



Bernardo Leopardi Gonçalves Barretto Bastos

**Quantificação de incertezas em procedimento de
avaliação de risco devido à contaminação em água
subterrânea**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Ciências.

Orientador: Prof. Tácio Mauro Pereira de Campos.
Co-Orientadores: Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Júnior e Prof. Manoel de Melo Maia Nobre.

**Rio de Janeiro
Setembro de 2005**

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.



Bernardo Leopardi Gonçalves Barretto Bastos

**Quantificação de incertezas em procedimento de
avaliação de risco devido à contaminação em água
subterrânea**

Dissertação apresentada como requisito parcial para
obtenção do grau de Mestre em Ciências pelo Programa
de Pós-graduação em Engenharia Civil da PUC-Rio.
Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Tácio Mauro Pereira de Campos

Orientador
Puc-Rio

Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Júnior

Co-Orientador
Puc-Rio

Prof. Manoel de Melo Maia Nobre

Co-Orientador
UFAL

Dorothy Carmen Pinatti Casarini

CETESB

Profa. Ana Cristina Malheiros Gonçalves Carvalho

PUC-Rio

Rio de Janeiro, 23 de setembro de 2005

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização do autor, do orientador e da universidade.

Bernardo Leopardi Gonçalves Barretto Bastos

Graduou-se em Engenharia Civil pela UFAL (Universidade Federal de Alagoas) e em Direito pelo CESMAC (Centro de Estudos Superiores de Maceió) em 2002. Atua nas áreas de engenharia ambiental, geotecnia ambiental, direito ambiental, modelagem matemática, transporte em meios porosos. Participa de estudos de modelagem matemática de dispersão atmosférica e de águas subterrâneas, identificação, remediação e monitoramento de áreas contaminadas e condução de análises de risco. Atua como advogado forense e parecerista nas áreas cível, administrativa e ambiental.

Ficha Catalográfica

Bastos, Bernardo Leopardi Gonçalves Barretto

Quantificação de incertezas em procedimento de avaliação de risco devido à contaminação em água subterrânea / Bernardo Leopardi Gonçalves Barretto Bastos ; orientadores: Tácio Mauro Pereira de Campos, Eurípedes do Amaral Vargas Júnior, Manoel de Melo Maia Nobre. – Rio de Janeiro : PUC, Departamento de Engenharia Civil, 2005.

214 f. ; 30 cm

Dissertação (mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Civil

Inclui bibliografia

1. Engenharia civil – Teses. 2. Geotecnia ambiental. 3. Engenharia ambiental. 4. Contaminação. 5. Águas subterrâneas. 6. Solo. 7. Análise de risco. 8. Direito ambiental. 9. Gestão ambiental. I. Campos, Tácio Mauro Pereira de. II. Vargas Júnior, Eurípedes do Amaral. III. Nobre, Manoel de Melo Maia. IV. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Civil. V. Título.

CDD: 624

Agradecimentos

Agradeço ao apoio familiar. Aos meus pais, que, sendo o exemplo que são, tacitamente me encorajaram no mundo acadêmico.

À Daniella Omena pelo apoio e paciência além da inestimável contribuição na revisão dos conceitos jurídicos.

Aos meus orientadores, não só pelo sólido suporte acadêmico, mas também pela ampla acessibilidade e pela valiosa confiança em mim depositada acreditando sempre no resultado do trabalho; pessoas de elevados valores com quem tive a grata oportunidade de trabalhar e conviver.

Especificamente: Ao Prof. Manoel Maia Nobre que primeiro me apresentou à Geotecnia Ambiental ainda na graduação e por fazer a ponte com a PUC-Rio, bem como pelas valiosas lições e decisivas orientações desde a definição do objeto de estudo até a condução e conclusão do trabalho; Ao Prof. Tácio de Campos, sempre certificando que todo conceito mais avançado esteja embasado em conceitos básicos bem sedimentados; Ao Prof. Eurípedes Vargas, âncora para todo o aprofundamento matemático e computacional e de cujas orientações sempre conduziram a um aprimoramento eficaz do trabalho.

Aos demais professores e funcionários do programa de pós-graduação em engenharia civil da PUC-Rio pelo excelente ambiente acadêmico.

À Prof. Rosane Maia Nobre pelas pertinentes observações e indicações de leitura que em muito contribuíram para a revisão bibliográfica.

Agradeço ao meu pai, Prof. Jenner Barretto Bastos Filho, agora em atenção a contribuições específicas em relação às questões epistemológicas relacionadas à transdisciplinariedade, complexidade e reducionismo. À minha mãe, Prof. Graça Leopardi Gonçalves pelas contribuições específicas que

possibilitaram o entendimento dos conceitos toxicológicos e dos modelos fármaco-cinéticos.

Agradeço ao apoio financeiro prestado pelas seguintes instituições: Faperj, CNPq, PUC-Rio e UFAL.

Agradeço ainda ao material gentilmente cedido pelo Prof. William Kastemberg (Berkley) bem como por suas sugestões de leitura. Somos gratos ainda à indicação do Prof. Gour-Tsyh Yeh (Florida University) fundamental para o entendimento de seu modelo AT123D.

Ao amigo e colega Ricardo Moreira pela inestimável ajuda tanto nos estudos quanto na resolução de questões burocráticas, muitas das quais foram um verdadeiro teste à sua paciência e amizade.

Ao apoio e disponibilidade dos amigos e colegas Fábio Brant e Jocelene Pacheco que se prontificaram a socorrer-me em momentos em que estive ausente da cidade.

Agradeço ainda ao carinhoso acolhimento dos amigos Waldemar Oliveira, Alzira Moreira, e Marilice Vidal nos meus primeiros dias nesta cidade.

À Danusa Souza pelos desenhos mais elaborados.

Resumo

Bastos, Bernardo Leopardi Gonçalves Barretto; De Campos, Tácio Mauro Pereira; Vargas Júnior, Eurípedes do Amaral; Nobre, Manoel de Melo Maia. **Quantificação de incertezas em procedimento de avaliação de risco devido à contaminação em água subterrânea.** Rio de Janeiro, 2005. 214p. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

A análise quantitativa de risco à saúde humana (*AqR*) devido a uma determinada área contaminada vem se verificando como importante ferramenta na gestão ambiental bem como a concretização de dano ambiental, tanto no Brasil como em outros países. Os procedimentos para *AqR* consistem em passos seqüenciados de forma orgânica e lógica e englobam características legais, aspectos toxicológicos e mecanismos de transporte. Apesar de não haver uma lei específica que regule a *AqR*, o Direito Ambiental permite que estas metodologias sejam plenamente aplicadas tanto no âmbito administrativo quanto no âmbito judicial para a caracterização de dano ambiental. As metodologias de *AqR* se valem de modelos fármaco-cinéticos que relacionam a exposição ao composto químico à possibilidade de causar danos à saúde humana. A Geotecnia Ambiental estuda o transporte e comportamento dos contaminantes nos solos e nas águas subterrâneas. A *AqR* se mostra um problema complexo e permeado por inúmeras incertezas e variabilidades. Foi proposta a utilização do método do segundo momento de primeira ordem (FOSM) para quantificar as incertezas relacionadas com a estimativa dos parâmetros de transporte a serem usadas em um modelo analítico de transporte de soluto em meios porosos (Domenico). O estudo de caso consiste na aplicação do programa desenvolvido para esta finalidade (SeRis). O método se mostra computacionalmente econômico e o estudo de caso, dentro das idealizações, identificou os parâmetros com maior importância relativa e apresentou uma variância total razoável para o resultado.

Palavras-chave

Geotecnia ambiental, engenharia ambiental, contaminação, águas subterrâneas, solo, análise de risco, direito ambiental, gestão ambiental.

Abstract

Bastos, Bernardo Leopardi Gonçalves Barretto; De Campos, Tácio Mauro Pereira (Advisor); Vargas Júnior, Eurípedes do Amaral (Co-Advisor); Nobre, Manoel de Melo Maia (Co-Advisor). **Uncertainty quantification at risk assessment procedure due contaminated groundwater.** Rio de Janeiro, 2005. 214p. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

The quantitative human health risk assessment (*AqR*) due a contaminated site has become an important tool at Environmental Management and at the identification of environmental harm, at Brazil and other countries. The *AqR* procedures consists in logical sequence of actions concerned about legal aspects, toxicological matter and transport phenomena. In spite of the absence of a single law that could regulate specifically the *AqR*, the Environmental Law, as a whole, allows that *AqR* methodologies to be fully applied at governamental and judicial levels. The *AqR* procedures are base on pharmaco-kinetics models that quantitatively relates the exposure to the chemicals to human harm potency. The Environmental Geotechnics studies the fate and transport of contaminants at soil and groundwater. *AqR* is complex and full of uncertainties and variabilities subject. It have been proposed the application of the first order second moment method (FOSM) to quantify the uncertainties related to the estimation of the transport parameters to be used in the analytical transport model of solute in porous media (Domenico). It have been developed a specific software that meets this objective (SeRis). This software proved to be computationally efficient. The case study example indicated the relative importance of the considered parameters and presented a reasonable total system variance.

Keywords

Environmental engineering, contamination, groundwater, soil, risk assessment, environmental law, environmental management.

Sumário

Introdução	16
1 . Avaliação de risco	21
1.1. Gestão ambiental	21
1.1.1. Gestão ambiental em sentido amplo	21
1.1.2. Gerenciamento ambiental de áreas contaminadas	23
1.2. Definição	25
1.2.1. Risco de fundo, risco incremental e risco total	26
1.2.2. Avaliação de risco ambiental	27
1.3. Procedimento para avaliação de risco	30
1.3.1. Identificação do perigo, obtenção e validação de dados	33
1.3.2. Avaliação das exposições	35
1.3.3. Avaliação da toxicidade	40
1.3.4. Caracterização do risco	43
1.3.5. Estabelecimento de metas de remediação	46
1.4. Metodologia RBCA	46
2 . Análise de risco no ordenamento jurídico brasileiro	49
2.1. Tratamento jurídico da <i>AqR</i>	49
2.2. Princípios do direito ambiental	51
2.2.1. Princípio do acesso eqüitativo aos recursos naturais	52
2.2.2. Princípio do direito fundamental à qualidade do meio ambiente	53
2.2.3. Princípio do caráter público dos bens ambientais	54
2.2.4. Princípio da prevenção	55
2.2.5. Princípio da precaução	56
2.2.6. Princípio da exigibilidade do estudo prévio de impacto ambiental	62
2.2.7. Princípio do desenvolvimento sustentável	62
2.2.8. Princípio da proteção da biodiversidade	63
2.2.9. Princípio da defesa do meio ambiente	63
2.2.10. Princípio do usuário-pagador e do poluidor-pagador	64
2.2.11. Princípio da reparação ou da responsabilização pelo dano ambiental	65
2.2.12. Diferenciação entre o princípio do poluidor-pagador e o princípio da reparação ou responsabilização pelo dano ambiental	66
2.3. Competências ambientais	66
2.4. Papel da avaliação de risco	68
2.4.1. Âmbito administrativo	69
2.4.2. Âmbito judicial	70
3 . Análise quantitativa das incertezas	71
3.1. Características da metodologia de avaliação de risco	71
3.2. Incertezas e variabilidade	74

3.3. Identificação das incertezas na metodologia de avaliação de risco	76
3.4. Modelagem de transporte de contaminantes em águas subterrâneas	77
3.5. Tratamento estatístico das variáveis	79
3.5.1. Medidas da função densidade de probabilidade	80
3.6. Análise gráfica	82
3.7. Quantificação das incertezas	82
3.7.1. Coeficiente de sensibilidade	83
3.7.2. Método de Monte Carlo	83
3.7.3. Método do segundo momento de primeira ordem	86
4 . Programa Desenvolvido	90
4.1.1. Modelo analítico adotado	91
4.1.2. Metodologia do programa (SeRis)	94
5 . Estudo de caso: Cidade dos Meninos	100
5.1. Descrição do problema	100
5.1.1. Localização	100
5.1.2. Histórico	102
5.1.3. Caracterização hidrogeológica	103
5.1.4. Caracterização da contaminação	104
5.2. Modelo conceitual	106
5.2.1. Justificativa dos parâmetros utilizados	106
5.3. Validação por Monte Carlo	117
5.4. Validação pelo RISC4	117
6 . Apresentação e análise dos resultados	119
6.1. Análise gráfica	119
6.1.1. Gráfico conjunto	130
6.2. Coeficiente de sensibilidade normalizado	132
6.3. Coeficiente de sensibilidade não-normalizado	134
6.4. Risco	135
7 . Conclusões e Sugestões	137
7.1. Conclusões	137
7.2. Sugestões	140
8 . Referências bibliográficas	142
ANEXO A – Rotina do programa SeRis	157
ANEXO B – Valores da função φ	167
ANEXO C – Derivadas da função de Domenico	169
ANEXO D – Função complementar de erro	212

Lista de figuras

Figura 1 – Metodología da <i>AqR</i> .	32
Figura 2 – Rotas de exposição. Adaptado de LaGrega, 1994, p. 845.	36
Figura 3 – Principias vias de exposição.	40
Figura 5 - Relação dose resposta para efeitos não carcinogênicos.	42
Figura 6 – Modelo conceitual.	91
Figura 7 – Esquema do programa SeRis.	95
Figura 8 – Localização da Cidade dos Meninos.	101
Figura 9 – Vista aérea da Cidade dos Meninos.	101
Figura 10 – Representação esquemática do HCH.	104
Figura 11 – Comportamento da concentração inicial.	119
Figura 12 – Comportamento da taxa de degradação da fonte.	120
Figura 13 – Comportamento do tempo.	122
Figura 14 – Comportamento da distância longitudinal.	123
Figura 15 – Comportamento da permeabilidade.	124
Figura 16 – Comportamento do gradiente hidráulico.	124
Figura 17 – Comportamento da porosidade.	125
Figura 18 – Comportamento do retardamento.	126
Figura 19 – Comportamento da dispersividade longitudinal.	127
Figura 20 – Comportamento da dispersividade lateral.	127
Figura 21 – Comportamento da dispersividade transversal.	128
Figura 22 – Comportamento do coeficiente de degradação.	128
Figura 23 – Comportamento da largura da fonte.	129
Figura 24 – Comportamento da profundidade da fonte.	130
Figura 25 – Sensibilidade gráfica em torno do ponto médio.	131
Figura 26 – Coeficiente de sensibilidade normalizado.	132
Figura 27 – Coeficiente de sensibilidade não normalizado.	134

Lista de tabelas

Tabela 1 – Classificações de incertezas	75
Tabela 2 – Maiores concentrações.	105
Tabela 3 – Proporções para os isômeros do HCH.	108
Tabela 4 – Grau de relevância dos compostos envolvidos.	108

Lista de termos, abreviações, siglas e acrônimos

ADD: *Average Daily Dose*. Dose média diária.

AqR: Avaliação quantitativa de risco à saúde humana devido à determinada área contaminada quimicamente.

ARA: Avaliação de risco ambiental.

ASTM: *American Society for Testing Materials*. Sociedade estadunidense de normatização, assemelhada à ABNT no Brasil.

ATSDR: *Agency for Toxic Substances and Disease Registry*. Agência estadunidense de substâncias tóxicas e registro de doenças.

BTEX: Denominação usual para os principais compostos da gasolina, do ponto de vista ambiental: benzeno, tolueno, etilbenzeno e xileno.

CEPA: *Canadian Environmental Protection Agency*. Agência de proteção ambiental do Canadá.

CERCLA: *Comprehensive Environmental Response, Compensation and Liability Act*. Lei de responsabilização por dano ambiental. Encontra-se no capítulo 103 do título 42 do US CODE.

CETESB: Companhia de Tecnologia e Saneamento do Estado de São Paulo.

COC: *Chemical of Concern*. Composto de maior relevância em um estudo de AqR.

CONAMA: Conselho Nacional de Meio Ambiente.

DNAPLE: *Dense Non Aqueous Fase Liquid*. Líquido pouco miscível com a água e mais denso que ela.

EIA: Estudo de Impacto Ambiental.

EPA: o mesmo que USEPA.

ERA: *Ecological Risk Assessment*. Avaliação de risco ecológico.

FDP: função densidade de probabilidade. O mesmo que PDF.

FOSM: *First Order and Second Moment*. Método do segundo momento de primeira ordem para avaliação de incertezas.

IPCS-INCHEM: *International Programme on Chemical Safety*. Programa internacional de segurança química. Organismo internacional que objetiva disponibilizar publicamente as revisões mais atuais dos compostos químicos de relevância ambiental (www.inchem.org).

IRIS: *Integrated Risk Information System*. Banco de dados toxicológicos da USEPA.

LNAPL: *Light Non Aqueous Fase Liquid*. Líquido pouco miscível com a água e menos denso que ela.

LUST: *Leaking Underground Storage Tank*. Tanque de armazenamento subterrâneo vazante.

MMC: Método de Monte Carlo.

MTBE: Éter metil tetrabutil.

NAPLE: *Non Aqueous Fase Liquid*. Líquido pouco miscível com a água.

NCP: *National Oil and Hazardous Substances Pollution Contingency Plan*. Política administrativa federal dos Estados Unidos para responsabilização ambiental de vazamentos de petróleo e de quaisquer outras substâncias nocivas.

NEPA: *National Environmental Policy Act*. Lei instituidora da política de gestão ambiental dos EUA expressa no capítulo 55 do título 42 do US CODE.

PDF: *Probability Density Function*. O mesmo que FDP.

RAGS: *Risk Assessment Guidance for Superfund*. Guia de avaliação do risco do programa superfund elaborado pela EPA.

RBCA: *Risk Based Corrective Action*. Programa de intervenção baseado no risco.

RfD: Dose de referência. Definido como o limite máximo de quantidade que determinado composto que não geraria efeitos negativos se ingerido.

RIMA: Relatório de Impacto Ambiental.

RI/FS: *Remedial Investigation/Feasibility Study*. Cerne da Metodologia proposta pelo RAGS que consiste na determinação de subsídios para a efetivação da melhor remediação de uma área contaminada.

RISC®: *Risk Integrated Software for Clean-Ups*. Programa computacional comercial para a estimativa de risco e de metas de remediação em problemas de contaminação no solo e em águas.

RIVM: *Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu*. Instituto nacional de saúde pública e meio ambiente. Agência Ambiental Holandesa.

SARA: São os aditamentos e a regulamentação da CERCLA. Assim como esta, está expressa no capítulo 103 do título 42 do US CODE.

SF: *Slope Factor*. Fator de Carcinogenicidade. Constante obtida da declividade da curva dose-resposta para compostos cancerígenos.

SQL: *Sample Quantitation Limits*. Limite de amostragem.

Superfund: É o mesmo que CERCLA.

TIC: *Tentatively Identified Compounds*. Compostos indentificados empiricamente.

US CODE: Coletânea da legislação federal dos EUA.

USEPA: *United States Environmental Protection Agency*. Agência de proteção ambiental dos EUA.

VOC: Sigla inglesa para Compostos Orgânicos Voláteis.

1. Introdução

Contaminações por compostos químicos nos solos e nas águas subterrâneas¹ são problemas sérios e comuns principalmente em centros urbanos e em áreas

No sentido de auxiliar a solução, ou ao menos a mitigação de problemas de saúde pública, uma série de tecnologias vêm sendo desenvolvidas. No âmbito da Geotecnia Ambiental, além do proeminente desenvolvimento de técnicas de remediação, houve considerável avanço na capacidade de se prever o transporte e o comportamento dos contaminantes nos solos e nas águas subterrâneas, tornando-se possível estimar cenários de contaminação para momentos futuros, a partir de dados atuais.

A Toxicologia, por sua vez, tem aprimorado modelos fármaco-cinéticos que possibilitam a estimativa de efeitos patológicos devidos à in 4(à)-1.441.401110.69(c)-2.062(i)9.219(r)2.062
 ¶j 19.44 Td (A)-C.229(os)-m.2449()-69.292.-1.442()-po.401(r)-.20.(a).06(s)-4.6166(t)1.401(i)-2.092(l)-

análise das incertezas envolvidas a fim de se quantificar a forma em que elas influem no resultado da análise.

A fim de se garantir a melhor estratégia de gerenciamento ambiental, diversos esforços vêm sendo envidados no sentido de se avaliar as incertezas de toda a metodologia de *AqR*, em especial às incertezas relacionadas aos parâmetros de transporte (Ma, 2000 e Maxwell, 1999).

Os parâmetros de transporte em geral não podem ser estimados com absoluta precisão. Nesta imprecisão está incorporada uma série de incertezas e variabilidades. Dentro de uma ótica protetória da saúde humana, sempre que houver considerável incerteza sobre o comportamento de determinado fenômeno, deve-se partir da premissa da pior situação razoável que consiste no cenário menos favorável para a saúde humana.

