertical em “background”, dedicada à distribuição das hidrofácies (Figura 63b).

Além da malha de discretização mais fechada, na vertical este segundo modelo conta com apenas 30 m de profundidade, e camadas de 1,6 m de espessura média. Um domínio de extensões regulares procura eliminar distorções visuais quando da comparação dos resultados, evitando distorções de perspectivas de continuidades das hidrofáceis e do traçador de partículas.

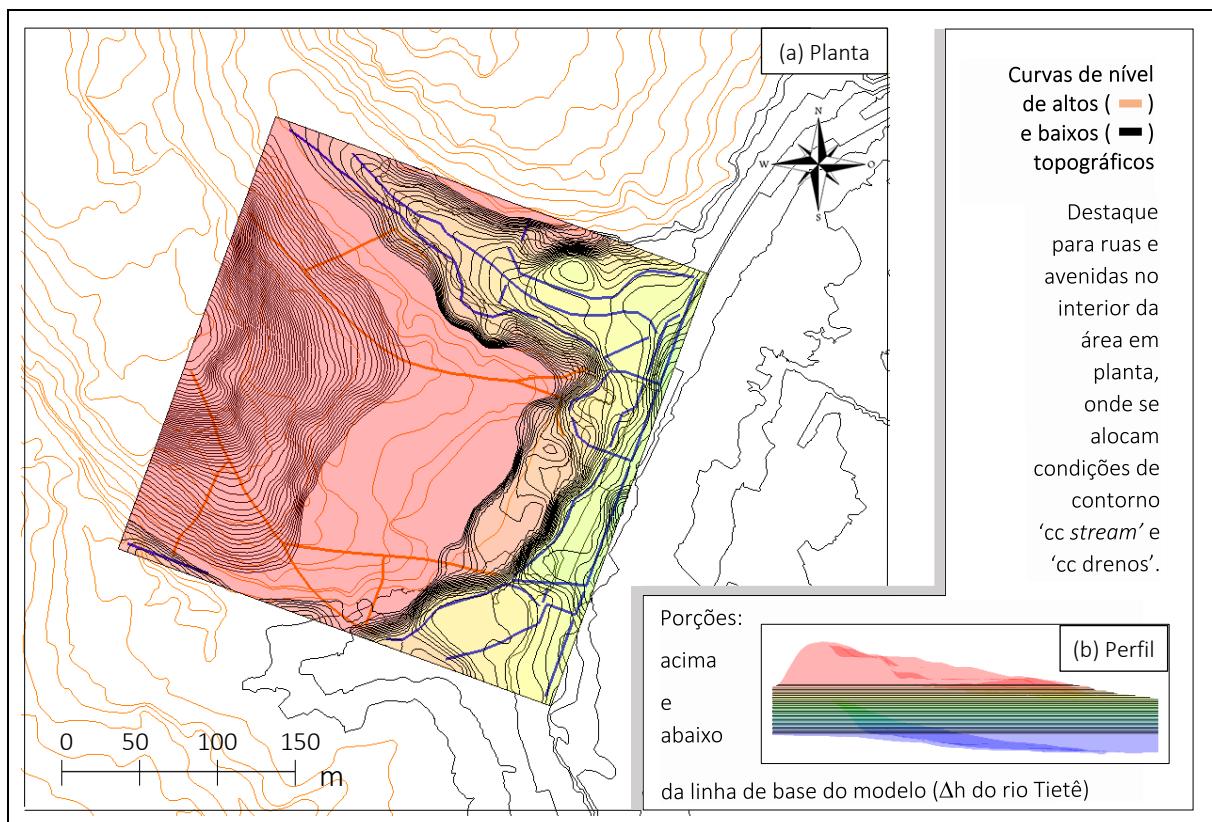


Figura 63: (a) Domínio modelado, ruas e avenidas sobre topografia (Guarugeo, 2020) de curvas de nível de planalto e planície nas cores laranja e preta; (b) Perfil de elevações acima e abaixo do nível de base (horizontal)

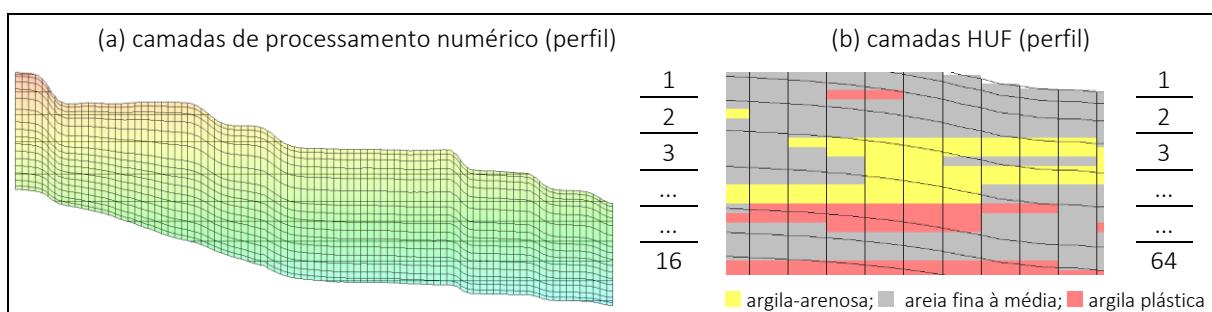


Figura 64: Discretizações: (a) Camadas de processamento numérico; (b) Unidades de fluxo (HUFs)

6.2.1. Bloco-diagrama determinístico (MBDD)

Dos 90 testemunhos de sondagem, de constituídos de cinco hidrofácies (item 5.1), em um segundo momento reinterpretadas como 22 horizontes de deposição (item 5.2) a interpolação determinística chegou ao que se entende como melhor configuração bloco-diagrama MBDD (Figura 65).

Registra-se que o modelo numérico de fluxo possui 16 camadas matemáticas (*Modflow*), ao mesmo tempo em que conta com uma malha de *background* dedicada à definição de 64 camadas litológicas (Figura 64). Como unidades geológicas de fluxo (HUFs) melhora-se a precisão e mantém-se a mesma base de discretização do procedimento de interpolação MBDE.

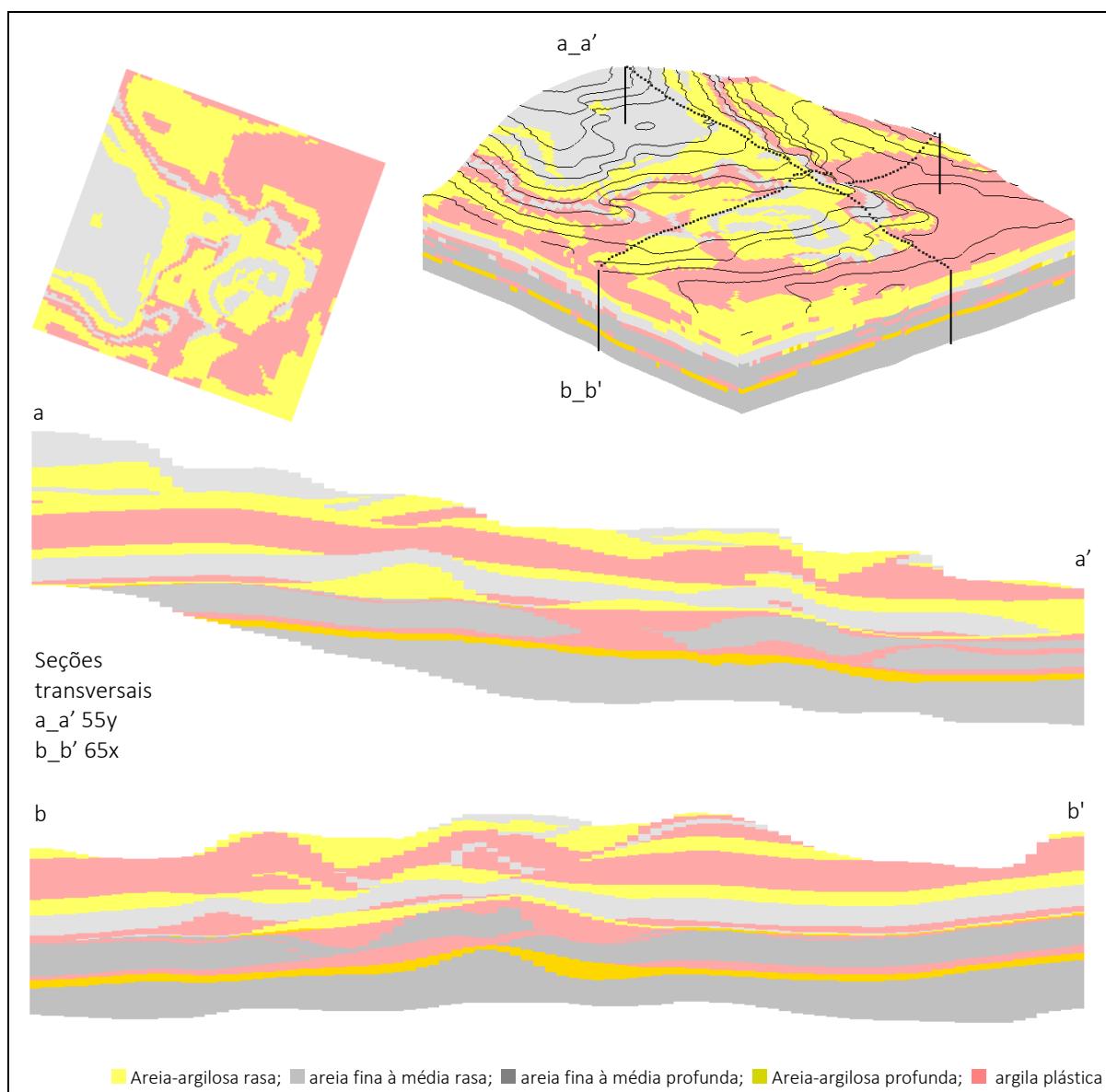


Figura 65: Bloco-diagrama e seções transversais MBDD, fruto de interpolações condicionadas aos 90 poços de observação, às seções transversais interpretadas (2D) de 22 horizontes de deposição HUFs

6.2.2. Conjunto de blocos-diagrama estocástico markoviano (M_{BDE})

A interpretação das cadeias de Markov identificadas na base de dados leva ao conjunto estocástico-markoviano de blocos-diagrama apresentado na Figura 66 e na Figura 67.

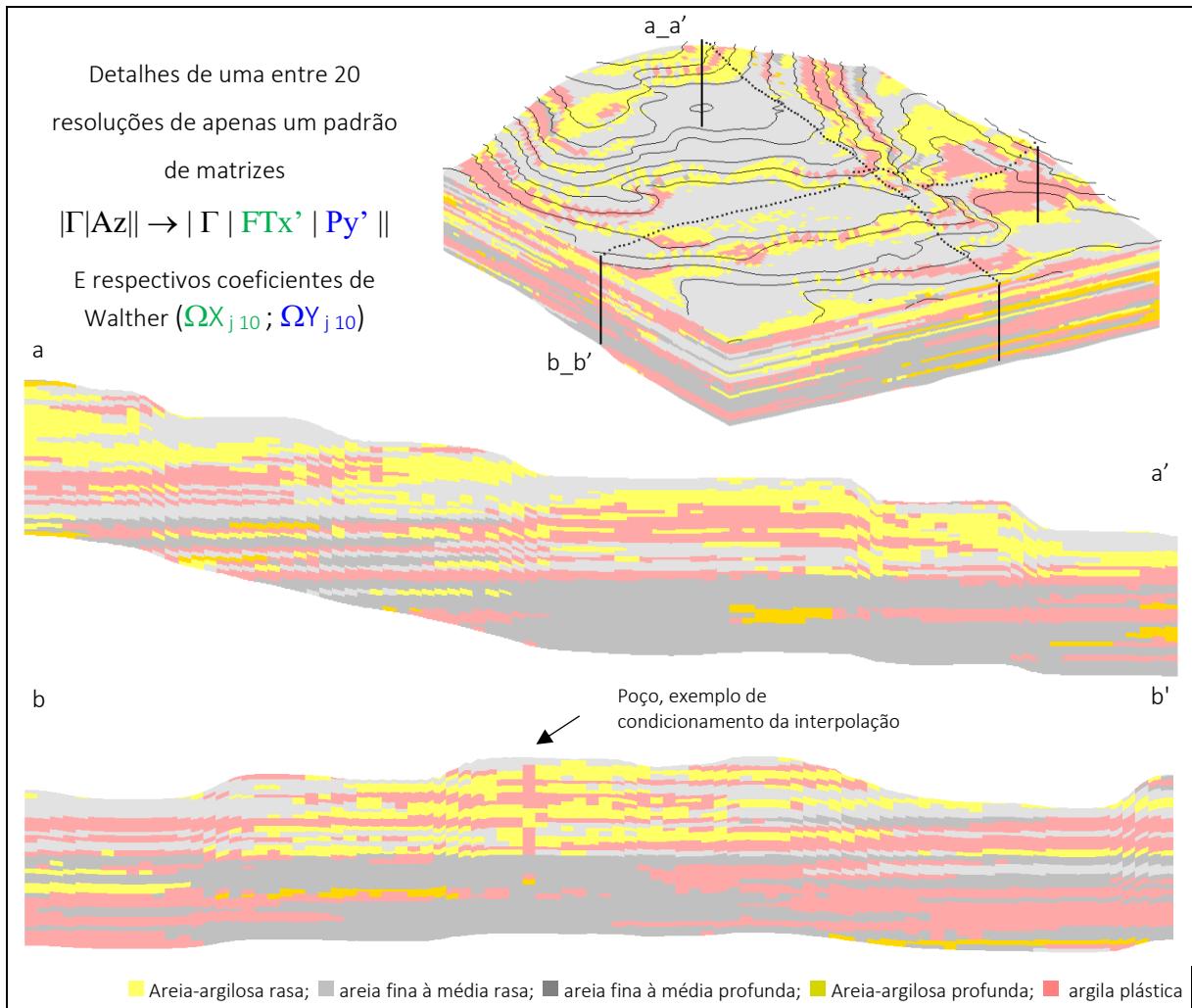


Figura 66: Bloco-diagrama e seções de transversais de uma das resoluções equiprováveis M_{BDE}

Na direção axial y', de hidrofácies mais antigas (à exemplo da Formação Resende) de depósitos de rios entrelaçados passando a meandrantes e anastomosados, mais sinuosos e argilosos, como se observam na configuração atual destes rios (antes de retificados).

Na direção lateral x' (strike), de hidrofácies “de aluvião” advindas de fluxo de massa (voçorocas), córregos e canais intermitentes na direção perpendicular ao eixo de maior comprimento do vale do rio Tietê, possivelmente de novos eventos da Formação Resende.

Estas últimas, associadas à depósitos mais recentes, assim como de novos retrabalhos, configuraria a formações Itaquaquecetuba e Tremembé (lacustre), dispostas na citada direção axial (dip) y'.

Foram 20 resoluções equiprováveis de resultados M_{BDE} (Figura 67).

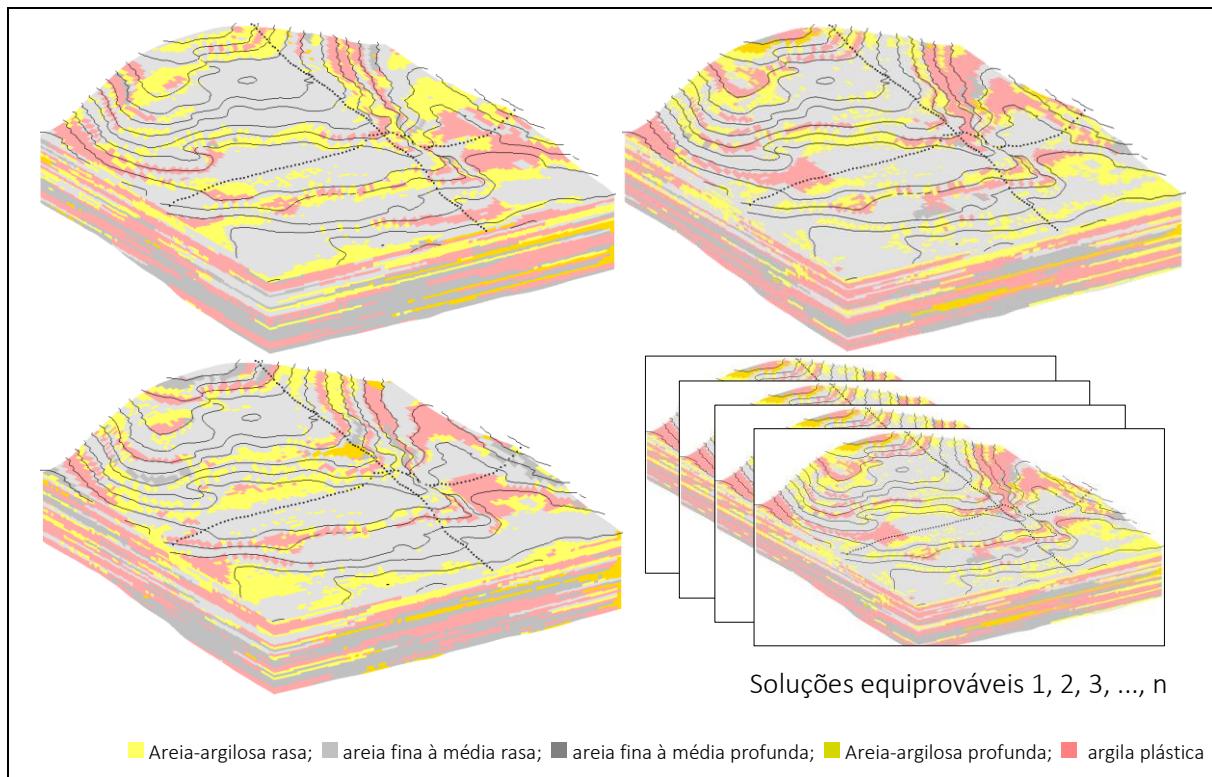


Figura 67: Resoluções equiprováveis de iguais padrões estatísticos Tprogs do modelo M_{BDE}

Parte das premissas utilizadas no processo de tomada de decisão encontram-se tais como comprimentos (p_j) e as proporções (L_k) das respectivas hidrofácies, individuais, descritas em 3D, encontram-se na Tabela 11.

Além dos atributos ‘ p_j e L_k ’, tais resoluções M_{BDE} seguem obrigatoriamente os mesmos padrões matemáticos de recorrência e justaposição de suas hidrofácies, padrões estes a serem verificados no gráfico de barras empilhadas e nos transiogramas de caminhamento (Figura 45).

Tabela 11: Proporções p_j (%) e comprimentos L_k (m) nas direções vertical z, lateral x' e axial y'

Hidrofácies		Proporções p_j	Comprimentos $L_k z$	$L_k x'$ (m)	$L_k y'$ (m)
Hf. A	Areia-argilosa rasa	15 %	1.2 m	23	69
Hf. B	areia fina rasa	27 %	1.5 m	102	102
Hf. D	areia fina profunda	23 %	5.2 m	105	105
Hf. E	Areia-argilosa profunda	2 %	0.9 m	23	139
Hf. C	argila plástica	32 %	1.7 m	108	94

Segue a potociometria simulada M_{BDD} de uma primeira visualização geral 3D (Figura 68_I). Já na Figura 68_II destacam-se detalhes de três destas camadas numéricas (camadas 4, 10 e 14), escolhidas para ilustrar os níveis raso, intermediário e profundo. Na Figura 68III, IV são observadas as duas seções transversais, em direções complementares (x', y').

A componente horizontal de fluxo é mais pronunciada na direção de maior declividade do terreno, e deixa de acompanhar sua topografia a medida em que se colocam a maiores profundidades. Também é observado, atendendo às expectativas do modelo conceitual (Figura 48), um contraste entre fluxo vertical e horizontal, com forte tendência descendente.

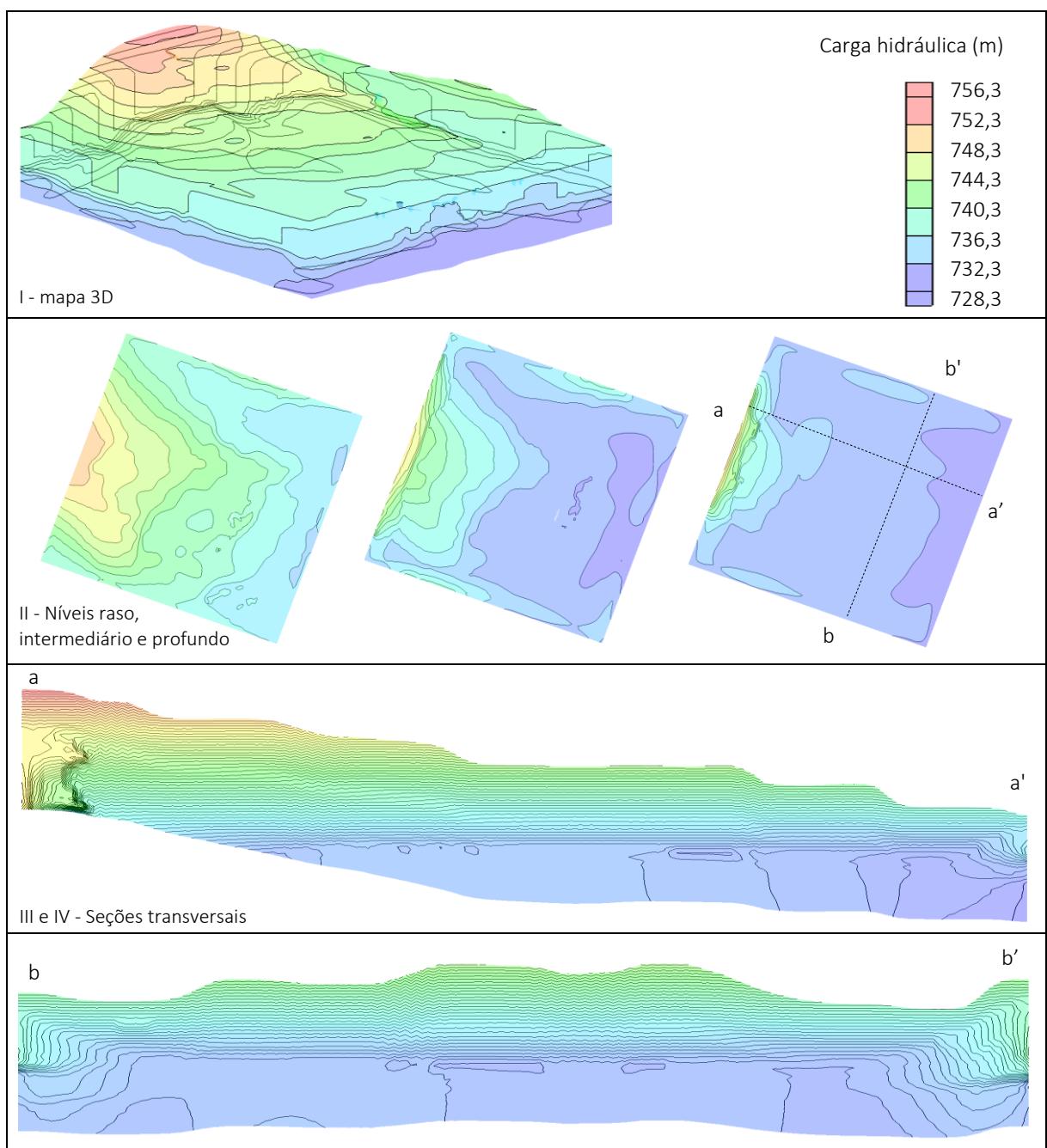


Figura 68: Potociometria M_{BDD} (I) 3D, (II) planta, níveis: raso, intermediário e profundo; (III) Seções aa', bb'

Mantendo-se constantes todas as condições de contorno e quaisquer outros parâmetros de processamento, a não ser a substituição de suas unidades hidrogeológicas de fluxo (HUFs) a nova alocação espacial das hidrofácies M_{BDE} Tprogs mantém a potociometria (Figura 69), era de se esperar (Fogg *et. al.*, 2000).

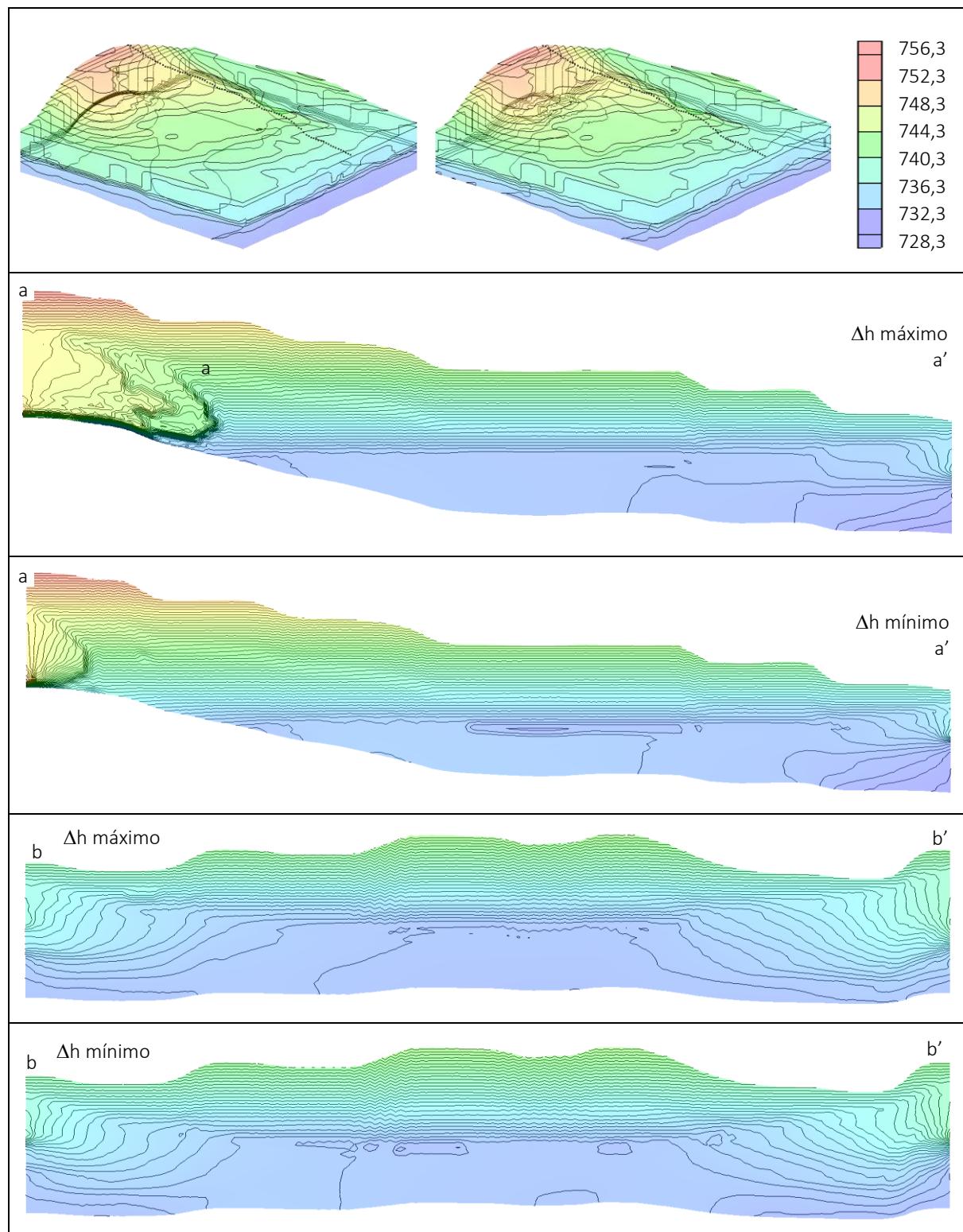


Figura 69: Mapas potociométricos máximo e mínimo de 17 realizações M_{BDE}

6.2.3. Barreira hidráulica: Contextos MBDD versus MBDE

Como tarefa derradeira, se procurou simular as consequências da implantação de uma barreira hidráulica como medida de remediação de pretensos contaminantes no local. Estes, foram colocados como partículas simulando o traçado advectivo das águas subterrâneas, ou seja, não se considerou as reações entre o contaminante com o substrato, o que seria uma tarefa para um modelo reativo mais complexo, em modo transitente.

Seguem detalhes dos mapas equipotenciométricas em planta e em perfil (Figura 70), em específico à distribuição das hidrofácies no modelo determinístico MBDD. Enquanto a Figura 71 os resultados com a distribuição das hidrofácies no contexto do modelo estocástico MBDE.

As partículas do modelo MBDD tendem a seguir uma diagonal descendente em direção a fronteira inferior do domínio modelado na mesma medida em que se encontram em maiores profundidades (apresentando declividades de até 45°), o que dificulta ou ainda, traz menos credibilidade ao dimensionamento da barreira hidráulica no contexto MBDD. Verificou-se que apenas as partículas situadas nas porções superiores do modelo (camadas numéricas 10 e 11) podem ser capturadas pelo cone de rebaixamento formado a vazões de até 6 m³/d por poço.

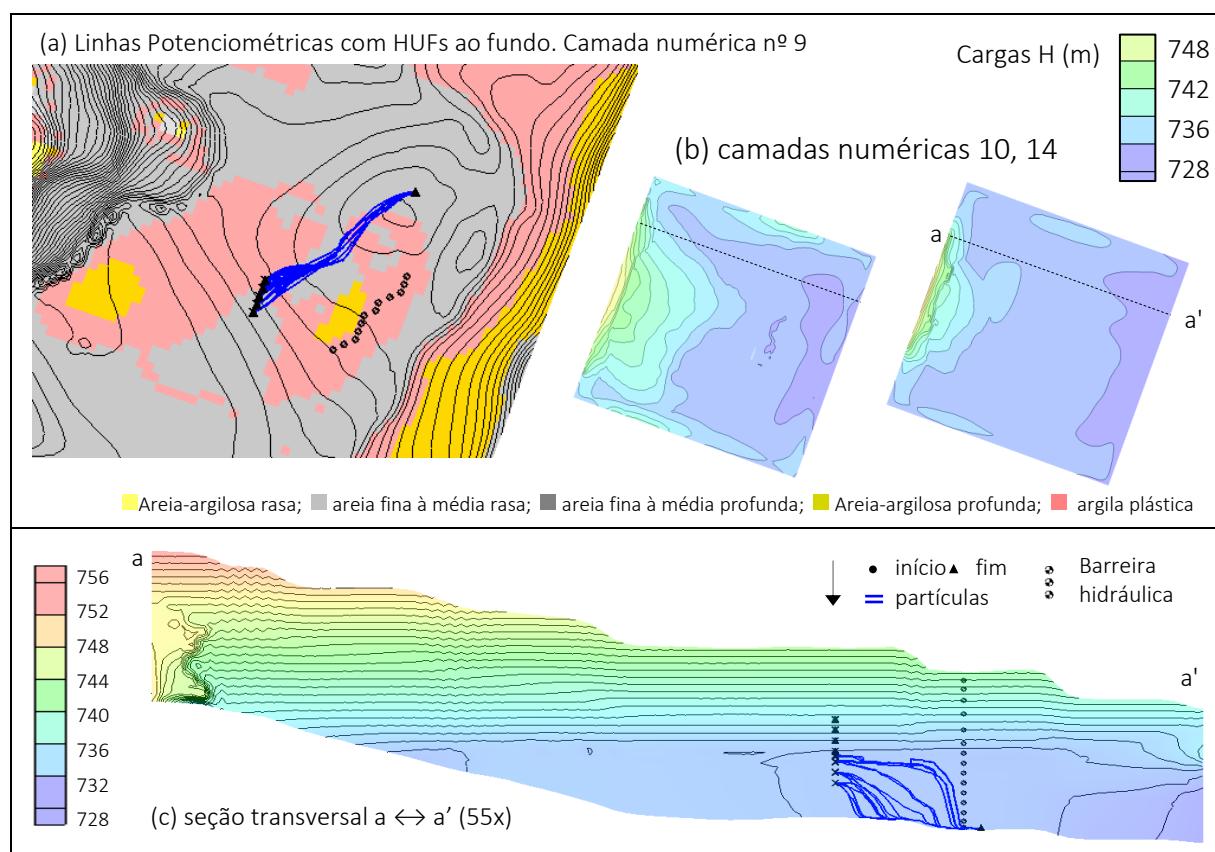


Figura 70: Barreira hidráulica MBDD em planta (a, b) e perfil (c); Traçado das partículas sem bombeamento

O comportamento da barreira hidráulica no contexto M_{BDE} foi diferente (Figura 71). Mais horizontalizado, o fluxo M_{BDE} proporcionou maior liberdade no dimensionamento das vazões de bombeamento necessárias para a captura das partículas.