Dentro de uma metodologia complexa, onde há a confluência de inúmeros fatores, não se afigura razoável estimar todos os parâmetros individualmente no seu limite mais prejudicial. Isso porque, em assim se procedendo, o resultado final do método, certamente não seria razoável devido aos fatores de cumulação de erro que seriam potencializados de passo em passo do procedimento.

Ciente desta característica, Maxwell (1999), por exemplo, propôs um método, partindo de um modelo hidrogeológico discretizado de um meio heterogêneo hipotético, para proceder a uma análise de sensibilidade a fim de avaliar a importância relativa das incertezas da geologia local; variabilidade dos dados comportamentais e fisiológicos da exposição humana; e as incertezas no modelo Toxicológico que relaciona a propensão de se desenvolver câncer a partir do consumo constante de água contaminada por pequenas quantidades de compostos cancerígenos.

O método proposto consiste em considerar cada variável como uma variável estatística e proceder a um grande número de simulações aleatórias (método de Monte Carlo) para se estimar o risco humano devido a uma dada exposição. Os resultados são então dispostos em um gráfico bi-dimensional (superfície). Cortes

nesta superfície dão a importância relativa de cada componente do modelo na incerteza total do sistema.

Ma (2002) também sugere um método baseado em simulações de Monte Carlo que combina o coeficiente de importância (*rank coefficient*) para se determinar a importância relativa de cada parâmetro (com suas incertezas e variabilidades inerentes) para o risco à saúde humana.

O presente trabalho, por sua vez, se propõe a descrever a metodologia da *AqR*, em seu segundo capítulo. No terceiro capítulo são estabelecidas, através de uma abordagem jurídica, as linhas gerais em que tais métodos podem ser aplicados no Brasil. A questão da análise das incertezas é tratada no Capítulo 4. O quinto capítulo apresenta o programa desenvolvido para a avaliação das incertezas. No Capítulo 6 há a aplicação do programa desenvolvido a um problema de contaminação em águas subterrâneas. A análise proposta leva em consideração exclusivamente as incertezas relacionadas aos parâmetros de transporte de águas subterrâneas. São discutidos os resultados no que concerne à sensibilidade de toda metodologia no âmbito da geotecnia ambiental.

O objetivo da dissertação é, portanto, proceder a uma análise quantitativa das incertezas relacionadas aos parâmetros hidrogeológicos a fim de avaliar o grau de confiabilidade do procedimento de *AqR* na estimativa do risco à s

Oncto(o)10.6(o)-.191(gr).219(t102.2(b)10.6

na linha da Geotécnica Ambiental, visto que, em última análise o objeto relaciona-se com o impacto do fenômeno de transporte de compostos químicos em meios porosos. Análise esta que depende ontologicamente da inter-relação dentre Geotécnica Ambiental, Toxicologia e Direito.

2. Avaliação de risco

A avaliação quantitativa de risco à saúde humana (*AqR*) tem se constituído numa das mais novas e importantes ferramentas da gestão² ambiental de áreas contaminadas. O entendimento da *AqR* depende, portanto, da conceituação de *gestão ambiental* e de *área contaminada*.

2.1. Gestão ambiental

2.1.1. Gestão ambiental em sentido amplo

A gestão ambiental, em seu sentido amplo, é um dos principais aspectos da política ambiental nacional. Esta política, de natureza pública³, por sua vez, tem como objetivo a determinação, organização e execução de ações que visem à preservação e ao melhoramento da vida natural, especialmente a vida humana. A política ambiental baseia-se em critérios técnicos, sociológicos e econômicos,

² Os termos *gestão* e *gerenciamento*, apesar de sua semelhança, podem apresentar algumas distinções. Ao se referir à *gestão ambiental* comumente se refere a uma ação (política, programa ou prática) estatal em áreas determinadas e.g. gestão de bacias hidrográficas, gestão de reservas. A gestão empresarial é por vezes chamada de *gerenciamento ambiental*. Não há, contudo, unanimidade quanto ao uso de ambos os termos sendo freqüente a substituição de um pelo outro. O presente trabalho não adotará distinções rigorosas sendo ambos os termos utilizados para configurar ação, pública ou privada, no sentido de controlar os aspectos ambientais.

³ Uma política pública é uma estratégia governamental que visa ao bem-estar social. Implica uma percepção do futuro do país e a definição de meios e instrumentos institucionais para a realização de tais objetivos (Melo *et al*, 1997). Uma *política pública* é uma ação deliberada dos poderes públicos constituídos visando atender necessidades de uma sociedade. Essas ações podem ser definidas para atender demandas focalizadas – atenção a problemas que afetam a parte de uma dada população, ou universalistas – atenção a problemas que afetam a população no seu todo. Tais ações também contribuem para a solução de questões setoriais – educação, habitação, justiça, estrutura agrária, saúde, saneamento, segurança, transporte etc., ou geograficamente delimitadas – nacional, regional, sub-regional, local etc. (Tenório, 2002).

além da análise das motivações individuais e coletivas expressas pela sociedade sob a forma de necessidades, desejos e aspirações (Lapoix *apud* Silva, 2002).

A eficácia da política ambiental depende de sua harmonia com a normatização da matéria, isto é, das leis, decretos, regulamentos etc., que compõem o ordenamento jurídico do assunto. Neste sentido, a gestão ambiental se apóia sobre diversos instrumentos institucionais e jurídicos, e a execução de uma política de Meio Ambiente requer a estruturação de um sistema administrativo sob coordenação unitária (estatal), mesmo que seja descentralizado, como é o Sistema Nacional do Meio Ambiente (Silva, 2002).

No Brasil a política ambiental foi instituída pela Lei Federal n. 6.938 de 1981, cujo objetivo, conforme seu artigo 2º, consiste na “preservação, melhoria e recuperação da qualidade ambiental propícia à vida, visando assegurar, no País, condições de desenvolvimento socioeconômico, aos interesses da segurança nacional e à proteção da dignidade da vida humana, atendido os seguinte princípios:

- I- ação governamental na manutenção do equilíbrio ecológico, considerando o meio ambiente como um patrimônio público a ser necessariamente assegurado e protegido, tendo em vista o uso coletivo;
- II – racionalização do uso do solo, subsolo, da água e do ar;
- III – planejamento e fiscalização do uso de recursos ambientais;
- IV – proteção dos ecossistemas, com a preservação de áreas representativas;
- V – controle e zoneamento das atividades potencial ou efetivamente poluidoras;
- VI – incentivos ao estudo e à pesquisa de tecnologia orientada pra o uso racional e a proteção dos recursos ambientais;
- VII – acompanhamento do estado da qualidade ambiental;
- VIII – recuperação de áreas degradadas;
- IX – proteção de áreas ameaçadas de degradação;
- X – educação ambiental em todos os níveis de ensino, incluindo a educação da comunidade, objetivando capacita-la para a participação ativa na defesa do meio ambiente.”

2.1.2.

Gerenciamento ambiental de áreas contaminadas

O gerenciamento de áreas contaminadas é o conjunto de ações que envolvem o Poder Público, os responsáveis pela contaminação e as populações potencialmente afetadas, no sentido de implementar os objetivos da Política Ambiental, notadamente a segurança das pessoas afetadas.

O gerenciamento de áreas contaminadas se preocupa, portanto, em primeiro lugar, com os efeitos da contaminação química dos solos e das águas subterrâneas que atingem diretamente os seres humanos e, posteriormente, com os efeitos que atingem todo o ecossistema.

2.1.2.1.

Definição de área contaminada

Considerando a *AqR* como um instrumento da gestão ambiental, faz-se necessário delimitar o conceito de área contaminada, como também conceituar o termo *contaminação*.

A delimitação do conceito de *área contaminada* difere sensivelmente de autor para autor. Contaminação pode ser entendida como o processo de introduzir na água, ar ou solo, microorganismos, substâncias químicas, substâncias tóxicas, resíduos ou esgoto em uma concentração passível de tornar o meio impróprio para os usos atuais ou futuros. (USEPA, 2005).

Os termos *contaminação* e *poluição* costumam ser definidos das mais diversas formas. A poluição pode ser conceituada como sendo a presença de substância no ambiente que, devido à sua composição química ou quantidade, prejudica o funcionamento dos processos naturais e produz efeitos nocivos ao

ambiente ou à saúde humana. (USEPA, 2005). Este é um conceito eminentemente químico, pois a poluição seria fruto de um ou mais compostos químicos excluídas, portanto, as poluições sonora, térmica e visual. Na legislação estadunidense, a poluição é entendida como sendo exclusivamente fruto de *ato humano* que produz ou induz alteração na integridade física, biológica, química ou radiológica na água ou em outro meio (*Clean Water Act*).

No Brasil, a Lei de Política Nacional do Meio Ambiente define poluição como sendo a degradação da qualidade ambiental resultante de atividades que direta ou indiretamente: a) prejudiquem a saúde, a segurança e o bem-estar da população; b) criem condições adversas às atividades sociais e econômicas; c) afetem desfavoravelmente a biota; d) afetem as condições estéticas ou sanitárias do meio ambiente; e) lancem matérias ou energia em desacordo com os padrões ambientais estabelecidos (Lei 8.938/81).

A CETESB (1999) propõe diversos elementos delimitadores da amplitude do termo *área contaminada* ao defini-la da seguinte forma:

Uma área contaminada pode ser definida como uma área, local ou terreno onde há comprovadamente poluição ou contaminação, causada pela introdução de quaisquer substâncias ou resíduos que nela tenham sido depositados, acumulados, armazenados, enterrados ou infiltrados de forma planejada, acidental ou até mesmo natural. Nesta área, os poluentes ou contaminantes podem concentrar-se em subsuperfície nos diferentes compartimentos do ambiente, por exemplo nos solos, nos sedimentos, nas rochas, nos materiais utilizados para aterrar os terrenos, nas águas subterrâneas ou, de forma geral, nas zonas não saturadas e saturadas, além de poderem concentrar-se nas paredes, nos pisos e nas estruturas de construções. Os poluentes ou contaminantes podem ser transportados a partir destes meios, propagando-se por diferentes vias, como, por exemplo, o ar, o próprio solo, as águas subterrâneas e superficiais, alterando suas características naturais ou qualidades e determinando impactos negativos e/ou riscos sobre os bens a proteger, localizados na própria área ou em seus arredores.

Os principais elementos que comparecem na definição de área contaminada são: contaminação, poluição e bens a proteger. Em se entendendo que o conceito delimita as características próprias de um objeto, então constata-se o quão ampla é a definição acima. Área contaminada seria assim qualquer espaço físico no qual compostos químicos possam afetar nocivamente os bens a proteger.

2.2. Definição

A avaliação de risco, de forma ampla, é uma metodologia adotada por um largo espectro de áreas do conhecimento. Na economia, por exemplo, há estudos para avaliação de riscos financeiros, causado pelos movimentos no Mercado; risco administrativo, que dá a medida de impacto que a presença individual de uma determinada empresa possa ocasionar em um determinado nicho de mercado; como também há métodos para se avaliar o chamado risco estratégico, que tenta analisar e quantificar os efeitos das mudanças fundamentais na economia e no ambiente político (Goorbergh et ali, 1999).

Apostolakis revisou estudos de avaliação de risco em reatores nucleares devido a graves acidentes; de processos de incineração de armas químicas como também de colapso em estações espaciais (2004).

Na engenharia estrutural, o procedimento da análise de confiabilidade é, em sua essência, uma avaliação de risco, onde se estima a probabilidade de falha de uma estrutura bem como a sensibilidade do projeto em relação às inúmeras variáveis (Harr, 1987).

Muitos outros ramos utilizam metodologias de análise de risco, como por exemplo, na avaliação de segurança de assentamentos humanos frente à catástrofes ambientais (vulcões, terremotos e tufões); na aprovação de alimentos industrializados (Frey, 2002, p. 554 e Patil *et al*, 2004); na concessão de licenças para novos medicamentos; nos cálculos atuariais de empresas de seguro (Mumpower e McClelland, 2002 e Hsieh, 2001); como também na análise da confiabilidade de sistemas computacionais.

Enquanto os estudos da probabilidade de ocorrência de um determinado evento são problemas eminentemente estatístico-probabilísticos, a “avaliação de risco”, por sua vez, além do estudo da probabilidade de ocorrência de determinado evento, carrega em si a noção de uma consequência extrema, isto é, trata-se do

estudo da chance de ocorrer um determinado evento não desejado (*e.g.* a chance de ocorrência de um cataclismo, ou a probabilidade do mercado rejeitar um novo produto). Noutras palavras, a avaliação de risco contém em si *juízos de valores*, os quais carregam aspectos mais subjetivos.

A probabilidade de ocorrência de um evento é geralmente mensurável. As conseqüências podem ser mensuráveis ou não, a depender das idealizações feitas. A avaliação de risco à saúde humana, especificamente, trata da probabilidade das populações humanas desenvolverem câncer (risco cancerígeno) ou outra doença (risco tóxico) devido à exposição contínua e prolongada a uma determinada área contaminada. A idéia básica consiste em que é possível quantificar a suscetibilidade carcinogênica por uma exposição ambiental.

A análise também aborda os “riscos” de desenvolvimento de outras doenças (diversas do câncer) o que, como será demonstrado no decorrer do trabalho, se afasta essencialmente do conceito probabilístico de risco.

2.2.1. Risco de fundo, risco incremental⁴ e risco total

Outra distinção importante é aquela entre o risco de fundo e o risco incremental. O risco de um indivíduo hipotético (receptor) desenvolver câncer devido à sua exposição a uma determinada área contaminada com um composto químico é chamado de risco incremental (*incremental risk*).

O risco de fundo (*background risk*) seria a probabilidade deste mesmo receptor, desenvolver aquela doença por uma outra razão qualquer como, por exemplo, predisposição genética, alimentação específica, exposições a outras áreas contaminadas.

⁴ O termo incremental é um cognato do termo inglês *incremental* (LaGrega, 1994). Há autores nacionais que preferem o termo adicional. Contudo, visto que ambas as palavras (incremental e adicional) constam na língua portuguesa com significados próximos, não se vê razão para preterir o termo *incremental* que, além da perfeita aceção, visa à uniformização com o termo técnico já consagrado em inglês.

O risco total é dado pela simples soma dos riscos de fundo e incremental.

Em geral, o risco de fundo é consideravelmente maior que o risco incremental. Um caso típico apresentaria o risco de fundo muitas ordens de grandeza superior ao risco incremental na AqR , conforme o exemplo a seguir.

Se, por exemplo, uma pessoa bebe por 70 anos água com a concentração de 1,0 ppb de benzeno (composto altamente nocivo) terá seu risco de desenvolver câncer aumentado em aproximadamente⁵ $8,0E-07$ (equivalente a oito chances em 10 milhões). Contudo, a chance deste sujeito contrair câncer de outra forma é de 25% (uma chance em quatro) segundo estudos válidos para a população estadunidense (LaGrega, 1994). O risco de fundo (0,25) é muitas ordens de grandeza maior que o risco incremental ($8,0E-07$), o que é um resultado típico de uma análise quantitativa de risco.

2.2.2. Avaliação de risco ambiental⁶

A avaliação de risco ambiental visa à identificação e quantificação dos riscos à saúde humana decorrentes de uma área contaminada específica através de princípios de toxicologia humana, do conhecimento das propriedades físico-químicas dos contaminantes e do entendimento dos fenômenos de transporte entre a fonte de contaminação e as pessoas possivelmente afetadas (receptores).

O desenvolvimento das metodologias de análise de risco, embora já datem de aproximadamente três décadas na área de sistemas de tecnologia (Apostolakis, 2004), teve forte impulso a partir da implementação do programa de remediação

⁵ Considerando um *slope factor* de $2,9 \times 10^{-2} \text{ [mg/(kg.dia)]}^{-1}$, uma expectativa de vida igual ao período de exposição de 70 anos e uma taxa de ingestão de água de 2,0 L/dia.

⁶ Apesar da semelhança semântica dos termos *análise* e *avaliação*, os autores atribuem acepções próprias na área ambiental. *Análise de risco* seria um termo mais amplo e englobaria a avaliação do risco, seu gerenciamento e a estratégia de comunicação do risco à sociedade. A *avaliação de risco*, por sua vez, seria o procedimento técnico que visa dar a dimensão do risco. A avaliação poderá ser qualitativa ou quantitativa.

de áreas contaminadas nos EUA em 1986. Este programa é conhecido pelo título *Superfund*.

A idéia inicial de se recuperar todas as áreas minimamente contaminadas até se restabelecer as condições anteriores à contaminação, mostrou-se inviável frente às limitações orçamentária e técnica. (Connor, 2002 e Khan, 2001).

A análise de risco teve assim um importante papel: a priorização das áreas que mereceriam investimento através da quantificação do risco a que estavam expostas as pessoas. Respondeu-se inicialmente à pergunta “quais áreas remediar?”

Mesmo após eleitas as áreas cuja necessidade de remediação fossem consideradas mais iminentes, ainda havia um segundo problema: saber até que ponto remediar. Surge então um segundo questionamento “qual é o limite da remediação”.

A idéia inicial de que todas as áreas deveriam ser remediadas até que alcançassem níveis de contaminação não detectáveis, não se mostrou razoável. Isto porque, na maioria dos casos, as técnicas de remediações tornam-se exageradamente dispendiosas a partir de uma determinada concentração. Noutras palavras, a partir de um determinado ponto, continuar remediando uma área para diminuir a concentração da contaminação em um valor infinitesimal, poderia significar um gasto suficientemente grande para remediar muitas outras áreas em um nível de contaminação razoável. (Small, 1998).

As metodologias de avaliação de risco prestaram-se então a estimar o nível de contaminação abaixo do qual o risco seria aceitável. Estes níveis são chamados de *MRBR* (Meta de Remediação Baseada no Risco).

Disseminou-se, desde então, a idéia de que a avaliação de risco seria um procedimento tecnicamente defensável e conceitualmente sustentável para a determinação da probabilidade de ocorrência de efeitos negativos à saúde humana decorrentes da exposição a áreas contaminadas por compostos químicos, cujos

princípios básicos são: a) proteção à saúde humana; b) determinação do nível de remediação⁷ ambiental necessário; c) avaliação da viabilidade técnica de remediação; d) priorização de áreas contaminadas; e) gerenciamento ambiental integrado com adequada priorização de alocação de recursos (CETESB, 2004).

A validade ética da metodologia de avaliação de risco pode ser questionada. Sempre que se avalia risco tolerável, custo e benefício pode-se estar transigindo como valores superiores como a vida humana. Neste aspecto a *AqR* é fundamentada sob uma ótica eminentemente utilitarista. Estas características reforçam a necessidade de uma estreita dependência de juízos de valor e de posicionamento ético dos profissionais envolvidos (Kastemberg, 2002).

A *AqR* não é o único instrumento para as tomadas de decisões em matéria ambiental. Cada vez mais tem-se utilizado o termo “decisão instruída pelo risco” (*risk-informed*), no lugar de “baseada no risco” (*risk-based*), para se classificar as decisões auxiliadas por estudos de *AqR* (Apostolakis, 2004). Enquanto esta presume que a *AqR* seja um estudo suficiente para tomar qualquer decisão em matéria ambiental; a análise instruída pelo risco, vê a *AqR* como mais um subsídio para o processo de decisão política.

Embora a análise de risco represente um valioso progresso no processo racional de tomada de decisão, não é o único subsídio a ser adotado (Apostolakis, 2004) e deve ser apresentada com clareza em sua metodologia, ênfase nas suas limitações (USEPA, 1997) e nos seus aspectos éticos que devem ser considerados pelos profissionais envolvidos.

⁷ Em inglês utiliza-se a expressão *target* para indicar o nível de remediação. Alguns autores, a exemplo da Cetesb, preferem o termo *alvo* para indicar o nível de remediação. O termo nível de remediação parece mais explicativo. Outra opção seria o termo *meta*. Este é preferível ao termo *alvo* visto que transmite a idéia de que é um valor desejável mas pode ser preferencialmente superado enquanto *alvo* pode não dar a idéia de que possa ser superado.

2.2.2.1. Análise de risco ecológico

Faz-se na literatura, a distinção entre as metodologias de análise de risco à saúde humana e as metodologias de análise de risco ecológico (ERA). Estas últimas englobariam a primeira e levariam ainda em consideração os efeitos de uma determinada área contaminada em todo o ecossistema, isto é, na biota em geral e no meio físico.

A avaliação de risco ecológico é um ramo científico ainda mais embrionário que a avaliação de risco à saúde humana e não será considerada neste trabalho. Ao se referir à avaliação de risco, está se referindo aqui, exclusivamente à avaliação de risco cancerígeno à saúde humana.

2.3. Procedimento para avaliação de risco

As primeiras metodologias de análise de risco são atribuídas ao programa espacial americano na década de 1950 com o advento dos modos de falha e análise de efeitos (*modes failure and effects analysis*) para o entendimento e a correção das falhas de lançamento de foguetes e mísseis. As metodologias foram usadas também na avaliação do risco de reatores nucleares nos idos de 1975 e tiveram grande avanço como ferramenta no gerenciamento ambiental do programa *Superfund* (Kastember, 2004, p.1).

Em 1989, a USEPA apresentou o documento intitulado *Risk Assessment Guidance for Superfund (RAGS)*, que descreve as linhas gerais adotadas no desenvolvimento de metodologias de avaliação de risco à saúde humana. LaGrega (1994) apresenta uma metodologia análoga à metodologia da USEPA para a avaliação de risco. Recentemente, no Brasil, a CETESB (2004) publicou o nono capítulo do Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas intitulado

Avaliação de Risco à Saúde Humana. Este capítulo é a maior referência nacional sobre a metodologia de análise de risco e está maciçamente baseada no RAGS.

O *RAGS* foi desenvolvido em consonância com a legislação ambiental estadunidense, em especial a CERCLA, e tem como objetivo possibilitar a otimização do processo de remediação. O *RAGS* é uma importante referência para as metodologias de avaliação de risco não apenas nos EUA, mas em todo o mundo.

Um conceito chave das metodologias de avaliação de risco é o RI/FS (investigação corretiva e estudo de viabilidade⁸) que consiste na determinação de subsídios para a efetivação da melhor estratégia de remediação de uma área contaminada através da avaliação do risco à saúde das pessoas.

A metodologia se encontra esquematizada na **Figura 1** e está dividida em sete passos. Inicialmente procede-se a coleta e a avaliação dos dados, posteriormente é analisada a maneira com que os indivíduos podem ser afetados bem como a toxicidade dos compostos envolvidos. Com dados suficientes, procede-se a caracterização do risco que servirá como base para ações de gestão ambiental.

Antes da coleta e avaliação dos dados, contudo, há de se proceder à identificação do perigo (LaGrega, 1994).

⁸ Do inglês

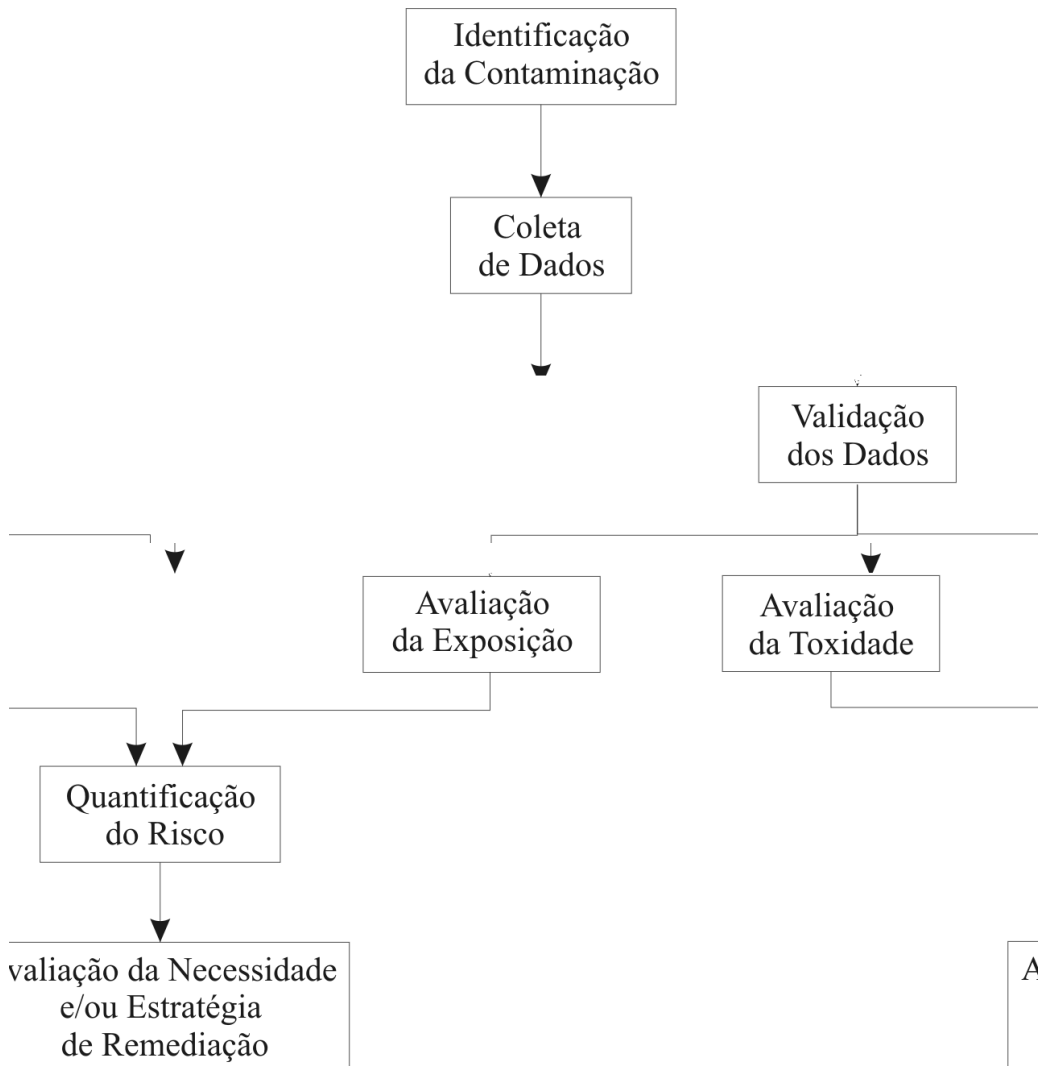


Figura 1 – Metodologia da AqR.
Fonte: Adaptada USEPA, 1989, p. 1-7.

A

2.3.1. Identificação do perigo, obtenção e validação de dados

O primeiro passo para qualquer análise de risco é a identificação, ainda que superficial, de um perigo, relacionado a uma área contaminada. O bom senso é uma atitude fundamental nesta fase inicial. A experiência indica uma série de situações onde a possibilidade de haver perigo químico como, por exemplo, em áreas de disposição de resíduos industriais ou urbanos, em unidades industriais, em postos de combustíveis, em qualquer lugar onde se verifique algum vazamento de composto químico, em cemitérios e em áreas de rejeito de mineração.

Há, todavia situações menos evidentes, em especial nas áreas naturalmente contaminadas, ou naquelas onde a fonte de contaminação encontra-se relativamente distante, ou ainda, em contaminações induzidas por regimes artificiais de fluxo como, por exemplo, a intrusão salina devido à exploração desordenada de água subterrânea (Nobre *et al*, 2001).

São subsídios para a identificação do perigo: a) o histórico da área, que inclui principalmente as atividades anteriores às atuais; b) a destinação do solo, tanto aquela de natureza programática (estabelecida nos planos diretores municipais) quanto a própria destinação efetiva (aquela que se verifica na prática); c) os níveis de contaminação nos diferentes meios: na atmosfera, no solo, nos sedimentos, nas águas subterrâneas; d) as características ambientais que afetam o transporte e o comportamento dos compostos químicos, como as condições atmosféricas, geológicas e hidrogeológicas; e, e) as populações potencialmente afetadas.

Uma vez identificada uma área contaminada, o passo seguinte é a identificação dos compostos químicos de interesse. Não raramente, encontram-se mais de 100 compostos químicos diferentes em uma mesma região contaminada. Não obstante a facilidade computacional de se modelar o transporte e o comportamento de vários compostos químicos, não é razoável proceder a uma

Avaliação de risco

análise de risco com tantas variáveis porque, muito provavelmente, haverá um subgrupo de compostos, bastante reduzido, responsável por parte considerável do risco a ser quantificado.

Estima-se que o subgrupo representativo de compostos químicos deve ser aquele responsável por 99% do risco da área, levando-se em consideração o grau de toxicidade, a sua persistência e sua presença nas exposições mais significativas (LaGrega, 1994).

Um equívoco freqüente é o foco que é dado na avaliação da toxicidade de novos produtos em detrimento da análise de sua persistência. Um exemplo clássico de persistência é o DDT, composto artificial com baixa toxicidade e alta persistência. Este composto, cujo desenvolvimento valeu o prêmio Nobel (1948), é absorvido e armazenado nos tecidos lipídicos e penetra na cadeia alimentar de aves predadoras. Os ovos das aves afetadas apresentam cascas ligeiramente mais finas. A nova espessura, contudo, apesar de não parecer um problema tão sério, faz com que os ovos eclodam antes do desenvolvimento apropriado dos pequenos pássaros, o que implica em um desequilíbrio ecológico complexo (Werner, 1993).

Identificado o perigo e isolados os compostos de interesse, procede-se à aquisição de dados para a continuidade da avaliação de risco. Os dados necessários para a quantificação do risco são aqueles relacionados com: a) as características dos contaminantes; b) suas concentrações nas fontes e no meio de interesse; c) as características das fontes, em especial aquelas relacionadas com o potencial de descarga; e d) as características do meio capazes de influir no transporte e no comportamento dos compostos químicos (USEPA, 1999).

Há na literatura uma série de metodologias para a aquisição de dados onde são descritos procedimentos detalhados de amostragem e validação dos resultados obtidos. Dentre estes documentos, ressalta-se o Manual de Gerenciamento de Águas Contaminadas da CETESB, por ser uma importante referência em língua portuguesa. O RAGS da USEPA, em sua seção 4, indica algumas dezenas de referências para amostragem e validação de dados relevantes para a análise de risco.

2.3.2. Avaliação das exposições

Na avaliação das exposições, estima-se a quantidade de contaminante que ingressa em um dado receptor (pessoa potencialmente mais atingida).

O primeiro passo para a avaliação das exposições é a pesquisa das fontes de contaminação. Uma vez identificada a fonte de contaminação o passo seguinte consiste em se entender como o contaminante é transportado no meio de interesse (atmosfera, solo, água superficial, sedimentos ou água subterrânea).

Entendidos os mecanismos de transporte, deve-se então identificar as populações potencialmente expostas ao contaminante, bem como avaliar em que medida se dá esta exposição.

2.3.2.1. Rotas ambientais

Um vazamento químico, por exemplo, costuma atingir a população humana de diferentes formas. Parte do material poderá volatilizar-se antes de se infiltrar no solo e, através do transporte pelo meio atmosférico, atingir uma determinada população dita receptora.

Parte do vazamento poderá atingir o lençol freático, dissolvendo-se nas águas subterrâneas. Estas águas podem, eventualmente, ser utilizadas para ingestão, para irrigação ou para higiene. Em cada um destes casos há uma rota distinta.

Neste estágio da avaliação de risco, identificam-se as rotas de exposições quer sejam potenciais ou não. A **Figura 2** ilustra as principais rotas ambientais de exposições identificadas em análises de risco. É interessante notar que o vento e o

fluxo subterrâneo podem ter direções predominantes diametralmente opostas o que aumenta consideravelmente o raio de influência de um acidente ambiental.

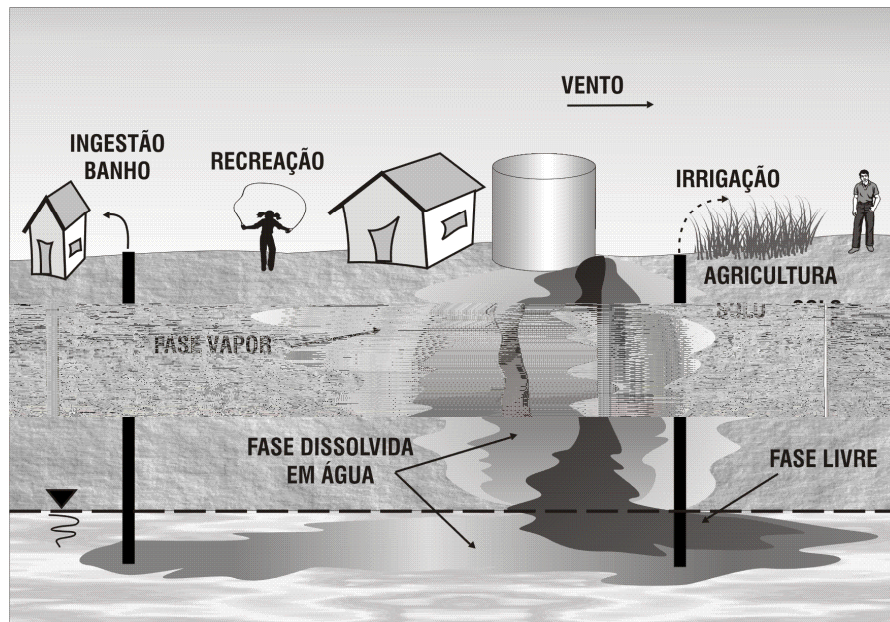


Figura 2 – Rotas de exposição. Adaptado de LaGrega, 1994, p. 845.

Não se pode precisar, *a priori*, qual é a rota que proporciona maior risco. Se assim fosse, rapidamente iria se analisar o risco do pior caso. A experiência, contudo, demonstra que, mais frequentemente, o risco de ingestão de água e a inalação são os mais consideráveis.

2.3.2.2. Transporte e comportamento do contaminante

Os compostos químicos comportam-se de formas diferentes dependendo do meio em que estejam. Nesta fase, busca-se o entendimento do transporte, a adsorção, a absorção e a biodegradação do contaminante no meio de interesse. Este comportamento depende de características físico-químicas dos compostos (densidade, K_{ow}) e de parâmetros do meio (em águas subterrâneas, v.g., a permeabilidade, a fração de carbono orgânico no solo, o gradiente hidráulico e a porosidade).

Os parâmetros do meio físico e as técnicas de inferência do comportamento dos compostos em água subterrânea (modelos analíticos e numéricos) são abordados no Capítulo 4.

2.3.2.3. População afetada

A tarefa seguinte consiste na determinação da população afetada. Esta população não se restringe àquela atualmente presente na região. Deste modo, uma análise conseqüente também deve levar em consideração os possíveis novos assentamentos. Uma metodologia crível e razoável deve levar em consideração também a sensibilidade de subgrupos populacionais mais sensíveis, como idosos e crianças.

As diferenças comportamentais e ocupacionais dos diversos subgrupos populacionais devem ser consideradas. Trabalhadores, transeuntes e moradores relacionam-se com a exposição de formas e tempos diferentes.

2.3.2.4. Concentração nos pontos de exposição e suas doses

A metodologia de avaliação de risco inclui a determinação da concentração da substância química contaminante nos pontos de exposição para as condições atuais e as futuras. Dados de amostragem direta devem ser preferidos em detrimento de dados de modelos matemáticos para condições atuais.

Para condições futuras, contudo, o uso dos modelos matemáticos é imperativo. Para o transporte de contaminantes nas águas subterrâneas são utilizados modelos hidrogeológicos analíticos ou numéricos. Para o transporte de compostos no meio atmosférico utilizam-se, em geral, modelos gaussianos. A

utilização de quaisquer destes modelos exige julgamento profissional criterioso no que tange às suas limitações, idealizações, sensibilidade e representatividade.

As concentrações nos pontos de exposição servem para se estimar as doses a que os receptores estarão expostos. Na literatura faz-se a distinção entre três tipos de doses: a dose administrada, que é aquela ingerida, inalada ou em contato dérmico; a dose de ingresso, aquela efetivamente absorvida; e a dose-alvo que seria a quantidade que atinge determinado órgão (alvo) (LaGrega, 1994).

A estimativa da dose de ingresso é feita através da seguinte expressão genérica:

$$I = \int_{t_1}^{t_2} C(t) \cdot IR(t) \cdot dt \quad (1)$$

Onde I é a dose de ingresso, $C(t)$ é a concentração no meio de interesse em função do tempo t e $IR(t)$ é a taxa de ingresso também como função do tempo t .

Para a avaliação de risco à saúde humana, é conveniente assumir as funções $C(t)$ e $IR(t)$ como constantes no tempo.

Sabe-se que a dose de ingresso é a medida da quantidade do composto a que *supostamente* o receptor está exposto, ou seja, é a quantificação do contaminante em contato com o receptor.

A dose média diária (ADD – *Average Daily Dose*) assumindo-se as funções $C(t)$ e $IR(t)$ como constantes para um determinado intervalo de tempo e é dada pelas seguinte equação:

$$ADD_{ijk} = \bar{C} \cdot \left[\frac{IR}{BW} \right] \cdot EF \cdot ABS \quad (2)$$

onde ADD é o ingresso médio diário (ingresso crônico) ou quantidade de contaminante que ingressa no organismo humano por um caminho de exposição (em unidade de massa/tempo) e é efetivamente absorvido (utilizado no cálculo do índice de perigo); C é a concentração média do contaminante no meio focado (em unidade de massa/volume ou massa/massa); IR é a taxa de contato com o meio focado (em unidade de volume/tempo ou massa/tempo); EF é a frequência de exposição (em unidade de tempo/tempo); e ABS é o fator absorção (adimensional) que é a razão entre a dose sob a qual o receptor está em contato pela porção efetivamente absorvida por seu organismo. O índice i indica o meio de interesse, j a rota ambiental e k a via de ingresso.

A ADD é a dose crônica que é utilizada quando o período de exposição coincide com o tempo de vida. Contudo, para o cálculo do risco carcinógeno, é comum que o período de exposição do receptor a determinado contaminante (ED) seja consideravelmente diferente de sua expectativa de vida (AT). O $LADD$ (*Life-Time Average Daily Dose*) é definido como o ingresso médio diário integral ou seja é a média da quantidade de todo contaminante a que o receptor está sujeito pela sua expectativa de vida.

$$LADD_{ijk} = \bar{C} \cdot \left[\frac{IR}{BW} \right] \cdot \frac{ED \times EF}{AT} \cdot ABS \quad (3)$$

onde o $LADD$ é o ingresso integral médio diário (em unidade de massa/tempo); ED é a duração da exposição (em unidade de tempo); BW é o peso corporal (em unidade de massa); AT é período de interesse que geralmente equivale à expectativa de vida (em unidade de tempo).

No caso particular em que a exposição a um determinado contaminante se der durante toda a vida do receptor o $LADD$ e o ADD se igualam.

No cálculo da ADD , é comum se utilizar a concentração média durante um longo período de tempo (USEPA, 1989). Por precaução, pode-se utilizar a maior

Avaliação de risco

concentração, ou ainda, caso se disponha de dados mais confiáveis, adota-se a concentração média em um determinado período (e.g. a concentração obtida da maior média de 7 anos).

Ao contrário da dose de ingresso (*I*) a *ADD* é a quantificação do contaminante efetivamente absorvido pelo receptor. Por segurança, contudo, é comum assumir o fator de absorção *ABS* como unitário, o que significa dizer que toda a dose de ingresso é efetivamente absorvida pelo receptor.

Estas expressões genéricas costumam ser adaptadas para cada via de exposição. Há pelo menos 14 vias de exposição relevantes para a avaliação de risco à saúde humana (USEPA, 1898 e CETESB, 2004). A **Figura 3** ilustra as principais vias de exposição:

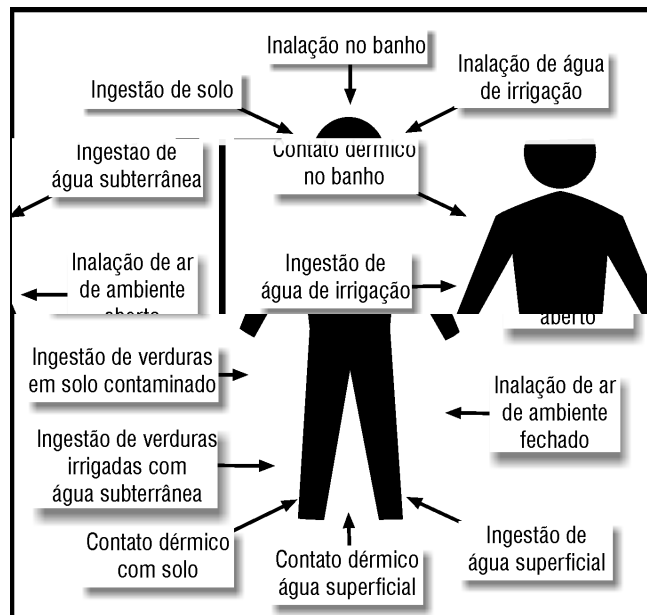


Figura 3 – Principais vias de exposição.