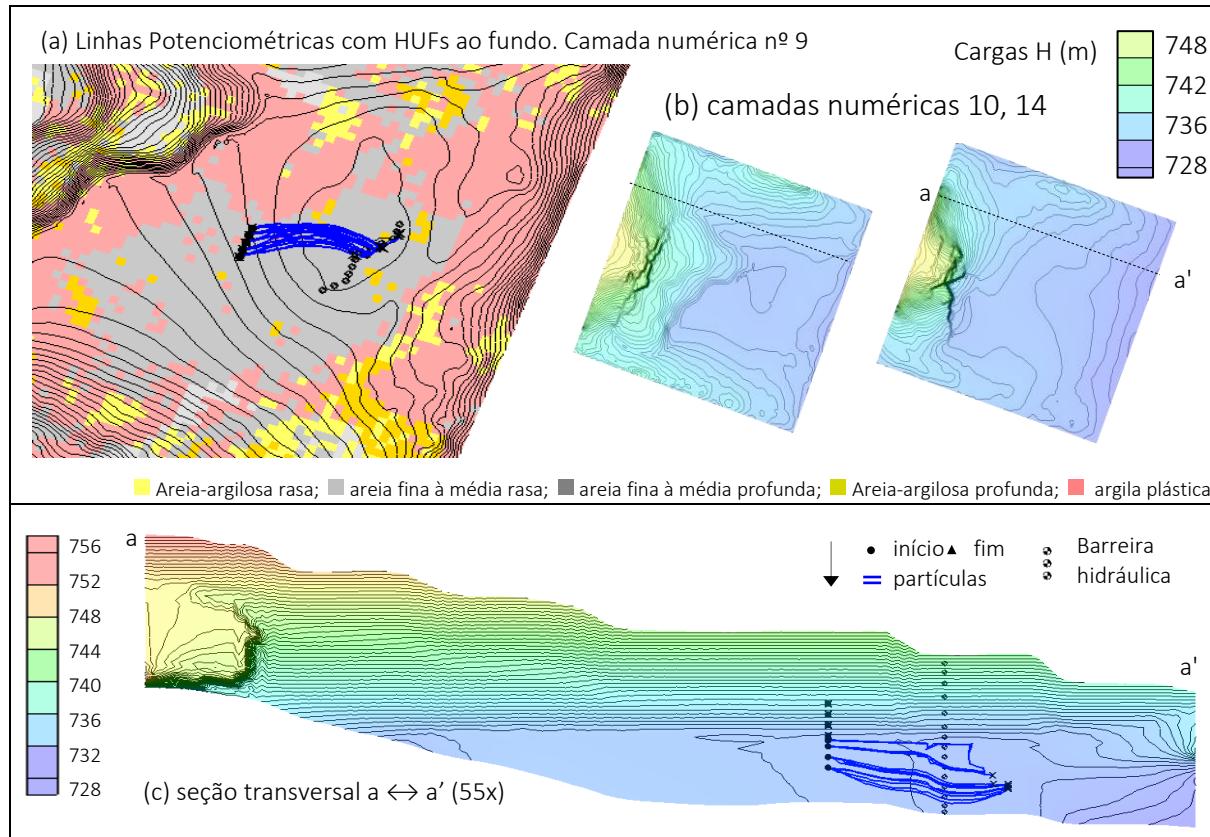


Figura 71: Barreira hidráulica M_{BDE} em planta (a, b) e perfil (c); Com bombeamento à $6 \text{ m}^3/\text{d}$ e 12 poços

A Figura 72 presta contas quanto a variação (%) do balanço de massa das 20 realizações M_{BDE} em torno das vazões anteriormente calculadas para o contexto M_{BDD} . As pequenas variações destas vazões permitem demonstrar que as diferentes realizações são compatíveis, o que permite suas comparações entre si, e com o modelo anterior (M_{BDD}).

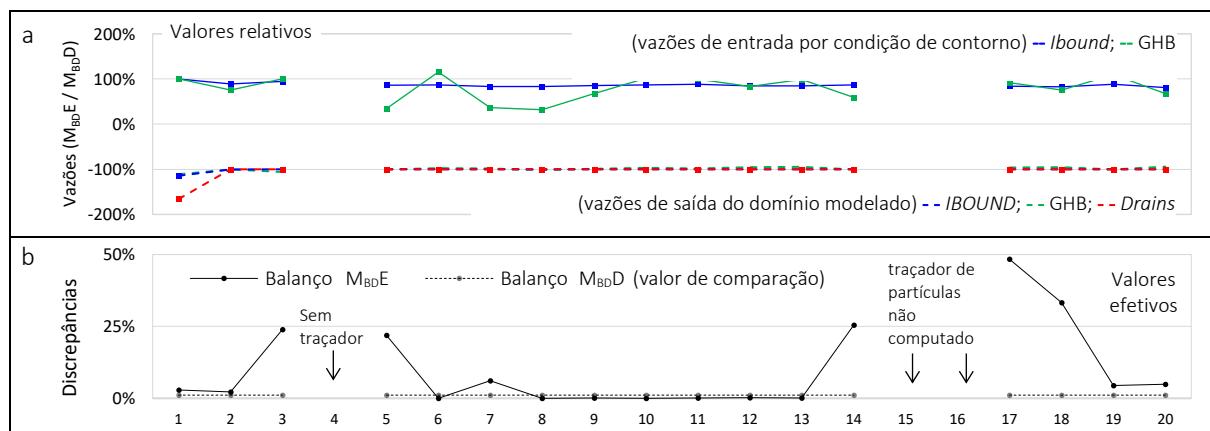


Figura 72: (a) Fluxo M_{BDE} em torno do cômputo M_{BDD} ; (b) Balanços de massa M_{BDE} , por realização

6.2.3.1. Respostas equiprováveis MBDE

A abordagem probabilística implica em chances de ocorrência de um resultado. No caso, são exemplificados um par de exemplos com acertos e outro com falhas. O dimensionamento da barreira hidráulica para 20 estatisticamente equiprováveis realizações MBDE se realizou pela simples incremento das vazões de bombeamento. Enquanto a Figura 73 ilustra exemplos de falha da barreira hidráulica operando com 12 poços à uma vazão de 6 m³/dia/poço, a Figura 74 ilustra exemplos de seu sucesso na captação de 100% das partículas.

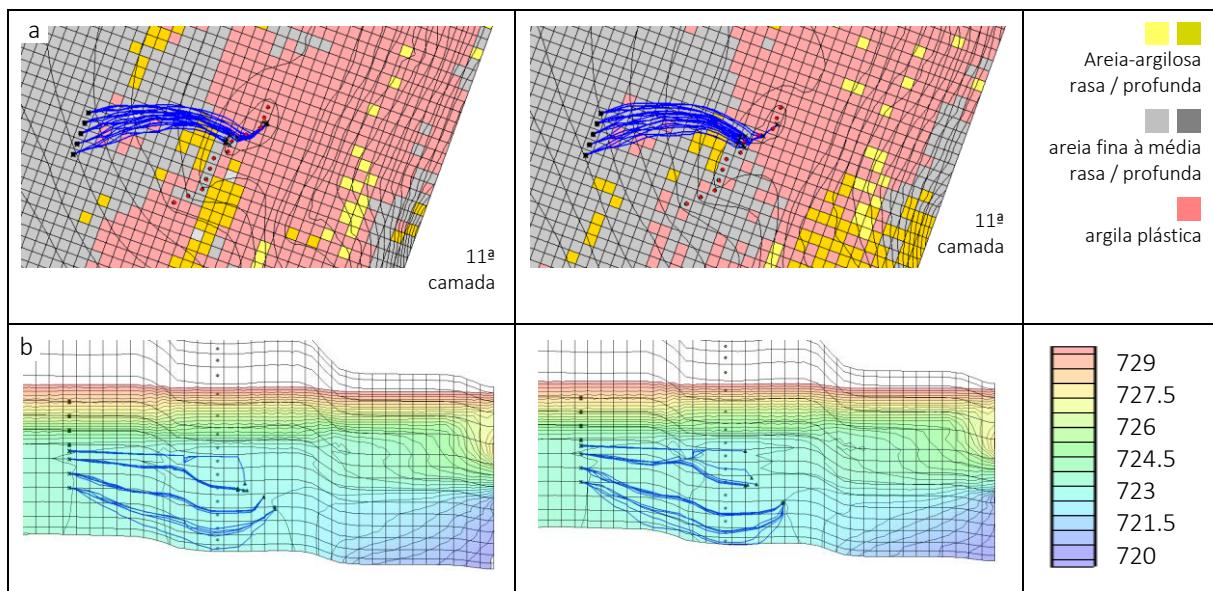


Figura 73: Resoluções MBDE, exemplo de sucesso da barreira hidráulica, em (a) planta e (b) perfil; (suprimidas as cargas potenciométricas acima de 729m, para se enfatizar a visualização do mapa mais profundo)

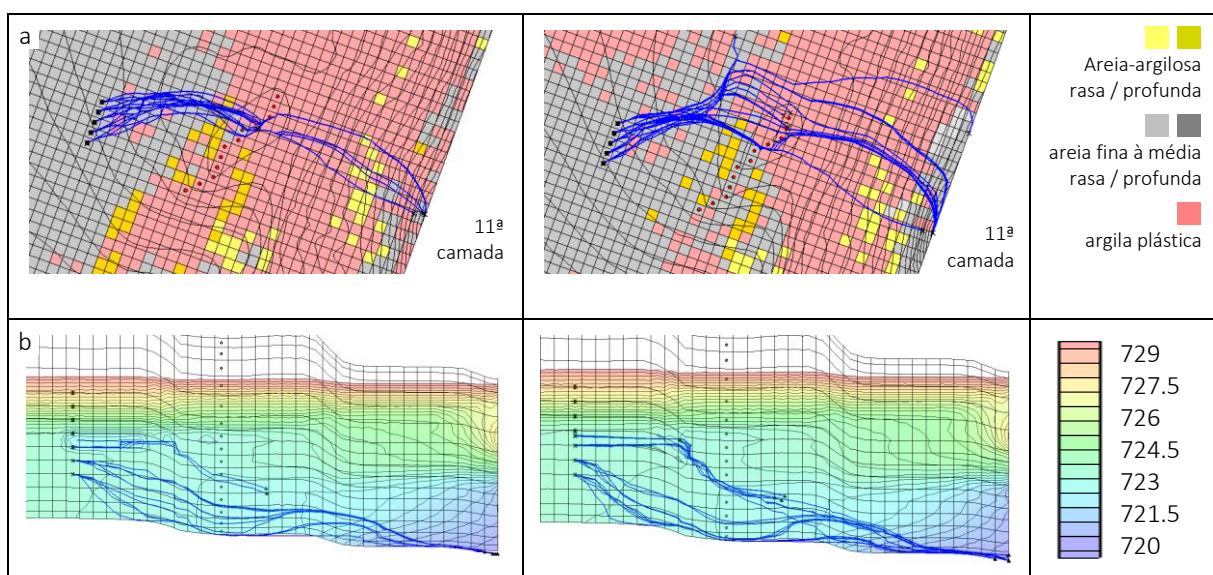


Figura 74: Resoluções MBDE, exemplo de falha da barreira hidráulica, em (a) planta e (b) perfil. (suprimidas as cargas potenciométricas acima de 729m, para se enfatizar a visualização do mapa mais profundo)

As potenciometrias da Figura 73 e da Figura 74 estão sobrepostas às hidrofácies HUFs apontam a posição mais pronunciada do cone rebaixamento (11^a, 12^a camadas numéricas).

Vale destacar que, esta última configuração de menor escala (360 x 360 m) conta com condições de contorno levemente diferentes da configuração anterior (1200 x 1200 m). Este segundo resultado possui maior ênfase nos extratos mais profundos deste aquífero.

6.2.3.1.1. Resultado estatístico M_{BDE}

O comportamento das partículas, que de certa forma representa a distribuição das linhas ou ‘tubos’ de fluxo ($\Delta\psi$), mesmo que em estado estacionário, representam a reação ou movimento das águas de modo perpendicular ao delineamento prévio das linhas equipotenciais ($\nabla\phi$), daquelas de maior para aquelas de menor valor. Pelo cruzamento de mapas bidimensionais (2D) sobrepostos, estima-se o comportamento da potenciometria tridimensional.

A Tabela 9, presta contas do dimensionamento da barreira hidráulica M_{BDE}. Procurou-se contabilizar as chances de captação de todas as partículas para crescentes vazões de bombeamento por poço, adotando-se vazões uniformes em todos seus 12 poços.

Como realizações válidas, tomou-se apenas aquelas onde se observou o funcionamento da ferramenta *particle tracking*. Neste caso, observou-se que uma barreira hidráulica de vazões mínimas (de maior eficiência) se encontra na faixa de 8 m³/d/poço ou vazão total de 96 m³/d.

Tabela 12: Eficiência e eficácia da barreira hidráulica de grupo de realizações equiprováveis Tprogs

Vazão		12 poços		Nº de falhas (F)	Realizações válidas (R)	Eficácia = 1 - (F / R)
6	por poço	72	Vazão total	9	16	56 %
6.5		78		5	16	69 %
7		84		2	17	94 %
8		96		0	16	100 %

Como observações finais, espera-se que a comparação M_{BDD} e M_{BDE} desperte a atenção quanto a importância de se procurar embutir a complexidade natural de certos ambientes sedimentares às premissas de um modelo de fluxo.

A grande influência do fluxo vertical de suas águas subterrâneas reflete a saída de água pelo fundo do modelo, condição necessária para se chegar à calibração dos poços profundos. Destaca-se que tal avaliação estatística pode ter maiores consequências em modelos de maiores, de extensões regionais, sem falar de suas implicações em modelos de transporte.

7. DISCUSSÕES

Para viabilizar a proposta de comparação dos modelos M_{BD}D e M_{BD}E fez-se necessário não só um bom entendimento da metodologia de cadeias de Markov em si. Foi importante, e até mandatório, ater-se às premissas da sedimentologia aplicáveis ao algoritmo Tprogs em respeito à característica complexidade dos sistemas sedimentares presentes na área de estudo.

O significado teórico das cadeias de Markov em si, e sua aplicação através das rotinas Tprogs, foram questões razoavelmente bem resolvidas neste trabalho. Quanto a sua implementação, são duas as premissas mais susceptíveis à discussão.

Após assimilados os conceitos de categorização e definição da janela inicial de observação (Δh) Tprogs, não se deixando de considerar o conceito sedimentológico introdutório: horizontes de deposição HUF, chegou-se à discussão de como a interpretação (*soft data*) deve ser aplicada junto a base de dados disponibilizada para processamento: Em suma, tratou-se de responder a seguinte pergunta: - Qual a mais apropriada combinação de variáveis transiogramas |P|M|FT|R| Tprogs, e que magnitude aplicar para os coeficientes Walther (Ωj_{10})?

Entendeu-se que as matrizes em sua forma de taxas |A|, frequências |F| e probabilidades imbricadas |P| para as três direções ($Z \rightarrow x', y'$) vieram a ser as mais indicadas para o presente estudo de caso. Como justificativa de dimensionamento de cada uma das hidrofácies de forma independente os respectivos planos cartesianos vertical e horizontal:

- Ao se considerar a alta densidade de informações da base de dados optou-se por utilizar a matriz de taxas imbricadas |Rz| na primeira direção, vertical (Carle, 1999);
- Entendeu-se que há maiores probabilidades da lei de Walther se aplicar em maior escala na direção axial (*dip y'*). Com base no alinhamento (aporte de sedimentos) entre do aquífero São Paulo (vale do rio Tietê) e do aquífero Taubaté (vale do Paraíba), optou-se pelas probabilidades imbricadas nesta direção axial |Py|;
- Entendeu-se que há maiores probabilidades da lei de Walther se colocar em menor escala na direção lateral (*strike x'*). Consequentemente, optou-se pela menor carga de probabilidades disponibilizada pela matriz de frequências de transição |FTx|, como forma de enfatizar os depósitos mais superficiais, do leque aluvial, nesta direção lateral;
- Também foi considerado o aporte e retrabalhos de sedimentos mais recentes novamente na direção axial (*dip y'*). Procurou-se reforçar o respeito ao princípio da estacionariedade da base de dados, subdividindo-a em hidrofácies rasas e profundas.

Pelo gráfico de barras empilhadas da primeira cadeia de Markov sob a qual todo o caminhamento do transiograma se realiza, acredita-se que foi facilitada a tarefa de comparar os padrões (proporções, comprimentos, recorrência e tendências de justaposição) das cinco hidrofácies efetivamente observadas em campo, e sua tradução como dados modelados.

Uma vez superadas questões sedimentológicas e de definição dos blocos-diagrama, abriu-se a discussão sobre o modelo numérico de fluxo, para os cenários M_{BDD} e M_{BDE}.

Durante a simulação, destacou-se a dificuldade de projetar uma solução numérica para uma base de dados (poços de monitoramento) razoavelmente complexa, com medidas de carga hidráulica tomadas a diferentes profundidades, em uma área de elevado gradiente topográfico. Tais considerações levaram à adoção das condições contorno ‘cc CHD’, ‘cc Ibound’ e ‘cc GHB’. A partir do ajuste das condutâncias desta última, foi estimada uma vazão complementar que precisa deixar o modelo por sua base, em direção ao manto de alteração. Em consonância, o adequado posicionamento da condição de contorno ‘cc drenos’ foi solução que mais influenciou a calibração dos poços de monitoramento rasos sem “afogar” os poços profundos. Ao se ater ao objetivo de observar o comportamento de uma barreira hidráulica e facilitar a comparação do produto das interpolações e do traçado de partículas ‘particle tracking’, optou-se em um segundo domínio menor, de dimensões regulares, e com malha mais fechada.

Outra dificuldade constatada na construção do modelo de fluxo foi a necessidade de se manter estáveis as cargas hidráulicas das regiões topograficamente mais elevadas (portanto acima, potencialmente longe do lençol freático), sem causar o alagamento das porções menos elevadas ‘de várzea’ no mesmo modelo. Em um contexto de pouca recarga por infiltração em zona urbana de solo impermeabilizado, e alta declividade, considerou-se a aplicação de condições de contorno de recarga linear ‘cc stream’, como forma de se alcançar eventuais necessidades de uma recarga extra por meio não saturado, replicando potenciais vazamentos de tubulações de água, esgoto e águas pluviais.

Ao se observar uma forte condição de rebaixamento do lençol freático na região, e por sua proximidade junto ao canal de circunvalação de Guarulhos, e ao orientar o modelo pela disposição das condições de contorno ‘cc drenos’ de carga hidráulica estimada em 700m no seu ponto mais baixo (ao cruzar a rod. Presidente Dutra), chegou-se à conclusão de que o Tietê se encontra suspenso ou com pouca ligação hidráulica com o aquífero, pelo menos nesta região.

Somente o modelo determinístico (M_{BDD}) foi calibrado. A comparação com o modelo M_{BDE} se fez quanto à distribuição espacial de suas hidrofácies e, principalmente, de suas

condutividades hidráulicas (K). A ferramenta PEST foi útil em ajustes finos de calibração, e se fez presente para viabilizar a automação da modelagem inversa dos blocos-diagrama Tprogs.

O balanço de massa M_{BDD} se aproximou da requerida discrepância de 1%. Resultado não repetido pelas simulações M_{BDE} , que em média apresentaram fluxos de entrada e saída 3x maiores que o modelo de referência. Ao se considerar os resíduos de 90% dos poços de seções filtrantes de até 3m de comprimento, se atingiu meta de erro total $EMQN \leq 10\%$. Como medida de controle, acredita-se que um erro geral $EAM = 1.3$ m seja satisfatório. Não se fez uso da regularização com pontos piloto, o que potencialmente reduziria a metas de calibração.

Uma vez que as soluções M_{BDD} e M_{BDE} partilham das mesmas condições de contorno e configurações de processamento, se realizou a comparação de entre seus resultados. Nomeadamente para este estudo de caso, verificou-se que o traçado das partículas nos contextos determinístico e estocástico são marcadamente diferentes no plano vertical.

Dada a homogeneidade da distribuição das hidrofácies M_{BDD} , como camadas plano-paralelas de alta continuidade lateral, verificou-se que existe grande tendência de a solução numérica estar condicionada à condutividade hidráulica de apenas uma de suas hidrofácies. Uma base de comparação para estimativas de anisotropia vertical foi implementada (VANI). Como normalmente pode-se ter o entendimento de que as partes mais profundas do modelo sejam mais homogêneas, até pela escassez de descrições litológicas nesta profundidade, verificou-se uma maior dificuldade, ou até impossibilidade de se dimensionar a barreira hidráulica no contexto determinístico. No modelo M_{BDD} , as partículas apresentaram maiores tendências descendentes logo saírem da área fonte, passando por baixo da barreira hidráulica, mesmo com poços de bombeamento à grandes profundidades.

Em contrapartida a distribuição das mesmas cinco hidrofácies no contexto M_{BDE} , mesmo quando configuradas de forma conservadora para assumir maiores continuidades laterais (com altos coeficientes $\Omega_{j10x}, \Omega_{j10y}$), apresentaram uma carga de heterogeneidade suficiente para manter o fluxo de forma mais horizontalizada que a solução precedente.

Após verificação visual do traçado das partículas que muitas vezes se colocam além da barreira hidráulica, foi possível se realizar o dimensionamento da mesma com facilidade contexto M_{BDE} , via incrementos das vazões de seus poços de bombeamento.

Como resultado final, chegou-se às probabilidades de captação de todas as partículas para uma vazão mínima, mais eficiente, da barreira hidráulica neste contexto M_{BDE} .

8. CONCLUSÕES

Um primeiro ponto a se destacar quanto as diferenças entre modelos M_{BDD} e M_{BDE} está na forma com que se colocam as previsões de cada uma destas duas abordagens:

- Se M_{BDD} procura garantir a eficiência de sua barreira hidráulica mediante o que se considera como a melhor representação litológica do bloco-diagrama implementado;
- A abordagem M_{BDE} propõem computar as probabilidades desta mesma barreira hidráulica cumprir com seu objetivo, capturar todas as partículas contaminantes, pela análise probabilística de um conjunto de resultados de suas realizações equiprováveis, consideradas como mais apropriadas como forma de representação de um ambiente sedimentar naturalmente complexo, e por este mesmo motivo, de difícil caracterização.

Interpretar dados pontuais (descrições categóricas), de produtos sedimentares ocorrendo sob variada dispersão no espaço tridimensional, de ambientes de reconhecida heterogeneidade e ainda, a partir de limitadas bases de dados, sempre foi um grande desafio.

Apesar da considerável resistência nos meios jurídico, regulatório e administrativo em tratar com análises de risco em termos probabilísticos, sabe-se, pelo menos, que não é de caráter técnico a maior das dificuldades que se impõem em fazê-lo (Rubin *et. al.*, 2018).

Como parte inerente da análise de formações sedimentares, deve-se reconhecer o fato de que não se sabe precisamente o término de uma camada e o começo da próxima. Posto o desafio de superar a dificuldade de se trabalhar com dados categóricos (litologias A, B, C, n), de fenômenos (de deposição), inherentemente contínuos (Godin, 1989), atrelar às previsões de uma simulação numérica suas efetivas probabilidades de ocorrência, se mostrou ser uma grande contribuição da abordagem estocástica markoviana.

Com relação as potencialidades de novas aplicações da metodologia Tprogs (M_{BDE}), recomenda-se ampliar a análise sedimentológica como condição necessária à caracterização das litologias verificadas em testemunhos de sondagens; Procurar pela separação (de superfícies de sedimentação) e simulação independente de diferentes ambientes de deposição, assim como variar os padrões escocásticos-markovianos (heterogeneidades e anisotropia) dentro de um mesmo modelo conceitual de fluxo, também vem a ser uma demanda de interesse.

Em específico a simulação estocástica inversa, recomenda-se uma rotina de calibração individual, com pouca variação dos parâmetros de entrada, de forma a manter compatíveis os resultados de cada novo bloco-diagrama Tprogs entre si, e entre sua contraparte determinística.

REFERÊNCIAS

- Ab'Sáber, A. N. 1956. Geomorfologia do sítio urbano de São Paulo. Boletim da Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras da USP, São Paulo, n. 219, 1957. (Geografia, 12)
- Aquaveo GMS, 2014. User Manual (v10.3) Groundwater Modeling System, http://gmsdocs.aquaveo.com/GMS_User_Manual_v10.3.pdf (acessado novembro 2020)
- Aquaveo GMS, 2020. Definições de condutância para condições de contorno rio e General Head Bound (*GHB*). https://xmswiki.com/wiki/GMS:GHB_Package; <https://xmswiki.com/wiki/GMS:Conductance> (acessado outubro 2020)
- Allen, J. R. L. 1963. The classification of cross-stratified units, with notes on their origin. *Sedimentology*, 2, 93–114
- Anderson M.P., Aiken J.S., Webb E.K., Mickelson D.M. 1999. Sedimentology and hydrogeology of two braided *stream* deposits. *Sedimentary Geology*, 129: 187-199
- Bedani E. F., Saad A. R. 2009. Paisagem natural paleógena da bacia sedimentar de São Paulo no município de Guarulhos, estado de São Paulo São Paulo. UNESP, Geociências, v. 28, n. 4, p. 363-376, 2009
- Bedani E. F., Saad A. R. 2009. Paisagem Natural Paleógena da Bacia Sedimentar de São Paulo, no município de Guarulhos. Dissertação de mestrado - Centro de pós graduação e pesquisa CEPPE - Universidade de Guarulhos UnG
- Bertolo R. A. 1996. Relações entre rios e o aquífero sedimentar da bacia de São Paulo em área de exploração intensiva de água subterrânea. Dissertação de Mestrado. Instituto de Geociências. IGC/USP
- Carle S. F. 1999. T-PROGS - Transition Probability Geostatistical Software- Tutorial Version 2.1. Hydrologic Sciences Graduate Group University of California, Davis
- Carle S. F. 2000. Use of a Transition Probability/Markov Approach to Improve Geostatistical Simulation of Facies Architecture. American Association of Petroleum Geologists (AAPG) Hedberg Symposium: Applied Reservoir Characterization Using Geostatistics. TX
- Carle S. F., Esser B. K., Moran J. E. 2006. High-resolution simulation of basin-scale nitrate transport considering aquifer system heterogeneity - *Geosphere*; June 2006; v. 2; no. 4; p. 195-209; doi: 10.1130/GES00032.1
- Carle S., Fogg G. 1996. Transition probability-based indicator geostatistics - *Mathematical Geology* 28 (4), 453-476
- Carle S., Fogg, G. 1997. Modeling Spatial Variability with One and Multidimensional Continuous-Lag Markov Chains. *Mathematical Geology* 29, 891–918 doi:10.1023/A:1022303706942
- Carle S., Weissmann G., Fogg G. 1998. Conditional simulation of hydrofacies architecture: A transition probability/Markov approach - *Hydrogeologic Models of Sedimentary Aquifers*
- Ciiagro 2020. Centro integrado de informações agrometeorológicas <http://www.ciiagro.org.br/ema/> (acessado em outubro 09/2020).
- Crowley K. D. 1983. Large-scale bed configurations (macroforms), Platte River Basin, Colorado and Nebraska: Primary structures and formative processes. *Geological Society of America Bulletin*, vol. 94, issue 1, p. 117
- Davis J. C. 1973. Statistics and Data Analysis in Geology, 2º Ed, Wiley & Son.
- dell'Arciprete D., Bersezio R., Felletti F., Giudici M., Comunian A. Renard P. 2012. Comparison of three geostatistical methods for hydrofacies simulation: a test on alluvial sediments. *Hydrogeology Journal*. 20: 299–311 - 10.1007/s10040-011-0808-0
- Departamento de águas e energia elétrica - DAEE 1997. Estudo de Águas Subterrâneas – Região Administrativa 3 - São José dos Campos. São Paulo. v. 1 e 3.

- Deutsch, C.V., and Journel, A. J., 1992, Geostatistical software library and user's guide: Oxford University Press, New York, 340 p.
- Diniz H.N., Duarte, U. 1996. Caracterização geológica e hidrogeológica da Bacia Hidrográfica do Rio Baquirivu-Guaçu, na região de Guarulhos, SP. Revista Universidade de Guarulhos – Série Geociências, Ano I, 3, UnG, Guarulhos, p. 51-61
- Diniz N., D. 1996. Estudo do potencial hidrogeológico da bacia hidrográfica do rio Baquirivu-Guaçu, Municípios de Guarulhos e Arujá, SP. 1996. Tese de doutoramento. Universidade de São Paulo
- Domenico, P.A., Schwartz, F.W. 1990. Physical and chemical hydrogeology, 849p. Texas A&M University – John Wiley and Sons.
- Doherty J. 2018. Model-Independent Parameter Estimation - User Manual Parts I and II: PEST, SENAN and Global Optimisers.
- Doherty, J.E., Hunt, R.J. 2010, Approaches to highly parameterized inversion - A guide to using PEST for groundwater-model calibration: U.S. Geological Survey Scientific Investigations Report 2010-5169, 59 p.
- Domenico, P.A., Schwartz, F.W. 1998. Physical and Chemical Hydrogeology. 506p.
- Engdahl N., Weissmann. G., Bonal N. 2010. An integrated approach to shallow aquifer characterization: combining geophysics and geostatistics. Computational Geosciences. 10.1007/s10596-009-9145-y
- Fehidro 033/98 - 1998 Banco de dados espaciais da bacia do alto Tietê - (Prof. Dr. Ariel Macedo), Associado ao relatório: Geologia, Diagnóstico Hidrogeológico da Região Metropolitana de São Paulo, Convênio SABESP/CEPAS-IG-USP - São Paulo - 1994 (Dr. Cláudio Riccomini) - geolig.igc.usp.br (acessado em 01/2020)
- Fleckenstein J. H., Niswonger R. G., Fogg G. E. 2005. River-Aquifer Interactions, Geologic Heterogeneity, and River Management Ground Water - Vol. 44, No. 6 - 2006 (pages 837-852) 837
- Fogg, G. 1986. Groundwater Flow and Sand Body Interconnectedness in a Thick, Multiple-Aquifer System. DO - 10.1029/WR022i005p00679. Water Resources Research
- Fogg, G, Carle, S., Green, C. 2000. Connected-Network Paradigm for the Alluvial Aquifer System. Special Paper of the Geological Society of America. 10.1130/0-8137-2348-5.25
- Fogg, G., Noyes, C., Carle, S. 1998. Geologically based model of heterogeneous hydraulic conductivity in an alluvial setting. *Hydrogeology Journal* 6, 131–143.
- Galloway W. E., Hobday D. K. 1996. Facies Characterization of Reservoirs and Aquifers - Terrigenous Clastic Depositional Systems, Applications to Fossil Fuel and Groundwater Resource, 2nd (second) Edition Hardcover
- Godin, P.D. 1989. Fining-upward cycles in the sandy braided-river deposits of the Westwater Canyon Member (Upper Jurassic), Morrison Formation, New Mexico - Department of Geology, University of Toronto, Toronto, Ont. M5S 3B1, Canada December 7
- Guarugeo. Modelo topográfico do terreno - <https://guarugeo.guarulhos.sp.gov.br/> (acessado janeiro 2020)
- Grossi R., M., Suhogusoff A., V., Ferrari L., C., K., M., 2018. Método de probabilidades de transição aplicado à definição de camadas litológicas para o desenvolvimento de modelos numéricos de fluxo de águas subterrâneas. <https://www.abas.org/xxcabas/anais/10404.pdf>
- Harbaugh J. W., Bonham-Carter G. 1971. Computer Simulation in Geology. Donald Singer. The Journal of Geology 79:3, 375-375
- Harbaugh, A.W., Banta, E.R., Hill, M.C., and McDonald, M.G. 2000 Modflow-2000, the U.S. Geological Survey modular ground-water model -- User guide to modularization concepts and the Ground-Water Flow Process: U.S. Geological Survey Open-File Report 00-92, 121 p.

- He X., Koch, J. Sonnenborg., T, Jorgensen F., Schamper C., Refsgaard J. 2013. Transition probability-based stochastic geological modeling using airborne geophysical data and borehole data. *Water Resources*, 50, 3147–3169, doi:10.1002/2013WR014593
- Hickin E.J. 1983. River channel changes: retrospect and prospect. In: J.D. Collinson and J. Jones N., Walker J., Carle S. 2005. Hydrogeologic Unit Flow Characterization Using Transition Probability Geostatistics. *Ground Water* 43,, 2: 285–289 289
- Krause F.F., Collins H.N., Nelson D.A., Machemer S.D., and French, P.R. 1987. Multiscale anatomy of a reservoir: geological characterization of Pembina-Cardium pool, west-central Alberta, Canada. United States: N. p., Web
- Langousis A., Kaleris, V., Kokosi A. 2018. Markov based transition probability geostatistics in groundwater applications: assumptions and limitations - *Stoch Environ Res Risk Assess*
- Lanzarini L. L., 1995. Modelos e Simulações de Fácies e Sequências Sedimentares Fluviais e Eólicas de Reservatórios Petrolíferos. Tese de Doutoramento. IGC / USP
- Lee S., Carle S. F., Fogg G. E. 2007. Geologic heterogeneity and a comparison of two geostatistical models: Sequential Gaussian and transition probability-based geostatistical simulation. *Elsevier Advances in Water Resources*
- Leeder M. 2011. Tectonic Sedimentology: Sediment Systems Deciphering Global to Local Tectonics. DO - 10.1111/j.1365-3091.2010.01207.x - *Sedimentology* -
- Leeder M. R. 1993. Tectonic controls upon drainage basin development, river channel migration and alluvial architecture: implications for hydrocarbon reservoir development and characterization. *Geological Society, London, Special Publications*, 73, 7-22, 1
- Leeder M. R., Gawthorpe R. L. 1987. Sedimentary models for extensional tilt-block/half-graben basins. *Geological Society, London, Special Publications*, 28, 139-152, 1
- Lemon A. M., Jones N. L. 2002. Building solid models from boreholes and user-defined cross-sections. *Environmental Modeling Research Laboratory, Brigham Young University, P.O. Box 24080 242 Clyde Building BYU, Provo, UT 84602, USA*
- Lin C., Harbaugh, J. W. 1984. Graphic display of two- and three- dimensional Markov computer models in geology: *Van Nostrand Reinhold, New York, 180 p.*
- Mancini F. 1995. Estratigrafia e aspectos da tectônica deformadora da formação Pindamonhangaba, bacia de Taubaté, SP. Dissertação de mestrado. Programa de pós graduação em geologia sedimentar. Universidade de São Paulo
- Maples S. R., Foglia L., Fogg G. E., Maxwell R. M. 2019. Sensitivity of Hydrologic and Geologic Parameters on Recharge Processes in a Highly-Heterogeneous, Semi-Confined Aquifer System. *Hydrol. Earth Syst. Sci. Discuss.*, <https://doi.org/10.5194/hess-2019-412>, in review, 2019
- Marsily de G., Delay F., Gonçalves J. 2005. Dealing with spatial heterogeneity - *Hydrogeol MAS*. 2005. Mapa de águas subterrâneas do Estado de São Paulo em 1:1.000.000. Governo do estado se São Paulo DAEE/IG-SMA/IPT/CPRM
- Mattes D., Veras P., Moreno R. S. 2008. Plano Diretor de Drenagem do Município de Guarulhos.
- Meirovitz C. 2010. Influence of American River incised valley fill on Sacramento county hydrogeology. MSc Thesis, University of California, Davis, CA
- Miall A. D. 1981. Analysis of fluvial depositional systems. *Education Course Note Series. American Association of Petroleum Geologists*, 20:1-75
- Miall A. D. 1985. Architectural-Element Analysis: A New Method of Facies Analysis Applied to Fluvial Deposits. *Earth Science Reviews*, 22(4):261-300
- Miall A. D. 1988. Architectural elements and bounding surfaces in fluvial deposits: anatomy of the Kayenta formation (lower jurassic), Southwest Colorado. *Sedimentary Geology* Vol., Issues 3–4, 28 March 1988, Pages 233-240, 247-26 [https://doi.org/10.1016/0037-0738\(88\)90133-9](https://doi.org/10.1016/0037-0738(88)90133-9)

- Miall A. D. 1996. *The Geology of Fluvial Deposits. Sedimentary Facies, Basin Analysis, and Petroleum Geology*. Xvi + 582 pp. Springer-Verlag.
- Miall A. D. 2000. *Principles of Sedimentary Basin Analysis*. Springer. ISBN: 3-540-65790-8
- Miall A. D. 2014. *Fluvial Depositional Systems*
- Oliveira, A.M.S.; Andrade, M.R.N.; Queiroz, W.; Sato, S.E. 2005. Diagnóstico ambiental para o manejo sustentável do núcleo do Parque Estadual da Cantareira e áreas vizinhas do município de Guarulhos. Relatório final de Pesquisa FAPESP, 2 v., 109 p.
- Pest-suite, 2020. <https://pesthomepage.org/pest-suite> (acessado novembro 2020)
- Ramos R. C. 2003. Sistemas Aluviais Terciários da Bacia de Resende, Estado do Rio de Janeiro, Brasil: Análise de Fácies e Revisão Estratigráfica, 221p. 29,7 cm (Instituto de Geociências – UFRJ, D.Sc., Programa de Pós-Graduação em Geologia, 2003). Tese – Universidade Federal do Rio de Janeiro, realizada no Instituto de Geociências
- Reading H. G. 1996. *Sedimentary environments processes, facies, and stratigraphy*. Oxford Blackwell Science 1996 Cambridge, Mass.. xiv, 688 p.; ill., maps : 28 cm
- Riccomini, C. 1990. O Rift Continental do Sudeste do Brasil. Tese de Doutorado. Instituto de Geociências. IGC/USP
- Riccomini, C; Coimbra, A. M. 1992. Geologia da Bacia Sedimentar de São Paulo.
- Rodriguez S. K. 1998. Geologia urbana da região metropolitana de São Paulo. São Paulo: IGC, Universidade de São Paulo. Tese de Doutorado em Geologia Sedimentar
- Rodriguez, F., Delliou A., Andrieu, H., Gironás, J. 2020. Groundwater Contribution to Sewer Network Baseflow in an Urban Catchment-Case Study of Pin Sec Catchment, Nantes, France. Water
- Ross, S. M. 2009. *A first course in probability* / Sheldon Ross. - 8th ed.
- Rubin Y., Chang C., Chen J., Cucchi K., Harken B., Heße F., Savoy H. 2018. Stochastic hydrogeology's biggest hurdles analyzed and its big blind spot. *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 22, 5675–5695, 2018 <https://doi.org/10.5194/hess-22-5675-2018>
- Rust B. R. 1978a. A classification of alluvial channel systems. In Miall, A. D. (Ed.) *Fluvial Sedimentology*. Can. Soc. Petrol. Geol., Mem. 5: 605-625
- Sá, V. R. 2016. Aplicação de métodos geoestatísticos no estudo das distribuições espaciais de condutividade hidráulica em áreas do Sistema Aquífero Guarani (SAG) e do Sistema Aquífero Bauru (SAB) no Estado de São Paulo. Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo. Dissertação de Mestrado em Recursos Minerais e Meio Ambiente.
- Sant'Anna, L. G. 1999. Geologia, mineralogia e gênese das esmectitas dos depósitos paleogênicos do rift continental do sudeste do Brasil. Tese de Doutorado. Instituto de Geociências. IGC/USP
- Sartore L. 2013. spMC: Modelling Spatial Random Fields with Continuous Lag Markov Chains. *The R Journal* Vol. 5/2, ISSN 2073-4859
- Schumm S., A. 1999. *Fluvial Sedimentology VI* - ISBN:9781444304213 The International Association of Sedimentologists
- Schumm S., A. 2005. *River Variability and Complexity*. New York: Cambridge University Press
- Schwarzacher W. 1969. The Use of Markov Chains in the Study of Sedimentary Cycles. *Mathematical Geology*, Vol. 1, No. 1
- Shultz M. R., Cramer, R. S., Plank, C.; Levine H., Ehman K. D. 2017. Best Practices for Environmental Site Management: A Practical Guide for Applying Environmental Sequence Stratigraphy to Improve Conceptual Site Models USEPA
- Sylvester Z., Durkin P. R., Hubbard S. M., Mohrig D., 2020 - Autogenic translation and concave bank deposition in meandering rivers. University of Texas at Austin. Preprint submitted to Eartharxiv.