2.3.3. Avaliação da toxicidade

relação entre esta dose e o eventual mal que ela pode trazer (e.g. desenvolvimento de câncer) é um dado que se deve buscar nos estudos toxicológicos. Assim sendo, conclui-se que a toxicologia contribui para a metodologia de análise quantitativa do risco informando quais os males que determinada dose pode oferecer ao receptor.

A relação entre o mal e a dose é chamada relação dose-resposta e é estudada individualmente para cada composto químico. Os estudos toxicológicos fornecem constantes (RfD , SF) para a estimativa quantitativa do risco.

Os estudos toxicológicos, a exemplo dos estudos hidrogeológicos, devem ser analisados em atenção às incertezas relacionadas às suas conclusões.

A toxicologia apresenta modelos diferentes para os compostos carcinogênicos e os não carcinogênicos. Tem se admitido que a exposição a compostos carcinogênicos, qualquer que seja a dose, acarretará um incremento na propensão do receptor em desenvolver câncer.

Já o comportamento dos efeitos não carcinogênicos é diverso. Acredita-se que, para estes compostos, haja uma dose limite, abaixo da qual, não se verifique qualquer efeito não-cancerígeno. Um exemplo deste limite inferior é a dose de referência (RfD) definida pela USEPA.

As **Figuras 4 e 5** ilustram a diferença entre os modelos dose-resposta para efeitos carcinogênicos e não carcinogênicos.

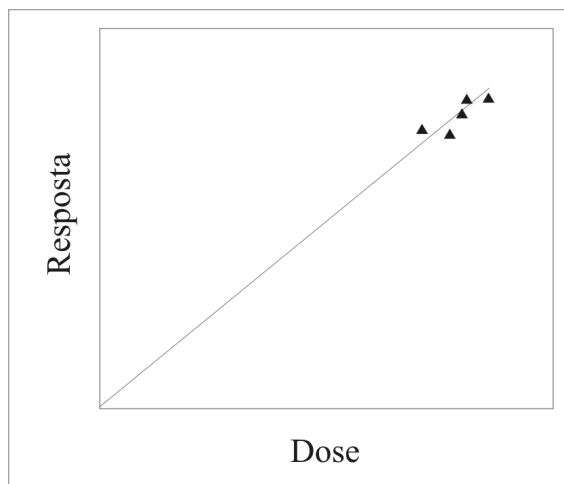


Figura 4 - Modelo linear de relação dose resposta para efeitos carcinogênicos.

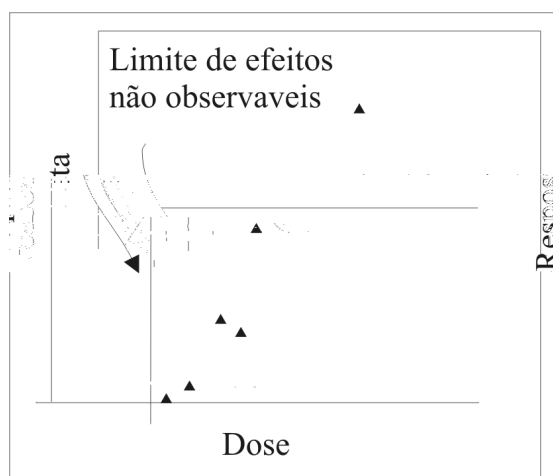


Figura 5 - Relação dose resposta para efeitos não carcinogênicos.

Deve-se notar que um mesmo composto pode apresentar efeitos carcinogênicos e não carcinogênicos.

Para efeitos carcinógenos, o comportamento dose-resposta reflete a probabilidade de um receptor desenvolver câncer durante seu tempo de vida devido a uma determinada dose do composto. Define-se o fator de cálculo SF (*slope factor*) como sendo a tangente à curva dose-resposta e é dada em unidade do inverso da dose (dose^{-1}). Multiplicando-se uma dada dose pelo seu SF estima-se a probabilidade de se desenvolver a doença devido a esta dose.

Para efeitos não carcinógenos há, como foi dito acima, um limite inferior abaixo do qual não se verifica qualquer efeito adverso à saúde. O “risco”, para estes compostos, é estimado através de um índice de perigo. Este índice é dado pela razão entre a dose efetivamente administrada e o limite inferior da curva dose-resposta. Índices de perigo acima da unidade sugerem a possibilidade de efeitos adversos à saúde.

Há de se notar que apenas o modelo do comportamento dose-resposta para compostos carcinogênicos permite o cálculo de um risco probabilístico. O índice de perigo não é uma probabilidade matemática, mas sim um indicativo;. Assim sendo, assemelha-se ao inverso de um fator de segurança: quanto maior seu valor, maior o perigo.

Os profissionais de avaliação de risco contam com fontes especializadas de dados toxicológicos específicos para seu trabalho. Dentre estas fontes ressaltam-se os bancos de dados das agências ambientais (e.g. IRIS da USEPA e os relatórios da RIVM) e órgãos não governamentais ou intragovernamentais como o IPCS INCHEM.

2.3.4. Caracterização do risco

O cálculo do risco é feito em separado para efeitos carcinogênicos e para os demais efeitos. Esta divisão justifica-se pela constatação de que a probabilidade de desenvolver câncer é aumentada para qualquer que seja a dose administrada, como dito anteriormente.

Admite-se que para os demais danos (não-cancerígenos) só se verifiquem efeitos negativos quando a dose administrada for superior a uma dada quantidade.

O risco devido à exposição a compostos químicos cancerígenos (*Risco-c*) é definido como a probabilidade adicional de se desenvolver câncer durante todo o tempo de vida de um indivíduo devido a esta exposição ao composto químico carcinogênico.

Estudos na área de toxicologia indicam para cada composto químico quais as constantes utilizadas para o cálculo do risco. Partindo da premissa de que a exposição a um composto químico carcinogênico, qualquer que seja sua dose, irá aumentar o risco do receptor a desenvolver a doença, deduz-se, adotando-se uma aproximação linear⁹, que o risco seja dado pela seguinte expressão:

$$(4) \quad \text{Risco-ci} = I \times SF$$

Quando estão presentes vários compostos carcinogênicos costuma-se definir o risco total como sendo a soma dos riscos calculados para cada composto.

Sabidamente esta é uma simplificação aproximada. Por analogia sabe-se que a probabilidade de se obter um “5” ao se lançar um dado é de 1/6. Se um dado é lançado seis vezes não se tem uma probabilidade de 100% de se obter um “5”, mais sim, 6 chances de 1/6.

Dois compostos carcinogênicos podem ocasionar males diversos (câncer no fígado e câncer no pulmão, por exemplo). A exposição a estes dois compostos não acarretaria, necessariamente, em um risco igual a soma dos dois riscos considerados individualmente.

Contudo, a soma dos riscos devidos à exposição a compostos carcinogênicos é uma praxe internacional (a favor da segurança), corroborada pela EPA (1989) e pela CETESB (2004).

⁹ Os estudos toxicológicos indicam que a aproximação linear num modelo de doses pequenas é válida para riscos menores ou iguais a 0,01. Riscos maiores que 1% deverão ser estimados em modelos não-lineares (USEPA, 1989).

Define-se assim o risco total como sendo o somatório de todos os riscos individualmente considerados.

$$Risco-c_t = \Sigma Risco-c_i \quad (5)$$

Para o cálculo dos efeitos não carcinogênicos parte-se da premissa que existe um determinado nível de exposição abaixo do qual se estima que não há efeito negativo para a população (até mesmo para receptores mais sensíveis como crianças e idosos).

Define-se, portanto, a dose de referência (*RfD*) como o limite máximo de quantidade que determinado composto que, em caso de ingestão, não geraria efeitos negativos. Calcula-se o quociente de perigo (*HQ*) como sendo a razão entre a dose de ingresso e a dose de referência. O índice de perigo (*HI*), a exemplo do risco incremental total, é dado pelo somatório de todos os quocientes de perigo:

$$HI = \Sigma HQ_i \quad (6)$$

onde o sub-índice *i* indica cada uma das rotas de exposição e compostos identificados.

É importante lembrar que o índice de perigo indica o potencial de um efeito não carcinogênico adverso à saúde. Não se trata, portanto, de um risco probabilístico.

O limite de uma unidade para o índice de perigo é internacionalmente aceito como o valor a partir do qual há um indicativo de um potencial dano à saúde humana (LaGrega, 1994 e USEPA, 1989).

2.3.5. Estabelecimento de metas de remediação

A metodologia de avaliação de risco determina que, em se verificando um risco inaceitável, calculam-se as metas de remediação para a área contaminada. As metas de remediação são obtidas através de uma retro-análise do cálculo do risco ou do índice de perigo. Partindo de um risco aceitável como, por exemplo, $1,0 \times 10^{-5}$, isto é uma chance a cada 100.000, pode-se calcular a concentração do composto. Esta concentração, abaixo da qual o risco é considerado aceitável, é chamada de meta de remediação baseada no risco (MRBR).

De forma análoga, considerando o índice de perigo igual à unidade como tolerável, pode-se calcular a concentração do composto abaixo da qual o índice de perigo seja menor que 1. A concentração assim calculada é também chamada de meta de remediação baseada no risco (MRBR) sob recomendação da CETESB (2004), a despeito de não haver propriamente cálculo de risco e sim de índice de perigo.

A escolha da técnica apropriada e a execução da remediação, embora esteja contida dentro de alguns roteiros de avaliação de risco (RAGS), é claramente uma nova atividade. A remediação é uma atividade posterior à avaliação de risco e terá nela os subsídios relativos ao grau de risco atual e futuro para que, através de técnicas apropriadas, se alcance o grau de risco aceitável.

2.4. Metodologia RBCA

Existem diversos roteiros com o objetivo específico de guiar um processo de *AqR* em áreas contaminadas. Estes roteiros, em geral, são desenvolvidos com o objetivo de facilitar e padronizar as análises.

Dentre estes roteiros destacam-se a Metodologia Holandesa e o RBCA.

O *RBCA* (*Risk Based Corrective Action*) é um guia para tomada de decisão baseado no risco que consiste, em última análise, num procedimento para se quantificar o risco de forma racionalizada a fim de prover a melhor e mais barata solução a ser dada a uma determinada área contaminada.

O *RBCA* é um roteiro para avaliação de risco desenvolvido pela *ASTM* (*American Society for Testing Materials*). Este é possivelmente o mais popular roteiro para avaliação de risco e se encontra disciplinado em duas normas: E1730 e E2081-0. A primeira (1995) tem aplicação restrita a contaminações por hidrocarbonetos do petróleo, enquanto a segunda (2000) presta-se a qualquer tipo de contaminante (ASTM, 1999).

A idéia básica é de se proceder à avaliação de risco inicialmente de forma mais protetora possível e com dados mais genéricos. Com o avanço do processo ganha-se em sofisticação em amostragens e análises para uma avaliação mais precisa. A metodologia *RBCA* é escalonada em três estágios.

O roteiro do *RBCA* assume que toda avaliação de risco traz, em si própria, um grau de incerteza, por esta razão sugere que ao se avançar nos estágios, diminua-se o nível protetório na proporção em que seja diminuído o nível de incertezas.

O *RBCA* não foi instituído através de uma lei, tampouco trata-se de regulamento de um órgão ambiental qualquer; é sim uma norma técnica, assemelhada às normas *ISO* ou àquelas publicadas pela *ABNT* no Brasil e, portanto, não goza de coercitividade¹⁰. A seqüência estabelecida pelo *RBCA* é de seguimento facultativo e voluntário nos EUA, a menos que, alguma agência ambiental o institua obrigatoriamente o que, contudo, exige uma séria de adaptações.

¹⁰ Coercitividade é uma característica de algumas normas (em especial das leis) de serem de obediência obrigatória concedendo-se ao Estado o poder de fazer segui-las através de mecanismos de persuasão e constrangimento.

A aplicação do procedimento proposto pela E2081 exige que uma série de decisões técnicas (e.g. os métodos de amostragem do material) e políticas (e.g. o nível de risco tolerado) tenham lugar anteriormente (E2081).

O *RBCA* só tem lugar em processos de avaliação de risco de áreas já contaminadas e, portanto não pode ser utilizada como um procedimento preventivo.

Dadas as dificuldades técnicas e financeiras de se proceder uma análise sempre com os melhores procedimentos, o *RBCA* institui uma seqüência racional e razoável em diferentes níveis.

Quanto mais escassos forem os dados disponíveis, as idealizações serão exageradas no sentido de aumentar a exposição e, portanto, mais protetória será a análise. Com o ganho de conhecimento, as idealizações serão substituídas por dados reais e, conseqüentemente, mais realista será a análise.

O princípio básico é o seguinte: se com poucos dados e assumindo os parâmetros desconhecidos como os menos favoráveis, e, ainda assim, o risco for tolerável, não haverá necessidade de novas ações. Se, por outro lado, os estudos iniciais indicarem um risco não tolerável, passar-se-á para um novo estágio onde as idealizações serão substituídas por dados mais precisos. Persistindo o risco no nível máximo (terceiro estágio), proceder-se-á necessariamente à remediação da área contaminada (E2081).

Nada impede, contudo, que a remediação seja procedida nos primeiros níveis, pois, o julgamento profissional adequado sempre justificará uma atitude protetória.

3. Análise de risco no ordenamento jurídico brasileiro

3.1. Tratamento jurídico da *AqR*

A análise quantitativa de risco não se apresenta regulada de modo específico por qualquer texto legal¹¹ brasileiro. Não há no país qualquer lei, ou outro texto legislativo, que exija, autorize expressamente ou regule passo a passo e de forma geral uma metodologia de *AqR*.

No Estado de São Paulo, há uma recente instrução para a aplicação de avaliação de risco para áreas contaminadas expressa no Manual de Gerenciamento de Áreas contaminadas do órgão ambiental local (CETESB, 2001).

Este documento tem caráter administrativo, uma vez que foi desenvolvido por um órgão da administração pública estadual e, portanto, não se trata de um texto legislativo.

A inexistência de lei (em sentido estrito) que regule especificamente a aplicação de *AqR* na esfera nacional, por si só, não é um fato impeditivo à sua aplicação. Isso porque, predomina na seara jurídica o entendimento de que não se admite lacuna no direito. O ordenamento jurídico não se compõe apenas de leis e demais atos normativos, mas é um organismo complexo e completo que dá solução a todos os casos, quer regulados especificamente ou não¹².

¹¹ Os textos legais são as leis em sentido amplo (e.g. constituição, leis ordinárias e leis complementares) bem como os atos normativos e.g. decretos, portarias.

¹² Bobbio (1982) relata que a idéia de que o Direito não admite lacuna (dogma da completude) “é o princípio de que o ordenamento jurídico seja completo para fornecer ao juiz, em cada caso, uma

A inexistência de uma norma que regule detalhadamente determinada matéria exige que a solução do problema seja balizada por técnicas interpretativas do ordenamento jurídico. Há diversas técnicas de exegese, contudo, notadamente no campo ambiental, a interpretação da lei se dará em observância, naturalmente, aos princípios de direito ambiental.

Atualmente encontra-se superada a discussão a respeito do valor normativo dos princípios. Hodiernamente é amplamente aceito o conceito introduzido nos trabalhos de Esser, Alexy, Crisafulli e Ronald Dworkin, que consideram os princípios como sendo espécies do gênero norma (Bonavides, 1998). Normas englobam, portanto, os princípios e as regras (demais normas).

O papel dos princípios na interpretação é apresentada na clássica definição de Mello:

[Princípio] é, por definição, mandamento nuclear de um sistema, verdadeiro alicerce dele, disposição fundamental que se irradia sobre diferentes normas compondo-lhes o espírito e servindo de critério para sua exata compreensão e inteligência, exatamente por definir a lógica e a racionalidade do sistema normativo, no que lhe confere a tônica e lhe dá sentido harmônico. É o conhecimento dos princípios que preside a inteligência das diferentes partes componentes do todo unitário que há por nome sistema jurídico positivo. Violar um princípio é muito mais grave que transgredir uma norma qualquer. A desatenção ao princípio implica ofensa não apenas a um específico mandamento obrigatório mas a todo o sistema de comandos. É a mais grave forma de ilegalidade ou inconstitucionalidade, conforme o escalão do princípio atingido, porque representa insurgência contra todo o sistema, subversão de seus valores fundamentais, contumélia irremissível a seu arcabouço lógico e corrosão de estrutura mestra. (Mello, 2003)

O princípio pode estar escrito expressamente em uma norma, sendo então classificado como princípio expresso ou subjacente aos demais mandamentos de uma norma, caso em que é classificado como princípio implícito.

solução sem recorrer à equidade” acrescentando que este entendimento, que já foi dominante, permanece dominante em parte após, principalmente das críticas da Escola do Direito Livre (representada por Eugen Ehrlich) que acredita que “o Direito constituído está cheio de lacunas e, para preenchê-las, é necessário confiar principalmente no poder criativo do juiz”. Esta discussão, que além de aspectos jurídicos, envolve a Sociologia e a Filosofia, não será alimentada aqui, por entender-se suficiente a idéia de a inexistência de lei que regule a *AqR*, não significa sua inaplicabilidade. Ademais, no direito brasileiro há dispositivo expresso no sentido de não se admitir lacuna na lei (artigo 126 do Código de Processo Civil).

Os princípios expressos e implícitos que se apresentarem na Constituição Federal, gozam de hierarquia superior aos demais princípios.

Há autores (Zago, 2001) que entendem que os princípios constitucionais são superiores hierarquicamente até mesmo às regras constitucionais.

Mesmo autores que defendem não haver hierarquia entre os princípios e as demais normas, acreditam que estas, “contudo, hão sempre de ser interpretadas de molde a dar maior eficácia possível ao princípio a que se encontram sujeitas” (Bastos, 2001).

Os princípios ambientais que compõem o ordenamento jurídico brasileiro desempenham “a função de orientar a atuação do legislador e dos poderes públicos na concretização e cristalização dos valores sociais relativos ao meio ambiente, harmonizando as normas do ordenamento ambiental, direcionando a sua interpretação e aplicação.” (Tupiassu, 2003).

Ademais, não se prestam os princípios apenas como bússola para o legislador, mas, principalmente para o interprete do direito que, frente a um caso concreto, deverá interpretar as demais normas de forma harmônica aos princípios ambientais.

3.2. Princípios do direito ambiental

Não há uma classificação unânime de quais seriam os princípios ambientais. A Conferência das Nações Unidas, de Estocolmo, em julho de 1972, enumerou 26 princípios ambientais, considerados prolongamento da Declaração Universal dos Direitos do Homem. A doutrina, contudo, adota diversos critérios. Machado (2000), por exemplo, enumera sete princípios, enquanto Gomes (1999), reúne a principiologia ambiental em onze mandamentos.

Para o entendimento do tratamento jurídico da *AqR*, é pertinente o entendimento do princípio do acesso eqüitativo aos recursos naturais, do direito fundamental à qualidade do meio ambiente, do caráter público dos bens ambientais, do princípio da prevenção, do princípio da precaução, da exigibilidade prévia de estudo de impacto ambiental, do desenvolvimento sustentável, da proteção da biodiversidade, da defesa do meio ambiente, do usuário-pagador e do poluidor-pagador e da responsabilização ambiental.

3.2.1.

Princípio do acesso eqüitativo aos recursos naturais

Os recursos naturais como o ar, as águas, o solo, o patrimônio genético e as belezas naturais, por serem universais, devem ter seu acesso garantido a todos o que inclui também as futuras gerações. A eqüidade no acesso garante que todos aqueles que estejam em condição semelhante, tenham o mesmo acesso aos bens naturais.

Machado (2000) observa que o acesso pode se dar de três formas: pela fruição direta, pela poluição e pela contemplação da paisagem. Desta análise observa-se que a poluição, em especial, também é uma forma lícita de acesso aos recursos naturais. Mesmo dentro do caráter protecionista da legislação ambiental, não está afastada a legalidade da ação poluidora. O que não se permite, contudo, é que a atividade poluidora não seja eqüitativamente distribuída.

Dentro do princípio do acesso eqüitativo aos recursos naturais se verifica, por exemplo, que a legalidade do ato de um cidadão possuir e usar um automóvel à gasolina, que sabidamente polui o ambiente, só se justifica a partir do momento em que se aceite que esta conduta, mesmo que realizada por todos os cidadãos, resulte em um dano ambiental tolerável. Caso contrário, isto é, se esta conduta é considerada intolerável, não se afigura eqüitativo que alguns possam poluir o ambiente desta forma.

O princípio do acesso equitativo aos recursos naturais pode ser extraído do art. 225 da constituição que garante a todos o “direito ao meio ambiente ecologicamente equilibrado, bem de uso comum do povo e essencial à sadia qualidade de vida”.

A Lei 9.433 de 1997 consagra o princípio do acesso equitativo de forma mais específica do que fez a Constituição, em relação aos recursos hídricos, especificamente ao dispor em seu artigo 11 que o “regime de outorga do direito de uso dos recursos hídricos tem como objetivos assegurar o controle qualitativo e quantitativo dos usos da água e o efetivo exercício dos direitos de acesso à água”.

3.2.2.

Princípio do direito fundamental à qualidade do meio ambiente

A Declaração de Estocolmo¹³ abriu caminho para que constituições posteriores, a exemplo da Constituição brasileira de 1988, reconhecesse o direito ao meio ambiente ecologicamente equilibrado como um direito fundamental (Silva, 2002).

Um direito fundamental¹⁴ é aquele sem o qual a “pessoa humana não se realiza, não convive e, às vezes, nem mesmo sobrevive” que tem como matriz o direito à vida. A tutela da qualidade do meio ambiente tem caráter instrumental, pois através dela se protege a vida humana (Silva, 1998).

Partindo da primazia dos direitos da pessoa humana, o princípio do direito humano fundamental do meio ambiente seria o mais importante princípio de

¹³ Declaração das Nações Unidas para o Meio Ambiente assinada em Estocolmo em 1972.

¹⁴ A Constituição federal classifica os direitos fundamentais em os direitos e deveres individuais e coletivos, os direitos sociais, os direitos de nacionalidade, de cidadania (direitos políticos) e por fim, as garantias constitucionais. A classificação dominante, contudo, é aquela apresentada por Bobbio onde os direitos são classificados historicamente em gerações onde os direitos de primeira geração (da liberdade) que seriam os direitos civis e políticos; os de segunda geração (de igualdade) seriam os direitos econômicos, sociais e culturais e os de terceira geração (fraternidade) seriam os direitos de solidariedade onde se incluem os direitos do consumidor e o direito ao meio ambiente ecologicamente equilibrado.

direito ambiental e, a exemplo do princípio do acesso equitativo, encontra-se expresso artigo 225 da Constituição (Gomes, 1999).

3.2.3.

Princípio do caráter público dos bens ambientais

A Constituição (art. 225) atribuiu caráter público aos recursos naturais. Este caráter público difere daquele referente à clássica dicotomia entre bens públicos e privados. Não se pode dizer, por exemplo, que as águas subterrâneas tenham a mesma disciplina jurídica de uma via pública ou de uma avenida central que também são bens públicos. Por esta razão, autores com Fiorillo (2002), classificam os recursos naturais como um terceiro gênero, estranho à antiga classificação de bens em públicos e privados, que seriam os bens ambientais.

Caracterizar os recursos naturais como bens ambientais, não lhes retira propriamente seu caráter público (Bastos, 2004), mas, pelo contrário, lhes garante uma maior proteção, pois além de todas as garantias dadas aos bens públicos, gozam os bens ambientais de especial tutela, destacadamente, dos demais princípios que lhes são próprios.

Como corolário do princípio do caráter público dos bens ambientais, aplicam-se também princípios tipicamente de direito administrativo adaptados às peculiaridades ambientais como o princípio da supremacia do interesse público na proteção do meio ambiente (Gomes, 1999, p. 174 e Tupiassu, 2003); o princípio da indisponibilidade do interesse público na proteção do meio ambiente (Gomes, 1999); e o princípio da obrigatoriedade da intervenção estatal (Gomes, 1999) e o princípio da obrigatoriedade da introdução da variável ambiental nas políticas públicas (Tupiassu, 2003).

Em linhas gerais, o princípio da supremacia do interesse público garante que, em frente a um conflito envolvendo interesses privados e interesses da sociedade de forma geral em matéria ambiental, a solução do litígio deve dar primazia ao interesse público.

O princípio da indisponibilidade do interesse público na proteção do meio ambiente, por sua vez, proíbe, por exemplo, que um órgão público, um particular ou mesmo o próprio legislador, transija em matéria ambiental, abrindo mão de um interesse que não lhe pertence, mas sim à sociedade.

A obrigatoriedade da intervenção estatal é uma consequência lógica do caráter público do bem ambiental, e, neste sentido se posicionou o legislador constituinte ao redigir o § 1º do art. 225 da Constituição Federal, que estabelece as situações em que o poder público é obrigado a interferir quando se tratar de matéria ambiental.

O dispositivo constitucional de maior aplicabilidade para questões de *AqR* é a alínea *f* do referido dispositivo que obriga o poder público a interferir para “controlar a produção, a comercialização e o emprego de técnicas, métodos e substâncias que comportem *risco* para a vida, a qualidade de vida e o meio ambiente” (grifamos).

O conceito de risco à saúde humana objeto das metodologias de *AqR* aqui abordadas, é perfeitamente englobado pelo termo *risco* a que se refere o dispositivo constitucional acima.

Como decorrência lógica do princípio do caráter público dos bens ambientais e dos demais princípios decorrentes, evidencia-se que cabe ao poder público, obrigatoriamente, introduzir a variável ambiental nas políticas públicas.

3.2.4. Princípio da prevenção

O artigo 2º da Lei 6.938 de 1981 deu *status* de princípio ambiental à obrigatoriedade da proteção dos ecossistemas, tanto no que se refere à preservação

Análise de risco no ordenamento jurídico brasileiro

das áreas representativas bem como no que diz respeito à preservação das áreas ameaçadas de degradação.

Este princípio exorta à proteção do meio ambiente exigindo-se da sociedade e dos poderes públicos uma posição preservacionista em relação ao meio ambiente.

O princípio da prevenção garante que a ineficácia de ações fundadas em preceitos puramente utilitaristas, garantindo que o meio ambiente seja considerado um valor maior.

3.2.5. Princípio da precaução

3.2.5.1. Histórico e definição

O princípio da precaução remonta ao direito alemão (*Vorsorgeprinzip*) desde a década de 1970, sendo estabelecido pela doutrina daquele país que a mitigação dos riscos ambientais deve se dar em observância ao princípio da precaução, o qual requer a redução da extensão, da frequência ou da incerteza do dano (Machado, 2000).

O princípio da precaução foi estabelecido expressamente pela Conferência das Nações Unidas para o Meio Ambiente e Desenvolvimento de 1992 no Rio de Janeiro ao dizer que:

Quando houver ameaça de danos sérios ou irreversíveis, a ausência de absoluta certeza científica não deve ser utilizada como razão para postergar medidas eficazes e economicamente viáveis para prevenir a degradação ambiental.¹⁵

¹⁵ Tradução livre do inglês: "Where there are threats of serious irreversible damage, lack of full scientific certainty shall not be used as a reason for postponing cost-effective measures to prevent environmental degradation."

Uma interpretação literal deste princípio mostraria que sua aplicação se restringe a danos sérios ou irreversíveis. Não há, contudo, nenhuma razão para acreditar que o princípio não se aplique a danos ambientais menos intensos.

Outro ponto da definição que chama atenção é a referência à falta de “absoluta certeza científica”. A ausência de certeza científica absoluta é uma regra quase universal, visto que dificilmente haverá alguma atividade humana cujo impacto seja estimado com “absoluta certeza científica”. O próprio termo “certeza científica” remonta a uma digressão filosófica, o que não se fará aqui podendo ser objeto de estudo próprio.

Outro elemento importante da definição acima é seu caráter negativo i.e o princípio não estimula nem determina uma conduta pró-ativa, mas apenas assegura que as incertezas científicas não sejam um obstáculo à preservação ambiental. O princípio, da forma que se lê no texto da convenção das Nações Unidas, determina apenas que evento potencialmente danoso *não* será utilizado como pretexto para postergar medidas eficazes.

Na busca de uma definição mais protetiva para o ambiente, Goldstein apresenta a definição de Wingspread de 1997 para o princípio da precaução (2004).

Quando uma atividade aumentar os danos à saúde humana ou ao meio ambiente, medidas de precaução devem ser tomadas mesmo em situações onde as relações causa-efeito não forem cientificamente estabelecidas.¹⁶

A definição de Wingspread é coerente com a definição das Nações Unidas, contudo apresenta uma ação positiva. As medidas devem ser tomadas sempre que se verifiquem as situações de incerteza e não apenas que as medidas de prevenção não sejam postergadas como propõe a primeira definição.

¹⁶ Tradução livre do inglês: “When an activity raises threat of harm to human health or the environment, precautionary measures should be taken even if some cases and effect relationships are not fully established scientifically.”

Em todo caso, pode se extrair de ambas as definições que o princípio da precaução é uma norma valorativa que estabelece duas situações: em primeiro lugar reconhece a complexidade dos problemas ambientais e as limitações do método científico; num segundo momento elege o meio ambiente como um valor importante o suficiente para que as incertezas científicas possam ser subestimadas, impondo a todos (poder público e a sociedade) uma atitude protecionista e razoável em relação às atividades potencialmente danosas ao meio ambiente.

3.2.5.2. Crítica ao princípio da precaução

Starr (2003) acredita que o princípio da precaução é uma idéia meramente retórica que em nada contribui para as tomadas de decisão no âmbito ambiental. Acrescenta que, dada à complexidade das situações e a limitação dos critérios científicos, os órgãos políticos teriam sempre que decidir entre as opções de continuar um determinado empreendimento ou não, sem qualquer garantia de qual das opções é a melhor para a sociedade.

A comissária da União Européia Wallstrom, acrescenta que os EUA não reconhecem o princípio da precaução nas questões comerciais internacionais por considerá-lo parte de uma doutrina nebulosa, criada pelos europeus com o único objetivo de validar barreiras comerciais contra todos os produtos produzidos com maior produtividade fora de suas fronteiras (Goldstein, 2004).

As duas posições levantadas são cínicas e limitadoras da interpretação possível ao princípio precaucionista¹⁷. Não parece plausível que a falta de certeza científica invalide o princípio, mas sim o contrário, visto que sua aplicação visa justamente dar orientação para os casos de incerteza.

O princípio a precaução se presta a guiar tanto a interpretação das questões ambientais quanto as decisões políticas, minimizando os efeitos negativos que

¹⁷ O termo *cínico* é empregado aqui no sentido de que as referidas definições do princípio da precaução visam dar utilidade prática imediata ao princípio em detrimento a qualquer análise

uma atividade possa gerar, mesmo que não seja previsível dada a ignorância científica sobre determinado assunto.

A complexidade da questão ambiental é um fato impeditivo de adoção de normas simplistas como, por exemplo, a mera adoção de limites toleráveis de contaminação aplicáveis a todos os casos. A precaução é um princípio ontologicamente válido e essencial para lidar com questões complexas como a contaminação ambiental.

3.2.5.3.

Distinção entre os princípios da prevenção e da precaução

Enquanto o princípio da prevenção visa evitar atividades sabidamente danosas ao meio ambiente, o princípio da precaução atua nos casos em que as incertezas permeiam determinada questão. As dúvidas no âmbito técnico compelem a sociedade a se *precaver* sobre a possibilidade de um dano incerto (aplica-se o princípio da precaução). Por outro lado, se uma atividade é seguramente danosa, cabe à sociedade evitar, ou prevenir este evento. A similitude semântica entre os termos “precaução” e “prevenção” não deve confundir os conceitos de ambos os princípios, visto serem eles diferentes na sua essência.

3.2.5.4.

Posição jurídica do princípio da precaução

Segundo orientação dos nossos tribunais, a assinatura de uma declaração internacional (como o que ocorreu na Conferência das Nações Unidas para o Meio Ambiente e Desenvolvimento de 1992), não faz com que o seu texto passe a integrar o ordenamento jurídico brasileiro.

axiológica. Neste sentido a definição de Wallstrom é conhecida na comunidade ambiental como “a definição cínica do princípio da precaução” (Goldstein, 2004).

Para fazer parte do direito interno, necessário se faz a ratificação pelo Congresso Nacional do texto aprovado. No Brasil há duas convenções internacionais ratificadas que trazem, em seu bojo, o princípio da precaução, são elas: Convenção da Biodiversidade Biológica, ratificada através do Decreto Legislativo 2 de 3.2.1994, e a Convenção-Quadro das Nações Unidas sobre a Mudança do Clima, ratificada através do Decreto Legislativo 1 de 3.2.1994 (Machado, 2000 e Silva, 2003).

Em ambos os documentos o princípio da precaução encontra-se em forma mais restritiva do que a declaração de Wingspread, o que, contudo, dado a natureza abstrata dos princípios, em nada impede a interpretação mais extensiva deste mandamento, devendo, portanto, interpretar-se o princípio da forma mais geral.

Gomes, por sua vez, defende ainda a tese de ser o princípio da precaução uma norma implícita da Constituição Federal visto que há nela vários mecanismos preventivos embasados na precaução como na obrigatoriedade de estudo prévio de impacto ambiental e na necessidade de consulta popular em audiências públicas em questões ambientais de grande monta (1999).

3.2.5.5. Aplicabilidade do princípio da precaução na AqR

O princípio da precaução, por tratar diretamente das incertezas técnicas inerentes às questões ambientais, tem especial aplicabilidade nas questões de *AqR* onde as incertezas, como será visto adiante, desempenham papel preponderante.

Em atividades prévias, como no caso do licenciamento ambiental ou de obtenção de qualquer outra licença ou autorização, o princípio da precaução estabelece que o ônus de provar que a técnica ou processo a ser utilizado é ambientalmente seguro (Silva, 2003, p. 112 e Goldstein, 2004) cabe ao empreendedor. Portanto não caberia ao órgão ambiental provar a insegurança do projeto, pois tal ônus seria dos responsáveis pelo empreendimento.

Como a *AqR* é, em geral, um procedimento posterior, ou seja, é utilizada quando já há uma contaminação, a questão do ônus da prova não é tão simples. Cabe ao responsável pelo empreendimento sempre que se tiver certeza da existência de uma contaminação, provar a sua segurança, ou seja, que a contaminação é inócua. Não seria razoável impor ao empreendedor o ônus de provar a qualquer tempo a segurança de uma contaminação eventual, pois tal interpretação geraria uma considerável insegurança jurídica.

Cabe, assim, ao empreendedor, dentro da interpretação dada ao princípio da precaução, provar a segurança de seu empreendimento durante o processo de licenciamento ambiental e em qualquer momento em que se verifique uma contaminação efetiva.

Outra questão levantada tem relação com os aspectos psicológicos das pessoas encarregadas de tomar decisões no âmbito ambiental. Por mais subsídios técnicos que se disponha, não há como escapar que toda tomada de decisão é um processo político e, portanto, altamente influenciáveis por fatores humanos. Estudos de psicologia e neurolinguística sugerem que o princípio da precaução tem aplicabilidade não apenas na falta de métodos analíticos, “científicos” e confiáveis sendo recomendável, também, como forma de precaução, a aplicação da sensação leiga de risco (intuição) sempre que o tomador de decisão estiver lidando com problemas complexos, incertos e de grandes proporções (Slovic *et al*, 2004).

Neste aspecto o “princípio da precaução deve ser assumido como um princípio jurídico-político orientador da política ambiental, e como princípio estruturante do direito do ambiente, que impõe uma diretriz legiferante no sentido da criação de instrumentos jurídicos necessários para assegurar a conservação do *status quo* ambiental. Ademais, instala o debate necessário a fim de orientar as decisões políticas conseqüentes no marco da participação democrática e plural” (Hammerschmidt, 2003).

3.2.6.

Princípio da exigibilidade do estudo prévio de impacto ambiental

Frente às exigências de prevenção e precaução, a Constituição consagrou o princípio instrumental da exigência de estudo prévio de impacto ambiental. A exigibilidade do estudo ambiental é um verdadeiro princípio de direito ambiental (Gomes, 1999).

Este princípio encontra-se expresso no art. 225, §1º, IV, da Constituição Federal, onde se determina que o poder público é responsável por “exigir, na forma da lei, para instalação de obra ou atividade potencialmente causadora de significativa degradação do meio ambiente, estudo prévio de impacto ambiental”.

O *EIA* é o primeiro momento em que se deve aferir o risco ambiental. “Diagnosticado o risco, pondera-se sobre os meios de evitar o prejuízo” (Machado, 2000).

3.2.7.

Princípio do desenvolvimento sustentável

O desenvolvimento sustentável é um ideal que está fortemente relacionado às futuras gerações. Significa que a atividade humana deve respeitar não apenas o acesso aos bens ambientais da geração presente, como também deve assegurar este acesso às gerações vindouras. Trata-se da imposição legal da solidariedade diacrônica no âmbito ambiental.

O desenvolvimento sustentável é um princípio constitucional ambiental (Gomes, 1999, p. 179 e Tupiassu, 2003) e está expresso no *caput* do artigo 225 da Carta Magna.

O desenvolvimento sustentado é um princípio que legitima avaliações de risco a longo prazo. Neste aspecto, as *AqR* na área de geotecnia devem levar em

considerações os efeitos futuros e não apenas os riscos iminentes. Não raro, recomendam-se simulações de transporte de contaminantes nas águas subterrâneas para várias décadas à frente.

3.2.8. Princípio da proteção da biodiversidade

A Constituição não se preocupou estritamente com a proteção do meio ambiente no que lhe toca ao homem. Também faz menção expressa à proteção da biodiversidade (art. 255, §1º, I e II) elevando-a ao *status* de princípio constitucional ambiental (Gomes, 1999), ainda que a justificativa final deste princípio seja a própria preservação da espécie humana (Gomes, 1999).

O princípio da proteção da biodiversidade tem na avaliação de risco ecológico (item 1.2.2.1.), mais do que pertinente à *AqR*, um de seus grandes instrumentos de efetividade.

3.2.9. Princípio da defesa do meio ambiente

Apesar da amplitude da sua denominação, o princípio da defesa do meio ambiente é um princípio de ordem econômica que visa estritamente condicionar a atividade produtiva ao respeito ao meio ambiente (Gomes, p. 184).

A ordem econômica é definida como sendo “o plexo normativo, de natureza constitucional, no qual são fixadas a opção por um modelo econômico e a forma como deve se operar a intervenção do Estado no domínio econômico” (Silva Neto, 2001).

A defesa do meio ambiente é princípio constitucional expreso (art. 170, IV), nos seguintes termos: “a ordem econômica fundada na valorização do trabalho humano e na livre iniciativa, tem por fim assegurar a todos uma

existência digna, conforme os ditames da justiça social, observando os seguintes princípios [...] VI- defesa do meio ambiente.”

3.2.10. Princípio do usuário-pagador e do poluidor-pagador

A Constituição estabeleceu que os bens ambientais pertencem a todas as pessoas. Não se pode dizer que os bens ambientais tenham caráter meramente público, pois neste caso poderia haver, por exemplo, a sua privatização. Não é possível, portanto, dada a ordem constitucional que haja privatização dos bens ambientais. Os bens ambientais não são considerados nem públicos e nem privados (Fiorillo, 2002), mas sim pertencentes a todo o povo.

Assim sendo, “o uso gratuito destes recursos naturais tem representado um enriquecimento ilegítimo do usuário, pois a comunidade que não usa o recurso, ou que usa em menor escala, fica onerada” (Machado, 2000).

O poluidor “que usa gratuitamente o meio ambiente para nele lançar os poluentes invade a propriedade pessoal de todos os outros que não poluem, confiscando o direito de propriedade alheia” (Machado, 2000).

Sob esta ótica, a Lei 6.938 de 1981, instituiu os princípios do usuário-pagador e do poluidor pagador em seus artigo 4º, VII ao estabelecer que a Política Nacional do Meio Ambiente visará “à imposição, ao usuário da contribuição pela utilização dos recursos ambientais com fins econômicos” e “a imposição ao poluidor e ao predador da obrigação de recuperar e/ou indenizar os danos causados”.

3.2.11.

Princípio da reparação ou da responsabilização pelo dano ambiental

O princípio da reparação impõe ao causador de um dano ambiental a responsabilidade de sua reparação. Trata-se de princípio constitucional expresso no artigo 225, § 3º:

§3º As condutas e atividades consideradas lesivas ao meio ambiente sujeitarão os infratores, pessoas físicas ou jurídicas, a sanções penais e administrativas, independentemente da obrigação de reparar os danos causados.

A Lei 6.938 de 1981 determina que a responsabilidade pelo dano ambiental é de natureza objetiva. Isso significa que o causador de um dano ecológico será obrigado a repará-lo e indenizá-lo independentemente de ter agido com culpa.

Krell (1998) questiona a responsabilização por dano ambiental em atividades desenvolvidas dentro dos limites legais ou sob autorização válida expedida pelo poder público.