- Smith D. G., Putnam P. E. 1980. Anastomosed river deposits: modern and ancient examples in Alberta, Canada. National Research Council of Canada. J. Earth Sci.
- Spitz, K. and Moreno, J. 1996. A Practical Guide to Groundwater and Solute Transport Modeling. John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Suguió K. 2003. Geologia Sedimentar. São Paulo: Edgard Blucher, 400 P
- Takiya H. 1997. Aplicação de métodos quantitativos espaciais a dados geológicos da bacia de São Paulo. Dissertação de mestrado. Instituto de Geociências. IGC/USP. DOI 10.11606/D.44.1991.tde-03062015-090908
- Takiya H. 1997. Estudo da sedimentação Neogênico-Quaternário no município de São Paulo: caracterização dos depósitos e suas implicações na geologia urbana. Tese de Doutorado. Instituto de Geociências. IGC/USP
- Traum J. A., Phillips S. P., Bennett G. L., Zamora C., Metzger L. F., 2014. Documentation of a groundwater flow model (SJRRPGW) for the San Joaquin River Restoration Program study area, California: U.S. Geological Survey Scientific Investigations Report 2014-5148, 151 p., <http://dx.doi.org/10.3133/sir20145148>
- Vaz D. F. A. A., Grossi R. M. 2016. Emprego de planilhas eletrônicas padrão MS Excel para modelagem matemática de aquíferos por diferenças finitas. Trabalho de Conclusão de Curso (Pós-Graduação em Gerenciamento de Áreas Contaminadas) - Centro Universitário Senac, São Paulo
<https://drive.google.com/file/d/1KF7G1Or6SnieGJVtFmtpBUgurT3vdHV0/view?usp=sharing>
- Walker R. G. 1979. Facies and Facies Models: General Introduction. In W. R. G., Ed., Facies Models, Geological Association of Canada, Second Edition, pp. 1-7
- Weissmann G., S., Zhang Y., Fogg G. E., Mount J. F. 2004 Influence of incised-valley-fill deposits on hydrogeology of a stream-dominated alluvial fan. In: Aquifer characterization. SEPM Spec
- Weissmann G., Carle, S., Fogg G. 1999. Three-dimensional hydrofacies modeling based on soil surveys and transition probability Geostatistics. W. Resources Research 10.1029/1999WR900048
- Weissmann G., Fogg G. 1999. Multi-scale alluvial fan heterogeneity modeled with transition probability geostatistics in a sequence stratigraphic framework. Hydrologic Sciences, University of California, Davis, CA 95616-8627, USA
- Winge M. 2001. Glossário Geológico Ilustrado - <http://sigep.cprm.gov.br/glossario/>, acessado em 17/02/2020
- Wright V.P., Marriott S. B. 1993. The sequence stratigraphy of fluvial depositional systems: the role of floodplain sediment storage. Sedimentary Geology 86: 203-210
- Yamamoto J. K. 2001. Avaliação e classificação de reservas minerais. Volume 38. Editora: EdUSP, 226 p.
- Yamamoto J. K., Landim P. M. B. 2013. Geoestatística conceitos e aplicações. SP. 215 p.
- Young S. C., Doherty J., Budge T., Deeds N. 2010. Application of PEST to Re-Calibrate the Groundwater Availability Model for the Edwards-Trinity (Plateau) and Pecos Valley Aquifers. Texas Water Development Board

GLOSSÁRIO

Anisotropia deposicional		Ocorrência de fácies – sentido horizontal – orientação preferencial de aporte de sedimentos – escalas regionais
Cadeias de Markov	$ T(\Delta h) $	Probabilidades de transição – Chances de ocorrência de um ‘evento’ em função de outro anteriormente observado
Caminhamento		Rotina dinâmica de tomada de dados da geoestatística; amostragem espacial (virtual), sobre uma base de dados já existente (real, vinda de dados amostrados em campo)
Discretização		Subdivisão de área / volume em unidades infinitesimais
Granocrescência ascendente (<i>coarsening upward</i>),		Ocorrência de fácies – mais grossos na base e finos no topo – fenômeno regido por ciclos / variações climáticas
Granodecrescência ascendente (<i>fining upward</i>)		Ocorrência de fácies – mais grossos no topo e finos na base – fenômeno regido por ciclos / variações climáticas
Hidrofácies		Corpos sedimentares interconectados, com propriedades hidráulicas similares – sistema de classificação
Horizontes de deposição		Recurso interpretativo que ordena os materiais sedimentares por sua ordem de ocorrência temporal
Imbricamento $ P $		Probabilidades de transição condicionadas a ‘eventos / probabilidades’ anteriores – cálculo Bayesiano
Krigagem		Sistema de interpolação baseado em correlações espaciais
Lei de Walther	Ω	‘Sedimentos observados ocorrendo em conformidade, em sucessões verticais, assim também o fazem lateralmente em ambientes sedimentares adjacentes’
Máxima entropia	$ M $ ou π	Sistema de máxima aleatoriedade
Passos do caminhamento ‘n’		Intervalo de movimentação da janela de observação
Probabilidades de transição	$ T(\Delta h) $	Cadeias de Markov - Chances de ocorrência de um ‘evento’ em função de outro anteriormente observado
Transiograma	$ \Gamma_{jk} T(h) $	Sistema gráfico de correlações espaciais baseado em um conjunto de cadeias de Markov

ANEXO A. BASE DE DADOS

A.1. Litoestratigrafia pós-processada, pós categorização (tabelas 1 de 3)

<p>Lista de poços de observação e de sondagens utilizadas na interpolação.</p> <p>Obs.: Coordenadas geográficas transformadas para manter o sigilo da fonte; porém com as relações espaciais entre os dados preservadas.</p>	<p>Materiais / litologia / hidrofácies</p> <p>Hf. 2 - Areia-argilosa rasa Hf. 3 - Areia fina à média rasa Hf. 7 - Argila plástica Hf. 4 - Areia fina à média profunda Hf. 5 - Areia-argilosa profunda</p>
--	--

poços				poços				poços				poços							
id.	x	y	z	L	id.	x	y	z	L	id.	x	y	z	L	id.	x	y	z	L
1	138.7	87.8	3.2	3	13	87.5	230.4	3.5	2	25	177.3	109.5	0.3	3	35	193.8	30.8	2.7	7
	138.7	87.8	1.5	7		87.5	230.4	2	3		177.3	109.5	1.2	2		193.8	30.8	4.5	3
	138.7	87.8	0.3	2		87.5	230.4	0.5	2		177.3	109.5	1	7		193.8	30.8	6.5	5
	138.7	87.8	3.5	7		87.5	230.4	0.5	7	26	181.9	122.2	0.7	3		193.8	30.8	0.5	7
	138.7	87.8	1.1	4		87.5	230.4	2.5	3		181.9	122.2	1.7	2		193.8	30.8	1	7
	138.7	87.8	1.2	7		87.5	230.4	0.5	7		181.9	122.2	0.2	3	36	263.1	181.0	1.7	2
	138.7	87.8	0.3	3	14	114.6	238.0	1.3	2		181.9	122.2	0.7	2		263.1	181.0	1	7
2	51	266.1	3.1	2		114.6	238.0	3.5	7	27	310.7	24.9	2.3	7		263.1	181.0	1.5	3
	51	266.1	0.5	3		114.6	238.0	2.1	3		310.7	24.9	1.7	3		263.1	181.0	4	7
	51	266.1	3	7	15	152.7	212.3	2.6	2		310.7	24.9	4	5		263.1	181.0	0.7	3
	51	266.1	2	3		152.7	212.3	1.2	3	28	311.5	25.1	2.7	5		263.1	181.0	7	7
3	71.3	211.0	3.8	2		152.7	212.3	4.3	2		311.5	25.1	0.5	7		263.1	181.0	2	7
	71.3	211.0	1.8	3	16	56.4	130.0	4.4	2		311.5	25.1	2.2	3	37	156.3	157.8	1.5	2
	71.3	211.0	1.4	2		56.4	130.0	2.5	7		311.5	25.1	2.5	7		156.3	157.8	4.5	7
	71.3	211.0	2	3	17	326.2	116.6	1.9	7		311.5	25.1	2.4	7		156.3	157.8	5.1	4
	71.3	211.0	0.8	7		326.2	116.6	2	4	29	190.8	169.5	0.7	2		156.3	157.8	3.4	4
4	288.9	115.1	2.9	2	18	82.3	93.6	5.5	2		190.8	169.5	1.9	7	38	199.1	147.8	0.9	2
	288.9	115.1	2	7		82.3	93.6	6.2	7		190.8	169.5	1.4	3		199.1	147.8	1.3	7
	288.9	115.1	3	4	19	45.8	173.8	6.8	2		190.8	169.5	1.3	7		199.1	147.8	3.9	2
5	37.5	229.2	2.1	2		45.8	173.8	0.2	3		190.8	169.5	4.3	5		199.1	147.8	0.8	7
	37.5	229.2	0.5	3		45.8	173.8	1.5	2		190.8	169.5	1	3		199.1	147.8	2.3	3
	37.5	229.2	0.5	2		45.8	173.8	1.5	3	30	0	210.6	3.5	2		199.1	147.8	0.7	7
	37.5	229.2	2.5	3		45.8	173.8	1.5	3		0	210.6	4.3	3		199.1	147.8	1.2	4
	37.5	229.2	0.5	7	20	46	155.0	5.4	2		0	210.6	1.2	2		199.1	147.8	1.8	7
	37.5	229.2	1.5	3		46	155.0	3.5	3		0	210.6	1.5	3		199.1	147.8	1	5
6	191.9	168.4	0.4	3		46	155.0	1.5	7		0	210.6	0.5	7	39	197.2	153.0	3.3	3
	191.9	168.4	0.5	2		46	155.0	2.3	3	31	25.6	206.0	4.8	2		197.2	153.0	0.8	7
	191.9	168.4	1.5	7	21	103.6	200.8	1.4	3		25.6	206.0	1.5	3		197.2	153.0	6.7	4
	191.9	168.4	0.5	3		103.6	200.8	1.8	2		25.6	206.0	1	7		197.2	153.0	2.7	7
	191.9	168.4	1.8	7		103.6	200.8	0.8	7		25.6	206.0	1.5	3		197.2	153.0	1	5
7	192	279.9	1.6	7		103.6	200.8	0.5	2		25.6	206.0	0.5	7	40	195.2	156.0	2	2
	192	279.9	3.3	3		103.6	200.8	1.2	3		25.6	206.0	2.5	3		195.2	156.0	2.1	3
8	211.5	203.8	1.7	2		103.6	200.8	0.8	2	32	29.3	250.6	4.4	2		195.2	156.0	0.8	7
	211.5	203.8	2	7		103.6	200.8	1.5	7		29.3	250.6	3.8	3		195.2	156.0	5.4	5
	211.5	203.8	0.5	2	22	123.7	3.0	2.2	2		29.3	250.6	1	7		195.2	156.0	1.2	4
	211.5	203.8	1.5	3		123.7	3.0	2.5	3		29.3	250.6	1	3		195.2	156.0	2	7
	211.5	203.8	1	7	23	146.6	174.4	2.1	2		29.3	250.6	2	2		195.2	156.0	1	5
9	214.3	262.4	4	3		146.6	174.4	2.5	2	33	378.3	124.8	2.1	5	41	193.2	160.2	1	2
	214.3	262.4	2.5	2		146.6	174.4	0.5	3		378.3	124.8	1.7	7		193.2	160.2	2.7	3
10	277.8	314.9	1.2	7	24	149.1	105.9	0.9	3	34	372.8	130.2	2.8	2		193.2	160.2	1.2	7
	277.8	314.9	2.2	7		149.1	105.9	0.5	7		372.8	130.2	1.5	7		193.2	160.2	5.5	5
11	317.3	250.8	1.6	2		149.1	105.9	4.6	5		372.8	130.2	0.5	2		193.2	160.2	0.5	4
	317.3	250.8	1	2		149.1	105.9	0.4	4		372.8	130.2	0.7	3		193.2	160.2	3.7	7
12	306.7	0.0	2.5	7		149.1	105.9	1	5		372.8	130.2	7.3	7		193.2	160.2	1	5
	306.7	0.0	1.7	4		149.1	105.9	0.5	7		372.8	130.2	3	5					

Litoestratigrafia processada (continuação tabela 2 de 3)

poços					poços					poços					poços				
id.	x	y	z	L	id.	x	y	z	L	id.	x	y	z	L	id.	x	y	z	L
42	197.8	160.2	2	2	48	198.5	158.2	0.5	2		189	156.7	3.5	7		185.1	142.0	1.5	3
	197.8	160.2	1.7	7		198.5	158.2	0.9	3		189	156.7	0.8	5		185.1	142.0	2.9	7
	197.8	160.2	7.7	5		198.5	158.2	0.6	7		189	156.7	1.9	4		185.1	142.0	1.5	5
	197.8	160.2	0.7	4		198.5	158.2	0.5	2		189	156.7	2.5	4		185.1	142.0	1.5	4
	197.8	160.2	2.3	7		198.5	158.2	1.4	7	53	193.1	164.9	0.3	2		185.1	142.0	3.5	5
	197.8	160.2	1	5		198.5	158.2	5.3	3		193.1	164.9	2.4	7		185.1	142.0	1.2	4
43	203.6	161.3	1.3	2		198.5	158.2	3.5	7		193.1	164.9	2.5	3		185.1	142.0	4.3	4
	203.6	161.3	1.7	7		198.5	158.2	1.3	4		193.1	164.9	0.7	7	59	212	191.6	3.2	2
	203.6	161.3	7.1	3		198.5	158.2	4.6	7		193.1	164.9	3.8	2		212	191.6	0.3	7
	203.6	161.3	0.4	5		198.5	158.2	2	5		193.1	164.9	0.5	3		212	191.6	2.6	2
	203.6	161.3	0.5	4		198.5	158.2	1	4		193.1	164.9	2.6	7		212	191.6	2.6	4
	203.6	161.3	1.4	7		198.5	158.2	2.4	4		193.1	164.9	0.9	3		212	191.6	17.7	4
44	203.6	161.3	1	3	49	211	153.4	1.8	7		193.1	164.9	2.9	4	60	208.2	157.3	1.8	3
	200.8	169.2	0.7	2		211	153.4	0.9	3		193.1	164.9	3.3	5		208.2	157.3	0.7	7
	200.8	169.2	2.1	3		211	153.4	0.5	7		193.1	164.9	0.7	4		208.2	157.3	6.7	2
	200.8	169.2	1.7	7		211	153.4	4.3	2		193.1	164.9	4	4		208.2	157.3	0.5	3
	200.8	169.2	5.3	2		211	153.4	1.7	3	54	217.1	154.6	0.7	2		208.2	157.3	2.6	7
	200.8	169.2	1.8	3		211	153.4	3.3	7		217.1	154.6	0.6	7		208.2	157.3	1.8	4
	200.8	169.2	1.2	7		211	153.4	1.8	4		217.1	154.6	6.6	2		208.2	157.3	1.4	7
	200.8	169.2	0.8	4		211	153.4	3.5	7		217.1	154.6	2.7	7		208.2	157.3	0.7	4
	200.8	169.2	5.5	7		211	153.4	1	4		217.1	154.6	4.3	4		208.2	157.3	9	4
	200.8	169.2	1.3	5		211	153.4	0.6	5		217.1	154.6	3.1	7	61	204.4	155.3	2.1	7
	200.8	169.2	1.2	4		211	153.4	1.9	4		217.1	154.6	1.1	5		204.4	155.3	9.32	2
	200.8	169.2	2.8	4		211	153.4	1.8	4		217.1	154.6	0.5	4		204.4	155.3	0.78	3
45	206.1	158.7	1.2	3	50	192.6	160.9	0.3	2		217.1	154.6	2	4		204.4	155.3	1.1	7
	206.1	158.7	0.3	7		192.6	160.9	2.5	3	55	221.7	159.3	1	2		204.4	155.3	1	4
	206.1	158.7	7.3	2		192.6	160.9	0.2	7		221.7	159.3	1.4	3		204.4	155.3	4	7
	206.1	158.7	0.3	3		192.6	160.9	6.4	2		221.7	159.3	0.6	7		204.4	155.3	0.4	4
	206.1	158.7	3	7		192.6	160.9	0.5	3		221.7	159.3	5.9	2		204.4	155.3	5.5	4
	206.1	158.7	1.2	4		192.6	160.9	4.4	7		221.7	159.3	0.4	3	62	195.1	143.9	0.85	2
	206.1	158.7	0.4	7		192.6	160.9	1.9	4		221.7	159.3	2	7		195.1	143.9	1.4	3
	206.1	158.7	0.8	4		192.6	160.9	2.5	7		221.7	159.3	0.5	5		195.1	143.9	1.1	7
	206.1	158.7	2.3	7		192.6	160.9	0.5	5		221.7	159.3	0.8	7		195.1	143.9	4.8	2
	206.1	158.7	1.5	5		192.6	160.9	1	4		221.7	159.3	0.2	4		195.1	143.9	1.5	3
	206.1	158.7	1.5	4		192.6	160.9	4.1	4		221.7	159.3	4.6	7		195.1	143.9	2.9	7
	206.1	158.7	1.5	4	51	198.4	148.3	0.7	2		221.7	159.3	1.3	4		195.1	143.9	1.6	4
46	194.4	153.2	1.2	7		198.4	148.3	0.9	7		221.7	159.3	4.6	4		195.1	143.9	6	5
	194.4	153.2	2.8	3		198.4	148.3	4.5	2	56	163.9	135.6	4.2	7		195.1	143.9	1.7	4
	194.4	153.2	0.4	7		198.4	148.3	0.6	7		163.9	135.6	8.5	3		195.1	143.9	2.8	4
	194.4	153.2	5.9	2		198.4	148.3	2.2	2		163.9	135.6	1.8	7	63	212.1	147.8	0.29	2
	194.4	153.2	0.7	3		198.4	148.3	2.3	3		163.9	135.6	0.5	4		202.7	161.5	0.6	5
	194.4	153.2	2.1	7		198.4	148.3	1.2	7		163.9	135.6	4.9	7		202.7	161.5	2	4
	194.4	153.2	2.9	4		198.4	148.3	2.1	4		163.9	135.6	1.5	4		202.7	161.5	3.7	4
	194.4	153.2	4.1	7		198.4	148.3	4.1	7		163.9	135.6	7.1	4	65	189	161.9	1.91	3
	194.4	153.2	0.7	5		198.4	148.3	0.6	5	57	191.4	151.8	4.1	7		189	161.9	0.9	7
	194.4	153.2	1.2	4		198.4	148.3	1	4		191.4	151.8	0.8	2		189	161.9	4.3	3
	194.4	153.2	2.6	4		198.4	148.3	4	4		191.4	151.8	1.1	7		189	161.9	0.5	2
47	211	160.9	1.4	3	52	189	156.7	0.4	2		191.4	151.8	3.5	3		189	161.9	2.6	3
	211	160.9	0.4	7		189	156.7	1.8	3		191.4	151.8	1.5	3		189	161.9	3.4	7
	211	160.9	7.6	2		189	156.7	0.9	7		191.4	151.8	2.4	7		189	161.9	1	4
	211	160.9	1.4	3		189	156.7	2.1	3		191.4	151.8	2.1	4		189	161.9	5	5
	211	160.9	2.9	7		189	156.7	0.5	7		191.4	151.8	3.9	7		189	161.9	1	4
	211	160.9	1.5	4		189	156.7	1.5	2		191.4	151.8	0.9	5		189	161.9	5	4
	211	160.9	0.6	7		189	156.7	0.5	7		191.4	151.8	4.7	4	66	181.5	154.5	1.28	2
	211	160.9	1.3	4		189	156.7	0.5	2	58	185.1	142	2.5	7		181.5	154.5	0.6	3
	211	160.9	3.1	7		189	156.7	1.5	3		185.1	142	0.6	2		181.5	154.5	0.72	2
	211	160.9	0.5	5		189	156.7	2.7	7		185.1	142	0.7	7		181.5	154.5	1.08	7
	211	160.9	3	4		189	156.7	3.1	4		185.1	142	5.3	2		181.5	154.5	4.12	2

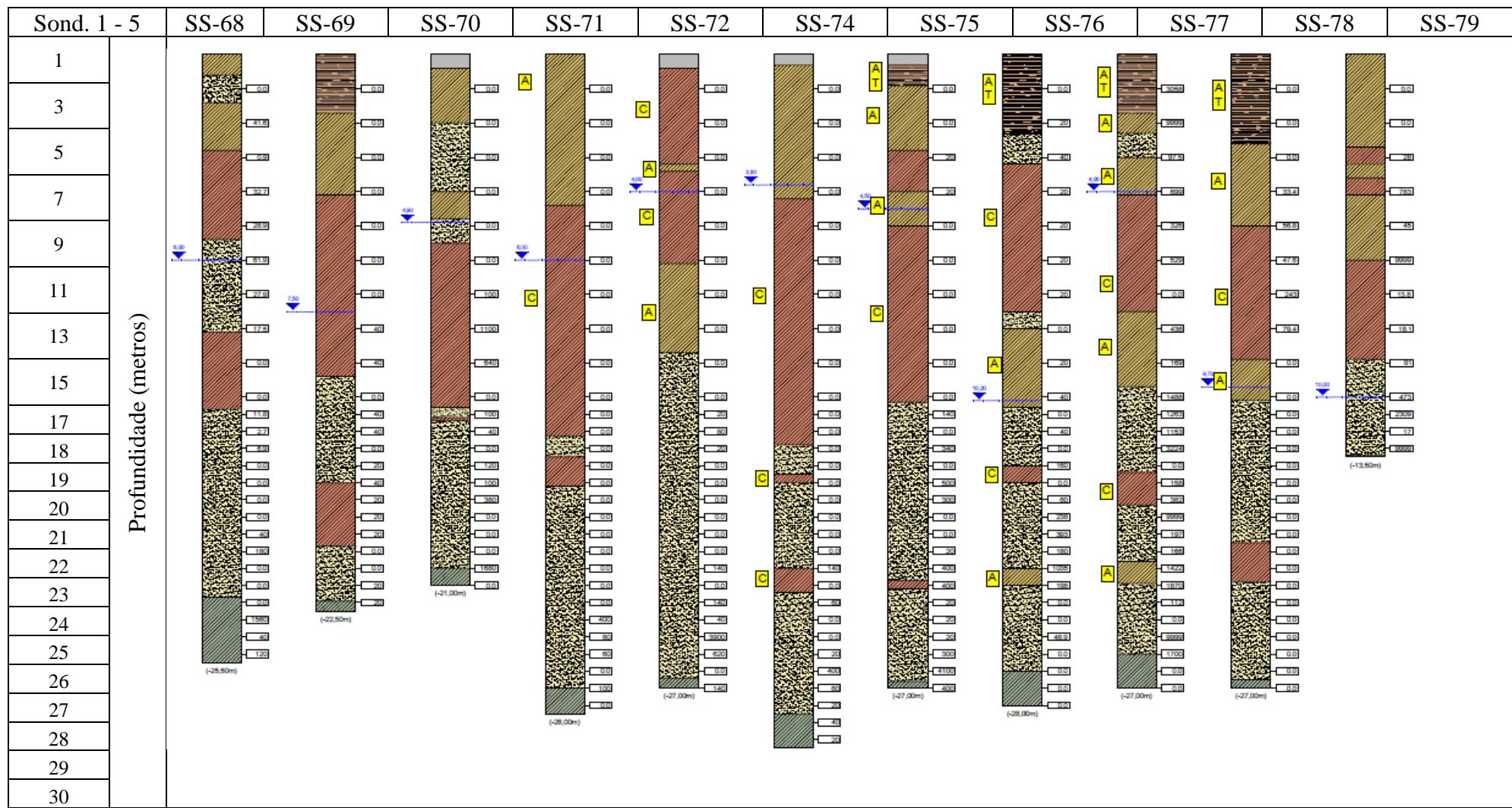
Litoestratigrafia processada (continuação tabela 3 de 3)

poços					poços					poços					poços				
id.	x	y	z	L	id.	x	y	z	L	id.	x	y	z	L	id.	x	y	z	L
67	181.5	154.5	2.68	3	215.2	165.4	1.7	3	79	236.1	147.9	3.8	2	256.9	181.2	0.6	7		
	181.5	154.5	4	7	215.2	165.4	0.5	7		236.1	147.9	1.8	7	256.9	181.2	1	4		
	181.5	154.5	2	4	215.2	165.4	6.2	2		236.1	147.9	0.8	2	256.9	181.2	0.5	7		
	181.5	154.5	2.8	5	215.2	165.4	1.7	3		236.1	147.9	3	3	256.9	181.2	2	4		
	181.5	154.5	1.3	4	215.2	165.4	7.7	7		236.1	147.9	7.7	7	256.9	181.2	4.5	4		
	181.5	154.5	4	4	215.2	165.4	1.7	4		236.1	147.9	2.7	4	86	200.4	161.7	2	2	
	209.6	170.5	1.55	2	215.2	165.4	4.3	4		236.1	147.9	4	4	200.4	161.7	1	3		
	209.6	170.5	2.4	7	213.8	156.9	0.4	2	80	236.1	138.4	3.7	2	200.4	161.7	0.5	7		
	209.6	170.5	2	7	213.8	156.9	1.3	7		236.1	138.4	0.9	7	200.4	161.7	6.5	2		
	209.6	170.5	1.9	2	213.8	156.9	4.9	2		236.1	138.4	2	3	200.4	161.7	1	3		
	209.6	170.5	1.3	3	213.8	156.9	2.7	3		236.1	138.4	4.2	7	200.4	161.7	3	7		
68	209.6	170.5	3.8	3	213.8	156.9	2.8	7		236.1	138.4	2.8	4	200.4	161.7	1	4		
	209.6	170.5	4.5	7	213.8	156.9	1.3	4		236.1	138.4	2.4	7	200.4	161.7	0.5	7		
	209.6	170.5	2.3	4	213.8	156.9	4.4	7		236.1	138.4	2.6	4	200.4	161.7	1	4		
	209.6	170.5	2.2	4	213.8	156.9	0.8	5		236.1	138.4	5	4	200.4	161.7	2	7		
	209.6	170.5	3.5	4	213.8	156.9	1.2	4	81	228.8	129.3	2	2	200.4	161.7	1.5	5		
	154.7	156.6	1.23	2	213.8	156.9	3.8	4		228.8	129.3	0.5	7	200.4	161.7	1.5	4		
	154.7	156.6	4.4	7	196.4	156.1	1.1	2		228.8	129.3	4.5	3	200.4	161.7	3.5	5		
	154.7	156.6	7.9	3	196.4	156.1	1.8	3		228.8	129.3	4.5	7	87	193	161.5	2	2	
	154.7	156.6	1.2	7	196.4	156.1	0.7	7		228.8	129.3	1	4	193	161.5	2.5	3		
	154.7	156.6	1.7	4	196.4	156.1	5.8	2		228.8	129.3	4.5	7	193	161.5	1.2	7		
	154.7	156.6	11.8	4	196.4	156.1	0.9	3		228.8	129.3	2	4	193	161.5	5.4	2		
69	226.9	130.2	3.11	2	196.4	156.1	2.4	7		228.8	129.3	5	4	193	161.5	0.5	3		
	226.9	130.2	2.3	7	196.4	156.1	2.7	4	82	222.8	122.6	2.5	2	193	161.5	4.5	7		
	226.9	130.2	5.4	4	196.4	156.1	4.6	7		222.8	122.6	1.9	7	193	161.5	2	4		
	226.9	130.2	5.6	7	196.4	156.1	0.9	4		222.8	122.6	2.5	3	193	161.5	2.4	7		
	226.9	130.2	3.7	4	196.4	156.1	3.5	4		222.8	122.6	3	7	193	161.5	0.5	5		
	226.9	130.2	3.2	4	76	203.8	159.4	0.6	2		222.8	122.6	2	4	193	161.5	1.1	4	
	243.7	151.8	1.59	2	203.8	159.4	1.6	3		222.8	122.6	4.4	7	193	161.5	4.1	7		
	243.7	151.8	0.6	3	203.8	159.4	0.4	2		222.8	122.6	4.1	4	88	199.4	160.7	2	2	
	243.7	151.8	0.8	2	203.8	159.4	0.3	7		222.8	122.6	3.5	4	199.4	160.7	1.8	3		
	243.7	151.8	1.4	7	203.8	159.4	5.5	3	83	216.5	114.1	2.2	2	199.4	160.7	0.5	7		
70	243.7	151.8	2.6	3	203.8	159.4	0.5	2		216.5	114.1	0.5	7	199.4	160.7	7	2		
	243.7	151.8	2.6	7	203.8	159.4	0.8	3		216.5	114.1	2.5	2	199.4	160.7	0.5	3		
	243.7	151.8	2.7	4	203.8	159.4	2.6	7		216.5	114.1	1.3	3	199.4	160.7	3.6	7		
	243.7	151.8	10.9	4	203.8	159.4	2.5	4		216.5	114.1	2.7	7	199.4	160.7	0.4	4		
	212.6	103.1	4.8	2	203.8	159.4	2.6	7		216.5	114.1	3.7	5	199.4	160.7	1.1	7		
	212.6	103.1	0.4	7	203.8	159.4	1.6	5		216.5	114.1	0.8	4	199.4	160.7	0.4	4		
	212.6	103.1	0.4	2	203.8	159.4	1.4	4		216.5	114.1	1	7	199.4	160.7	3.4	7		
	212.6	103.1	0.8	7	203.8	159.4	3.3	4		216.5	114.1	3	4	199.4	160.7	1.1	5		
	212.6	103.1	1.2	2	77	181.9	172.1	1.5	2		216.5	114.1	6	4	89	209.1	156.5	2	2
	212.6	103.1	1.8	3	181.9	172.1	1.9	7	84	209.6	106.7	4.7	7	209.1	156.5	0.7	3		
	212.6	103.1	1.8	3	181.9	172.1	1.2	2		209.6	106.7	1.2	3	209.1	156.5	0.2	7		
71	212.6	103.1	1.8	7	181.9	172.1	1	7		209.6	106.7	5	5	209.1	156.5	6.2	2		
	212.6	103.1	0.6	4	181.9	172.1	5.3	4		209.6	106.7	2	7	209.1	156.5	1.5	3		
	212.6	103.1	6.6	7	181.9	172.1	10.3	7		209.6	106.7	2	7	209.1	156.5	1.8	5		
	212.6	103.1	1.2	4	181.9	172.1	0.6	4		209.6	106.7	4	4	209.1	156.5	0.7	7		
	212.6	103.1	5.6	4	181.9	172.1	5.4	4		209.6	106.7	3.5	7	209.1	156.5	0.7	7		
	213.6	104.1	5	2	78	250	155.4	2.3	2		209.6	106.7	1.5	4	209.1	156.5	1.8	4	
	213.6	104.1	2.2	3	250	155.4	1.1	2		209.6	106.7	3.5	4	209.1	156.5	4.6	7		
	213.6	104.1	0.6	7	250	155.4	1	7	85	256.9	181.2	4.4	7	209.1	156.5	1	5		
	213.6	104.1	2.7	5	250	155.4	1	7		256.9	181.2	1.6	3	90	254	159.7	3	2	
	213.6	104.1	1.4	7	250	155.4	1	3		256.9	181.2	1.1	7	254	159.7	1.6	7		
	213.6	104.1	8.1	4	250	155.4	3.5	7		256.9	181.2	1	3	254	159.7	0.4	2		
	213.6	104.1	3.4	7	250	155.4	1.1	4		256.9	181.2	1	7	254	159.7	2.7	3		
	213.6	104.1	2	4	250	155.4	5.2	7		256.9	181.2	1.5	5	254	159.7	8.5	7		
	213.6	104.1	1.2	4	250	155.4	1.7	4		256.9	181.2	1	7	254	159.7	3.1	4		
73	215.2	165.4	0.8	2	250	155.4	6	4		256.9	181.2	5.9	4	254	159.7	4.2	4		