O referido autor estabelece o critério de que em casos de provocação de dano ambiental difuso¹⁸, dentro de desenvolvimento normal de uma atividade licenciada validamente pelo poder público, a responsabilidade do causador do prejuízo ecológico será ponderada pela determinação de que sua conduta se deu ou não dentro dos ditames da boa-fé.

Krell (1998), balizado pelo princípio da segurança jurídica, ressalta que na “indagação da existência desta boa-fé, devem ser considerados o poder econômico do poluidor, a sua capacidade técnica e estrutura administrativa, que podem levar a presunção da sua “má-fé” em relação a seu comportamento”.

¹⁸ O termo *difuso* está relacionado com a impossibilidade de se determinar todos os prejudicados e a medida em que cada indivíduo é afetado por uma determinada conduta. Em matéria ambiental,

3.2.12.

Diferenciação entre o princípio do poluidor-pagador e o princípio da reparação ou responsabilização pelo dano ambiental

A imposição de custos ao processo produtivo que degrade o meio ambiente não se confunde com a obrigação de reparar o dano ambiental.

No primeiro caso o foco é dado às atividades poluidoras autorizadas pela ordem jurídica. Assim, por exemplo, estaria de acordo com o princípio do poluidor-pagador, em tese, uma lei que eventualmente criasse uma “taxa” ambiental¹⁹ para os proprietários de veículos automotores, visto que, em sua atividade habitual, há poluição efetiva ao meio ambiente.

Com relação ao princípio da reparação, o foco é diverso. Trata-se da obrigatoriedade de reparar o meio ambiente, precipuamente, em atividades não autorizadas, como por exemplo, em um acidente.

Há caso, contudo, que a distinção de ambos os princípios não é tão clara, como por exemplo, em uma atividade que, mesmo autorizada pelo poder público, gere consideráveis danos ao meio ambiente e que os mesmos reclamem reparação. Nestes casos é prudente a ressalva feita por Machado ao dizer que os pagamentos pela poluição “não isentam o poluidor ou predador de ter examinada e aferida sua responsabilidade residual para reparar o dano” (2000) casos estes em que deve ser observado o mencionado critério de Krell.

3.3.

Competências ambientais

Os princípios fornecem as linhas gerais em que a *AqR* pode ser aplicada dentro dos preceitos legais brasileiros. Contudo, dentro de um estado federado como o Brasil, onde a cada ente federado (União, Estados, Municípios e Distrito

comumente os danos são de natureza difusa pois afetam a sociedade como um todo e cada indivíduo de diferentes formas.

¹⁹ Aqui o termo *taxa* não é utilizado com rigor jurídico. É preferível o termo *prestação* que indica tanto uma obrigação de ordem tributária (taxa, imposto, contribuições) como uma obrigação não tributária (tarifa, *e.g.*).

Federal) são destinadas diferentes atribuições, torna-se premente discutir as competências no âmbito ambiental.

As competências são as atribuições concedidas por lei a alguém para fazer alguma coisa, mais especificamente, “são as diversas modalidades de poder de que se servem os órgãos ou entidades estatais para realizar suas funções, suas tarefas, prestar serviços” (Silva, 2002).

Aqui se discutirá a respeito das competências legislativa (formal) e administrativa (material). Enquanto a primeira estabelece quais são os entes federados que podem legislar sobre determinada matéria, a segunda estabelece os limites da atuação do poder executivo de cada ente federado nesta matéria, ou seja, as matérias que a Administração poderá conhecer e decidir.

Em matéria de competência legislativa, no que se refere ao meio ambiente, cabe à União, em regra, estabelecer as normas gerais e aos Estados (ou ao Distrito Federal) estabelecer as normas de caráter suplementar que devem obediência aos preceitos das normas gerais. Trata-se, pois, de modalidade de competência concorrente (art. 24, VI, VII e VIII da Constituição Federal).

Em matéria de competência administrativa, a solução dada pela Constituição foi diversa daquela dada em matéria de competência legislativa. Cabe em comum, à União, aos Estados, ao Distrito Federal e aos Municípios proteger o meio ambiente e combater a poluição em qualquer de suas formas (artigo 23, VI da Constituição Federal). Esta solução visa dar maior proteção às questões ambientais.

A competência administrativa é sempre exercida com plenitude, isto é, não há hierarquia ou subordinação entre os entes federados nestas matérias. Isso significa, por exemplo, que um problema de contaminação seja tratado por órgãos municipais, estaduais e federais concomitantemente.

Da mesma forma, é razoável concluir que, na verificação da existência de uma determinada área contaminada, podem intervir todos os órgãos de proteção ambiental, qualquer que seja o ente federado a que se submeta.

3.4. Papel da avaliação de risco

A avaliação de risco é preponderantemente um procedimento posterior²⁰ (Kastemberg, 2004), o que significa que em geral se lança mão deste recurso depois de se verificar a possibilidade de existir um risco efetivo à saúde humana ou ao meio ambiente.

Os principais objetivos da *AqR* são, portanto: a) definir se houve dano ambiental; e b) delimitar a magnitude do dano ambiental em relação à saúde humana (quantificar), c) subsidiar decisões no gerenciamento de áreas contaminadas.

Ao constatar a existência de um dano ambiental abre-se caminho para a verificação da responsabilização. Pois, em geral, só há responsabilidade se houver dano.

A quantificação do dano é fundamental tanto na determinação da remediação, quanto na priorização desta.

Neste último aspecto (priorização) a avaliação de risco tem especial importância. Não raramente haverá em uma grande cidade, por exemplo, centenas de áreas contaminadas. Existe claramente uma impossibilidade material de se envidar esforços simultâneos para se remediar todas estas áreas. Esta impossibilidade tem caráter tanto técnico quanto financeiro.

²⁰ Nada impede e até se recomenda que *AqR* seja adotada em procedimentos prévios, como nos Estudos de Impacto Ambiental, conforme inclusive já se posicionou o CONAMA através da Resolução 305 de 12 de julho de 2002 que determinou a adoção de *AqR* para o caso de organismos geneticamente modificados; na Resolução 264, de 26 de agosto de 1999, em relação a resíduos em fornos rotativos de clínquer e na Resolução 316, de 29 de outubro de 2002 sobre o licenciamento de sistemas de tratamento térmico de resíduos.

A *AqR* serve, portanto, para se classificar as áreas contaminadas priorizando o esforço estatal naquelas em que o risco à saúde humana seja maior.

3.4.1. Âmbito administrativo

No âmbito administrativo a *AqR* pode ser regulada por órgãos ambientais federais, estaduais, distritais ou municipais. A CETESB, por exemplo, em seu Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas, propõe um esquema para a aplicação de *AqR*. No procedimento apresentado a avaliação de risco é classificada como uma das etapas no processo de recuperação de áreas contaminadas.

O gerenciamento de áreas contaminadas está baseado em duas partes: o processo de identificação e o processo de recuperação. O primeiro tem como objetivo a localização da área contaminada. O segundo processo visa tornar a referida área compatível para os fins a que se destina.

O gerenciamento de risco é dividido nas seguintes etapas: a) processo de identificação de áreas contaminadas (que inclui a definição da região de interesse; a identificação das áreas potencialmente contaminadas; a avaliação preliminar; a investigação confirmatória) e b) o processo de recuperação de áreas contaminadas (que inclui a investigação detalhada; a *avaliação de risco*; investigação para remediação; remediação; monitoramento).

Obviamente que a avaliação de risco não está, ontologicamente, presa ao roteiro de gerenciamento de áreas contaminadas proposto pelo órgão ambiental paulista. Trata-se de uma proposta para a efetivação do gerenciamento de áreas contaminadas, isto é, a CETESB criou um procedimento para pôr em prática a gestão de sítios contaminados, e, neste procedimento específico, a avaliação de risco aparece em um momento oportuno, dentro de uma seqüência organizada de ações.

O procedimento adotado pela CETESB, que apresenta forte influência do RAGS, é a expressão estatal mais detalhada sobre *AqR* no Brasil.

3.4.2. Âmbito judicial

As questões ambientais são intensamente tratadas na esfera administrativa, notadamente nos órgãos ambientais estaduais (a exemplo da CETESB, do CRA e da FEEMA). Pelo sistema legal brasileiro, contudo, toda e qualquer causa pode ser levada para a apreciação do judiciário. É o chamado princípio da inafastabilidade do controle judicial.

Em quaisquer casos, independentemente da intervenção estatal, o texto constitucional legitimou o Ministério Público (artigo 129, III), os cidadãos (artigo 5º, LXXIII) e as ONGs para, em qualquer casos de dano ambiental, possam provocar o Judiciário para obrigar o responsável a evitar, mitigar ou reparar danos ambientais.

Em casos de ação judicial, o judiciário se valerá, a fim de formar seu juízo, de prova técnica (perícia ambiental). Esta prova poderá, a depender do caso, ser composta por uma *AqR* para dar subsídio para que o juiz possa definir e delimitar o dano ambiental.

Desta forma, a *AqR* é instrumento hábil a compor prova técnica no âmbito judicial a fim de determinar a existência de dano ambiental bem como a delimitação de sua magnitude.

4. Análise quantitativa das incertezas

4.1. Características da metodologia de avaliação de risco

A rotina para se proceder a uma avaliação de risco, como vem sendo demonstrado, consiste em uma longa seqüência de cálculos e estimativas.

São características da metodologia: transdisciplinariedade; modularidade; incertezas; dados de entrada discretos; múltiplos meios, rotas e vias; não linearidade.

A transdisciplinariedade se evidencia pela necessidade de conceitos e técnicas de diversas áreas do conhecimento, notadamente da toxicologia e da engenharia.

A modularidade significa que métodos computacionais podem ser implementados em rotinas independentes e apenas uma quantidade discreta de dados processados será passada de um módulo para outro (Frey, 2002).

As inúmeras incertezas relacionadas com a metodologia de avaliação de risco, assim como a adoção de dados de entrada discretos, fazem com que seus resultados sejam interpretados com ressalvas.

As diversas possibilidades de exposição fazem com que uma avaliação de risco completa seja um estudo que demande muitos recursos (humanos e

materiais). Em geral, contudo, algumas formas de exposição dominam o problema que, não raro se reduzem a apenas um meio, uma rota e uma via.

Embora cada módulo possa ser considerado linear, a metodologia como um todo certamente não o é. Não há como se saber, *a priori*, como o resultado final irá reagir a uma perturbação em um determinado dado de entrada.

Todas estas características garantem que a metodologia de avaliação de risco seja um problema complexo²¹.

A forma tradicional de se proceder a uma avaliação de risco é a de considerar os parâmetros de entrada (*inputs*) como valores singulares e calcular o risco de forma determinística. Considerar todos os parâmetros como constantes, contudo, pode conduzir o trabalho a um resultado consideravelmente irreal.

A falta de consistência no resultado final poderá ocorrer por uma série de fatores, como por exemplo, estimativas extremamente protetórias²² quanto à adoção de valores máximos.

Em uma avaliação de risco, o considerável número de incertezas envolvidas faz com que a adoção de valores máximos razoáveis (concentração, tempo de exposição, expectativa de vida, permeabilidade), embora seja um procedimento defensável do ponto de vista dos princípios da precaução e da proteção, pode conduzir a um resultado extremo, totalmente fora da razoabilidade (LaGrega, 1994).

É uma prática comum na engenharia, e em outros ramos do conhecimento, o uso do 95º percentil como valor máximo razoável para a estimativa de um determinado parâmetro cujos valores possam ser considerados realizações de uma

²¹ O termo complexidade não é utilizado como sinônimo de extenso muito menos de difícil compreensão. Complexidade refere-se apenas às características de não linearidade, modularidade etc. A alta sensibilidade de sistemas físicos às condições iniciais também caracterizam a complexidade como no caso de sistemas da mecânica estatística (Bastos Filho, 125, 2003).

²² O termo “conservador” é frequentemente utilizado no sentido de protetório, protetor, ou pró-segurança, muito provavelmente devido ao anglicismo visto que em inglês a palavra *conservative*, tem esta acepção (cauteloso, preservador).

fdp como, por exemplo, na norma de concreto onde exige-se que a resistência dos ensaios dos corpos de prova tenha 95% de chance de estar acima do valor de resistência utilizado no projeto.

Como as rotinas de avaliação de risco apresentam diversas equações matemáticas, é evidente que não há como se saber, *a priori*, qual o grau de confiabilidade do resultado da avaliação de risco ao se adotar valores máximos razoáveis. Isto significa que a utilização do 95º percentil para os parâmetros da análise não garante que o resultado será o correspondente ao 95º percentil do risco (LaGrega, 1994).

Uma análise de sensibilidade tradicional, onde os parâmetros fossem perturbados em 25% para mais ou para menos, não produziria um resultado significativo porque muitos dos parâmetros envolvidos estariam próximos aos valores máximos razoáveis (LaGrega, 1994).

A sensibilidade da metodologia é melhor aferida ao se utilizar distribuições probabilísticas no lugar de estimativas pontuais para as variáveis incertas. Estas distribuições consideram as variáveis incertas como variáveis aleatórias (fruto de uma dada função densidade de probabilidade -*fdp*). Este processo é conhecido como modelagem estocástica (LaGrega, 1994) e pode ser implementado por métodos analíticos ou por simulação de Monte Carlo.

4.2. Incertezas e variabilidade

Os fenômenos físicos são comumente descritos através de equações matemáticas. Estas equações garantem que, uma vez que se tenha certeza sobre os parâmetros a serem utilizados, o valor da concentração em um determinado ponto em um tempo determinado será estimado com precisão. Os fenômenos que assim se comportam são classificados como determinísticos.

Na prática da engenharia, contudo, os parâmetros utilizados em modelos matemáticos não são conhecidos na sua exatidão devido a uma série de imprecisões comumente classificadas como incertezas, variabilidades e/ou ignorância. Por esta razão, apesar das equações matemáticas serem, a princípio, determinísticas, os resultados serão aleatórios, dadas às imprecisões nos parâmetros de entrada.

De modo geral pode-se dividir as incertezas em dois grupos: variabilidade e incerteza propriamente dita. A variabilidade é a heterogeneidade de valores dentro de uma população. A incerteza, por sua vez, está relacionada com a falta de conhecimento sobre o valor de determinada grandeza (Zheng *et al*, 2004, p. 553, 2004). Em outras palavras, a incerteza está relacionada com a imprecisão ou a perturbação da estimativa de um parâmetro enquanto a variabilidade relaciona-se com o grau em que esta estimativa pode ser generalizada no espaço, no tempo ou dentro de um grupo de indivíduos (USEPA, 1997). Parâmetros como a permeabilidade, portanto, são tanto variáveis, pois são diferentes para pontos diferentes, quanto incertos, visto que os métodos de amostragem ou ensaios não são sempre precisos.

Classificam-se as incertezas em incertezas normais e incertezas associadas a fatores que independem do projetista. Enquanto as primeiras estariam relacionadas com a variabilidade natural de uma determinada variável, as segundas estariam mais ligadas às imperfeições nos modelos matemáticos, que

poderiam ser reduzidas à medida que se utilize modelos matemáticos mais precisos.

As incertezas associadas seriam aquelas relacionadas a erros humanos ou a sabotagens e podem ser tratadas através de uma taxa de ocorrência a partir de um histórico de observações e contempladas no âmbito da confiabilidade do sistema.

Especificamente em *AqR*, as incertezas são classificadas em: a) incertezas relacionadas com a falta ou a precariedade de informação sobre o cenário; b) incerteza relacionada com os parâmetros; e c) incertezas relacionadas com o modelo teórico, i.e. com a própria base científica da metodologia (USEPA, 1997).

Há na literatura, contudo, dezenas de diferentes classificações para incerteza conforme apresentado na sintetização da **Tabela 1**.

Tabela 1 – Classificações de incertezas

Pesquisador	Classes de Incertezas
Morgan e Henrison (1990)	<ul style="list-style-type: none"> Incetezas em quantidades empíricas Incetezas na formulação do modelo
Rowe (1994)	<ul style="list-style-type: none"> Inceteza temporal Inceteza estrutural Inceteza métrica Inceteza translacional
Shrader-Frechette (1996)	<ul style="list-style-type: none"> Inceteza estrutural Inceteza na modelagem Inceteza estatística Inceteza na metodologia de decisão
National Research Council (1996)	<ul style="list-style-type: none"> Inceteza aleatória Inceteza epistêmica Indeterminação Ignorância
Wynne (1992)	<ul style="list-style-type: none"> Risco Inceteza Ignorância Indeterminação

Fonte: Bedsworth *et al*, 2002.

4.3. Identificação das incertezas na metodologia de avaliação de risco

Admite-se que em todas as idealizações impostas ao modelo haja um grau de incerteza, variabilidade e ignorância (Maxwell, 1999).

O modelo físico conceitual, isto é, a concepção do meio de interesse, traz em si uma série de incertezas. A variabilidade espaço-temporal dos parâmetros hidrogeológicos; as limitações do modelo matemático escolhido para simular o transporte do composto; as características da fonte primária de contaminação (como sua concentração inicial, sua distribuição geométrica e a taxa com que aumenta ou diminui sua concentração inicial), todos estes fatores acrescentam incerteza ao processo de avaliação de risco.

A identificação das rotas ambientais e da localização do receptor costumam ser incertas. Como também são incertos os hábitos e características da pessoa avaliada, tais como: idade, expectativa de vida, volume da água ingerida, volume de ar inalado e a quantidade de verduras ingeridas. (Binkowitz, 2001).

Assim como os hábitos do receptor e a física do problema não podem ser abordados de forma determinística, também o tratamento toxicológico tem validade limitada. As idealizações dos modelos fármaco-cinéticos, como por exemplo a aproximação linear da relação dose-resposta para pequenas doses crônicas, são constantemente revisados ou até mesmo invalidados por estudos toxicológicos.

Esta aproximação linear para o comportamento dose-resposta dos compostos carcinogênicos deve ser avaliada cuidadosamente dentro do intervalo de validade (tanto de tempo quanto de intensidade) sugerido pela toxicologia. Assim como, merece uma crítica atenta a prática de se somar os riscos carcinogênicos para a estimativa do risco total, visto que há vários indícios que a propensão em se desenvolver tumores distintos não deva ser somada. A

extrapolação para seres humanos de dados obtidos com estudos em roedores costuma ser analisada com ressalvas.

Não obstante as inúmeras fontes de incertezas inerentes às metodologias de *AqR*, o escopo do presente trabalho é o tratamento das incertezas relacionadas aos parâmetros de transporte e sua influência na quantificação do risco.

As incertezas relacionadas ao receptor são, essencialmente, o peso, a expectativa de vida, a quantidade de água ingerida por dia, quantidade de solo ingerido, taxa de inalação e superfície corporal. Estes fatores são chamados de fatores de exposição (USEPA, 1997). Há softwares de avaliação de risco tratam a sensibilidade do modelo quanto às incertezas relacionadas com o receptor e seus hábitos (por exemplo, RISC 4 Workbench). Existem publicações inteiramente dedicadas ao tratamento das incertezas e variabilidade dos fatores de exposição *e.g. Exposure Factors Handbook* da USEPA.

Deste ponto em diante, portanto, tratar-se-á da sensibilidade da metodologia da *AqR* frente às incertezas relacionadas aos parâmetros de transporte de contaminantes em águas subterrâneas.

4.4. Modelagem de transporte de contaminantes em águas subterrâneas

A avaliação da exposição, conforme esquemas propostos (USEPA/RAGS, 1989; LaGrega, 1994 e CETESB, 2004) é a etapa em que se quantificará o nível de contaminação a qual um receptor (real ou hipotético) estará submetido.

Se as concentrações dos contaminantes forem consideradas constantes no tempo, a exposição deverá ser avaliada com o valor de concentração obtido através de um resultado analítico *i.e.* uma amostragem direta.

Na maioria dos casos, contudo, quando o problema de contaminação se dá em águas subterrâneas, as concentrações futuras a que o receptor estará

submetido, são estimadas através de modelos matemáticos que simulam o comportamento dos compostos químicos de interesse.

O interesse sobre o comportamento da contaminação em águas subterrâneas vem crescendo notadamente desde o início da década de 1970. O atual estado da técnica sugere que a mais precisa análise do transporte de contaminantes em meios porosos se dê através do uso em conjunto de amostragens por poços de inspeção, amostragem dos solos, ensaios de bombeamento para determinação da permeabilidade, modelos físicos e modelos numéricos sofisticados (Yeh, 1981).

Os modelos matemáticos (numéricos ou analíticos) são desenvolvidos a partir da equação de advecção-dispersão, que por sua vez originam-se dos princípios de balanço de massa (Leij *et al.*, 1991); estes modelos visam prever o transporte e o comportamento dos contaminantes nas águas subterrâneas.