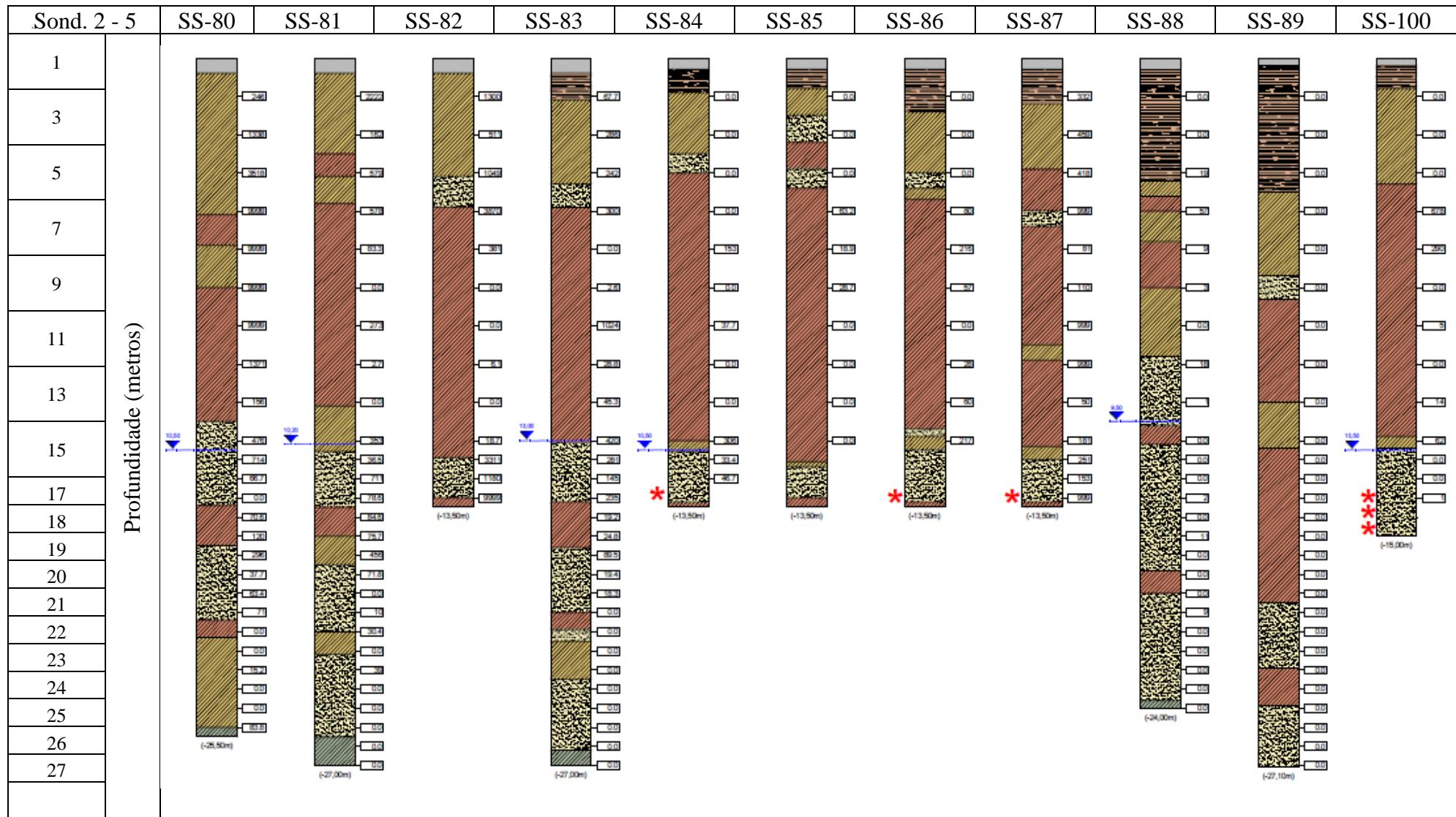
A.2. Perfis litológicos e sondagens (sumário e tabelas 1 a 11)

Sond. 1 - 5	SS-68	SS-69	SS-70	SS-71	SS-72	SS-74	SS-75	SS-76	SS-77	SS-78	SS-79
Sond. 2 - 5	SS-80	SS-81	SS-82	SS-83	SS-84	SS-85	SS-86	SS-87	SS-88	SS-89	SS-100
Sond. 3 - 5	SS-101	SS-102	SS-103	SS-104	SS-105	SS-106	SS-107	SS-108	SS-109	SS-110	SS-111
Sond. 4 - 5	SS-112	SS-113	SS-114	SS-115	SS-116	SS-117	SS-118	SS-119	SS-120	SS-121	SS-122
Sond. 5 - 5	SS-123	SS-124	SS-125	SS-126	SS-127	SS-128	SS-129				
PMs 1 - 2	SS-130 / PMP-79	SS-131 / PMI-79	SS-132 / PM-79	SS-133 / PMP-53	SS-134 / PM-75	SS-135 / PMI-75	SS-136 / PMP-80				
PMs 2 - 2	SS-137 / PMI-80	SS-138 / PM-80	SS-141 / PMI-56	SS-143 / PMI-44	SS-144 / PM-81	SS-146 / PMI-45	SS-147 / PMP-74	SS-148 / PMI-31			
Barreira Hidráulica 1-3	SS-149 / PZ-01B	SS-150 / PZ-01A	SS-151 / PZ-02B	SS-152 / PZ-02A		Piezômetros	SS-22 / PZ-01	SS-17 / PZ-03	SS-19 / PZ-04	SS-20 / PZ-05	
Barreira Hidráulica 2-3	SS-154 / PB-06A	SS-153 / PB-06B	SS-160 / PB-07A	SS-159 / PB-07B	SS-183 / PB-08A	SS-178 / PB-08B	SS-182 / PB-09A	SS-181 / PB-09B	SS-180 / PB-10A	SS-179 / PB-10B	
Barreira Hidráulica 3-3	SS-177 / PB-01A	SS-176 / PB-01B	SS-164 / PB-02A	SS-163 / PB-02B	SS-162 / PB-03A	SS-161 / PB-03B	SS-155 / PB-04A	SS-156 / PB-04B	SS-158 / PB-05A	SS-157 / PB-05B	
Centro de Massa	SS-170 / PBR-01	SS-167 / PBR-02	SS-166 / PBR-03	SS-165 / PBR-04	SS-168 / PBR-05	SS-169 / PBR-06	SS-175 / PBI-01 / PBP-01	SS-171 / PBI-02	SS-174 / PBP-02	SS-172 / PBI-03	SS-173 / PBI-04

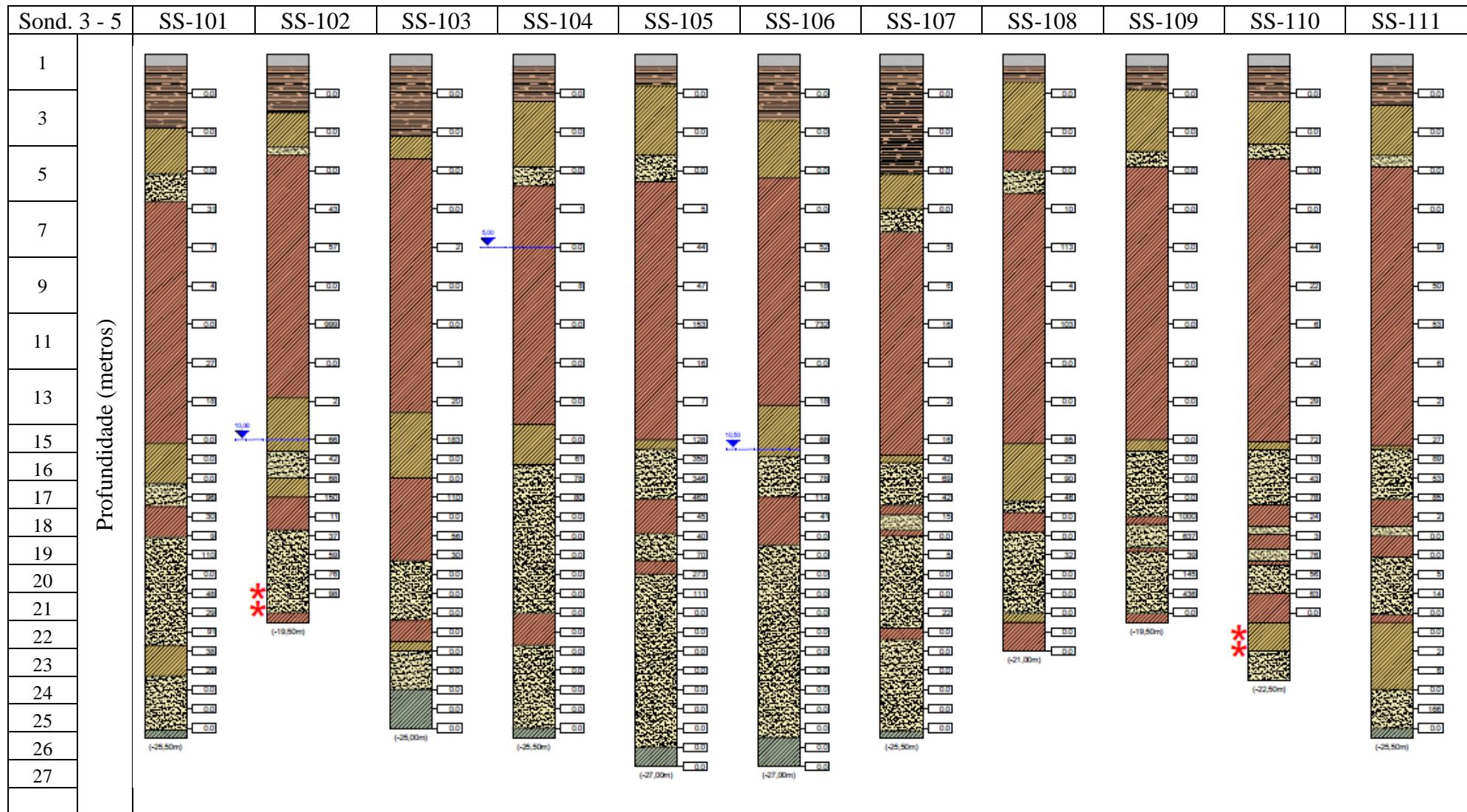
Perfis litológicos (Tabela 1 de 11)



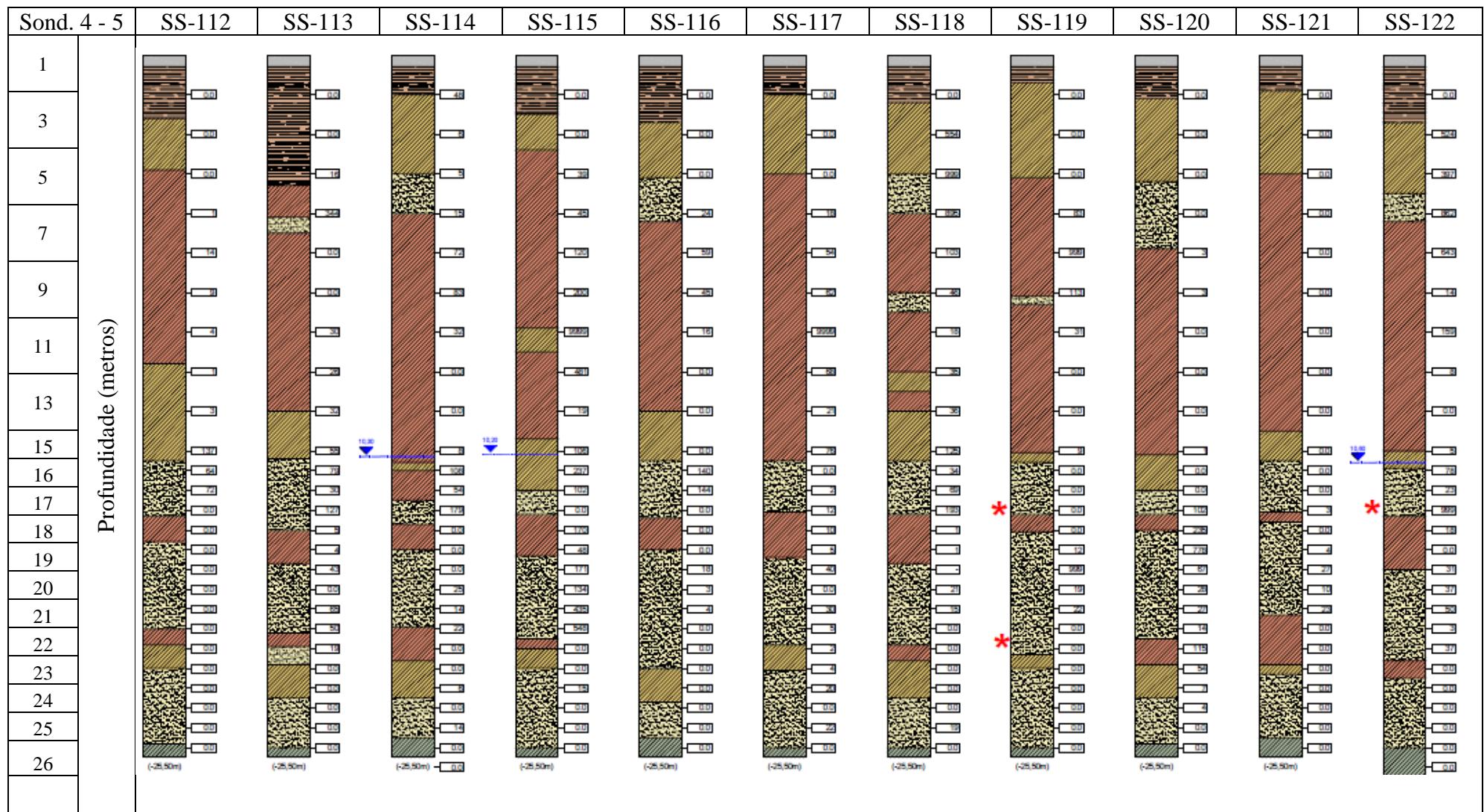
Perfis litológicos (Tabela 2 de 11)



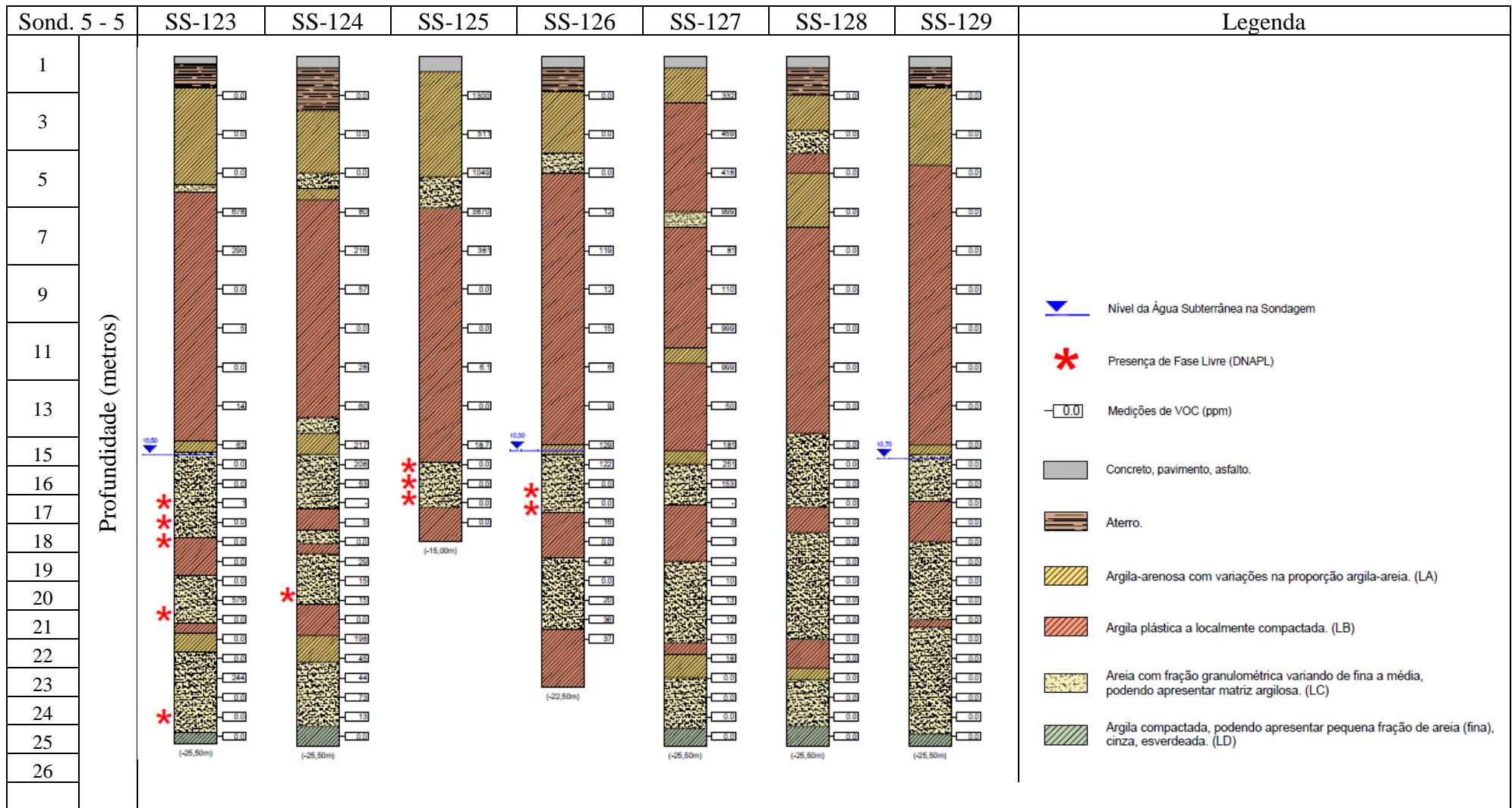
Perfis litológicos (Tabela 3 de 11)



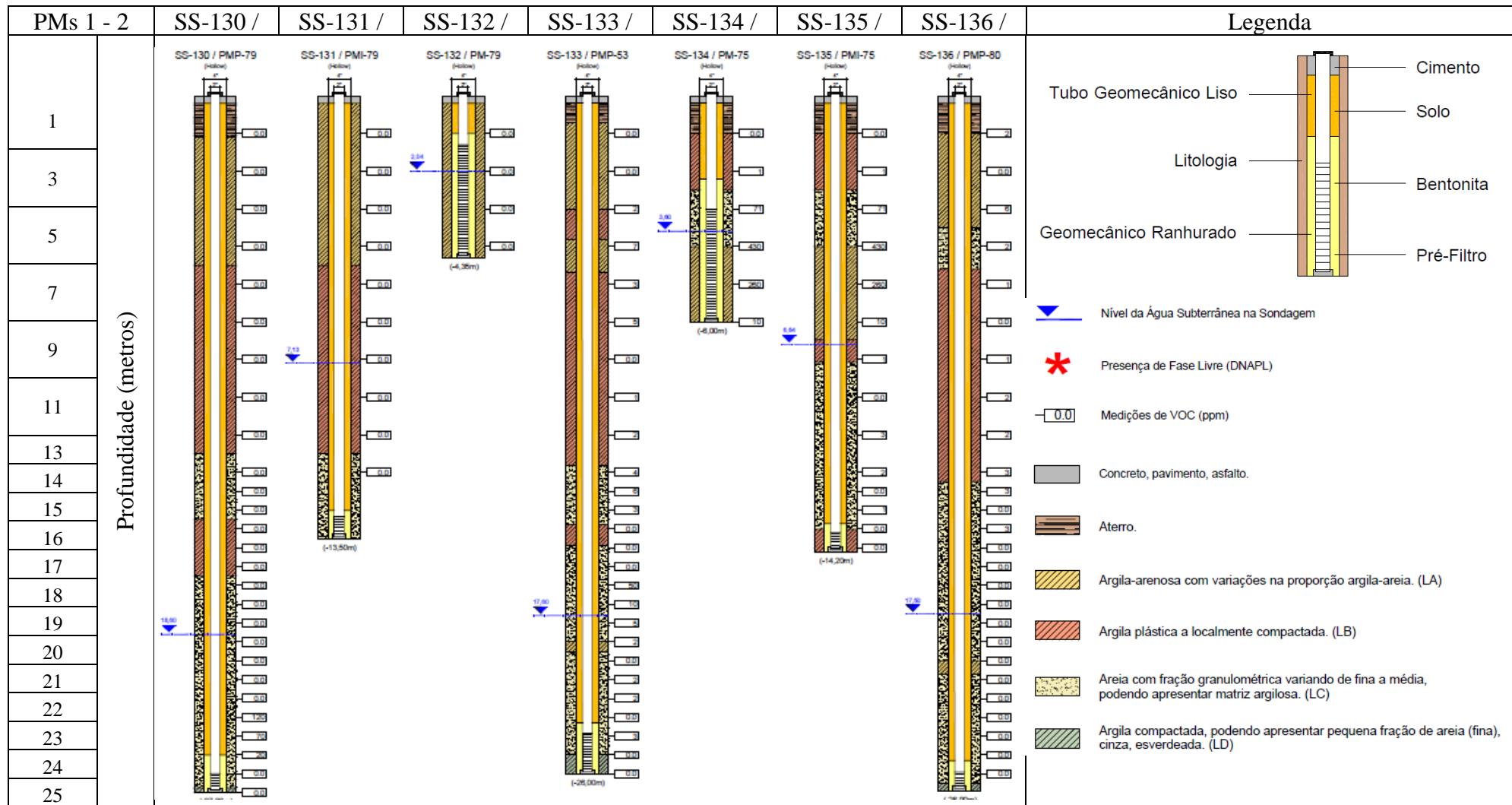
Perfis litológicos (Tabela 4 de 11)



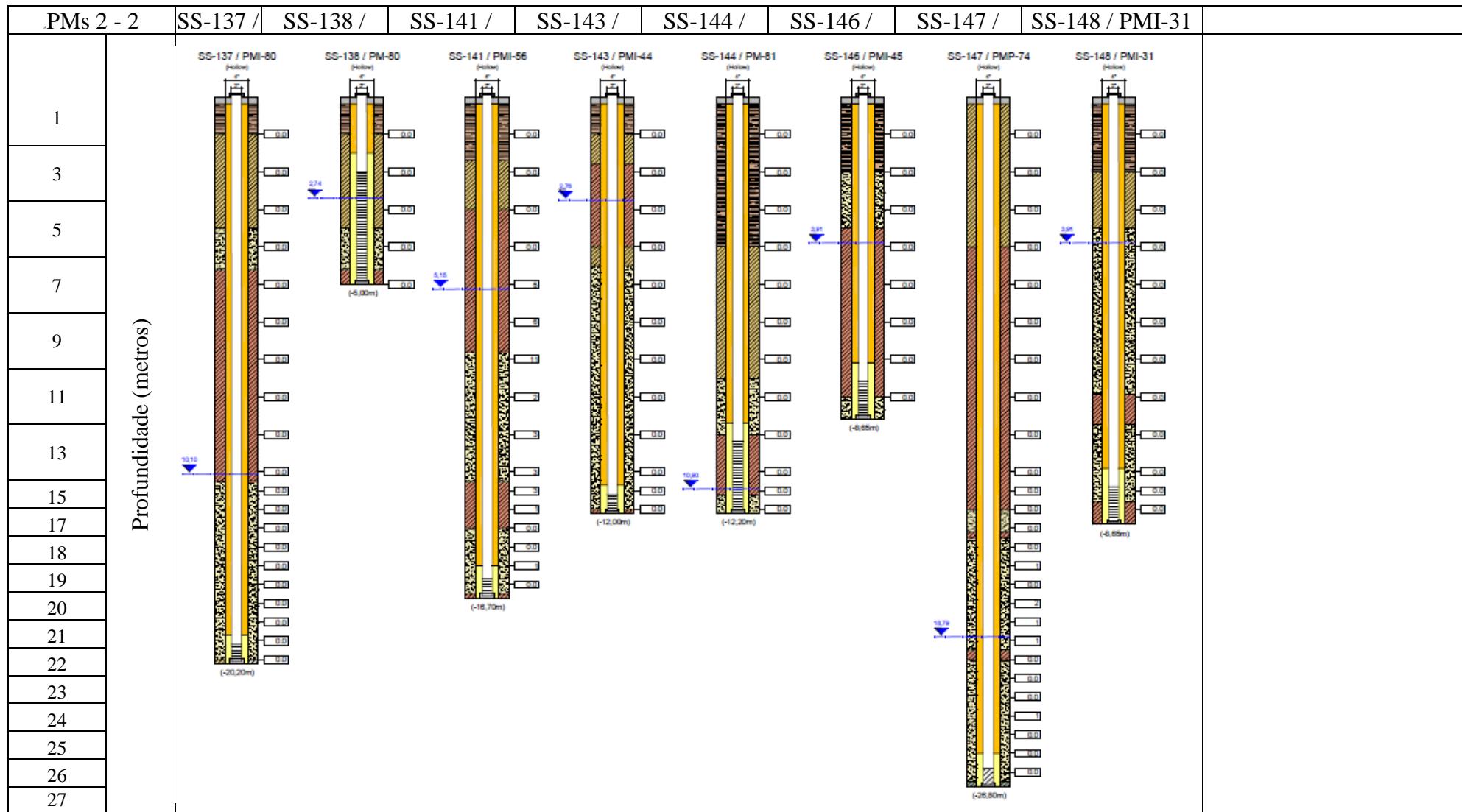
Perfis litológicos (Tabela 5 de 11)



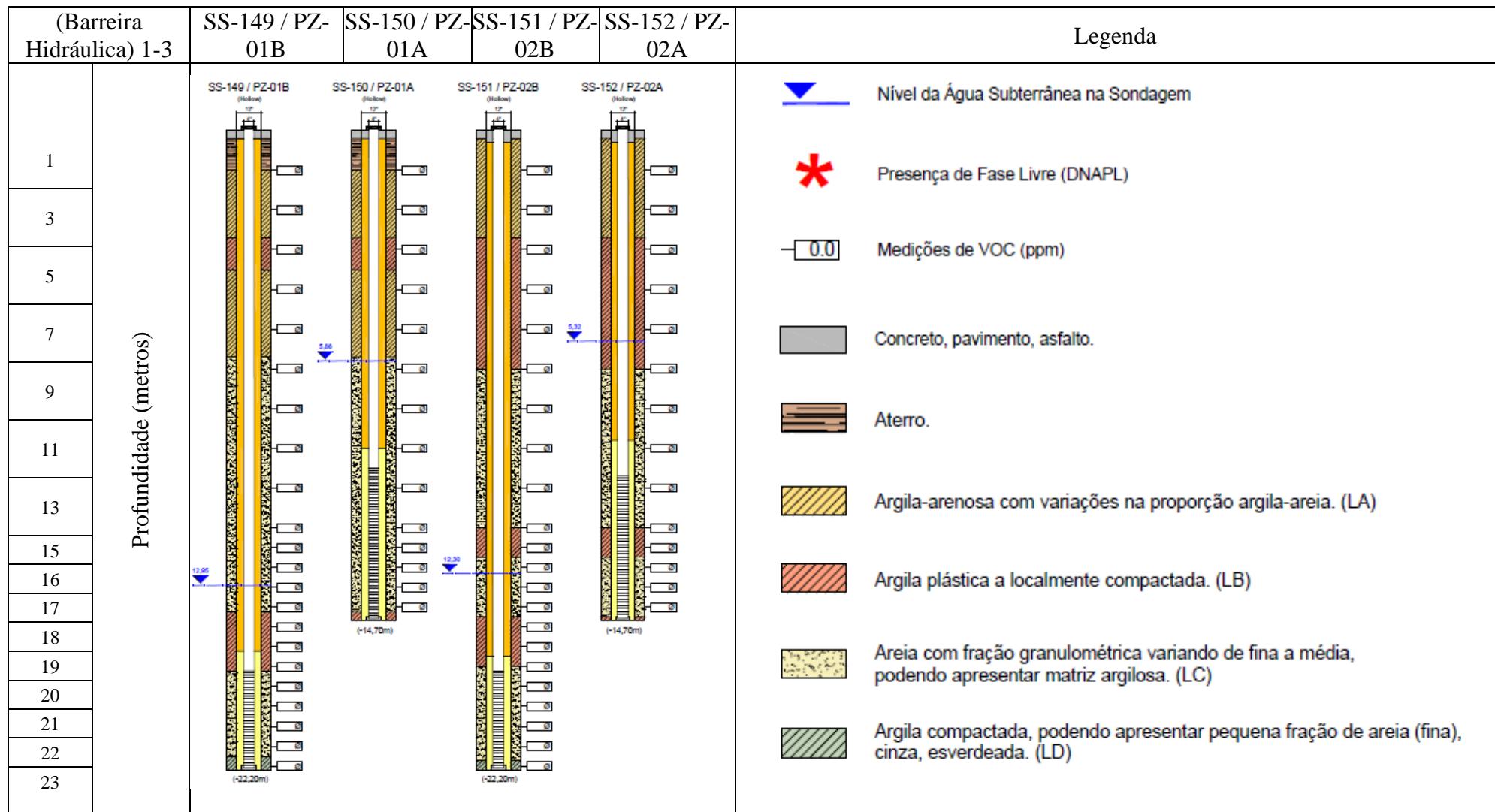
Perfis litológicos (Tabela 6 de 11)



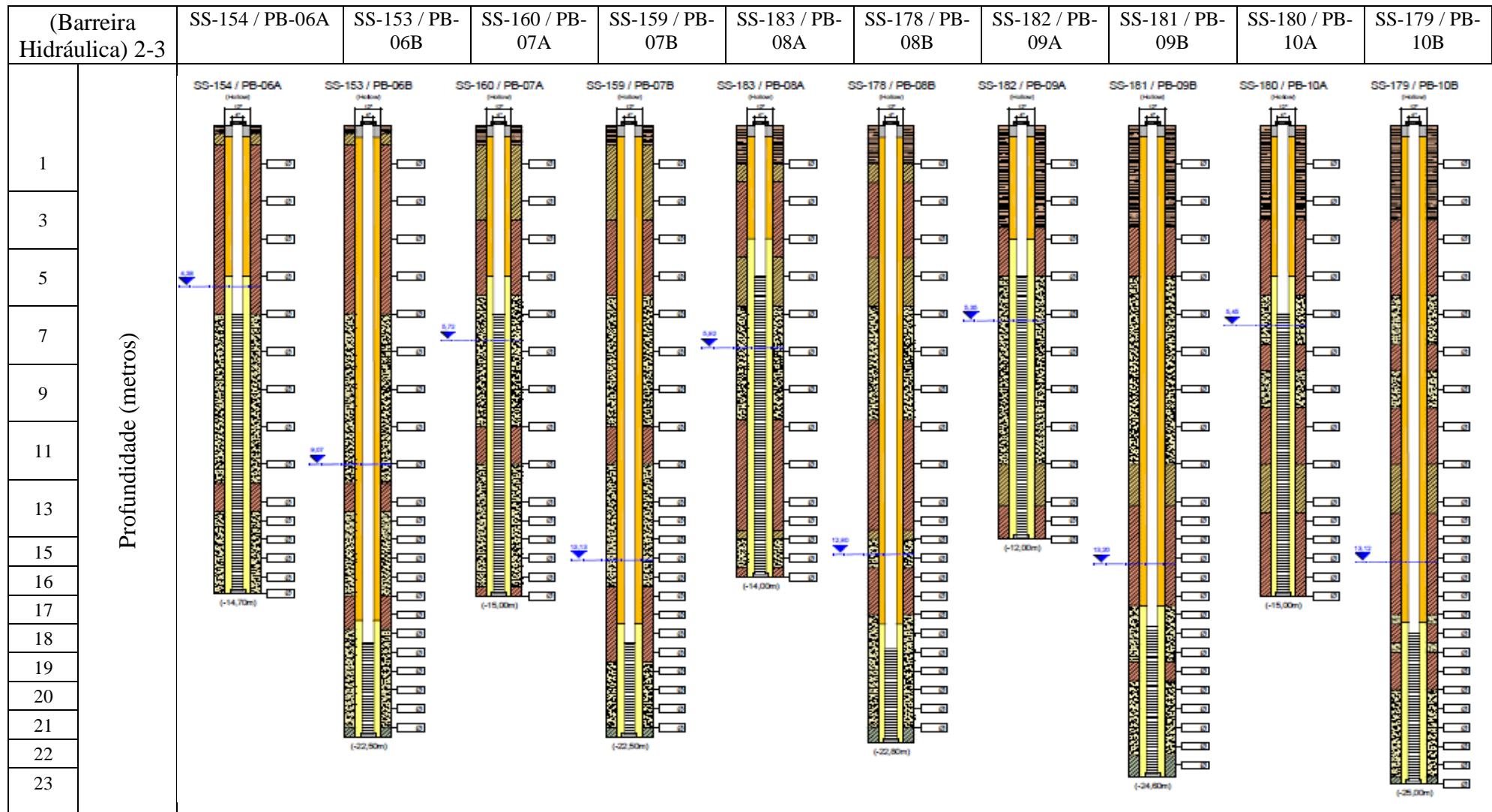
Perfis litológicos (Tabela 7 de 11)



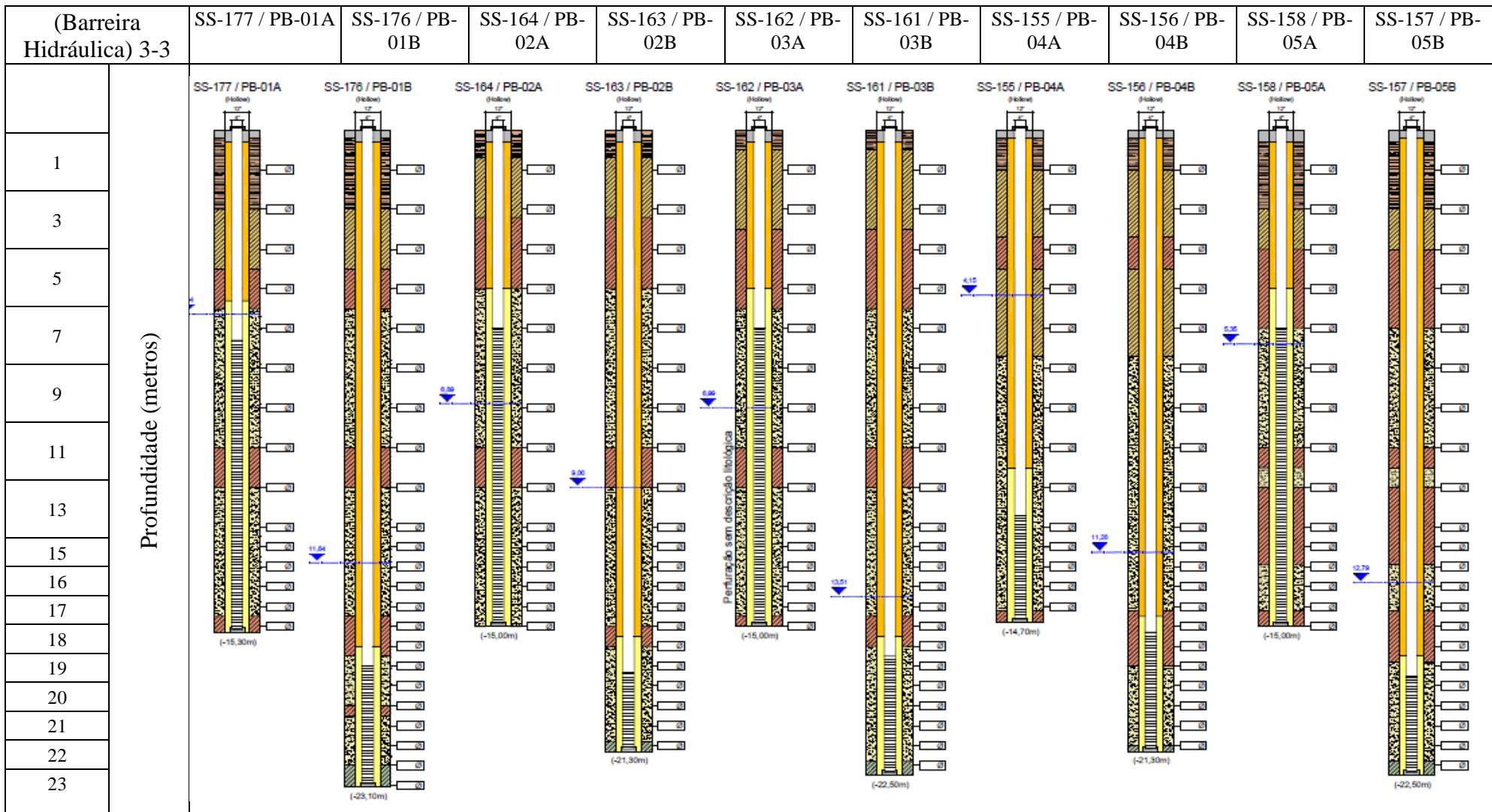
Perfis litológicos (Tabela 8 de 11)



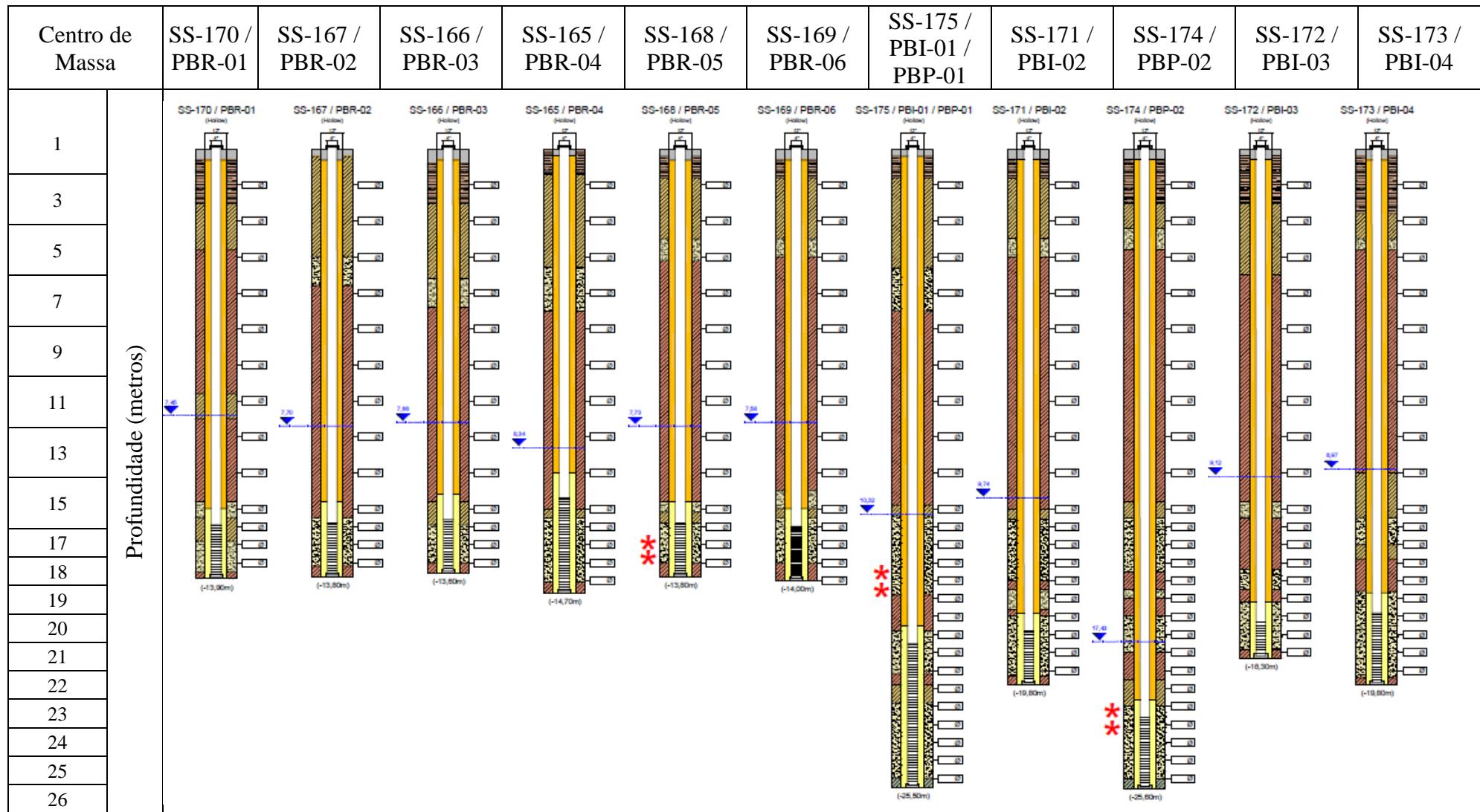
Perfis litológicos (Tabela 9 de 11)



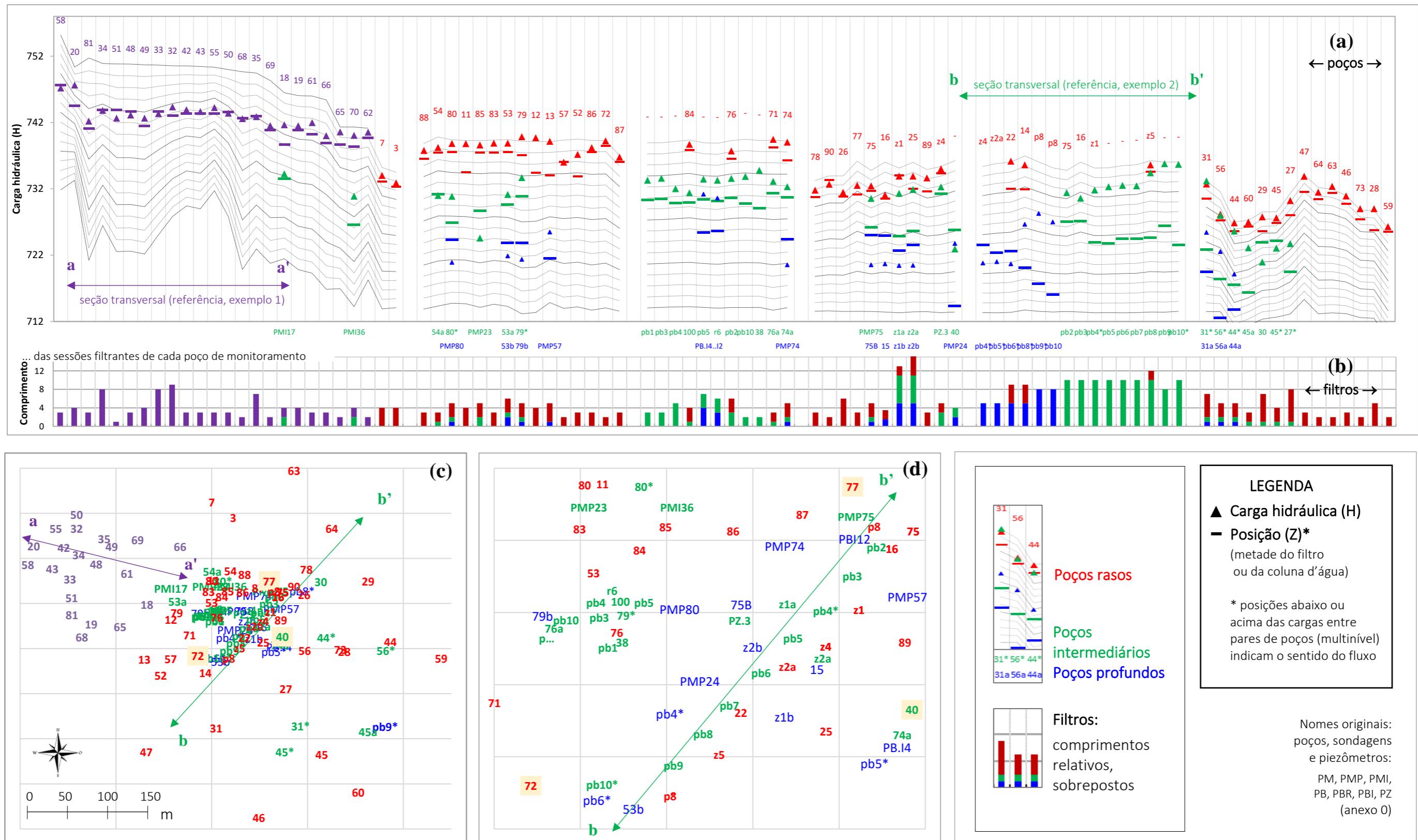
Perfis litológicos (Tabela 10 de 11)



Perfis litológicos (Tabela 11 de 11)



A.3. Parâmetros hidráulicos (base de dados pré-calibração)



(a) Cargas hidráulicas (H) de poços multiníveis, em função da topografia de topo de 16 camadas sobrepostas (futuro modelo numérico de fluxo) e suas posições (Z) de referência como pontos de tomadas de dados.
(b) Respectivos comprimentos das seções filtrantes de cada poço, em análise multinível;

A.4. Condutividades hidráulicas - testes de bombeamento e deslocamento (*slug tests*)

Nome	investigação	x	y	topo	prof.	NA	filtro	H	K (cm/s)	porção
PM-11	empresa a	243.2	203.0	740.9	7.5	2.1	4	738.8	1.50E-04	1
PM-12	empresa a	198.5	159.6	740.9	7.0	1.2	4	739.7	8.04E-05	1
PM-13	empresa a	170.8	115.4	740.7	7.5	1.6	4	739.2	9.98E-04	1
PM-14	empresa a	234.6	100.9	738.5	8.0	2.9	4	735.6	5.55E-06	1
PM-16	empresa a	310.3	185.1	737.5	10.2	6.5	2	731.1	2.12E-05	1
PM-18	empresa a	122.5	193.3	746.5	10.2	4.8	2	741.7	2.59E-05	1
PM-19	empresa a	115.4	154.3	746.0	7.2	4.5	4	741.5	3.89E-01	1
PM-20	empresa a	55.4	241.3	750.3	7.2	2.7	4	747.7	1.74E-05	1
PM-21	empresa a	218.5	179.6	740.9	7.0	1.2	4	739.7	5.28E-05	1
PM-22	empresa a	275.3	139.6	737.5	6.2	1.4	4	736.2	2.95E-05	1
PM-15	empresa a	311.5	185.8	737.5	21.0	16.8	2	720.7	1.09E-05	3(4)
PM-17	empresa a	123.5	194.3	746.4	19.0	12.2	2	734.3	0.00E+00	3(4)
PM-53	empresa b	241.1	178.4	741.1	5.0	2.2	3	738.9	8.69E-05	1
PM-75	empresa b	315.2	190.0	736.2	6.0	3.7	3	732.5	5.81E-05	1
PM-76	empresa b	246.5	161.9	741.0	5.9	3.3	3	737.7	4.04E-06	1
PM-80	empresa b	241.3	202.7	741.0	5.0	2.2	3	738.9	1.21E-04	1
PM-79	empresa b	204.7	166.9	740.9	4.4	1.0	3	739.9	3.70E-06	1
PZ-04	empresa b	295.0	158.0	736.9	3.5	1.8	2	735.0	2.36E-05	1
PZ-05	empresa b	270.3	128.0	737.8	4.3	2.2	2	735.6	5.89E-05	1
PMI-53	empresa b	240.0	179.5	741.1	16.5	10.0	1	731.2	1.12E-04	2(3)
PMI-75	empresa b	312.4	191.0	736.4	13.2	5.9	1	730.6	3.70E-04	2(3)
PMI-76	empresa b	247.8	163.1	740.9	13.4	7.8	1	733.1	1.02E-04	2(3)
PMI-80	empresa b	241.7	202.3	741.0	19.2	10.1	1	730.9	2.13E-05	2(3)
PMI-79	empresa b	205.5	167.8	740.8	13.5	7.1	1	733.7	7.11E-05	2(3)
PMP-53	empresa b	240.0	179.5	741.1	16.5	10.0	1	731.2	5.14E-05	3(4)
PMP-75	empresa b	312.4	191.0	736.4	13.2	5.9	1	730.6	5.80E-04	3(4)
PMP-80	empresa b	241.7	202.3	741.0	19.2	10.1	1	730.9	2.97E-05	3(4)
PMP-79	empresa b	206.5	169.1	740.9	26.9	19.6	1	721.4	6.66E-07	3(4)

A.5. Barreira hidráulica (base original de dados)

N1 original	N2	X	Y	T	B	NA	Prof.	F	H	NA	cotaF1	cotaF2	Z
PB-02 A	pb2	265.7	176.1	737	714	5.7	15	10	731	731	732	722	727
PB-03 A	pb3	257.4	168.1	737	713	6.6	15	10	731	731	732	722	727
PB-04 A	pb4	251.8	158.4	736	713	4.6	15	10	732	732	732	722	724
PB-05 A	pb5	245.7	150.8	737	713	4.3	15	10	732	732	732	722	724
PB-06 A	pb6	238.1	141.2	737	713	4.5	15	10	733	733	732	722	725
PB-07 A	pb7	230.7	132.1	737	713	4.7	15	10	733	733	732	722	724
PB-08 A	pb8	223.3	124.3	737	713	2.8	14	10	734	734	733	723	725
PB-09 A	pb9	217.2	115.6	738	713	1.7	12	8	734	736	734	726	726

A.6. Barreira hidráulica MD

Nome	Vazão	X	Y	T	B	NA	Prof.	F	H	NA	cotaF1	cotaF2	Z
W1	-2	249.8	155.4	-	-	-	-	20	-	-	723	717	720
W2	-2	248.8	151.4	-	-	-	-	20	-	-	723	717	720
W3	-2	243.2	148.9	-	-	-	-	20	-	-	723	717	720
W4	-2	242.0	145.6	-	-	-	-	20	-	-	723	717	720
W5	-2	241.0	141.1	-	-	-	-	20	-	-	723	717	720
W6	-2	239.0	137.9	-	-	-	-	20	-	-	723	717	720
W7	-2	234.0	135.5	-	-	-	-	20	-	-	723	717	720
W8	-2	229.4	133.1	-	-	-	-	20	-	-	723	717	720

A.7. Poços de monitoramento - cargas hidráulicas (tabela 1 de 3)

N1 original	P	N2	X	Y	T	B	NA	Prof.	F	H	-	NA	cotaF1	cotaF2	Z
PM-18	1	18	73.2	183.8	746.5	721.5	4.8	10.2	2	741.7	1	747.7	747.1	743.1	744.5
PM-19	1	19	66.1	144.8	746.1	719.8	4.5	7.2	4	741.5	2	741.5	742.9	738.9	740.9
PM-20	1	20	6.0	231.8	750.3	733.3	2.7	7.2	4	744.6	3	747.7	747.1	743.1	744.5
PM-32	1	32	51.0	251.0	750.6	727.8	6.2	12.0	9	744.4	4	744.4	747.6	738.6	743.1
PM-33	1	33	44.0	194.6	750.7	725.1	7.3	11.0	8	743.3	5	743.3	747.7	739.7	743.7
PM-34	1	34	53.0	222.1	750.9	726.5	7.0	11.0	8	743.9	6	743.9	747.9	739.9	743.9
PM-35	1	35	79.7	239.5	749.4	723.0	6.6	10.0	7	742.9	7	742.9	746.4	739.4	742.9
PM-42	1	42	37.5	229.7	750.5	729.4	6.6	10.5	3	743.9	8	743.9	743.0	740.0	743.3
PM-43	1	43	25.5	206.5	750.5	729.0	6.8	10.5	3	743.7	9	743.7	743.0	740.0	743.4
PM-48	1	48	71.3	211.5	750.8	722.6	7.7	11.0	3	743.2	10	743.2	742.8	739.8	743.6
PM-49	1	49	87.5	230.9	750.7	722.2	8.1	11.3	4	742.7	11	742.7	743.5	739.5	741.5
PM-50	1	50	50.9	266.6	750.0	727.8	6.6	9.7	3	743.4	12	743.4	743.3	740.3	743.6
PM-51	1	51	45.7	174.3	750.8	722.6	8.2	11.0	1	742.7	13	742.7	740.8	739.8	743.9
PM-55	1	55	29.2	251.1	750.3	731.7	6.1	10.0	3	744.3	14	744.3	743.3	740.3	743.4
PM-58	1	58	-0.1	211.1	755.2	731.9	8.0	9.0	3	744.6	15	747.2	749.2	746.2	747.7
PM-61	1	61	103.5	201.3	746.0	719.3	4.0	7.8	3	742.0	16	742.0	741.2	738.2	740.2
PM-66	1	66	152.7	212.8	745.4	716.8	5.4	8.0	3	741.5	17	740.0	740.4	737.4	738.9
PM-68	1	68	56.4	130.5	749.7	719.9	7.1	8.0	2	742.6	18	742.6	743.7	741.7	742.7
PM-69	1	69	114.5	238.5	748.3	720.8	6.8	8.5	2	741.6	19	741.6	741.8	739.8	740.8
PM-81	1	81	46.0	155.5	751.7	721.2	9.5	12.1	3	742.2	20	742.2	742.6	739.6	741.1
PM-03	2	3	214.3	262.9	735.8	714.1	2.9	5.5	4	732.9	21	732.9	734.3	730.3	732.3
PM-07	2	7	192.0	280.4	736.6	713.9	2.6	5.5	4	734.0	22	734.0	735.1	731.1	733.1
PM-11	2	11	193.9	193.5	740.9	714.7	2.1	7.5	4	738.8	23	738.8	737.4	733.4	734.5
PM-12	2	12	149.3	150.1	740.9	713.4	1.2	7.0	4	739.4	24	739.7	737.9	733.9	734.5
PM-13	2	13	121.5	105.9	740.7	714.9	1.6	7.5	4	739.2	25	739.2	737.2	733.2	734.0
PM-14	2	14	185.3	91.4	738.5	713.7	2.9	8.0	4	735.6	26	735.6	734.5	730.5	732.0
PM-22	2	22	226.0	130.1	737.5	713.4	1.4	6.2	4	736.2	27	736.2	735.3	731.3	732.0
PM-25	2	25	245.7	125.0	737.5	713.5	2.6	9.0	7	734.9	28	734.9	735.5	728.5	732.0
PM-26	2	26	288.4	177.9	735.3	713.5	3.8	7.5	6	731.5	29	731.5	733.8	727.8	730.8
PM-27	2	27	269.2	73.5	732.5	713.1	2.3	8.0	7	730.2	30	730.2	731.5	724.5	728.0
PM-28	2	28	330.2	114.7	729.8	712.5	2.2	6.5	5	727.6	31	727.6	728.3	723.3	725.8
PM-29	2	29	355.1	192.7	729.6	712.4	1.8	7.0	6	727.8	32	727.8	728.6	722.6	725.6
PM-31	2	31	196.5	29.5	734.5	713.5	1.8	6.5	5	732.7	33	732.7	733.0	728.0	730.5
PM-44	2	44	378.3	125.3	728.2	710.4	1.3	4.0	3	727.3	34	726.9	727.2	724.2	725.7
PM-45	2	45	306.6	0.5	729.6	712.7	1.9	4.2	3	727.7	35	727.7	728.4	725.4	726.9
PM-46	2	46	241.0	-69.3	732.2	713.2	1.3	4.0	3	730.9	36	730.9	731.2	728.2	729.7
PM-47	2	47	123.6	3.5	735.4	715.3	1.5	4.5	3	733.9	37	733.9	733.9	730.9	731.6
PM-52	2	52	138.6	88.3	741.2	714.2	4.0	9.3	3	737.2	38	737.2	734.9	731.9	733.9
PM-53	2	53	191.8	168.9	741.1	714.3	2.2	5.0	3	738.9	39	738.9	739.1	736.1	737.6
PM-54	2	54	211.4	204.3	741.5	714.3	3.3	5.7	2	738.3	40	738.3	737.9	735.9	737.5
PM-56	2	56	288.9	115.6	732.7	713.5	4.5	7.8	3	728.2	41	728.2	728.0	725.0	727.2
PM-57	2	57	149.1	106.4	741.0	714.0	5.0	7.5	2	736.0	42	736.0	735.5	733.5	736.1
PM-59	2	59	431.3	107.4	727.2	709.1	0.9	2.6	2	727.3	43	726.3	726.6	724.6	725.6
PM-60	2	60	344.7	-41.4	728.3	711.3	1.3	3.0	2	727.3	44	727.0	727.3	725.3	726.3

Poços de monitoramento - cargas hidráulicas (continuação 2 de 3)

N1 original	P	N2	X	Y	T	B	NA	Prof.	F	H	-	NA	cotaF1	cotaF2	Z
PM-62	2	62	75.5	127.2	741.1	718.3	0.6	2.5	2	739.4	45	740.5	740.6	738.6	739.6
PM-63	2	63	277.8	315.4	733.2	713.3	0.8	2.8	2	732.4	46	732.4	732.4	730.4	731.4
PM-64	2	64	317.2	251.3	733.5	713.2	2.0	4.0	2	731.5	47	731.5	731.5	729.5	730.5
PM-65	2	65	96.2	142.0	741.3	717.0	0.7	3.0	2	739.4	48	740.6	740.3	738.3	738.7
PM-70	2	70	146.54	174.92	741.31	714.3	1.2	3.6	2	739.4	49	740.1	739.7	737.7	738.3
PM-71	2	71	168.82	132.97	741.05	713.7	1.6	3.6	2	739.4	50	739.5	739.5	737.5	738.2
PM-72	2	72	177.24	109.98	740.98	714.1	1.7	3.5	2	739.2	51	739.2	739.5	737.5	738.5
PM-73	2	73	326.12	117.08	729.89	712.6	2.2	3.5	2	727.7	52	727.7	728.4	726.4	727.4
PM-74	2	74	181.88	122.73	740.90	714.1	1.9	5.5	3	739.1	53	739.1	738.4	735.4	736.3
PM-75	2	75	265.94	180.53	736.19	713.5	3.7	6.0	3	732.5	54	732.5	733.2	730.2	731.7
PM-76	2	76	197.23	152.40	740.96	714.1	3.3	5.9	3	737.7	55	737.7	738.1	735.1	736.6
PM-77	2	77	251.87	192.86	737.69	713.5	5.2	8.0	3	732.5	56	732.5	732.7	729.7	731.2
PM-78	2	78	290.60	205.62	734.56	713.6	2.8	5.3	3	731.8	57	731.8	732.3	729.3	730.8
PM-79	2	79	155.36	157.41	740.90	713.2	1.0	4.4	3	739.4	58	739.9	739.6	736.6	737.1
PM-80	2	80	192.04	193.22	741.03	714.8	2.2	5.0	3	738.9	59	738.9	739.0	736.0	737.5
PM-83	2	83	188.58	181.01	741.01	714.6	2.1	5.0	3	738.9	60	738.9	739.0	736.0	737.5
PM-84	2	84	202.49	175.22	741.04	714.2	2.3	4.7	3	738.7	61	738.7	739.3	736.3	737.8
PM-85	2	85	208.53	181.58	740.98	714.1	2.4	5.0	3	738.6	62	738.6	739.0	736.0	737.5
PM-86	2	86	224.18	180.51	741.01	713.7	2.8	5.0	3	738.2	63	738.2	739.0	736.0	737.5
PM-87	2	87	240.25	185.11	738.58	713.6	1.8	4.0	3	736.8	64	736.8	737.6	734.6	736.1
PM-88	2	88	226.21	200.04	740.51	713.9	2.7	5.5	3	737.8	65	737.8	738.0	735.0	736.5
PM-89	2	89	264.02	149.63	736.32	713.5	2.7	6.0	3	733.6	66	733.6	733.3	730.3	731.7
PM-90	2	90	277.75	187.13	735.30	713.6	2.6	3.0	2	732.7	67	732.7	734.3	732.3	733.3
PM-16 (PMI-16)	2	16	261.00	175.60	737.53	713.4	6.5	10.2	2	731.1	68	731.1	729.3	727.3	730.6
PM-17 (PMI-17)	2	PMI.17	74.16	184.81	746.44	721.5	12.2	19.0	2	734.3	69	734.3	729.4	727.4	733.5
PZ-01	2	z1	253.36	158.76	736.59	713.3	2.7	3.6	2	733.9	70	733.9	735.0	733.0	734.0
PZ-04	2	z4	245.66	148.48	736.86	713.4	1.8	3.5	2	735.0	71	735.0	735.4	733.4	734.4
PZ-05	2	z5	220.95	118.53	737.78	713.4	2.2	4.3	2	735.6	72	735.6	735.5	733.5	734.6
PM-45 A (PMP-45)	3	45a	311.45	25.65	729.62	712.6	6.5	16.5	1	725.2	73	723.1	714.1	713.1	716.4
PM-53A (PMI-53)	3	53a	190.73	170.00	741.12	714.4	10.0	16.5	1	731.2	74	731.2	725.6	724.6	729.6
PM-54A (PMI-54)	3	54a	211.16	203.44	741.65	714.4	10.6	15.8	1	731.0	75	731.0	726.9	725.9	731.2
PM-74A (PMI-74)	3	74a	182.65	121.78	740.90	714.1	8.6	14.5	1	732.3	76	732.3	727.4	726.4	730.7
PM-76A (PMI-76)	3	76a	198.46	153.60	740.88	714.1	7.8	13.4	1	733.1	77	733.1	728.5	727.5	731.4
PM-10 (PMI-10)	3	10	182.39	154.38	741.16	714.1	7.3	15.0	2	733.9	78	733.9	728.2	726.2	729.8
PM-23 (PMP-23)	3	23	203.53	187.16	740.98	714.3	16.4	20.5	2	725.2	79	724.6	722.5	720.5	728.7
PM-30 (PMI-30)	3	30	354.93	191.97	729.58	712.4	8.6	10.0	1	725.2	80	721.0	720.6	719.6	723.9
PM-36 (PMI-36)	3	PMI.36	149.22	187.07	741.38	715.2	10.5	20.0	2	730.9	81	730.9	723.4	721.4	726.6
PM-38 (PMI-38)	3	38	184.06	149.71	740.97	714.1	6.2	15.0	2	734.1	82	734.8	728.0	726.0	729.1
PM-40 (PMP-40)	3	40	225.71	131.01	737.53	713.4	14.6	19.0	2	725.2	83	723.0	720.5	718.5	725.8
PMP-100 (PMI-100)	3	100*	193.92	160.68	741.01	714.2	9.6	15.9	1	731.4	84	731.4	726.1	725.1	729.9
PMP-27	3	27*	268.17	77.91	732.57	713.3	8.8	17.5	1	725.2	85	723.8	716.1	715.1	719.5
PMP-31A (PMI-31)	3	31*	196.13	31.97	734.61	713.5	1.4	12.4	1	733.2	86	733.2	723.2	722.2	722.9
PMP-44A (PMI-44)	3	44*	373.68	130.26	728.24	710.8	2.6	12.0	1	725.6	87	725.6	717.2	716.2	717.6
PMP-45A (PMI-45)	3	45*	305.72	3.29	729.57	712.7	6.5	8.7	1	725.2	88	723.1	721.9	720.9	724.2

Poços de monitoramento - cargas hidráulicas (continuação tabela 3 de 3)

N1 original	P	N2	X	Y	T	B	NA	Prof.	F	H	-	NA	cotaF1	cotaF2	Z
PMP-56A (PMI-56)	3	56*	284.46	116.04	732.71	713.5	4.7	16.7	1	728.0	89	728.0	717.1	716.1	718.4
PMP-79A (PMI-79)	3	79*	156.20	158.35	740.84	713.2	7.1	13.5	1	733.7	90	733.7	728.3	727.3	730.9
PMP-80A (PMI-80)	3	80*	192.38	192.82	741.01	714.8	10.1	19.2	1	730.9	91	730.9	722.8	721.8	726.9
PMP-75A (PMI-75)	3	75*	263.06	181.47	736.41	713.5	5.9	13.2	1	730.6	92	730.6	724.3	723.3	726.2
PBR-01	3	r1	199.07	148.30	740.59	714.1	7.3	13.9	3	733.3	93	733.3	729.7	726.7	730.3
PBR-02	3	r2	197.15	153.55	740.60	714.1	7.0	13.5	3	733.6	94	733.6	730.1	727.1	730.6
PBR-03	3	r3	195.16	156.53	740.59	714.1	7.0	13.6	3	733.6	95	733.6	730.0	727.0	730.5
PBR-04	3	r4	193.15	160.69	740.80	714.2	8.8	15.3	5	732.0	96	732.0	730.5	725.5	729.9
PBR-05	3	r5	197.7	160.7	740.6	714.1	7.1	13.8	3	733.5	97	733.5	729.8	726.8	730.4
PBR-06	3	r6	203.5	161.8	740.5	714.0	7.2	14.0	3	733.3	98	733.3	729.5	726.5	730.1
PB-10 A	3	pb10	210.3	107.9	737.6	713.5	1.9	15.0	10	734.1	99	735.7	732.6	722.6	723.5
PB-02 A	3	pb2	265.7	176.1	737.1	713.5	5.7	15.0	10	731.4	100	731.4	732.1	722.1	727.1
PB-03 A	3	pb3	257.4	168.1	737.2	713.4	6.6	15.0	10	730.6	101	730.6	732.2	722.2	727.2
PB-04 A	3	pb4	251.8	158.4	736.4	713.3	4.6	14.7	10	731.8	102	731.8	731.7	721.7	724.0
PB-05 A	3	pb5	245.7	150.8	736.6	713.3	4.3	15.0	10	732.3	103	732.3	731.6	721.6	723.8
PB-06 A	3	pb6	238.1	141.2	737.0	713.3	4.5	14.7	10	732.5	104	732.5	732.3	722.3	724.5
PB-07 A	3	pb7	230.7	132.1	737.1	713.3	4.7	15.0	10	732.5	105	732.5	732.1	722.1	724.4
PB-08 A	3	pb8	223.3	124.3	737.2	713.4	2.8	14.0	10	734.1	106	734.4	733.2	723.2	724.6
PB-09 A	3	pb9	217.2	115.6	737.5	713.4	1.7	12.0	8	734.1	107	735.8	733.5	725.5	726.4
PZ-01A	3	z1a	253.1	160.4	736.7	713.3	5.4	14.5	6	731.3	108	731.3	728.2	722.2	724.9
PZ-02A	3	z2a	236.8	142.9	737.3	713.3	5.4	14.4	6	731.9	109	731.9	728.9	722.9	725.7
PZ-03	3	z3	244.3	155.7	737.0	713.3	4.7	7.2	3	732.3	110	732.3	732.8	729.8	731.3
PM-31 A (PMP-31)	4	31a	193.8	31.3	734.5	713.5	9.0	19.5	1	725.4	111	725.4	716.0	715.0	719.5
PM-44 A (PMP-44)	4	44a	372.8	130.7	728.3	710.8	9.1	19.0	1	720.5	112	719.1	710.3	709.3	713.8
PM-56A (PMP-56)	4	56a	286.1	118.9	732.8	713.5	10.2	25.4	1	722.6	113	722.6	708.4	707.4	712.5
PM-75 B (PMP-75)	4	75b	264.6	181.0	736.2	713.5	15.6	19.0	1	720.6	114	720.6	718.2	717.2	725.0
PM-15 (PMP-15)	4	15	262.2	176.3	737.5	713.4	16.8	21.0	2	720.7	115	720.7	718.0	716.5	724.9
PM-24 (PMP-24)	4	24	226.0	129.1	737.5	713.4	13.7	30.0	2	723.8	116	723.8	709.5	707.5	714.4
PMP-53B (PMP-53)	4	53b	189.0	170.2	741.1	714.4	19.2	26.8	2	721.9	117	721.9	716.3	714.3	723.9
PMP-57A (PMP-57)	4	57*	147.7	103.5	740.9	714.0	15.4	27.0	1	725.5	118	725.5	714.9	713.9	721.5
PMP-74B (PMP-74)	4	74*b	180.0	119.8	740.9	714.1	20.3	26.6	1	720.6	119	720.6	715.3	714.3	724.4
PMP-79B (PMP-79)	4	79b	157.2	159.6	740.9	713.2	19.6	26.9	1	721.4	120	721.4	715.0	714.0	723.8
PMP-80B (PMP-80)	4	80*b	192.4	191.8	741.1	714.8	20.1	26.8	1	720.9	121	720.9	715.3	714.3	724.3
PB-10 B	4	pb10*	256.9	181.7	736.6	713.4	9.6	25.4	8	727.0	122	727.0	719.2	711.2	716.0
PB-04 B	4	pb4*	243.6	148.4	736.6	713.3	15.8	21.0	5	720.8	123	720.8	720.6	715.6	723.5
PB-05 B	4	pb5*	236.0	138.9	736.9	713.3	15.9	22.5	5	721.0	124	721.0	719.4	714.4	722.4
PB-06 B	4	pb6*	228.7	129.8	737.0	713.4	16.2	22.5	5	720.7	125	720.7	719.5	714.5	722.6
PB-08 B	4	pb8*	216.4	114.6	737.5	713.4	10.9	22.8	5	726.7	126	726.7	719.7	714.7	720.1
PB-09 B	4	pb9*	209.6	107.2	737.6	713.5	9.3	24.5	8	728.3	127	728.3	721.1	713.1	717.7
PBI-02	4	2i	201.1	162.2	740.5	714.1	9.9	19.8	3	729.2	128	730.6	723.7	720.7	725.6
PBI-04	4	4i	209.1	157.0	740.5	713.9	9.3	19.7	4	729.2	129	731.2	724.8	720.8	725.4
PZ-01B	4	z1b	254.0	160.2	736.6	713.4	16.2	22.0	5	720.5	130	720.5	719.6	714.6	722.7
PZ-02B	4	z2b	236.1	142.2	737.2	713.3	16.7	22.0	5	720.5	131	720.5	720.2	715.2	723.6