Os modelos numéricos são ferramentas computacionais mais robustas que não prescindem de uma extensa caracterização do meio e, não raro, exigem uma quantidade exaustiva de ensaios para a determinação dos parâmetros de transporte, notadamente da permeabilidade.

Os modelos analíticos, por sua vez, por serem mais simples que os modelos numéricos, são utilizados como avaliação preliminar do transporte de contaminantes (Wilson *et al.*, 1978) ou em situações onde as incertezas relacionadas com os parâmetros de transporte tornam desaconselháveis o uso de simulações numéricas.

Os modelos analíticos têm ainda diversas outras funções de considerável relevância como a de validar os modelos numéricos mais elaborados (Batu e Van Genuchten, 1990, Leij *et al.*, 1991); prover estimativas iniciais para cenários de poluição; proceder análise de sensibilidade para estimar o efeito de cada um dos parâmetros de transporte; estimar concentrações em longas distâncias ou longos períodos onde o uso de modelos numéricos seria impraticável (Leij *et al.*, 1991).

Uma série de modelos analíticos foram implementados para a solução das equações de transporte de contaminantes dissolvidos em meios porosos: Lapidus e Amundson, 1952; Davidson *et al*, 1968; Lindstrom e Boersma, 1971; Lai e Jurinak, 1972; Warrick *et al*, 1972; Cleary *et a.*, 1973; Lindstrom e Stone, 1974; Marino, 1974; Kuo, 1976; Yeh e Tsai, 1976; Van Genuchten e Wierenga, 1976; Selim e Mansell, 1976; Wang *et al*, 1977 (*apud* Yeh, 1981); Bear, 1972; Burch, 1970; Cleary e Adrian, 1973; Collins, 1976; Dagan, 1971; Fried, 1975; Hunt, 1978; Miller, 1975; Shen, 1976 (*apud* Wilson e Miller, 1978); Wilson e Miller, 1978; Yeh, 1981; Batu e Van Genuchten, 1990; Domenico, 1987; Leij *et al*, 1991, dentre outros.

Nota-se que, com o avanço da velocidade de processamento dos novos computadores, muitos autores têm conseguido diminuir as simplificações de seus modelos, consequentemente, tornando-os mais realistas.

4.5. Tratamento estatístico das variáveis

Uma vez que os parâmetros de transporte são incertos, convém que estes sejam tratados como variáveis aleatórias, como exigem as metodologias de tratamento de incertezas. Uma possibilidade é assumir que os parâmetros de transporte sejam variáveis aleatórias contínuas e que, portanto, possam ser representadas por funções de densidade de probabilidade (*fdp*).

4.5.1. Medidas da função densidade de probabilidade

4.5.1.1. Momentos

Ao assumir que um determinado parâmetro seja dado por uma *fdp*, o passo seguinte seria determinar os seus momentos. O momento de ordem r , para uma variável é dado por:

$$\mu_r = \langle x^r \rangle \quad (7)$$

Onde a notação $\langle \quad \rangle$ significa o valor esperado (equivalente a uma média) que também é representado por $E(\quad)$ ou $\bar{\quad}$.

O primeiro momento $r = 1$ é a própria média aritmética de x , isto é, $\langle x \rangle$.

Um momento de ordem qualquer, tomado em relação à média é dado por:

$$\mu_r = \langle (x - \langle x \rangle)^r \rangle \quad (8)$$

Nestes casos, quando tomados em relação à média, os momentos recebem a denominação de momentos centrais, em oposição aos momentos genéricos centrados em uma origem qualquer a , os quais são dados por:

$$\mu_r = \langle (x - a)^r \rangle \quad (9)$$

O momento central de segunda ordem é a variância.

4.5.1.2. Assimetria

A assimetria (*skewness*) é a medida do desvio da simetria de uma distribuição. Se a curva de distribuição tem uma cauda mais longa à direita da ordenada máxima, tem-se uma distribuição desviada para a direita (assimetria positiva); no caso inverso a distribuição é desviada para esquerda (assimetria negativa). As distribuições simétricas (como a distribuição normal, a distribuição de Laplace e a distribuição uniforme) têm assimetria nula.

Uma das mais utilizadas medidas da assimetria é o coeficiente do momento de assimetria γ , dado pela seguinte relação entre os terceiro e segundo momentos centrados na média:

$$\gamma_1 = \frac{\mu_3}{\mu_2^{3/2}} \quad (10)$$

4.5.1.3. Curtose

A curtose de uma distribuição é a medida de seu achatamento em relação a uma distribuição normal.

Uma importante medida da curtose utiliza os segundo e quarto momentos centrados na média, e é dada por:

$$\beta_2 = \frac{\mu_4}{\mu_2^2} \quad (11)$$

Onde β_2 é chamado o coeficiente do momento de curtose.

4.6. Análise gráfica

A análise gráfica é um procedimento simples e intuitivo que consiste no estudo do comportamento de um fenômeno, descrito por uma função, através da sua visualização em uma ambiente cartesiano.

Para um melhor entendimento do comportamento de um fenômeno, é interessante que o gráfico da função que o descreve, seja obtido para domínios relativamente extensos, para que se identifiquem peculiaridades e tendências que são extraídas das inclinações, assíntotas e pontos de inflexão.

Funções de muitas variáveis podem ser analisadas visualizando-se o gráfico da variável dependente *versus* cada uma das variáveis independentes, uma por vez.

4.7. Quantificação das incertezas

Para que a avaliação quantitativa do risco à saúde humana possa se constituir em um subsídio eficaz para a tomada de decisões em questões de gerenciamento ambiental é necessário que se proceda à quantificação das incertezas. Quantificar a incerteza significa estimar o grau de confiabilidade da metodologia. Este apresenta os métodos mais tradicionais para a quantificação das incertezas dentro da metodologia da *AqR*.

Todos estes métodos poderiam ser enquadrados na classificação de análise de sensibilidade em sentido amplo. Contudo, evitou-se esta terminologia para que não se fizesse confusão com o termo análise de sensibilidade em sentido estrito que será a mera repetição da análise para dados valores dos parâmetros aleatórios (Greenland, 2001 e USEPA, 1997). Os métodos a seguir serão, portanto, descritos

Análise quantitativa das incertezas

como métodos de quantificação de incertezas, onde a análise de sensibilidade em sentido estrito seria uma espécie.

4.7.1. Coeficiente de sensibilidade

Coefficientes de sensibilidade são medidas da importância relativa de cada parâmetro em um determinado sistema ou equação.

Considerando uma função $\Phi(\vartheta_1, \vartheta_2, \dots, \vartheta_n)$, onde ϑ_i é o i -ésimo parâmetro, o coeficiente de sensibilidade local normalizado é dado por:

$$S_n = \frac{\partial \Phi}{\partial \vartheta} \cdot \frac{\vartheta_i}{\Phi} \quad (12)$$

O coeficiente acima é puramente algébrico e não leva em consideração qualquer característica estatística das variáveis ϑ_i . Outra medida da sensibilidade apresentada por Sykes leva em consideração o segundo momento (variância) e é dada pela seguinte expressão:

$$S = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \vartheta} \right)^2 \text{var}(\vartheta_i) \quad (13)$$

A grandeza da equação (13) que representa um coeficiente de sensibilidade não normalizado é dada em unidade do quadrado de Φ .

4.7.2. Método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo é uma simulação na qual os valores incertos são substituídos por variáveis aleatórias de uma dada *fdp*. Cada resultado obtido (para

uma iteração) é também uma variável aleatória e, portanto, requer-se um exaustivo número de simulações para que os resultados tenham representatividade estatística (LaGrega, 1994).

A simulação pelo método de Monte Carlo é uma prática comum em avaliação de risco (Kennedy, 2004) e é sempre um procedimento computacional (Harr, 1987). A grande vantagem deste método é que o resultado final obtido (após todas as iterações) é uma distribuição probabilística completa das variáveis aleatórias dependentes. A maior desvantagem é o fato de se exigir considerável tempo de simulação computacional, tão maior quanto maior for a quantidade de variáveis aleatórias.

O número de iterações necessário para que a simulação pelo método de Monte Carlo seja estatisticamente representativa, para distribuições normais, é dado pelo seguinte procedimento descrito por Harr (1987).

Considerando que cada iteração é um evento cuja probabilidade de êxito seja dada por R , e, conseqüentemente a probabilidade de erro é dada por $1 - R$, e assumindo ainda que cada iteração seja independente uma da outra, sendo N o número de iterações, pode-se então fazer uma aproximação²³ do valor esperado de NR e um desvio padrão de $\sqrt{NR(1-R)}$. Sendo $\tilde{\alpha}$ o número de sucessos das N iterações, tem-se:

$$\frac{1}{2} - \frac{\tilde{\alpha}}{2} = \varphi \cdot \left[\frac{-\tilde{\alpha}}{\sigma} \right] = \varphi \cdot \left[\frac{NR - \tilde{\alpha}}{\sqrt{NR(1-R)}} \right] \quad (14)$$

Onde $\tilde{\alpha}$ representa o número de sucessos nas N iterações em que a probabilidade do resultado ser maior ou menor que o valor não supere $\tilde{\alpha}/2$.

Simplificando, tem-se,

²³ Através de uma aproximação normal utilizando o teorema do limite central.

$$N = \frac{R(1-R)h^2_{\alpha/2}}{\varepsilon^2} \quad (15)$$

Onde $h^2_{\alpha/2} = \varphi^{-1}(1/2 - \alpha/2)$ e $\varepsilon = R - (\dots / N)$. A função φ é dada por:

$$\varphi(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^h \exp\left[-\frac{d^2}{2}\right] d \quad (16)$$

Note que $R(1-R)$ é máximo quando $R = \dots$. Assim tem-se uma estimativa protetora quando se faz $R(1-R) = \dots$,

$$N = \frac{h^2_{\alpha/2}}{4\varepsilon^2} \quad (17)$$

Para \dots variáveis tem-se:

$$N = \left(\frac{h^2_{\alpha/2}}{4\varepsilon^2} \right) \quad (18)$$

O **ANEXO B** apresenta valores tabelados para $\varphi(h)$.

Mesmo que, numa dada simulação pelo método de Monte Carlo, todos os parâmetros sejam considerados normalmente distribuídos, não há qualquer garantia quanto a forma da distribuição dos resultados, isto é, os resultados geralmente não se apresentam dentro de uma *fdp* gaussiana (Kennedy, 2004).

Os resultados de uma simulação pelo método de Monte Carlo são comumente apresentados em histogramas de frequência (concentração x frequência ou risco x frequência). Kennedy (2004) apresenta um método original de visualização de resultados de uma simulação de Monte Carlo para duas variáveis aleatórias que consiste na superposição de isolinhas de risco (ou da concentração) com os valores das variáveis aleatórias em um espaço cartesiano

onde a abscissa é um dos parâmetros aleatórios e cada uma das ordenadas representa, respectivamente, um outro parâmetro aleatório.

Resultados de análises com mais de dois parâmetros aleatórios, contudo, não podem ser interpretados pelo método gráfico descrito acima.

4.7.3. Método do segundo momento de primeira ordem

O método FOSM (do inglês *First Order and Second Moment*) tem como princípio básico a idéia de que toda a informação a respeito da natureza estocástica da resposta de um sistema pode ser obtida através da média e da variância-covariância (Nobre, 1993). Este método evita a necessidade de um exaustivo número de simulações, como é imperativo no método de Monte Carlo. Enquanto a média expressa a tendência do comportamento do sistema, a variância-covariância descreve a dispersão dos resultados em torno da média.

Quando a *fdp* segue uma distribuição normal, o terceiro momento, bem como todos os demais momentos de ordem ímpar maior que três, se anulam.

Seja a função Φ dada por:

$$\Phi(\vartheta_n) = f(\vartheta_1, \vartheta_2, \dots, \vartheta_n) \quad (19)$$

Ao se proceder a uma expansão de Taylor de 1ª ordem (Sykes) tem-se:

$$d\Phi = \frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta_1} \cdot d\vartheta_1 + \frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta_2} \cdot d\vartheta_2 + \dots + \frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta_n} \cdot d\vartheta_n \quad (20)$$

O valor esperado de Φ (primeira ordem: média) será dado por:

$$E[d\Phi] = \frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta_1} \cdot E[d\vartheta_1] + \frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta_2} \cdot E[d\vartheta_2] + \dots + \frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta_n} \cdot E[d\vartheta_n] \quad (21)$$

Admitindo que os parâmetros ϑ_i são normalmente distribuídos tem-se:

$$E[d\vartheta_1] = 0$$

$$E[d\vartheta_2] = 0$$

$$\therefore E[d\Phi] = 0 \quad (22)$$

Fazendo a variância (momento de segunda ordem) obtém-se:

$$E[(d\Phi)^2] = E\left[\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta_1} \cdot d\vartheta_1 + \frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta_2} \cdot d\vartheta_2 + \dots + \frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta_n} \cdot d\vartheta_n\right)^2\right] \quad (23)$$

O que equivale a:

$$E[(d\Phi)^2] = \left\langle \frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta_1} \quad \frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta_2} \dots \right\rangle \cdot [Cov(\partial\vartheta_i)] \cdot \begin{Bmatrix} \frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta_1} \\ \frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta_2} \\ \vdots \end{Bmatrix} \quad (24)$$

Com,

$$[Cov(\partial\vartheta_i)] = \begin{pmatrix} E(d\vartheta_1)^2 & E(d\vartheta_1 d\vartheta_2) & E(d\vartheta_1 d\vartheta_2) & \dots \\ E(d\vartheta_1 d\vartheta_2) & E(d\vartheta_2)^2 & E(d\vartheta_1 d\vartheta_2) & \dots \\ E(d\vartheta_1 d\vartheta_2) & E(d\vartheta_1 d\vartheta_2) & E(d\vartheta_3)^2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (25)$$

onde,

O termo $E(d\vartheta_i)^2$ é a variância para o parâmetro i .

Análise quantitativa das incertezas

O termo $E(d\vartheta_i d\vartheta_j)$ com $i \neq j$, é a covariância de i em relação a j (correlação).

Em notação matricial temos:

$$[\Delta] = [A] \cdot [B] \cdot [A]^T \quad (26)$$

Onde:

$$[\Delta] = E[(d\Phi)^2] \quad (27)$$

$$[A] = \left\langle \frac{\partial \Phi}{\partial \vartheta_1} \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \vartheta_2} \quad \dots \right\rangle \quad (28)$$

$$[B] = Cov(\partial \vartheta_i) \quad (29)$$

Para o caso especial das variâncias cruzadas serem nulas, isto é, se não houver correlação entre os diferentes parâmetros (parâmetros estatisticamente independentes), tem-se que:

$$Cov(\partial \vartheta_i) = \begin{pmatrix} E(d\vartheta_1)^2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & E(d\vartheta_2)^2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & E(d\vartheta_3)^2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (30)$$

O que simplificaria a eq. (24) em:

$$\Delta ar(\Phi) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \vartheta_i} \right)^2 \cdot \Delta ar(\vartheta_i) \quad (31)$$

Expandindo a função da eq. (19) por série de Taylor (Nobre, 1993 e Harr, 1987) teremos:

$$\Phi(\vartheta_n) = \Phi(\bar{\vartheta}) + \frac{d\Phi}{d\vartheta^T} \Big|_{\vartheta=\bar{\vartheta}} (\vartheta - \bar{\vartheta}) + \frac{1}{2} \frac{d^2\Phi}{d\vartheta^{2T}} \Big|_{\vartheta=\bar{\vartheta}_0} (\vartheta - \bar{\vartheta})^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3\Phi}{d\vartheta^{3T}} \Big|_{\vartheta=\bar{\vartheta}_0} (\vartheta - \bar{\vartheta})^3 \dots \quad (32)$$

$$E[\Phi(\vartheta)] \approx \Phi(\bar{\vartheta}) + \frac{1}{2} \frac{d^2\Phi}{d\vartheta^{2T}} \Big|_{\vartheta=\bar{\vartheta}} Cov(\vartheta) \quad (33)$$

A sensibilidade da função Φ a cada um de seus parâmetros ϑ_i é dada pelo seguinte termo:

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \vartheta_i} \right)^2 \cdot Var(\vartheta_i) \quad (34)$$

O parâmetro ϑ_i que apresentar o maior valor para o termo acima, será aquele que induz a maior sensibilidade à função Φ , e assim por diante.

São vantagens do método FOSM: o pequeno esforço computacional e conseqüentemente a utilização de pequenos tempos de simulação e a exigência em se conhecer apenas os momentos das distribuições e não toda a distribuição. A desvantagem seria a necessidade de manipulações matemáticas não elementares, em especial a obtenção de derivadas de segunda ordem (Harr, 1987).

5. Programa Desenvolvido

Desenvolveu-se um programa para a aplicação da metodologia de *AqR* com a implementação de análise gráfica; da quantificação de incertezas através dos coeficientes de sensibilidade; e do método FOSM.

De todos os dados de entrada para se proceder a uma *AqR*, o escopo do trabalho só envolverá a sensibilidade das variáveis relacionadas ao fenômeno de transporte de solutos em meios porosos.

A rotina desenvolvida preocupa-se em estabelecer um procedimento para se avaliar o risco de forma determinística (utilizando valores fixos para os parâmetros de entrada); proceder à análise gráfica para estabelecer como o comportamento de cada parâmetro de transporte influi no risco considerado deterministicamente (3.6); determinar o coeficiente de sensibilidade local normalizado (3.7.1); considerar os parâmetros de transporte como variáveis aleatórias regidas por funções densidade de probabilidade gaussianas. Daí estabelecer o coeficiente de sensibilidade (3.7.1), e avaliar a sensibilidade; estimar o risco esperado e a variância total do sistema pelo método FOSM (3.7.3). Por último, validar o procedimento do segundo momento através do processo iterativo de Monte Carlo (3.7.2)

O programa desenvolvido tem aplicabilidade para apenas uma via de ingresso, em uma rota, em um único meio (conforme itens 1.3.2.1 e 1.3.2.4), quais sejam, transporte pela fase dissolvida do contaminante em água subterrânea a ser ingerida.

O solo é considerado um meio homogêneo e isotrópico. As simulações partiram da idealização de que, em um determinado momento ($t=0$) havia uma região prismática abaixo da superfície na área em que o resíduo foi despejado

(foco principal) cuja concentração do composto é dada por uma constante C_0 (concentração máxima) conforme ilustrado na **Figura 6**.

O modelo de Domenico, como será demonstrado, desconsidera a dimensão x da região da fonte de contaminação.

Todos os parâmetros do aquífero (gradiente hidráulico, permeabilidade etc.) são considerados constantes no tempo.

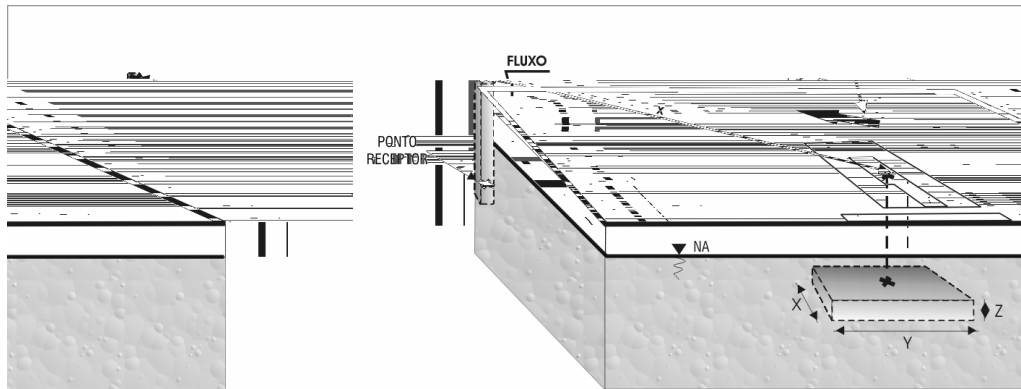


Figura 6 – Modelo conceitual.

5.1.1. Modelo analítico adotado

Dentre as diversas soluções analíticas para a equação de convecção-dispersão citadas no item 4.4 (Modelagem de transporte de contaminantes em águas subterrâneas), optou-se aqui pelo modelo analítico desenvolvido por Domenico (1987) com o algoritmo de decaimento da fonte desenvolvido pela USEPA (1996). A escolha justifica-se pelo fato de ser uma solução amplamente utilizada e estudada, bem como por estar disponível na literatura uma série de implementações do modelo que permite, por exemplo, a introdução do decaimento da concentração na fonte.