A.8. Calibração / resíduos - cargas hidráulicas calculadas e observadas - (Figura 49)

Nome	X	Y	Z	H_OBS.	H_CAL.	Nome	X	Y	Z	H_OBS.	H_CAL.
51	45.71	174.34	743.91	742.67	742.01	26	288.37	177.90	730.80	731.47	730.01
18	73.21	183.84	738.68	741.68	738.33	25	245.74	125.03	732.01	734.87	731.89
68	56.36	130.46	742.66	742.58	740.39	27	269.20	73.54	728.01	730.23	727.64
69	114.55	238.49	740.83	741.55	739.67	53a	190.73	170.00	729.59	731.17	727.96
42	37.45	229.72	743.31	743.94	743.27	54a	211.16	203.44	731.17	731.01	729.99
43	25.52	206.46	743.36	743.66	743.04	74a	182.65	121.78	730.68	732.34	729.42
48	71.28	211.53	743.64	743.15	742.06	76a	198.46	153.60	731.36	733.13	729.44
50	50.91	266.62	743.57	743.40	742.46	100*	193.92	160.68	729.91	731.40	729.52
55	29.19	251.12	743.36	744.27	741.19	27*	268.17	77.91	719.48	723.75	722.49
58	-0.06	211.08	747.67	747.21	747.39	31*	196.13	31.97	722.87	733.21	724.14
61	103.55	201.26	740.18	742.00	740.13	56*	284.46	116.04	718.41	728.01	721.95
66	152.67	212.83	738.92	740.01	736.57	79*	156.20	158.35	730.91	733.71	729.23
81	45.99	155.48	741.12	742.22	739.20	80*	192.38	192.82	726.87	730.89	726.35
19	66.09	144.79	740.85	741.51	740.30	75*	263.06	181.47	726.19	730.56	726.00
20	6.05	231.80	744.48	747.66	743.94	10	182.39	154.38	729.79	733.89	729.62
49	87.49	230.92	741.46	742.66	738.74	23	203.53	187.16	728.68	724.59	727.89
35	79.69	239.52	742.94	742.89	741.19	36	149.22	187.07	726.61	730.92	725.09
33	43.98	194.62	743.66	743.34	742.34	38	184.06	149.71	729.06	734.79	727.83
34	53.04	222.13	743.89	743.85	742.86	40	225.71	131.01	725.82	722.95	725.05
32	50.99	251.00	743.05	744.36	742.88	r1	199.07	148.30	730.33	733.31	729.46
54	211.42	204.33	737.49	738.25	735.56	r2	197.15	153.55	730.61	733.57	729.43
57	149.09	106.40	736.06	736.01	734.99	r3	195.16	156.53	730.49	733.60	729.44
62	75.49	127.17	739.64	740.54	739.48	r5	197.74	160.71	730.37	733.48	729.43
63	277.79	315.40	731.38	732.38	730.01	r6	203.51	161.76	730.13	733.30	729.42
64	317.20	251.26	730.45	731.51	730.24	z3	244.32	155.71	731.29	732.30	731.32
65	96.23	142.05	738.70	740.59	737.74	r4	193.15	160.69	729.88	732.03	729.55
70	146.54	174.92	738.33	740.07	737.45	z1a	253.07	160.36	724.87	731.33	724.51
71	168.82	132.97	738.24	739.47	737.19	z2a	236.80	142.90	725.65	731.90	724.83
72	177.24	109.98	738.48	739.24	737.12	x9	217.24	115.57	726.39	735.80	725.26
90	277.75	187.13	733.30	732.70	731.95	x10	210.34	107.92	723.53	735.69	723.52
16	261.00	175.60	730.56	731.07	729.19	x2	265.66	176.08	727.07	731.42	726.24
17	74.16	184.81	733.52	734.28	732.19	x3	257.41	168.07	727.17	730.61	726.40
z1	253.36	158.76	733.99	733.93	733.08	x4a	251.83	158.39	723.96	731.82	722.93
z4	245.66	148.48	734.36	735.03	733.21	x5	245.67	150.84	723.79	732.34	723.03
z5	220.95	118.53	734.56	735.63	733.95	x6	238.07	141.20	724.50	732.52	723.22
52	138.60	88.27	733.88	737.20	732.64	x7	230.67	132.14	724.43	732.46	723.32
53	191.80	168.92	737.58	738.90	737.28	x8	223.32	124.25	724.61	734.44	723.47
56	288.87	115.61	727.24	728.18	725.69	31a	193.77	31.32	719.50	725.44	723.96
74	181.88	122.73	736.33	739.05	734.95	56a	286.11	118.93	712.51	722.55	721.57
75	265.94	180.53	731.69	732.46	731.04	75b	264.58	180.97	724.98	720.55	724.42
76	197.23	152.40	736.56	737.71	734.96	57*	147.71	103.53	721.53	725.48	724.23
77	251.87	192.86	731.19	732.52	729.58	74*b	180.00	119.83	724.40	720.55	724.33
78	290.60	205.62	730.76	731.81	729.39	79*b	157.23	159.59	723.81	721.38	724.20
79	155.36	157.41	737.07	739.86	737.01	80*b	192.38	191.81	724.32	720.92	723.00
80	192.04	193.22	737.53	738.85	737.24	15	262.22	176.34	724.92	720.69	724.79
83	188.58	181.01	737.51	738.89	737.25	24	226.04	129.08	714.36	723.78	723.35
84	202.49	175.22	737.84	738.72	737.25	53*b	189.03	170.24	723.87	721.90	722.88
85	208.53	181.58	737.48	738.62	737.18	2i	201.06	162.24	725.64	730.62	724.33
86	224.18	180.51	737.51	738.23	737.11	4i	209.07	157.04	725.44	731.22	724.31
87	240.25	185.11	736.08	736.80	735.02	y4b	243.61	148.45	723.51	720.83	723.04
88	226.21	200.04	736.51	737.80	734.65	y5	236.04	138.94	722.40	721.02	723.13
89	264.02	149.63	731.66	733.64	730.91	y6	228.71	129.85	722.57	720.71	723.24
3	214.27	262.89	732.34	732.90	730.69	y8	216.43	114.64	720.14	726.67	723.46
7	191.95	280.39	733.14	734.02	731.29	z1b	253.99	160.16	722.71	720.45	722.89
11	193.89	193.50	734.50	738.82	732.62	z2b	236.13	142.16	723.57	720.48	723.25
12	149.25	150.13	734.45	739.73	732.25	y10	256.88	181.73	716.04	727.01	722.85
13	121.51	105.91	734.02	739.17	732.47	y9	209.56	107.17	717.68	728.28	723.64
14	185.26	91.36	731.95	735.63	730.50						
22	225.98	130.12	732.02	736.17	731.78						
31	196.49	29.54	730.50	732.74	729.34						

ANEXO B. ÁLGEBRA MATRICIAL DOS TRANSIOGRAMAS DE MARKOV

B.1. O algoritmo Tprogs

O algoritmo Tprogs facilita a busca por padrões recorrentes na base de dados. Compara espessuras (L_k , z), recorrência $|t_{jk}|$, e tendências de sobreposição (matrizes $|T|R|P|F|M|$) entre eventos espaciais. Seu processamento subdivide-se em três módulos (Figura 75):

- O módulo GAMEAS, uma modificação do código de programação GAMV do GSLIB (Deutsch and Journel, 1998), é responsável por estimar estatísticas espaciais de dados irregularmente espaçados (dell'Arciprete *et. al.*, 2010); O módulo MCMOD processa algebricamente cadeias de Markov; E o módulo TSIM se encarrega das interpolações iniciais de co-krigagem e da subsequente simulação indicadora sequencial (SIS), gerando como produto final o preenchimento de bloco-diagrama como soluções equiprováveis de simulação semiestocástica markoviana;

Como rotina de análise exploratória o módulo GAMEAS constrói uma *primeira matriz discreta* de cadeias de Markov. O módulo MCMOD transforma o resultado em uma matriz à passos contínuos, procurando replicar os padrões observados via modelagem matemática:

- Enquanto o transiograma GAMEAS aponta frequências e probabilidades efetivamente observadas (experimentais) $|\Gamma_{jk}(\Delta h * n)|$ entre dois eventos separados pelo intervalo de observação ‘ Δh ’ e caminhamento ‘ n ’;
- O transiograma MCMOD procura ajustar às tais curvas ‘experimentais’ uma nova curva ‘modelada’, derivada de uma única equação matricial teórica capaz repetir, matematicamente, o comportamento dos dados observados.

Por fim o módulo TSIM executa uma primeira co-krigagem e imediatamente preenche, via simulação indicadora sequencial (SIS) (Carle, 1999), todo o bloco-diagrama previamente fracionado.

Ponderadores necessários à interpolação espacial vem dos transiogramas MCMOD, de acordo com as respectivas direções em que pretenda realizar uma estimativa. Neste caso:

- Tanto uma co-krigagem, como uma consequente simulação indicadora sequencial (SIS) ambas ponderadas por cadeias de Markov, faz uso simultâneo de um transiograma $|\Gamma|T(h)||$ para dada direção do plano (2D) ou espaço (3D) cartesiano que se pretenda tomar como direções de preenchimento de seu conjunto equiprovável blocos-diagrama.

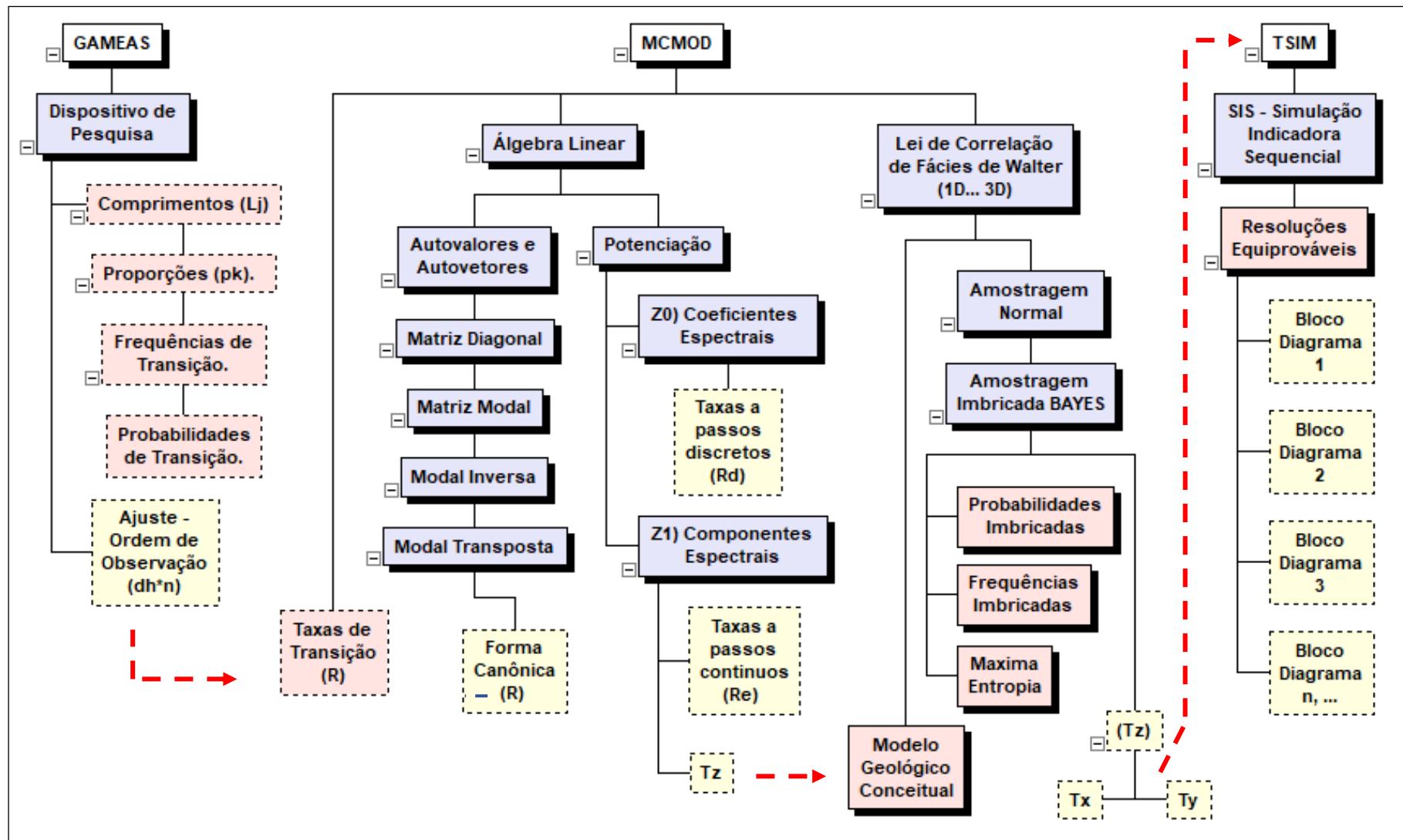


Figura 75: Visão Geral do algoritmo Tprogs, módulos análise de exploratória GAMEAS, processamento espacial MCMOD e co-krigagem / simulação indicadora TSIM.

B.1.1. Módulo GAMEAS - Transiograma experimental, dispositivo de pesquisa

GAMEAS (Figura 76), dispositivo de coleta e assim como na análise variográfica, apenas expõe a base de dados experimentais. De baixo para cima e da esquerda para a direita:

- Contabiliza o somatório (coluna a coluna) de frequências de transição $|\sum F(\Delta h)|$.
- Com todo o conjunto de cadeias de Markov sob caminhamento;
- Monta a matriz gráfica transiograma $|\Gamma|$, de probabilidades de transição $|T(\Delta h)|$ para todo o todo o conjunto de cadeias de Markov:

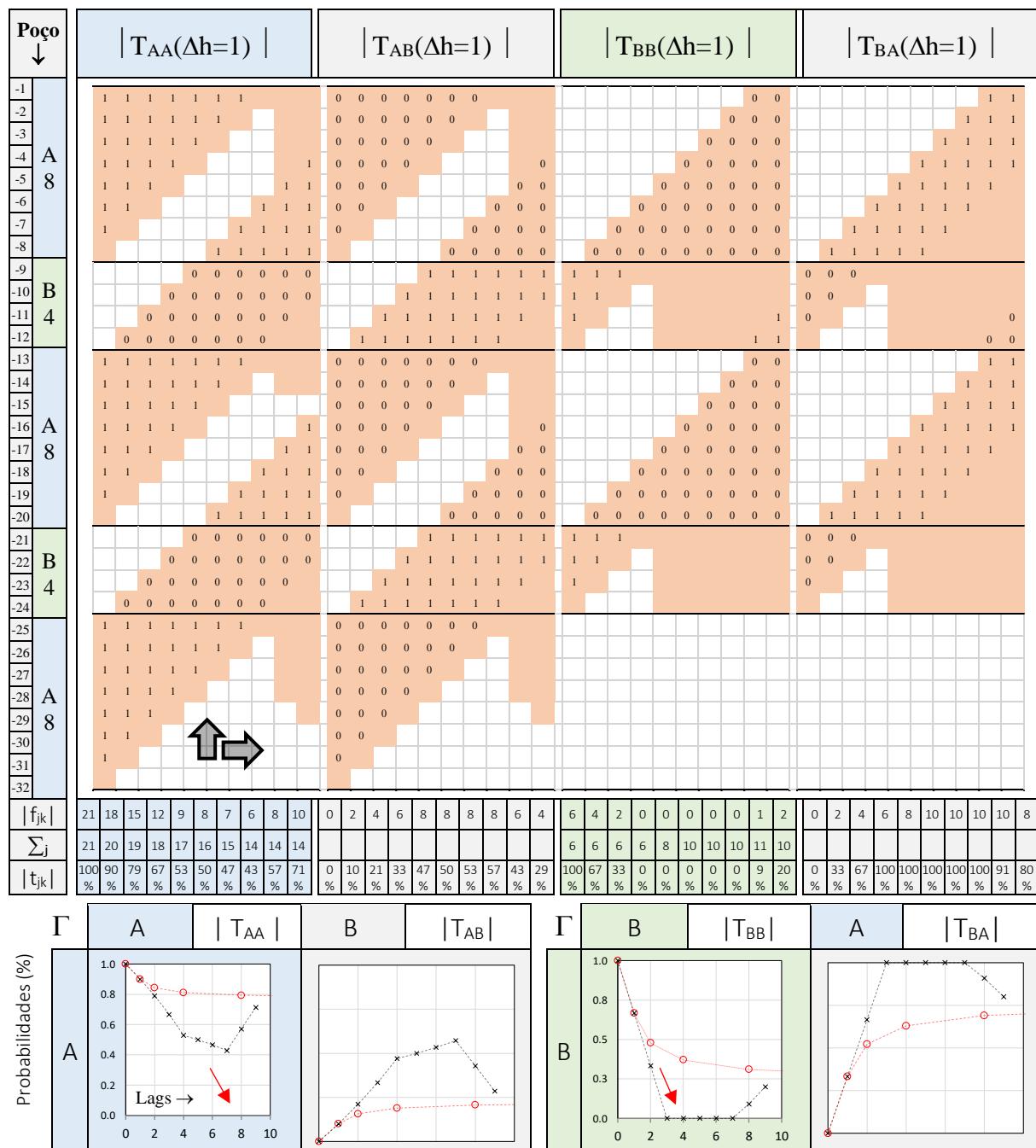


Figura 76: Frequências, probabilidades e matriz transiograma 2x2 $|\Gamma_{jk}| T_{AA}, T_{AB}, T_{BB}, T_{BA} |$

Deste exemplo sintético (Figura 76) do poço binário de eventos regulares e recorrentes $[(A8)_3(B4)_2]$, seu transiograma $(|\Gamma|T(h)|)$. Esta figura expressa:

- Comprimentos médios ($LA, z = 8$ e $LB, z = 4$ unidades), extraídos das projeções das curvas t_{AA} e t_{BB} até o eixo das abscissas (setas vermelhas), na origem ($\Delta h = 0$);
- E proporções médias ($pA = 75\%$ e $pB = 25\%$), que ocorrem no patamar das curvas ‘ t_{jj} ’, à medida que as variações de suas declividades se estabilizam no infinito (passos n_1, n_2, \dots, ∞); Estas são as proporções ou probabilidades marginais de cada evento observado.

Ou seja, frequências de transição são anotadas entre dois pontos (0, 1 do intervalo Δh), de cada camada do poço de observação tomada como ponto de referência (Figura 76). Tal mecanismo de amostragem compara o início e fim de cada par de eventos (camadas) na vertical, e recomeça novo somatório (de frequências) um intervalo à frente da contagem anterior. Para manter a simetria (Figura 76a) a ilustração se alterou a partir dos passos $[f(9)_{A,k} \text{ e } f(5)_{B,k}]$:

- De baixo para cima, o somatório de frequências $\sum |F(h)|$ indica transições ocorrendo ao longo dos eventos na direção do poço, separados pela janela de observação (Δh);
- Da esquerda para a direita, novos somatórios de frequências são anotados a cada novo distância mento unitário (n) do ponto ao lado (acima) do referencial anterior.

Assim os 04 transiogramas (matriz 2x2 Figura 76b), dependem da seguinte rotina de cálculo matricial (Equação 19). Exemplo: probabilidades $t_{aa} = (f_{aa}/(f_{aa} + f_{ab})) = 21 / (18 + 2) = 90\%$.

$$T = \begin{bmatrix} f_{AA} & f_{AK} \\ f_{KA} & f_{KK} \end{bmatrix} \quad T = \begin{bmatrix} t_{AA} & t_{AK} \\ t_{KA} & t_{KK} \end{bmatrix} \quad \sum_{k=1}^K t_{jk}(h) = 1 \quad \forall j \quad \text{Equação 19}$$

B.1.2. Módulo MCMOD - Transiograma modelado, pelas taxas de transição

Já o processamento algébrico MCMOD emprega a matrizes de taxas de transição $|R|$ (*rates*), que se deriva da anterior matriz de probabilidades $|T|$ (Equação 19):

$$r_{jk,z} = \frac{\partial t_{jk}(0 \leftarrow n)}{\partial h\varphi} = \begin{bmatrix} r_{AA} & r_{AB} \\ r_{BA} & r_{BB} \end{bmatrix} \quad \sum_{k=1}^K r_{jk,z} = 0 \quad \forall j$$

Equação 20

Equação 21: regra de somatório $|R|$ em linha

Cada elemento taxas de transição $|r_{jk}|$ evolui a partir da primeira inclinação (α) de suas respectivas curvas de probabilidades, no início imediato de trajetórias (0←h) (Equação 20);

Deste exemplo (2x2), as taxas de transição, expressas em radianos, leva esta discussão para o campo de grandezas angulares, úteis à verificação de fenômenos cíclicos (Figura 77).

$r_{jk} = \alpha = \frac{t_{y2} - t_{y1}}{t_{x2} - t_{x1}}$	$r_{AA} = \left(\frac{0,913 - 1}{1 - 0} \right) = -0,09$	<table border="1"> <tr> <td>R</td><td>A</td><td>B</td></tr> <tr> <td>A</td><td>-0.09</td><td>0.09</td></tr> <tr> <td>B</td><td>0.25</td><td>-0.25</td></tr> </table>	R	A	B	A	-0.09	0.09	B	0.25	-0.25	<table border="1"> <tr> <td>R*</td><td>A</td><td>B</td></tr> <tr> <td>A</td><td>-0.125</td><td>0.125</td></tr> <tr> <td>B</td><td>0.25</td><td>-0.25</td></tr> </table>	R*	A	B	A	-0.125	0.125	B	0.25	-0.25
R	A	B																			
A	-0.09	0.09																			
B	0.25	-0.25																			
R*	A	B																			
A	-0.125	0.125																			
B	0.25	-0.25																			
Adotou-se $ R^* $ em substituição à $ R $ para proporcionar maior significância a estatística de no mínimo 5 ocorrências de cada litologia $ F^* = (5 \times 8A + 5 \times 4B = 40 + 20 = 60$ unidades). Raciocínio extraído do teste χ^2 de Davis (1973).																					

Figura 77: Extração das taxas $|R|$ da matriz de probabilidades de transição $|T|$.

Uma matriz quadrada $|R|$ possui determinante igual a zero, o que permite sua representação matemática também como um conjunto de equações lineares. Sendo de interesse tanto a magnitude quanto o posicionamento dos índices $|r_{jk}|$ dentro da matriz de taxas $|R|$.

No tratamento dos dados (*Singular Value Decomposition*) destacam-se duas tarefas:

- Determinação de seus *autovalores* (λ) e *autovetores*: configurações de matrizes diagonal $|\Lambda|$, modal $|V|$, inversa $|INV|$ e transposta $|TRANSP|$ dos elementos iniciais;
- Definição da matriz de *coeficientes espectrais*, uma para cada autovalor (λ_{jk}), cujos componentes permitem a reconstrução da matriz original (inicial $|R|$) em termos de seu *formato canônico*.

De $|F|$, $|T|$ e, portanto, de $|R|$, chega-se ao *polinômio característico* (Figura 78):

(a)	(b)	
$A * X = B$ $\lambda * X = B$	$\begin{vmatrix} r_{AA} & r_{AB} \\ r_{BA} & r_{BB} \end{vmatrix} = 0$	$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$
$(A * X) - (\lambda * X) = 0$ $(A - \lambda I)X = 0$ $ A - \lambda I = 0$	$(a_{11} - \lambda)x_1 + a_{12}x_2 = 0$ $a_{21}x_1 + (a_{22} - \lambda)x_2 = 0$	$\lambda^2 - (a_{11} + a_{22})\lambda + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) = 0$
(c)		
$\begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0$		$\lambda_{1,2} = \frac{-p_1 \pm \sqrt{p_1^2 - 4p_0}}{2}$
$\lambda^2 - p_1\lambda - p_0 = 0$		

Figura 78: (a, b) - Teoria algébrica para extração de autovalores (λ) e autovetores

Da matriz $|R|$ ou $|A|$ para manter a nomenclatura de referência de Agterberg (1974) e Davis (1973), como uma matriz quadrada e de determinante igual a zero:

- Uma variável gama ‘ λ ’ pode ser adicionada à cada elemento da diagonal principal, como representação de suas variações escalares, sem alteração de seu significado;
- Via equações polinomiais (da 2ª deste exemplo, à 5ª ordem de magnitude como máxima capacidade de processamento Tprogs) as soluções de ‘ λ ’ vem da fórmula de Bhaskara.

Autovalores (λ) são as soluções escalares almejadas. Enquanto os autovetores X ($x_1; x_2$) mostram o resultado dos polinômios para cada valor ‘autovalor λ ’ calculado. Dos dados do exemplo em pauta (Figura 76), monta-se as matrizes modal $|V|$ e diagonal $|\Lambda|$ (Figura 79):

Matriz modal de autovetores	V		Matriz diagonal de autovalores		Λ	
	A	B	A	B	λ_A	0
	B	X_A	X_B	B	0	λ_B

Figura 79: Componentes singulares da matriz original 2x2

E como qualquer matriz $|A|$ volta a assumir seu valor inicial, formato canônico, quando computado pela seguinte regra de multiplicação $V\Lambda V^{-1} = |A|$ (Figura 80), segue seu cômputo (Figura 81), como remontagem da matriz original em sua forma canônica:

Modal $ V $	* Diagonal $ \Lambda $	modal inversa $ V^{-1} $	= Matriz $ A $
-------------	------------------------	--------------------------	----------------

Figura 80: Reconstrução de uma matriz quadrada $|A|$ em formato canônico

Matriz modal $ V $ de autovetores		Matriz diagonal $ \Lambda $ de autovalores $\lambda_{A, B}$		Modal inversa $ V^{-1} $		Formato canônico de $R=V\Lambda V^{-1}$					
V	A	B	Λ	A	B	V^{-1}	A	B	R	A	B
A	1	1	A	0	0	A	0.67	0.33	A	-0.125	0.125
B	1	-2	B	0	-0,37	B	0.33	-0.33	B	0.25	-0.25

Figura 81: Cômputo de forma canônica pela regra de multiplicação de valores decompostos

De considerável importância ao entendimento do significado dos conceitos descritos até o momento, e não menos importante, também para o entendimento do que é um transiograma de caminhamento $|\Gamma|T(h)|$ recomenda-se a visualização espacial do conceito de potenciação matricial, apresentado a seguir (B.1.1.a).

B.1.1.a. Potenciação dos índices da matriz de probabilidades $|T|$

A utilidade dos autovalores e autovetores é melhor compreendida quando tais índices são visualizados como distâncias físicas (Figura 82) no plano cartesiano (Davis, 1973).

Ao se dispor em formato gráfico e sequencial, os índices da matriz original (Figura 82a de probabilidades de transição $|T(\Delta h)|$), junto a seus componentes singulares $\lambda_{A,B}$ (Figura 82b), representam o processo de potenciação ou exponenciação dos dados originais $|T_{2x2}|$:

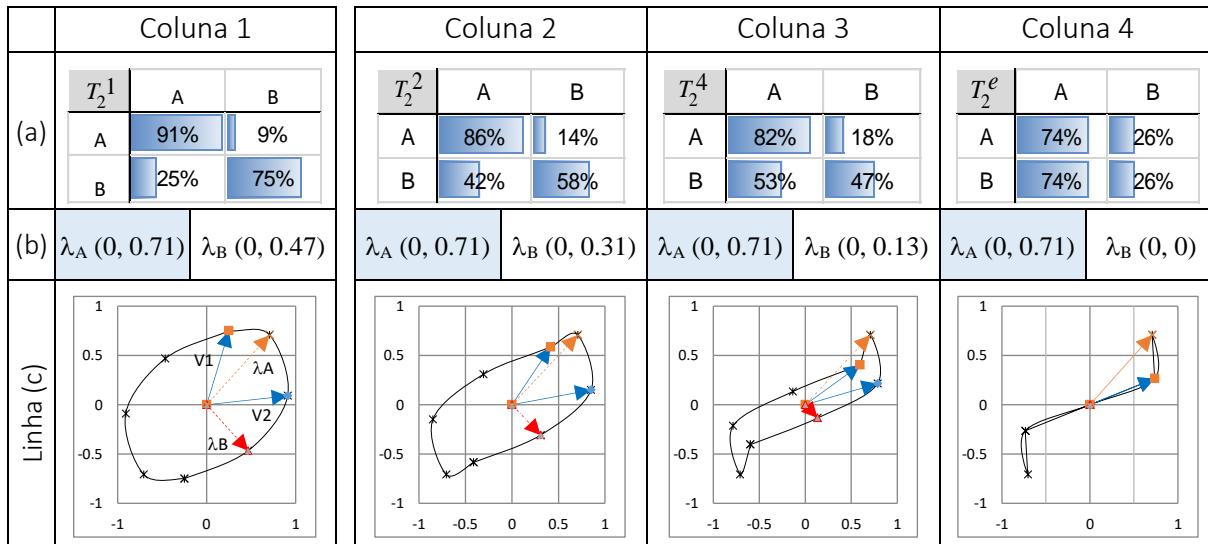


Figura 82: (a) Elementos $|t_{jk}|$; (b) Autovalores λ_{ab} ; (c) Feição espacial da potenciação $|T|^n$ (Grossi et. al., 2018)

Das colunas 1, 2, 3, 4 da Figura 82, a matriz original $|T_{2x2}|$ é multiplicada por ela mesma, ou elevada a subsequentes maiores potências ($|T_{2x2}^1|$, $|T_{2x2}^2|$, $|T_{2x2}^4|$, $|T_{2x2}^{16}|$) até a estabilização de seus índices internos $|t_{jk}|$, em $|T_{2x2}|^e$. Seus elementos são então observados como pares ordenados de probabilidades. Sendo os vetores $V_1(t_{11}, t_{12})$ e $V_2(t_{21}, t_{22})$ índices de comprimentos constantes e posições variáveis (vetores azuis). Enquanto os autovalores (λ_A e λ_B) calculados uma representação de vetores (vermelhos) de comprimentos variáveis e posições constantes.

Com o achatamento cadenciado de uma elipse imaginária ligando todos estes vetores, verifica-se a evolução das probabilidades de transição $|T(h)|$ ao longo dos passos e estabilizando-se no infinito. O comportamento das curvas de um transiograma (Figura 76), é o mesmo, estabiliza-se depois de percorrer certa distância Δh , em seus respectivos patamares.

Como curiosidade, destaca-se que esta mesma visualização (2D) poderia ter sido feita em três ou mais dimensões, ou seja, matrizes de maiores ordens de grandeza (de três ou mais litologias, por exemplo), teriam de ser representadas além do espaço tridimensional.

B.1.1.b. Coeficientes espectrais (Z_0) de taxas de transição $|R_d|$ de $|R|$

Com as taxas de transição $|R(\Delta h)|$, o módulo MCMOD já seria capaz de reconstruir, com autovalores e autovetores, o formato canônico da matriz de taxas $|R| \rightarrow |R_d|$, ou seja, partindo-se das taxas de transição experimentais, retorna-se via modelagem, às taxas ‘discretas’ $|R_d(\Delta h)|$.

Porém procura-se chegar a uma matriz de taxas contínuas, que sejam capazes de estimar probabilidades de transição para qualquer intervalo (h) entre (h_1) e (h_2) e não apenas entre as distâncias correspondentes a um intervalo discreto $[\Delta h * n]$. Por este motivo, MCMOD recorre ao traçado de curva condicionadas, explícitas, ou a passos contínuos $|P(h)|$, derivadas, como se verá adiante, da interpolação espacial lagrangiana.

Matrizes de coeficientes espectrais $|Z_0|$, uma para cada autovalor ‘ $\lambda_{A, B}$ ’, são alcançadas pelo seguinte procedimento algébrico (Figura 83):

$V^{-1} = T$	$ Z_0 * \lambda_A = V\text{Coluna}(A) * T'\text{Coluna}(A)$	$ Z_0 * \lambda_B = V\text{Coluna}(B) * T'\text{Coluna}(B)$
--------------	--	--

Figura 83: Montagem de componentes espectrais

De uma matriz quadrada qualquer $|A|$ (notação de Agterberg, 1974), a matriz modal e inversa é renomeada $|V^{-1}| = |T|$ e posteriormente calculada sua transposta: Matriz $|T'|$.

Matrizes de coeficientes espectrais $|Z_0|$ são calculadas a partir da multiplicação independente das colunas das matrizes $|V|$, ou $|T'|$, uma para cada autovalor $\lambda_{A, B}$:

De forma que a matriz de taxas discretas $|R_d|$, relativa a determinado intervalo Δh , pode ser remontada pelo somatório de cada um de seus autovalores ‘ $\lambda_{1,2}$ ’, antes multiplicados pelos respectivos coeficientes espectrais $Z_0(\lambda_{1,2})$, como descrito pela Equação 22 (Carle ,1999):

$$|R_d| = \sum_{i=A}^K \lambda_i Z_0 = \begin{bmatrix} r_{AA} & \cdots & r_{AK} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{KA} & \cdots & r_{KK} \end{bmatrix} \quad \text{Equação 22}$$

Onde:

λ_i = Autovalores da matriz de taxas de transição $|R|$

$|Z_0|$ = Matrizes de coeficientes espectrais, associadas aos autovalores $\lambda_{A, n}$

$|R_{\theta_d}|$ = Matriz de Taxas de Transição, em qualquer direção ‘ θ ’, no caso em pauta poço na e contagens de baixo para cima na direção vertical ‘z’

Desta alternativa configuração, como se esperava, retorna-se a matriz original $|R|$, porém agora como $|Rd|$. Seus resultados podem ser verificados na Figura 84 abaixo:

Matriz de coef. espectral Z_0 e autovalor $\lambda_A = 0$	Matriz de coef. espectral Z_0 de autovalor $\lambda_B = -0.37$	(b) $ R_\theta = \sum_{i=A}^K \lambda_i Z_0$																											
$Z_0(\lambda_A)$ <table border="1"> <tr> <td></td> <td>A</td> <td>B</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>0.67</td> <td>0.33</td> </tr> <tr> <td>B</td> <td>0.67</td> <td>0.33</td> </tr> </table>		A	B	A	0.67	0.33	B	0.67	0.33	$Z_0(\lambda_B)$ <table border="1"> <tr> <td></td> <td>A</td> <td>B</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>0.33</td> <td>-0.33</td> </tr> <tr> <td>B</td> <td>-0.67</td> <td>0.67</td> </tr> </table>		A	B	A	0.33	-0.33	B	-0.67	0.67	Rd <table border="1"> <tr> <td></td> <td>A</td> <td>B</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>-0.125</td> <td>0.125</td> </tr> <tr> <td>B</td> <td>0.25</td> <td>-0.25</td> </tr> </table>		A	B	A	-0.125	0.125	B	0.25	-0.25
	A	B																											
A	0.67	0.33																											
B	0.67	0.33																											
	A	B																											
A	0.33	-0.33																											
B	-0.67	0.67																											
	A	B																											
A	-0.125	0.125																											
B	0.25	-0.25																											

Figura 84: Remontagem de $|R|$ como $|Rd|$

Segue ainda a relação entre Taxas e probabilidades de transição $|R|$ e $|T|$

B.1.1.c. Taxas e probabilidades de transição

Uma matriz qualquer $|A|$ (Figura 85), multiplicada por ela mesma, porém em termos de sua configuração canônica aponta o caminho pelo qual as probabilidades de transição $|T|$ são calculadas por exponenciação, como aponta a Equação 23 e a Equação 24, de Carle (1999).

$$\begin{aligned}
 A^2 &= AA = (V\Lambda V^{-1}) \times (V\Lambda V^{-1}) \\
 A^2 &= (V\Lambda)(V^{-1}V)(\Lambda V^{-1}) \\
 A^2 &= (V\Lambda) I (\Lambda V^{-1}) \\
 A^2 &= V\Lambda^2 V^{-1} \\
 A^S &= V\Lambda^S V^{-1}
 \end{aligned}$$

Figura 85: Potenciação de matrizes

$ R = \sum_{i=A}^K \lambda_i Z_0$	Equação 22
$ T(\Delta h) = \exp(R\Delta h)$	Equação 23
$ T(\Delta h) = \sum_{i=A}^B \exp(\lambda_i \Delta h) Z_0$	Equação 24

Da regra de multiplicação matricial, uma matriz identidade vem da multiplicação de seus índices originais pela sua configuração inversa: $|V| \times |V^{-1}| = |I|$;

De forma que se volta, novamente, aos conhecidos índices do exemplo AB em pauta (Figura 76), cujas taxas $|R|$ derivam-se da exponenciação das probabilidades de transição $|T|$.

Tanto o procedimento de Carle (1999), quanto os cálculos de potenciação tradicionais retornam os mesmos resultados:

A	
Da Equação 24	$T(\Delta h) = \begin{bmatrix} 0,67 & \cdots & 0,33 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0,67 & \cdots & -0,33 \end{bmatrix} + \exp(-0,37) \begin{bmatrix} 0,33 & \cdots & -0,33 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -0,67 & \cdots & 0,67 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,90 & \cdots & 0,10 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0,21 & \cdots & 0,79 \end{bmatrix}$

B	$T(\Delta h) =$	Modal $ V $	Matriz Diagonal $ \Lambda ^{\text{exp}}$	Matriz Modal Inversa $ V^{-1} $	Resultado: Matriz $ R $
	$T(\Delta h) = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & -2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \exp(0) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \exp(-0,37) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 0,67 & \cdots & 0,33 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0,33 & \cdots & -0,33 \end{bmatrix}$				$\begin{bmatrix} 0,90 & \cdots & 0,10 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0,21 & \cdots & 0,79 \end{bmatrix}$

Tal raciocínio implica, porém, que $|T|$ (ainda) não deixou de se restringir a intervalos múltiplos de (Δh) , motivo pelo qual $T_d(\Delta h)$ é chamado de probabilidades de transição a passos discretos (Carle, 1999).

$$\begin{aligned}
 T(1\Delta h) &= IT(1\Delta h) \\
 T(2\Delta h) &= T(\Delta h)T(\Delta h) \\
 &\vdots \\
 T(n\Delta h) &= T[(n-1)\Delta h]T(\Delta h)
 \end{aligned}$$

B.2. Probabilidades de transição a passos contínuos (MCMOD - ABC)

O exemplo 3x3 ($A_8B_6C_4)_3$, expande o entendimento este entendimento (Figura 86):

F	A	B	C	T	A	B	C	R	A	B	C
A	35	5	0	A	0.875	0.125	0	A	-0,125	0,125	0
B	0	25	5	B	0	0.833	0.167	B	0	-0,167	0,167
C	0	4	15	C	0.211	0	0.789	C	0,211	0	-0,211

Figura 86. Frequências, probabilidades e taxas de transição para exemplo 3x3 ($A_8B_6C_4)_3$

O transiograma experimental GAMEAS, agora para as litologias ABC, mostra os padrões: comprimentos $L_A = 8$; $L_B = 6$; $L_C = 4$ un.; e proporções $p_A = 44$; $p_B = 33$; $p_C = 22\%$.

Uma vez construídas as matrizes: diagonal $|\Lambda|$ e modal $|V|$, e extraídos seus autovalores, X_A , X_B , X_C e autovalores λ_A , λ_B , λ_C das matrizes de probabilidades e taxas $|T|R|$:

- MCMOD poderia proceder para a extração das matrizes de coeficientes espectrais $|Z_0|$, e (re)construção das taxas e probabilidades a passos discretos $|R_d|T_d|$;
- Porém a interpolação lagrangiana, que trata da interpretação (em números radianos) das taxas de transição no espaço, demanda a matriz de componentes espectrais $|Z_1|$.

Assim como se calculou os autovalores ‘ λ_{ABC} ’ de $|R|$, calcula-se θ_{ABC} de $|T|$.

Polinômio característico		Autovalores	
De $R(\Delta h)$	$\lambda - (\lambda^2 - 0.54\lambda - 0.062625) = 0$	λ_A	0
	$x = (-b \pm \sqrt{-a * c})/(2 * a)$	λ_B	- 0.270692 - 0.143093i
	$\lambda_A = 0$ $\lambda_{b,c} = (-0.54 \pm \sqrt{-1 * 0.62625})/(2 * -1)$	λ_C	- 0.270692 + 0.143093i

Desafortunadamente, os índices da matriz inicial tomada como exemplo ABC (Figura 86) levaram a um polinômio característico de solução na raiz quadrada de um número negativo. Ainda assim, constatou-se que o algoritmo Tprogs se utiliza de números complexos ($x + yi$) para contornar este problema (Figura 87),

Ao leitor mais consciencioso, no entanto, não é preciso se prender às implicações de se fazer uso dos números complexos, porque como se verá ao final do processo, tais variáveis se anulam gerando resultados prontamente observáveis.

Utilizando comandos IM e MATRIZ para nº imaginários em cálculo matricial no MS Excel, foram processados os polinômios característicos necessários (também com auxílio dos seguintes endereços <i>online</i>): https://www.vcalc.com/wiki/SavannahBergen/Characteristic+Polynomial+of+a+3x3+Matrix https://www.mathportal.org/calculators/matrices-calculators/matrix-calculator.php http://www.wolframalpha.com/widgets/view.jsp?id=35f68681262e42ea89b0834caa51635b	θ_A	1
	θ_B	0.755055 - 0.108787i
	θ_C	0.755055 + 0.108787i

Figura 87: Processamento de componentes espectrais da base de dados ABC

B.1.1.d. Matrizes de componentes espectrais (Z1)

Ao se manipular tais grandezas expressas no espaço, em números radianos (Agterberg, 1974, p. 406), consegue-se estimar autovalores λ_m relacionados a cada passo contínuo ‘ h ’ dentro de um intervalo discreto ‘ Δh ’, entre dois pontos ‘ h_1 ’ e ‘ h_2 ’.

Na Equação 25 os termos ‘ Z_1 ’ como a razão dos produtórios (à semelhança dos somatórios) dos autovalores ‘ λ_m ’, da Matriz $|R|$, referentes às posições, anterior e posterior $\pm h$ a serem interpoladas entre dois pontos separados pela distância Δh .

$$Z_{1(A,B,n)} = \frac{\prod_{m \neq i} (\lambda_m I - R)}{\prod_{m \neq i} (\lambda_m - \lambda_i)}$$

Equação 25

$$U_{(M)} = (\lambda_m I - R)$$

$$U(A) = [\lambda A] * I - [R]$$

$$U(B) = [\lambda B] * I - [R]$$

$$U(C) = [\lambda C] * I - [R]$$

Pela variável auxiliar U_M de $|R_{ABC}|_{3x3}$ (adaptação do presente autor) é facilitada a construção das necessárias 03 matrizes de componentes espetrais $|Z_{1ABC}|$ (Figura 88).

$Z_{1(A)} =$	$\begin{array}{ c c } \hline U_{(A)} & * & U_{(B)} \\ \hline (\lambda_C - A) & * & (\lambda_C) \\ \hline \end{array}$	$Z_{1(C)} =$	$\begin{array}{ c c } \hline U_{(A)} & * & U_{(C)} \\ \hline (\lambda_B - A) & * & (\lambda_B) \\ \hline \end{array}$	$Z_{1(B)} =$	$\begin{array}{ c c } \hline U_{(B)} & * & U_{(C)} \\ \hline (\lambda_A - B) & * & (\lambda_A) \\ \hline \end{array}$
--------------	---	--------------	---	--------------	---

Figura 88: Produtórios da interpolação Lagrangiana

Resultado: matrizes de componentes espetrais da matriz $|R|_{3X3}$ (Tabela 13)

Tabela 13: Componentes espetrais calculados, matriz de taxas de transição $|R|$, Figura 86

$Z_{1(A)} =$	0.277777931205418 +0.0896842623877973i	-0.1666654095973 +0.121492321040364i	-0.111111390246266 -0.211176583428555i
	-0.222222779676571 -0.421696592762821i	0.33333443635609 +0.0482019609003257i	-0.111110663959437 +0.37349463186244i
	-0.222221692897046 +0.45317636436662i	-0.166667083533754 -0.315287583431187i	0.388888776430533 -0.137888780935937i
$Z_{1(B)} =$	0.277777931205418 -0.0896842623877973i	-0.1666654095973 -0.121492321040364i	-0.111111390246266 +0.211176583428555i
	-0.222222779676571 +0.421696592762821i	0.33333443635609 -0.0482019609003257i	-0.111110663959437 -0.37349463186244i
	-0.222221692897046 -0.45317636436662i	-0.166667083533754 +0.315287583431187i	0.388888776430533 +0.137888780935937i
$Z_{1(C)} =$	0.44444137589165	0.3333308191946	0.22222780492532
	0.444445559353143	0.33333112728782	0.222221327918874
	0.444443385794093	0.333334167067508	0.222222447138933

Apesar dos componentes espetrais $|Z_{1A}|$ e $|Z_{1B}|$ parecerem iguais, pode-se reparar que muitos de seus sinais (+-) estão trocados entre as suas partes real e imaginária ($a \pm bi$).

E uma rápida justificativa de sua não equivalência verifica-se pelo fato destes não se anularem entre si.

B.1.1.e. Remontagens: $|R_p|$ e $|P|$ a passos contínuos (h)

Da mesma maneira que se acessou o formato canônico da matriz $|Rd(B.1.2)|$, MCMOD se encarrega de determinar as curvas (contínuas) de real interesse $|P(h)|$, devido a sua utilidade nos consequentes procedimentos de interpolação.

Da equivalência estabelecida pela função exponencial $\exp(\lambda) = \theta$ (Carle, 1999) entre autovalores das matrizes $|T|$ e $|R|$:

- Curvas contínuas, ou explícitas são então acessíveis a partir da Equação 26 ou da Equação 27 conforme o caso, variando somente o comprimento do passo '(h)' desejado como dados de entrada.
- Uma vez que calculados os autovalores nestas formulações, respostas escalares de um só padrão observado (decomposição SVD) todos os demais elementos do transiograma derivam-se de um só conjunto de matrizes de probabilidades de transição, que havia sido determinada experimentalmente na matriz transiograma em sua origem ($0 \leftarrow \Delta h$).

$$\lambda_i = \ln \theta_k(h)/h$$

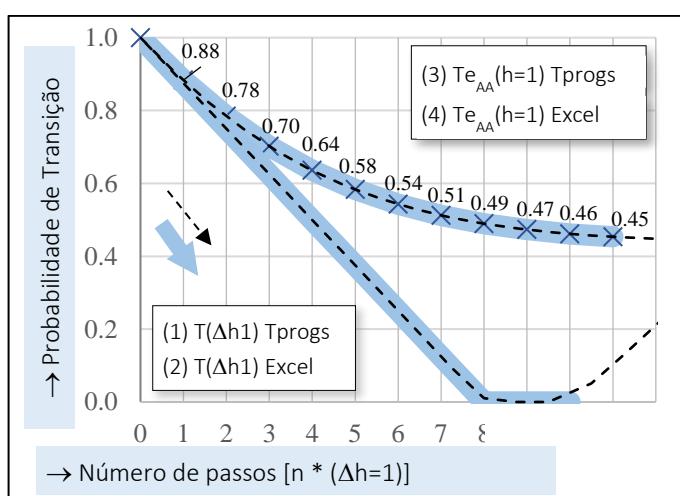
$$\theta_k(h) = \exp(\lambda_i h)$$

$$Re = \sum_{k=1}^K \frac{\ln \theta_k(h)}{\Delta h} Z_1 \quad \text{Equação 26}$$

$$Te(h) = \sum_{k=1}^K \theta_k(\Delta h)^{h/\Delta h} Z_1 \quad \text{Equação 27}$$

Figura 89: Equivalência entre λ e θ de $|R|$ e $|T|$

Recapitulando, já em termos do exemplo prático, como atesta o resultado da Figura 90:



- As curvas experimentais (1), (2) foram extraídas de GAMEAS, e MS-Excel (Equação 27):
- Curvas ajustadas (3), (4) apontam (presença / ausência) da litologia de interesse, seu limite máximo, e proporção / prob. marginal (p_j). Probabilidades contínuas (h).

Figura 90: Probabilidade de transição $\Gamma_{AA}(h)$

O transiograma de caminhamento $|\Gamma_{\text{e}}(h)|$ em termos nominais, é apresentado na Figura 91):

Dist.	n	Dist.	n	t_{AA}	t_{AB}	t_{AC}	t_{BA}	t_{BB}	t_{BC}	t_{CA}	t_{CB}	t_{CC}
$\Delta h = 0$		$\Delta h = 0$		100%	0%	0%	0%	100%	0%	0%	0%	100%
0.1 m	Excel	0,3 ft	Tprogs	96%	4%	0%	0%	95%	5%	7%	0%	93%
0.2 m		0,6 ft		93%	7%	0%	1%	91%	9%	13%	1%	86%
0.3 m	1	0,9 ft	3	89%	10%	1%	1%	86%	13%	19%	1%	80%
0.6 m	2	2,1 ft	7	78%	19%	3%	6%	71%	23%	36%	5%	60%
0.9 m	3	3 ft	10	70%	24%	5%	11%	62%	27%	43%	8%	49%
1.3 m	4	4,2 ft	14	62%	29%	9%	17%	53%	30%	49%	13%	38%
1.6 m	5	5,1 ft	17	58%	31%	11%	22%	47%	31%	51%	17%	32%
1.9 m	6	6,3 ft	21	53%	33%	14%	27%	42%	30%	52%	21%	27%
2.5 m	7	7,2 ft	24	51%	34%	15%	31%	39%	30%	52%	23%	25%
2.6 m	8	8,1 ft	27	49%	34%	17%	34%	37%	29%	52%	25%	23%
.
7.3 m	-	24 ft	78	44%	33%	22%	45%	33%	22%	45%	33%	22%
7.6 m	-	25 ft	82	44%	33%	22%	45%	33%	22%	44%	33%	22%

Figura 91 Probabilidades $\text{Te}(h)$ de apenas um transiograma na vertical (z), em números.

Comparar as probabilidades no passo $n = 0.1$, contra as mesmas na janela inicial unitária $\Delta h = 1$; sabendo-se que as distâncias Tprogs estão em polegadas (0.1 metro \cong 0.3 pés).

Deste ponto em diante, estimam-se probabilidades de transição entre dois eventos separados por qualquer distância, ou seja, a curva do transiograma que indicava as probabilidades entre pontos discretos - entre pontos separados pela distância ‘ Δh ’, assume agora um formato (teórico) contínuo, para qualquer combinação ‘ $\Delta h * n$ ’. Por exemplo: A probabilidade (t_{AA}) parte de 96% a 0,1 m, estabilizando a 49% a 2,6 m; enquanto as chances (t_{BC}) se estabilizam na metade deste comprimento (1.3 m).

B.1.1.f. Abordagens independente $|T(\Delta h)|$ versus condicionada $|P(h)|$

Em detalhe, verificam-se três transiogramas sobrepostos (Figura 92):

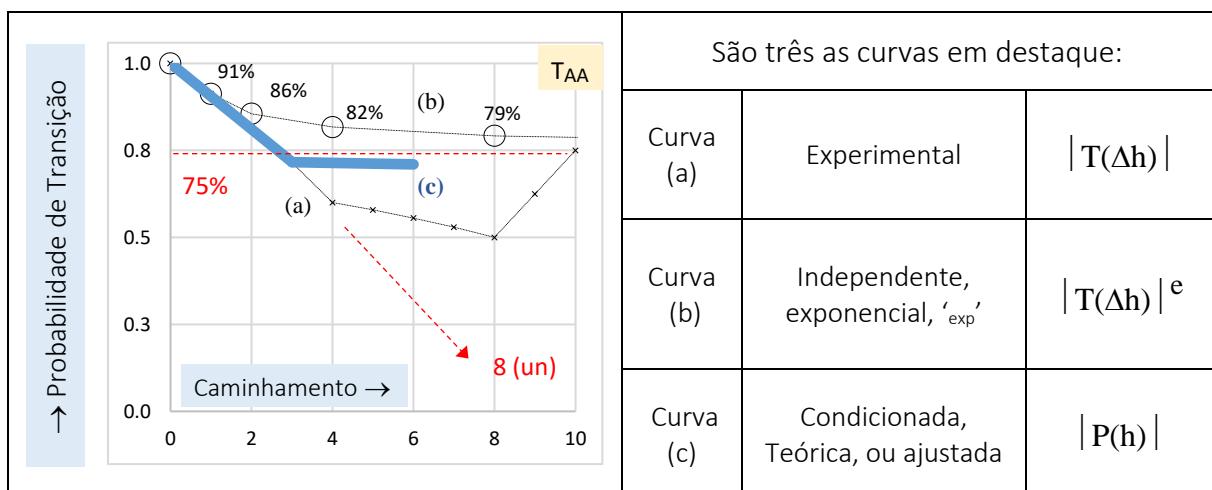


Figura 92: Curvas ajustada x experimental x potenciação (significado matemático)

Desta comparação (Figura 92):

- A curva experimental (a), que reflete a base de dados amostrada (GAMEAS);
- A curva independente (b), vem da potenciação direta da matriz $|T_{AB}|$ (Figura 82);
- E a curva condicionada (c), explícita, ou a passos contínuos $[P(h)]$, se apresenta como uma representação de como efetivamente pode se delinear como continuidade do fenômeno espacial sob análise, a qualquer distância de um ponto de referência.

B.3. Lei de Walther, inferências da direção z para o plano horizontal (x, y)

Do exemplo em discussão $(A_8B_6C_4)_3$ tomado repetidas vezes $A_8B_6C_4A_8B_6C_4A_8B_6C_4$ para melhorar a sustentação dos cálculos matemáticos; passa-se a uma nova relação espacial $([A_8B_6C_4]B_{20})_3$ com dois ciclos sobrepostos, de tal maneira a replicar a poços mais profundos - onde podem ocorrer (no espaço) sobreposição de sistemas sedimentares de características distintas (no tempo).

De GAMEAS, em [z] (Figura 93), o que em termos bastante simplificados ainda assim são factíveis como exemplo de sistemas naturais de acúmulo de depósitos sedimentares:

Ajuste (x) →		A	B	C	A	B	C	B		B		B		B		B		B		B	
↓ Poço (z)		p _j	L _{k, z}	TeI _z	A	B	C	A	B	C	X	p _j	L _{k, x}								
Z		32%	8	A	8	25%	75%	A	B	C	→	32%	80								
↓		51%	10	B	80%	10	20%	B	80%	10	→	51%	100								
↓		16%	4	C	0%	100%	4	C	0%	100%	→	16%	40								

Figura 93: Proporções (p_j) e comprimento ‘L_k’ de cadeias de Markov da direção ‘z’; Inferências de sua continuidade lateral com a adoção de coeficientes de Walther (Ω) na direção ‘x’

Proporções entre cada uma das litologias em relação às demais e seus respectivos comprimentos individuais (espessuras verticais médias A, B, C) são apresentados pelos índices ‘p_j(%)’ e ‘L_{k, z(m)}’.

Do transiograma vertical $|\Gamma_z (n = 1, 2, \dots, n)|$ deriva-se o transiograma horizontal $|\Gamma_x (n = 1, 2, \dots, n)|$ de comprimentos 10 vezes maiores que as espessuras originais em ‘z’ (Figura 94):

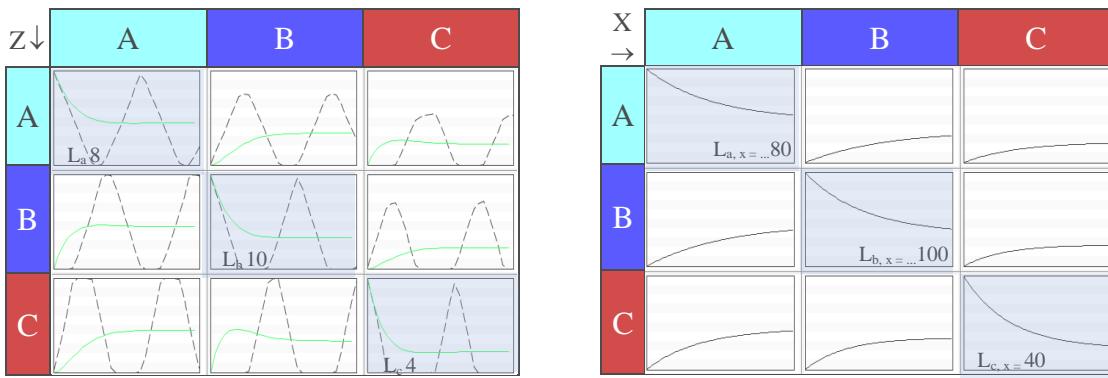


Figura 94: Trasiogramas experimental e ajustado $|\Gamma_Z|$; Trans. estimado $|\Gamma_X| = 10 |\Gamma_Z|$

Tal procedimento é embasado pela afirmação de que:

Horizontal juxtapositions provides information on vertical juxtaposition tendencies, and vice versa - Lei de Walther (Fogg et. al., 1998).

E ainda, quanto a seu funcionamento: O módulo MCMOD primeiro fixa a litologia preponderante como de fundo (*Background* $\Omega_j = 1$); a partir da qual calcula qualquer inferência ($\Omega_x \neq 1$ e $\Omega_y \neq 1$) alterando os demais índices da matriz original (Equação 28), em respeito às Equação 29 e 20.

$$\Omega_{A,x} = \frac{\bar{L}_{j,x}}{\bar{L}_{Background,z}}$$

Equação 28

$$\sum_{k=1}^K r_{jk} = 0 \quad (\text{linhas})$$

Equação 29

$$\sum_{k=1}^K p_j r_{jk} = 0 \quad (\text{colunas})$$

Equação 30

Observações:

- No exemplo da Figura 93, a janela de observação utilizada possui comprimento menor a menos espessas das litologias do sistema (poço) em pauta ($\Delta h < L[C4]$). Desta maneira enfatizou-se as relações internas do ciclo (A8B6C4)3 em detrimento do maior ciclo sobreposto ([A8B6C4] B20)3.
- Via de regra, o transiograma experimental de poços rasos não varia consideravelmente com a variação das janelas de observação Δh , o que facilita a implementação de projetos de pequena escala, que analisam formações sedimentares pertencentes a um mesmo ambiente sedimentar.

B.1.1.g. Módulo TSIM (co-krigagem / simulação indicadora sequencial)

TSIM executa uma primeira co-krigagem e imediatamente preenche, com a simulação indicadora sequencial (SIS), todo o bloco-diagrama previamente fracionado nas dimensões compatíveis de interesse, segundo as expectativas de heterogeneidades litológicas aplicáveis.

Os ponderadores necessários às interpolações espaciais vêm dos transiogramas MCMOD de cada direção (Z, X, Y). Na Figura 95, junto aos índices ponderadores espaciais dos transiogramas imbricados $|P_z(h)| P_x(h)|$, seguem 03 realizações equiprováveis:

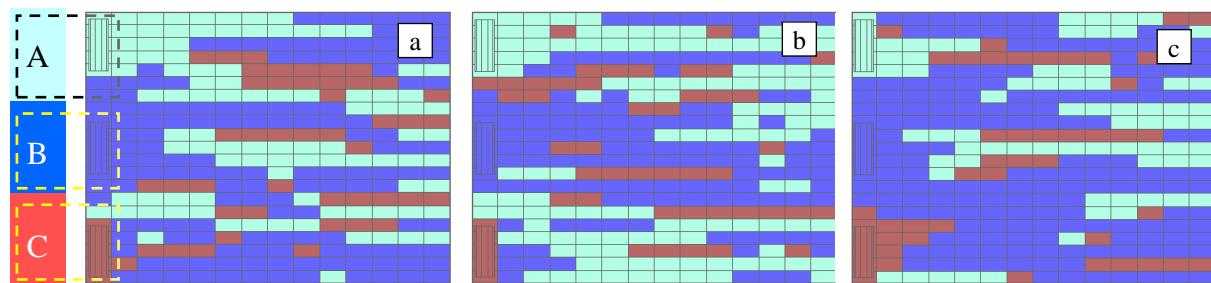


Figura 95: Detalhe horizontal de bloco-diagrama 2D interpolado a partir de eventos ABC.

Comparando-se resultados (a)(b)(c), nota-se que os maiores comprimentos L_{ABC} na direção horizontal ' $L_{k,x} = A_{80}B_{100}C_{40}$ ', ante às menores espessuras ' $L_{k,z}=A_8B_{10}C_4$ ' da vertical (z).

Como qualquer resultado dentre 'n' possíveis realizações equiprováveis TSIM, as 03 realizações da Figura 95, restritas aos padrões (ponderadores) captados pelos transiogramas possuem as mesmas chances de ser uma representação fidedigna da base de dados.

Em consequência, destacam-se quais seriam estas probabilidades, se fosse possível traçá-las em separado, como uma média de várias realizações (Figura 96). No detalhe, destaca-se que tais realizações foram condicionadas aos poços que ocorrem centralizados neta figura.

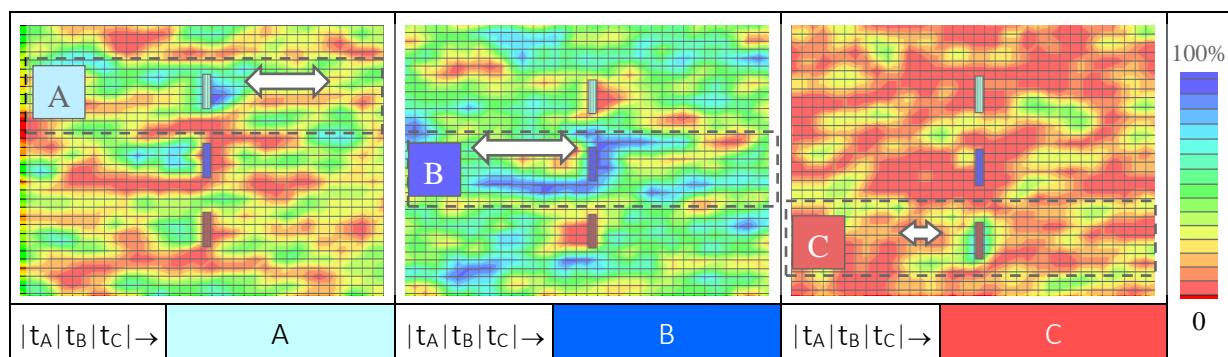


Figura 96: Compilação de [n] resultados de probabilidades em perfil 2D, evento por evento

Este segundo *layout* (Figura 96) aponta com maior clareza como o condicionamento “fixa” as fronteiras entre regiões estruturadas e demais regiões de interpolação semi-aleatória (Harbaugh & Carter, 1971), de preenchimentos que vão do azul (100%) ao vermelho (0%).

B.1.1.h. Resultados finais, conjuntos de blocos-diagrama estocásticos equiprováveis

Todo conteúdo deste capítulo foi apresentado em termos exclusivamente matemático-quantitativos, de relações estatísticas fictícias (*hard data*). O algoritmo Tprogs, porém, procura estabelecer um valor senão igual, talvez ainda maior ao significado das cadeias de Markov quando observados nas formações sedimentares reais, em bases de dados regionalizadas.

- Procura atribuir significados (*soft data*) aos dados observados (*hard data*);
- O imprescindível peso da interpretação (geológico-sedimentológico) é verificado quando se destacam os coeficientes de Walther na construção quantitativa de modelos conceituais antes apenas qualitativos, como nos exemplos conjuntos i e ii da Figura 97:

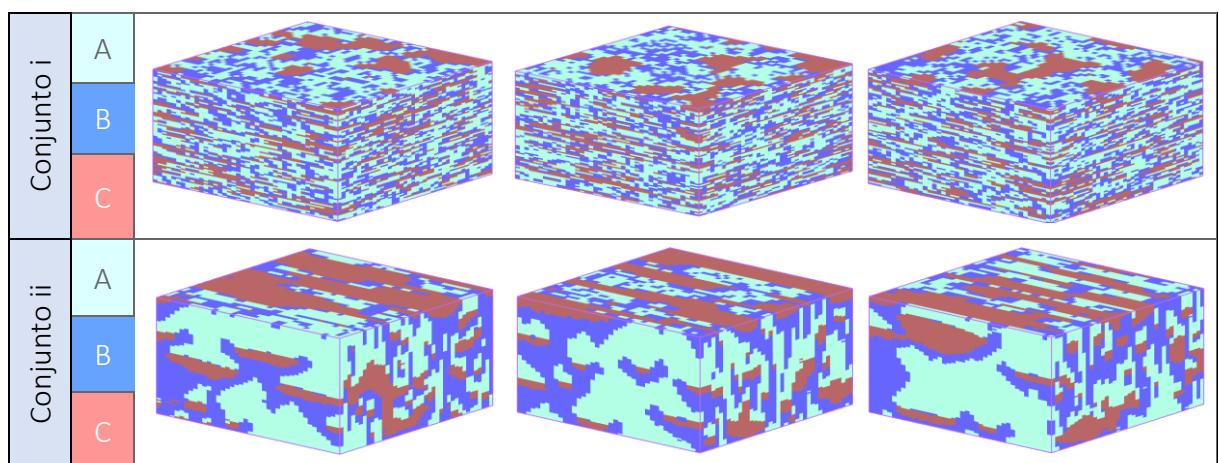


Figura 97: Conjuntos i e ii como resultados de duas interpretações distintas (*soft data*) da mesma base de dados (*hard data*).

De dois extremos coeficientes de Walther ‘ Ω ’, neste exemplo (Figura 97):

- Da Figura 97(i), um único padrão foi transposto para as direções $\Omega_z = \Omega_x = \Omega_y$;
- Da Figura 97 (ii), além da maior continuidade do evento ‘C’ na direção ‘x’, observam-se como as probabilidades imbricadas $|P(h)|$ tornam preponderante o condicionamento do evento ‘C’ às margens do evento ‘A’, como tendências de justaposição ($\Omega_z \neq \Omega_{xy}$).

Tendências de justaposição (Bayes) podem ter fortes implicações em modelos de fluxo, São encontradas em fenômenos sedimentológicos, como a granodecrescência ascendente.

B.1.1.i. Rotina de interpolação TSIM

Este trabalho não se prende à descrição das rotinas de co-krigagem TSIM, por se entender que o cerne do método Tprogs vem antes do entendimento e manipulação do transiograma $|\Gamma|T(h)|$ responsável pela definição dos índices ponderadores da simulação subsequente, do que dos mecanismos de funcionamento desta própria simulação / interpolações.

Ainda assim, sabe-se que suas interpolações utilizam a simulação indicadora sequencial (SIS), da conjugação de probabilidades normais ($j \rightarrow j$) e cruzadas ($j \rightarrow k$) de Markov, em processamento semelhante a interpolação multiponto (Yamamoto, 2003). Com destaque para a capacidade Tprogs de replicar fenômenos de justaposição, via probabilidades de transição condicionadas ou imbricadas $|P|$.

O módulo TSIM depende dos ponderadores espaciais W_j da krigagem clássica $|A| * |X| = |B|$ (Yamamoto & Landim, 2013), calculados a partir de distâncias cartesianas:

- Entre as litologias (eventos conhecidos) para montagem da matriz $|A|$;
- E entre distância de eventos conhecidos e o ponto central de cada unidade do bloco-diagrama (célula) previamente fracionado, a ser construída: matriz $|B|$;
- De $|A|$ e $|B|$, calcula-se a matriz $|X|$ de índices ponderadores W_j (Equação 31);

A simulação SIS em TSIM utiliza o mecanismo ‘*quenching interactions*’, pelo qual diferentes expectativas das três direções cartesianas são harmonizadas bloco-diagrama.

Segue (Equação 32) formulações matricial e analítica da rotina de cálculo / interpolação TSIM utilizado na co-krigagem (Yamamoto & Landim, 2013).

$$[A] * [X] = [B]$$

$$\begin{bmatrix} |T_{AA}(h)| & |T_{AB}(h)| & |T_{AC}(h)| \\ |T_{BA}(h)| & |T_{BB}(h)| & |T_{BC}(h)| \\ |T_{CA}(h)| & |T_{CB}(h)| & |T_{CC}(h)| \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} W_1 \\ \vdots \\ W_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |T_{AN}(h)| \\ |T_{BN}(h)| \\ |T_{CN}(h)| \end{bmatrix}$$

Equação 31

$$Pr = i_j \sum_{\alpha=1}^N \sum_{j=1}^K i_j(x_\alpha) w_{jk,\alpha}$$

Equação 32

ANEXO C. CLASSIFICAÇÃO DE DEPÓSITOS SEDIMENTARES

C.1. Escalas de observação

Na sedimentologia uma sucessão estratigráfica, em camadas independentes e espessuras variadas, representa o lapso temporal necessário à acumulação de seus depósitos. Pacotes de dados de diferentes dimensões refletirão um possível fenômeno deposicional para cada escala de observação empregada. O grande desafio de qualquer técnica de interpolação vem a ser como comparar eventos dispersos em até 12 ordens de magnitude (Miall, 2000). Na prática:

"Time scale selection largely determines the questions we can ask" (Hickin. 1983).

A Figura 98 aponta sistemas da maior para a menor escala de observação (Miall, 2014):

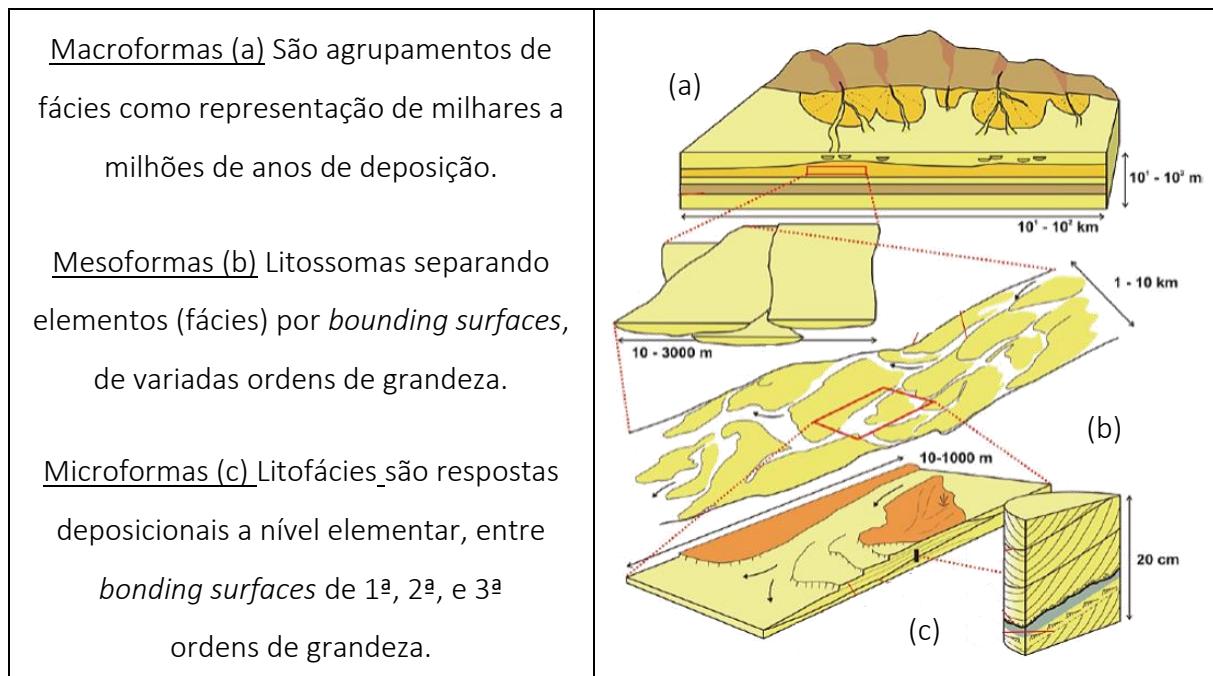


Figura 98: Hierarquia de sistemas deposicionais (Adaptado de Miall, 2014)

Em ordem de crescimento hierárquico, formas de leito possuem grandeza em 'cm²'. Sistemas deposicionais sobrepostos são capazes de preencher toda uma bacia sedimentar, alcançando dimensões na ordem de até 100 km² (Miall, 1996). E sequências de litofácies (Figura 98c) podem ser interpretadas em conjunto (*a coset*). Agrupadas, passam representar um litossoma / ou uma fácie na escala de mesoforma (Figura 98 b). Conjuntos de fácies passam à maiores ordens como membros de uma formação de macroformas (Figura 98 a).

De centimétricas à quilométricas, associações de fácies em escala regional possuem gênese relacionada à fenômenos de deposição distintos. Diferentes razões de deposição e sua recorrência variam também em função de sucessivos períodos erosivos e ou de não deposição.

C.2. Estratégias de classificação

Uma primeira análise granulométrica em microescala define as litofácies em três unidades, são os conjuntos de litofácies: pelíticas $< 0,062\text{mm}$ < arenáceas $< 2\text{mm}$ < rudáceas. Tratam-se de sedimentos grossos na forma de cascalho e conglomerados; sedimentos médios ou arenosos; e sedimentos finos, tais como as argilas, siltes e areia mais finas ou selecionadas.

Em maior detalhe, a disposição de física e geometria de grãos, usualmente classificadas por técnicas visuais ou por microscopia ótica, também pode ser interpretada por suas estruturas deposicionais (Figura 99), tais como as formas de acamamento e imbricação (tramas).

Litofácies - Pelíticas	
Fm	- Lamito arenoso maciço
Fsm	- Siltito grosso com laminação cruzada planar
Litofácies - Areníticas	
Sr	- Arenito laminado, de estratificação cruzada
Sh	- Arenito com estratificação cruzada acanalada
St	- Arenito c/ laminação cruzada, festonada, dunas sub-aquosas 3D
Sp	- Arenito planar, com laminação cruzada 15º a 35º, marcas 2D
Litofácies - Rudáceas	
Gt	- Conglomerado com estruturas acanaladas
Gm	- Conglomerado clasto-suportado maciço

Figura 99: Caracterização de litofácies (em microescala) e superfícies de 1ª, 2ª, e 3ª ordens.

Com o avanço das observações na direção vertical, em mesoescala, à medida que novas informações são acrescentadas às anteriores, recorre-se à classificação por elementos arquitetônicos (Miall, 2000).

Observações à nível de afloramento são então adicionadas para se caracterizar dados descritos antes apenas na vertical. Com as informações tomadas para nas direções horizontais, montam seções tipo. A Figura 100 apresenta um litossoma fácies de canal escavado em um substrato precedente (embasamento ou depósitos de sedimentos mais antigos). Neste contexto é comum a observação de diferentes estruturas internas de deposição, tais como as fácies de planície de inundação, fácies dique lateral, e demais subdivisões (Tabela 14).

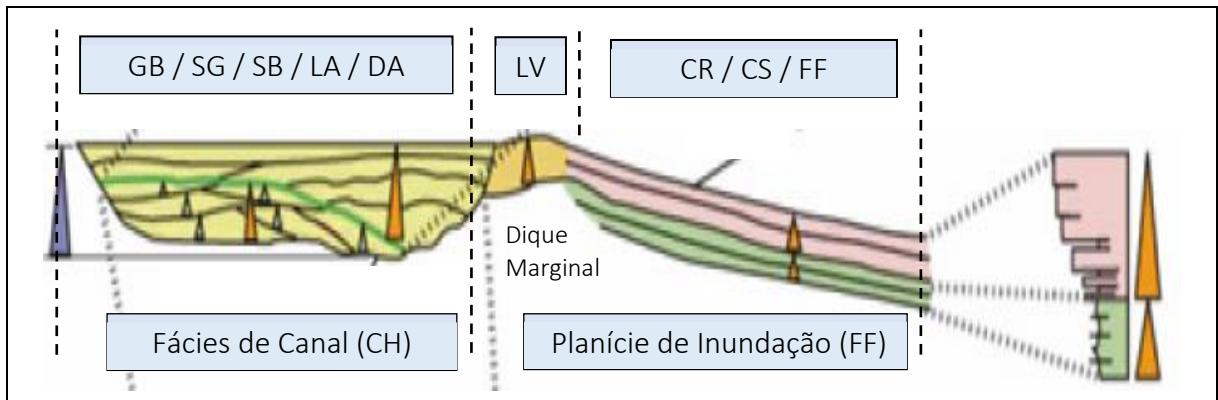


Figura 100: Elementos arquitetônicos de um sistema fluvial (Kendall, 2008, Apud Miall, 2014)

Tabela 14: Litossomas de 3^a, 4^a e 5^a ordens de grandeza (mesoescala).

Litosomas CH	Fácies de canal (<i>channels</i>)	Litossomas FF	Planícies de inundação (<i>overbank deposits</i>)
GB	Fundo de canal (<i>gravel beds</i>) -CH	LV	Diques marginais (<i>levee deposits</i>)
SG	Detritos de fluxo gravitacional - CH	CR	Depósitos de crevassa (de canal)
SB	Canais arenosos (<i>sand bars</i>)	CS	Depósitos de crevassa (<i>splays</i>)
LA	Depósitos de acreção lateral	FF	Depósitos finos (<i>floodplain fines</i>)
DA	Depósitos acreção vert. (<i>downstream</i>)	HO	Escavamento / preenchimento (<i>hollow</i>)

C.3. Hierarquias, arquitetura deposicional e *bounding surfaces*

Por definição pacotes de dados (discretos) são considerados como de um mesmo ciclo sedimentar quando separados acima e abaixo por superfícies de erosão ou de não deposição, de crescente continuidade lateral, na forma de *bounding surfaces* (Miall, 1988a).

O conceito de *bounding surfaces* procura hierarquizar depósitos sedimentares em relação à sua extensão física ou em específico, sua continuidade lateral. A Figura 101 compara diferentes tipos de estruturas sedimentares a partir de uma sequência 1 a 6 ordens de magnitude:

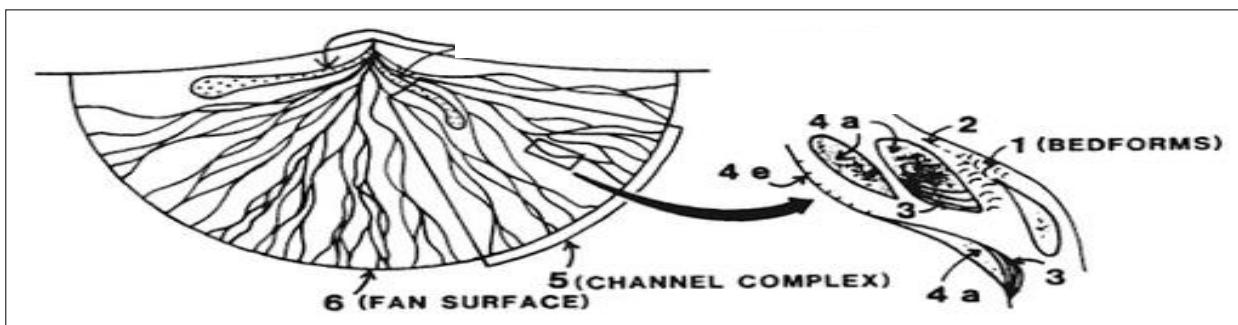


Figura 101: Hierarquia de litossomas e *bounding surfaces* (adaptado de Miall, 1996)

Em perfil de seção transversal 2D (Figura 102), as estruturas podem ser hierarquizadas segundo concretos argumentos sedimentológicos, capazes de certificar interpretações de materiais pertencentes a um mesmo ciclo ou período de deposição (Allen, 1963; Crowley, 1983).

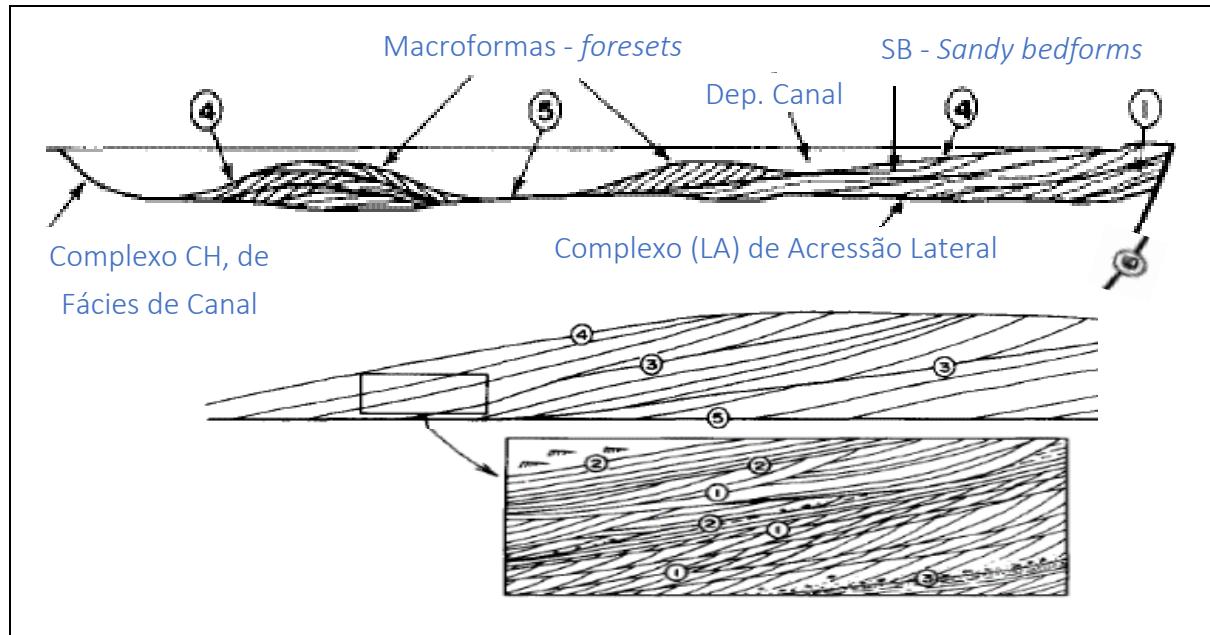


Figura 102: Hierarquia entre escalas de *bounding surfaces* (adaptado de Miall, 1996)

Bounding surfaces de menores (<) ordens de magnitude apresentam-se como litofácies, por exemplo, de formas de leito de sedimentação virtualmente contínua (canais ou camadas de planícies de inundação), contendo estruturas sedimentares similares de estratos horizontais geneticamente relacionados, como originários de um mesmo evento deposicional.

Conjuntos de litofácies semelhantes ‘*a cosets*’ de repetições em conteúdo, distribuição granulométrica e geometria começam a se delinear como litossomas (fácies) de maior ordem de grandeza, onde pouco ou nenhum truncamento é verificado como evidência de processos erosivos. Desta forma, observa-se que houveram poucas variações na mudança nas condições de fluxo (normalmente de suas direções), porém a intervalos de tempo pouco significativos;

Bounding surfaces de 3a ordem de magnitude encarregam-se então de dividir litossomas de constituição perceptivelmente diferentes, de estratos inclinados ou mais estruturados (maior extensão lateral), como incrementos de macroformas a exemplo dos depósitos de acreção lateral (Figura 103a) e depósitos de acreção vertical (Figura 103b).

Qualquer nova subdivisão entre escalas de classificação (litossomas, fácies e subfácies de 4^a, 5^a ordens), separadas por *bounding surfaces* de crescentes continuidades laterais são discerníveis apenas por métodos laterais de caracterização (Godin, 1989).

C.4. Estruturas de fácies de canais e de planície

Da classificação morfodinâmica, em maior detalhe pode-se observar:

Tabela 15: Nomenclatura padrão de litofácies de sistemas fluviais:

Classificação:	1 - <i>Channel facies</i> (CH)	2 - <i>Overbank facies</i>
1 - <i>Channel facies</i> (CH) a) <i>Gravel beds</i> (GB) b) <i>Gravity flow</i> (SG) 2 - <i>Overbank facies</i>	1.1 - <i>Sand bedforms</i> (SB) 1.1.1 - <i>Lateral accretion</i> (LA) e <i>Downstream accretion</i> (DA) 1.2 - <i>Laminated sand</i> (LS)	2.1 - Diques marginais (LR) (<i>Levee deposits</i>) 2.2 - Depósitos de crevassa 2.3 - <i>Floodplain fines</i> (FF)

I - Fácies de canal (litossomas *channel facies* - CH) - Côncavas para cima e separadas por superfícies de 3^a ou 4^a ordem, são estruturas de fluxo interno, e de canais amalgamados, (Miall, 1996). Primeiro escavados na rocha ou substrato precedente, a base dos sedimentos acumulados por posterior preenchimento pode apresentar marcas de erosão de base (marcas de sola) como cicatrizes por abrasão de transporte de seixos '*basal scours*'. Seu reconhecimento depende da habilidade de se verificar as fronteiras entre um canal e superfícies vizinhas (um dique marginal, por exemplo) e pelos contrastes entre formações de baixo e alto ângulo de deposição. O Litossoma '*gravity flow SG*', pertence a depósitos derivados de fluidos de elevada concentração de sedimentos. Como unidade de classificação, de depósitos individuais de formas alongadas que raramente ultrapassam 3m de comprimento e 0.5 a 3 m de espessura. Unidades de fluxo formadas pelo empilhamento de depósitos (areia) podem, em rios caudalosos, chegarem a 20m de espessura e alguns quilômetros de extensão na direção do fluxo.

Ia) - Litossomas *gravel beds* (GB) - Litofácies, Gh, Gp, Gt, são formadas em condições abruptas de transporte (fluxo de massa), com seus depósitos tendendo a se tornar progressivamente menos grossos a jusante. Movidos por correntes de tração (Miall, 1996), transportes mais massivos como nas raras corridas de lama derivam-se de chuvas excepcionalmente torrenciais, encharcamento e liquefação de solos nos sopés de montanha.

1.1 - *Sand bedforms* (SB) - Ambiente deposicional com predomínio de agradação vertical, tendo sua estrutura relacionada a mudanças de regimes de fluxo. Alternância de litofácies St (2D) e Sp (3D) são frequentes, assim como litofácies Sp (planar), Sr (marcas de laminação cruzada – '*ripple marks*' e Fl (de laminação fina), formando lâminas de no máximo alguns metros de espessura, porém passando de dezenas a centenas de metros de comprimento. São normalmente cortadas por superfícies '*bounding surfaces* de 2^a e 3^a ordens de magnitude.

1.1.1 - Lateral / downstream accretion (LA/DA) - Muito comuns em rios entrelaçados / anastomosados ‘braided rivers’, depósitos de canal, de acreção lateral ou frontal (no sentido do fluxo), litossomas LA/DA são formados por processos essencialmente diferentes, porém cujos processos resultam em estruturas similares ao ponto de se permitir uma classificação conjunta, pelo menos no que concerne à delimitação de estruturas de fluxo contra aquelas de armazenamento.

Fácies DA (Figura 103a) normalmente mergulham gentilmente a ângulos menores de 10°, com destaque para as litofácies planas (Sh e Sl), e apresentam-se com estratificação cruzada (sigmoide) acanaladas em ambas suas terminações (*epsilon crossbedding*), ou estratificação de bases tangenciais. Também comumente marcadas por pequenos canais, assim como cicatrizes de períodos mais secos, são perpendiculares à direção do paleofluxo. Sendo seu preenchimento final de espessura próxima da profundidade de seu paleocanal de origem.

Fácies LA (Figura 103b) formam-se por acreções de maior ângulo (até 25° em rios meandrantes de carga suspensa), com grau de mergulho variando de acordo com a relação comprimento / profundidade (*w/d ratio*) do paleocanal de origem, sendo diferentes declividades entre litofácies (sets) de um conjunto maior (*cosets*) variando em função da energia presente em eventos de descarga e a evolução de um meandro. São geradas pelos padrões helicoidais de fluxo, e seus depósitos mergulham paralelamente (Figura 104) à direção do curso d’água.

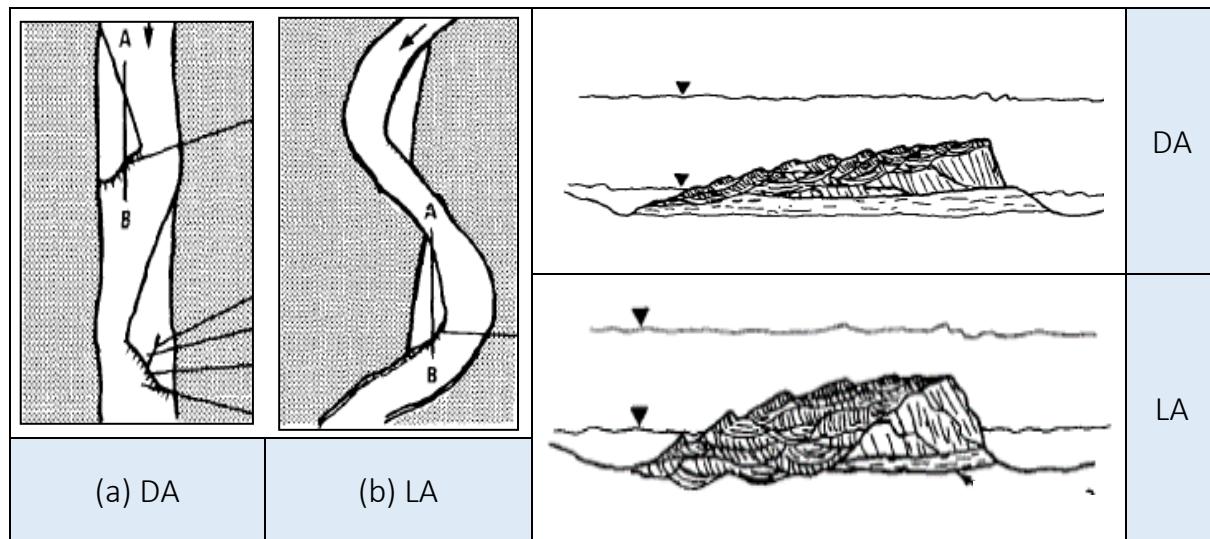


Figura 103: Comparação de fácies de acreção lateral / a jusante (Crowley, 1983)

É também necessária uma análise de paleocorrentes para definitivamente propor as chances de os elementos LA / DA pertencerem a uma ou outra classificação (Figura 104).

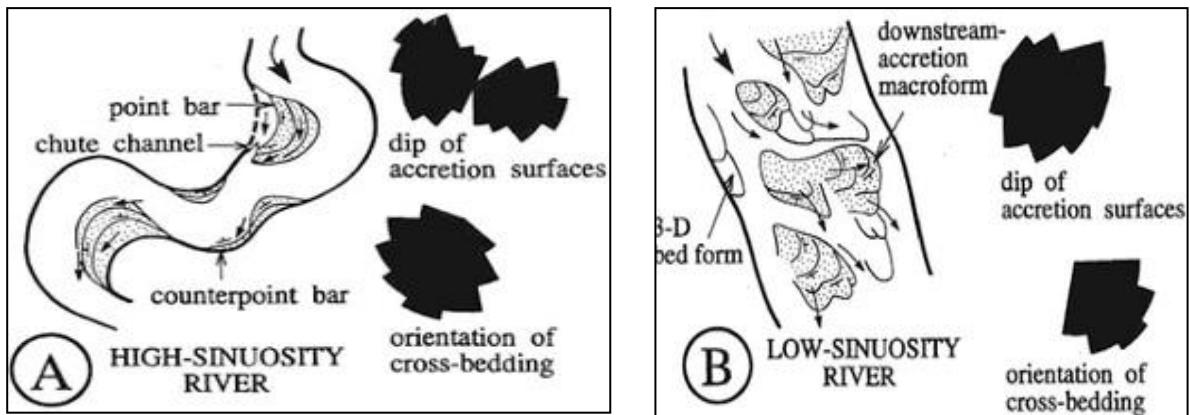


Figura 104: Orientações preferenciais de mergulho de fácie (A) LA; (B) DA. (Adaptado de Miall, 2000)

Uma vez encontradas as fácieis LA, a comparação de suas ocorrências dentro de um mesmo perfil vertical torna então possível o estabelecimento de relações quanto a variação ou evolução da sinuosidade de um curso d'água ao longo do tempo geológico. - Fácieis de planície de inundação ‘overbank facies’ ocorrem então separadas em três tipos: Dique Marginais; depósitos de crevassa; E os propriamente ditos Terraços Aluviais (*floodplain fines - FF*).

1.2. Laminated sand (LS) - Estrutura de significativa variação junto ao precedente litossoma (SB), associada a rios efêmeros e ambientes áridos, de solos desprotegidos, acossados por tempestades de elevada performance e capacidade de promover rápidas enchentes (*flash floods*), nas quais a elevação do regime de fluxo (nº de Froid: $Fr > 1$) promove condições fortes o suficiente para o retorno de deposições planares. Neste caso, além das anteriores características litofácieis (Sp, St, Sr) são também encontradas as litofácieis (Sh, Sl). Acrescenta-se que um decaimento rápido e sequencial de litofácieis arenosas para outras de conteúdo mais fino é perceptivelmente verificado. E voltando às fácieis planícies de inundação ‘overbank facies’

2.1. Depósitos de diques marginais (LR) - *Levee deposits* destacam-se como pequenas elevações às bordas dos canais, ocorrendo à maneira dos depósitos de acreção lateral (LA), porém a baixo mergulho, de disposição perpendicular ou obliqua às margens dos canais. Destacam-se litofácieis silto-arenosas de estrutura laminar ou de laminação cruzada, com apenas alguns centímetros de espessura e evoluindo rapidamente das maiores para as menores classes granulométricas devido à rápida deposição imposta pela vegetação ciliar atuando como consideráveis obstáculos no caminho da água para fora de um canal ‘velocity buff’. Nestes depósitos são comuns as biotubulações, como as marcas de raízes.

2.2. Depósitos de crevassa (CR, CL) - Como variações significativas das fácieis de canais (CH), destacam-se as fácieis depósitos de crevassa, formadas pelo extravasamento do fluxo para fora das bordas de um canal principal, na forma de pequenos canais de contribuição

‘crevasse splays - CS’ ou facilitando menores volumes de escoamento ao apenas dispor cargas de sedimentos de forma planar e reduzida extensão ‘crevasse sheets – CL’, muitas vezes descritas como pequenas asas ‘wings’, gradando para litossomas FF, de sedimentos finos Fm, Fl.

Como estruturas de 3^a ordem, sua origem também está associada aos característicos de rios entrelaçados / anastomosados ‘braided rivers’, o que se justifica pensando-se no rompimento das bordas de um canal ‘crevassing’ como um processo de compensação pela falta de espaço, ora ocupado pela precedente agradação de canais, assoreados depósitos LA/DA.

2.3. Depósitos de finos (floodplain fines, FF) - Excetuando-se ambientes de rios entrelaçados ‘braided rivers’ dos vales mais estreitos, está uma última variação de litofácies (terraços aluviais mais finos) de granulometria pelítica (lamitos e siltitos), são responsáveis pelo preenchimento das maiores partes das planícies aluviais, e, portanto, sua maior proporção em volume.

Tratam-se de depósitos de constituição tanto mais fina quanto mais distantes dos cursos d’água se encontram, dada sua origem como sedimentos originalmente em suspensão, capazes de sobrepujar subsequentes obstáculos contra seu deslocamento, logo após elevarem-se acima dos diques marginais (*levees*) em períodos de elevação fluvial da linha d’água.

E uma variação FF → FF(CH) - refere-se ainda a canais abandonados de forma alongada ‘oxbows lakes’, assim como os depósitos de ambientes lacustres, formados pelo preenchimento constante de antigos percursos fluviais. Demandam, porém, extensos períodos de tempo para seu total preenchimento, em comparação aos simples depósitos de canais (CH).

Relativo ao item Escalas de Heterogeneidade, quanto à sua classificação geomorfológica, os cursos d’água pode ser divididos pelo parâmetro de entrelaçamento (Tabela 16 - Rust, 1978a).

Tabela 16: Parâmetros de entrelaçamento de ambientes fluviais

Sinuosidade	Canais simples	Canais múltiplos
Baixa	Reto	Entrelaçado
Alta	Meandrante	Anastomosado

C.5. Tendências de justaposição de hidrofácies

Sistemas de leques aluviais (Figura 105) como reflexo de pulsos de escorregamento influenciados por tempestades, assim como de reacomodamentos tectônicos capazes de formar depósitos de profundidade proporcional à declividade de terrenos onde se originam seus materiais, apresentam extensas homogeneidade e continuidade laterais, da coalescência de leques vizinhos, na forma de depósitos de tipo *playa lake* (Schumm, 1977, Apud Leeder, 2011).

A Figura 105 apresenta uma marcante diferença entre os depósitos de planícies aluviais e a presente, expedita descrição de depósitos de sistemas de leques aluviais.

Depósitos de planícies aluviais costumam apresentar marcantes manifestação de eventos cíclicos, com intercalação entre camadas de mais grossas na base e gradativamente mais finas no topo, originárias de variações sazonais e transporte seletivo de sedimentos pesados em condições climáticas úmidas, seguidos por siltes e argilas, de granodecrescência ascendente.

Sistemas de leques aluviais, em contrapartida, apresentam estruturas sedimentares de menor escala, [de aquoso] hiper-concentrado de sedimentos (Blair and McPherson 1994, Apud Leeder, 2011) ou de escorregamentos de massa (fluxo seco). Tratam-se das estruturas sedimentares atreladas a instabilidade tectônica, como granocrescência ascendente.

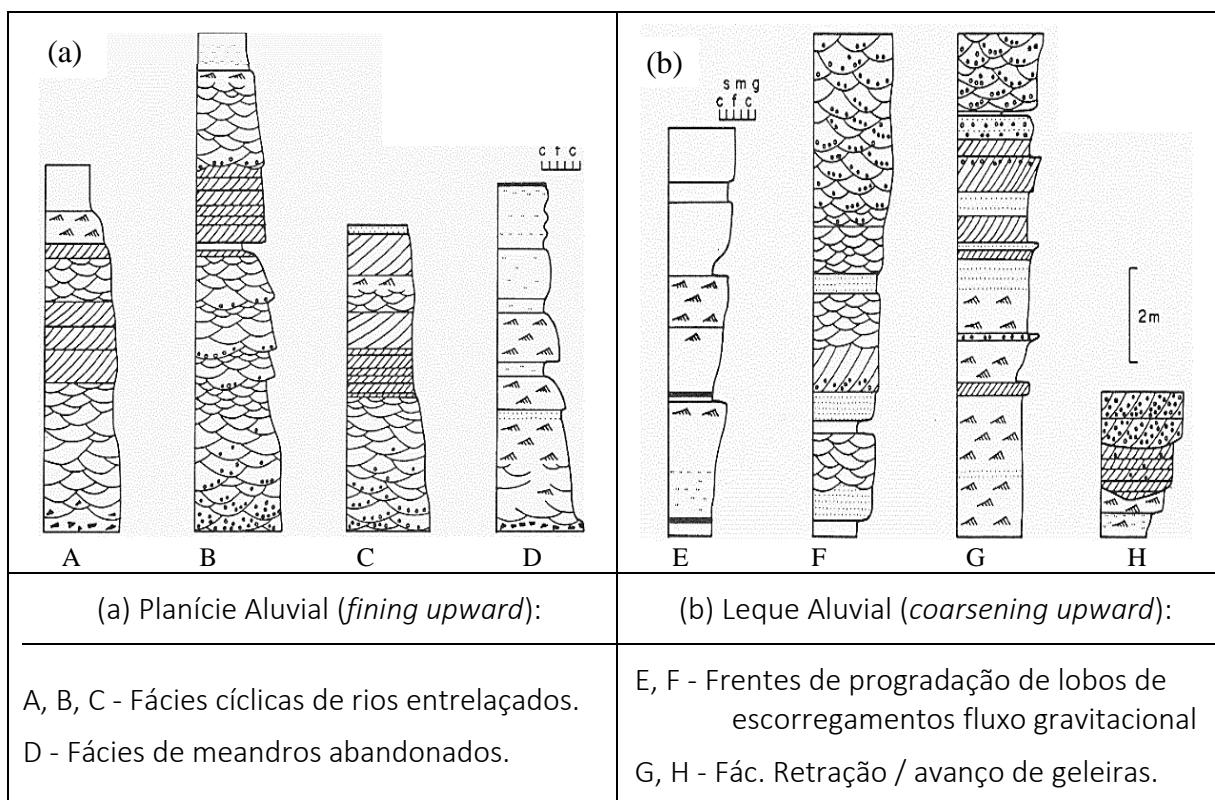


Figura 105: (a) Granodecrescência ascendente; (b) Granocrescência ascendente (Miall, 1981)