Dada a equação de convecção-dispersão:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = v \frac{\partial C}{\partial x} - D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = 0 \quad (35)$$

onde C é a concentração em massa por volume de água; D_x , D_y e D_z os valores das dispersões principais do tensor de dispersão; t é o tempo; x , y e z são as coordenadas espaciais cartesianas; e v é a velocidade de percolação da água.

Hunt (1978 *apud* Domenico, 1988) apresentou a seguinte solução, considerando o modelo de fonte prismática:

$$C(x, y, z, t) = (C_0 / 8) \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{x - vt + (X/2)}{2(D_x t)^{1/2}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{x - vt - (X/2)}{2(D_x t)^{1/2}} \right] \right\} \\ \cdot \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{y + (Y/2)}{2(D_y t)^{1/2}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{y - (Y/2)}{2(D_y t)^{1/2}} \right] \right\} \\ \cdot \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{z + (Z/2)}{2(D_z t)^{1/2}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{z - (Z/2)}{2(D_z t)^{1/2}} \right] \right\} \quad (36)$$

Onde X , Y e Z são as dimensões originais da fonte nas direções x , y e z , respectivamente, e C_0 é a concentração inicial na zona da fonte. O **ANEXO D** apresenta os valores para a função erro e função complementar de erro para diversos argumentos.

Constitui uma simplificação usual no modelo de Domenico, desprezar a dimensão da fonte na direção do fluxo (X) o que faz com que a fonte, no lugar de um prisma tri-dimensional, seja representado por uma superfície plana bi-dimensional (com coordenadas Y e Z ortogonais à direção do fluxo).

Domenico (1985) reescreve a equação acima considerando a fonte plana:

$$C(x, y, z, t) = (C_0 / 8) \cdot \text{erf} \left[\frac{x - vt}{2(D_x t)^{1/2}} \right] \cdot \left\{ \text{erf} \left[\frac{(y + Y/2)}{2(D_y x/v)^{1/2}} \right] - \text{erf} \left[\frac{(y - Y/2)}{2(D_y x/v)^{1/2}} \right] \right\} \cdot \left\{ \text{erf} \left[\frac{(z + Z/2)}{2(D_z x/v)^{1/2}} \right] - \text{erf} \left[\frac{(z - Z/2)}{2(D_z x/v)^{1/2}} \right] \right\} \quad (37)$$

Domenico (1987) introduz, ainda, a possibilidade do decaimento do contaminante através da constante λ (taxa de degradação de primeira ordem):

$$C(x, y, z, t) = (C_0 / 8) \cdot \exp \left\{ \frac{x}{2\alpha_x} \left[1 - \sqrt{1 + 4\lambda\alpha_x/v} \right] \right\} \cdot \text{erfc} \left[\frac{x - vt \sqrt{1 + 4\lambda\alpha_x/v}}{2\sqrt{\alpha_x vt}} \right] \cdot \left\{ \text{erf} \left[\frac{(y + Y/2)}{2\sqrt{\alpha_y vt}} \right] - \text{erf} \left[\frac{(y - Y/2)}{2\sqrt{\alpha_y vt}} \right] \right\} \cdot \left\{ \text{erf} \left[\frac{(z + Z/2)}{2\sqrt{\alpha_z vt}} \right] - \text{erf} \left[\frac{(z - Z/2)}{2\sqrt{\alpha_z vt}} \right] \right\} \quad (38)$$

A USEPA (1996) apresenta, por fim, a implementação do decaimento da concentração da fonte através da constante K_s :

$$C(x, y, z, t) = C_0 \exp[K_s(t - x/v)] \cdot \frac{1}{8} \exp \left[\frac{x}{\alpha_x} (1 - \sqrt{1 + 4\lambda\alpha_x/v}) \right] \cdot \text{erfc} \left[\frac{x - vt \cdot \sqrt{1 + 4 \cdot \lambda \cdot \alpha_x / v}}{2\sqrt{\alpha_x \cdot v \cdot t}} \right] \cdot \left\{ \text{erf} \left[\frac{y + Y/2}{2\sqrt{\alpha_y \cdot x}} \right] - \text{erf} \left[\frac{y - Y/2}{2\sqrt{\alpha_y \cdot x}} \right] \right\} \cdot \left\{ \text{erf} \left[\frac{Z}{2\sqrt{\alpha_z \cdot x}} \right] - \text{erf} \left[\frac{-Z}{2\sqrt{\alpha_z \cdot x}} \right] \right\} \quad (39)$$

$$\text{Com, } v = \frac{K \cdot i}{\theta_e \cdot R}$$

(40)

Onde θ_e é a porosidade efetiva; K a condutividade hidráulica; R o fator de retardamento; i o gradiente hidráulico; e z é tido como nulo, por convenção.

As condições iniciais são $C(x, y, z, 0) = 0$ (concentração inicial = 0 para $x, y, z, > 0$) e $C(0, Y, Z, 0) = C_0$ (concentração na fonte = C_0 , em todo o plano horizontal ($z=0$) no tempo 0).

As principais idealizações do modelo são que o aquífero e o campo de fluxo são homogêneos e isotrópicos; a velocidade da água subterrânea é suficientemente grande para que se possa desprezar os termos de difusão molecular e de dispersão (esta idealização pode não ser válida em transporte através da argila); a adsorção é um processo reversível governado por uma isoterma linear.

O modelo não é recomendado quando sistemas de bombeamento induzirem um campo de fluxo complicado, como também não se aplica quando gradientes verticais influírem no transporte de contaminantes. Como todo modelo analítico, a solução de Domenico não se aplica quando as condições hidrogeológicas mudarem consideravelmente no domínio.

O modelo não leva em consideração a infiltração, cujos efeitos tendem a reduzir as concentrações (Kennedy, 2004).

Borges (1996) ressalta a importância de se atentar para as diferenças entre o transporte da fase dissolvida e o transporte de fase particulada, fenômeno este que não será considerado no presente estudo.

5.1.2. Metodologia do programa (SeRis)

O SeRis (em alusão à Sensibilidade da Avaliação de risco) é uma rotina na linguagem Matlab® com o objetivo de avaliar a sensibilidade da metodologia de análise quantitativa de risco, devido às incertezas nos parâmetros de transporte da solução analítica de Domenico. O **ANEXO A** apresenta a rotina completa do SeRis.

Os parâmetros de transporte serão considerados variáveis aleatórias dentro de uma dada distribuição probabilística. Os demais dados de entrada (dados comportamentais e características dos compostos químicos) são considerados fixos (constantes). A **Figura 7** ilustra o funcionamento da rotina do SeRis:

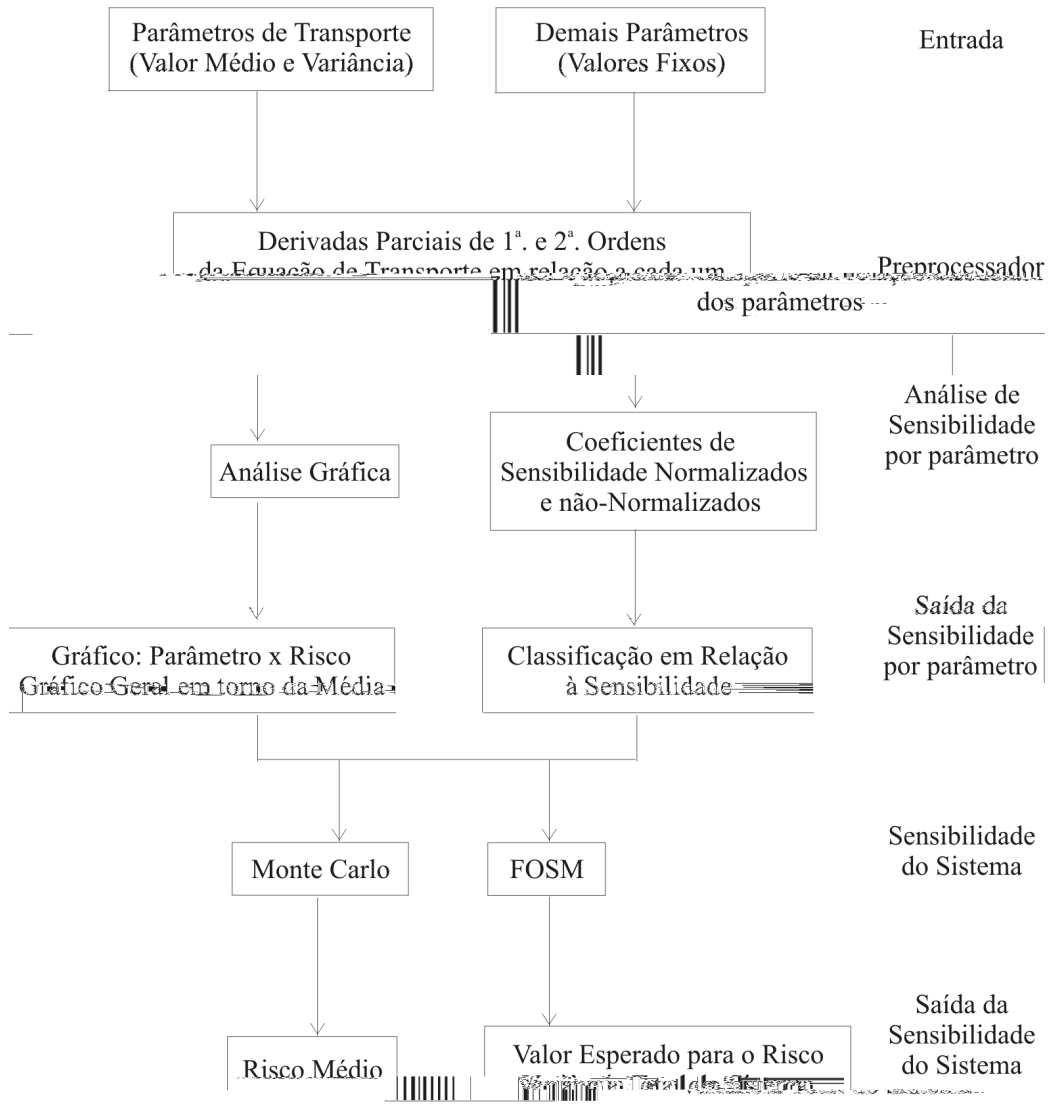


Figura 7 – Esquema do programa SeRis.

A entrada é feita através das seguintes matrizes:

$$[E] = \begin{Bmatrix} C_0 & Var(C_0) \\ Ks & Var(Ks) \\ t & Var(t) \\ x & Var(x) \\ k & Var(k) \\ i & Var(i) \\ \theta_e & Var(\theta_e) \\ R & Var(R) \\ \alpha_x & Var(\alpha_x) \\ \alpha_y & Var(\alpha_y) \\ \alpha_z & Var(\alpha_z) \\ \lambda & Var(\lambda) \\ Y & Var(Y) \\ y & Var(y) \\ Z & Var(Z) \end{Bmatrix}$$

$$[F] = [IR \quad BW \quad ED \quad EF \quad AT \quad ABS \quad SF]$$

Onde $[E]$ é a matriz dos parâmetros de transporte com C_0 , Ks , etc sendo os termos definidos no tópico 5.1.1 e $Var(C_0)$ é a variância do parâmetro C_0 e assim sucessivamente.

A matriz $[F]$ armazena os parâmetros fixos definidos na equação (3).

O pré-processo consiste em se diferenciar a equação de Domenico (eq. 39) em relação a cada um dos parâmetros da matriz $[E]$.

$$[G] = \left[\frac{\partial C}{\partial C_0} \quad \frac{\partial C}{\partial Ks} \quad \frac{\partial C}{\partial t} \quad \frac{\partial C}{\partial x} \quad \frac{\partial C}{\partial k} \quad \frac{\partial C}{\partial i} \quad \frac{\partial C}{\partial \theta_e} \quad \frac{\partial C}{\partial R} \quad \frac{\partial C}{\partial \alpha_x} \quad \frac{\partial C}{\partial \alpha_y} \quad \frac{\partial C}{\partial \alpha_z} \quad \frac{\partial C}{\partial \lambda} \quad \frac{\partial C}{\partial Y} \quad \frac{\partial C}{\partial y} \quad \frac{\partial C}{\partial Z} \right]$$

$$[H] = \left[\frac{\partial^2 C}{\partial C_0^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial Ks^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial k^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial i^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial \theta_e^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial R^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial \alpha_x^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial \alpha_y^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial \alpha_z^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial \lambda^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial Y^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \quad \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} \right]$$

Onde $[G]$ é a matriz que reúne as derivadas parciais de primeira ordem e $[H]$ a matriz que reúne as derivadas parciais de segunda ordem. O ANEXO C apresenta todas as derivadas da função de Domenico em formulação analítica.

A implementação do método FOSM consiste em montar a expressão matricial da eq. (43) e resolvê-la. O algoritmo desta passagem é o seguinte:

para $i = 1$ até $size(E,1)$
 $A(i) \leftarrow G(i)$
 $B(i,i) \leftarrow E(i,2)$
fim para

$$[V] \leftarrow [A] \cdot [B] \cdot [A]^T \quad (44)$$

Onde $A(i)$ é o i -ésimo termo do vetor $[A]$; $B(i,i)$ é o i -ésimo termo da diagonal da matriz $[B]$; $G(i)$ é o i -ésimo termo do vetor $[G]$ e $E(i,2)$ é o i -ésimo termo da segunda coluna da matriz $[E]$. $Size(E,1)$ é número de linhas da matriz $[E]$.

A variância $[V]$ dada pela equação (44) é simplesmente a variância da solução de Domenico e não a variância do sistema. Notar que $[V]$ é um escalar.

Como o risco é dado pela combinação das equações (3) e (4), tem-se que:

$$Risco = \bar{C} \cdot \left[\frac{IR}{BW} \right] \cdot \frac{ED \times EF}{AT} \cdot ABS \cdot SF \quad (45)$$

Onde C é dado pela equação de Domenico.

Como se assumiu que os parâmetros IR , BW , ED , EF , AT , ABS e SF são constantes, tem-se que:

$$a = \left[\frac{IR}{BW} \right] \cdot \frac{ED \times EF}{AT} \cdot ABS \cdot SF \quad (46)$$

Onde a é uma constante auxiliar no algoritmo.

Do cálculo tem-se que,

$$[GR] \leftarrow a [G]$$

$$[HR] \leftarrow a [H]$$

Onde $[GR]$ e $[HR]$ são matrizes análogas à $[G]$ e à $[H]$ com a diferença de que ao invés da concentração, são derivadas da função risco. Observa-se que, desta forma, a função risco (R) difere da função concentração (C) por uma constante a .

Adotando um IR de 2 litros por dia; BW de 70Kg; ED e AT ambos de 70 anos; um EF de 365 dias por ano i.e igual à unidade; uma taxa de absorção (ABS) unitária e o SF da Tabela 4 $(6,3 \text{ (mg/kg-dia)}^{-1})$, tem-se que a constante a vale 0,18 L/mg.

É importante observar que em diversos *softwares* comerciais, a exemplo do RISC® 4, a sensibilidade do modelo é aferida apenas em relação aos parâmetros da matriz $[F]$, apesar de que, possivelmente, os parâmetros da matriz $[E]$ sejam tão ou mais sensíveis que os parâmetros da matriz $[F]$ dentro da metodologia.

A sensibilidade destes parâmetros poderia facilmente ser incorporada na metodologia aqui apresentada. Ressalte-se que há na literatura muito mais estudos a respeito do comportamento estatístico dos parâmetros da matriz $[F]$ –que são ligados à variabilidade dos hábitos populacionais- do que para os parâmetros da matriz $[E]$ –que são eminentemente dependentes do caso em estudo (USEPA, 1997).

Contudo, como o objetivo da metodologia aqui aplicada é a análise da sensibilidade dos parâmetros de transporte, os valores da matriz $[F]$ serão considerados constantes e, conseqüentemente, também será constante a valor de a .

6. Estudo de caso: Cidade dos Meninos

6.1. Descrição do problema

6.1.1. Localização

A Cidade dos Meninos é um complexo de galpões, que abrange uma área de 19,4 km², construída em 1946, destinado inicialmente a compor o Centro de Promoção Social Fundação Abrigo Redentor (1946), o que seria uma espécie de colégio interno público.

Posteriormente, em 1950, instalou-se na região uma unidade de produção do pesticida hexaclorociclohexano (HCH) do Instituto de Malariologia do Ministério da Educação e Saúde, aproveitando as áreas não utilizadas de oito pavilhões do referido abrigo para crianças.

A produção destes pesticidas fazia parte da política pública da época e tinha como objetivo atingir a auto-suficiência na produção de pesticidas para o controle de epidemias como a malária, febre amarela, doença de chagas e esquistossomose.

A Cidade dos Meninos localiza-se no município de Duque de Caxias, na Baixada Fluminense, Estado do Rio de Janeiro, na Serra dos Órgãos, entre a encosta Serra do Mar e o Litoral (**Figura 8**).

Estudo de caso: Cidade dos Meninos

O foco principal de contaminação está localizado aproximadamente nas coordenadas ($x = 672.286$, $y = 7.490.180$) do sistema UTM (Barreto, 1998). A **Figura 9** ilustra a região do foco principal.



Figura 8 – Localização da Cidade dos Meninos.

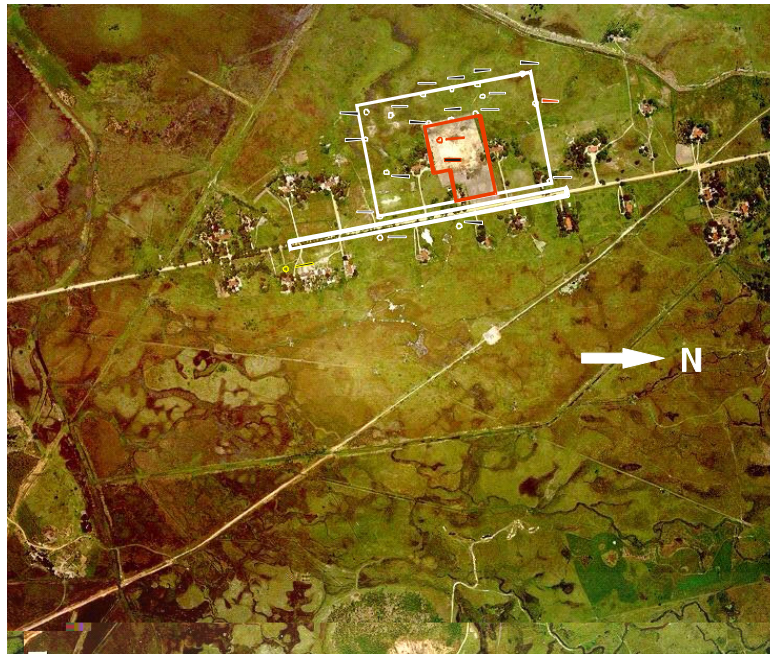


Figura 9 – Vista aérea da Cidade dos Meninos.
Fonte: DE CAMPOS *et al*, 1988.

6.1.2. Histórico

A fábrica de pesticidas funcionou por cinco anos, até 1955 quando foi desativada²⁴, deixando considerável quantidade de matéria prima abandonada em um terreno sem os devidos cuidados de armazenagem.²⁵

Passados 34 anos, o problema tornou-se público com a constatação da venda indiscriminada do “pó de broca” (nome popular dado ao pesticida) em uma feira local.

Órgãos estatais como a FEEMA e a Defesa Civil foram acionados e constataram o depósito abandonado. Procedeu-se, então, a retirada de 40 toneladas de HCH para o processamento adequado na Refinaria Duque de Caxias (REDUC). Contudo, estima-se que uma quantidade considerável de pesticida tenha permanecido na área até 1995, quando o Ministério da Saúde e a Prefeitura de Duque de Caxias, com o apoio técnico da Nortox Agroquímica, realizaram uma tentativa de remediação misturando-se cal e água com o solo contaminado (Barreto, 1998).

Estima-se que esta tentativa de remediação tenha resultado em uma contaminação generalizada pelo composto triclorobenzeno (produto da reação da cal com o HCH) além da não eliminação do HCH do solo (FEEMA/GTZ, 1997 *apud* Barreto, 1998).

O Ministério da Saúde (2002) realizou uma avaliação dos moradores aos contaminantes da Cidade dos Meninos. Este estudo levou em conta todos os compostos e todos os riscos (cancerígenos ou não), para todas as rotas. A

²⁴ Há fontes que indicam que a fábrica tenha funcionado até 1962 (Antunes, 2005, p. 1).

²⁵ O HCH foi parcialmente proibido no país em 1985 através da Portaria Federal MA n. 329 de 02 de setembro daquele ano. Apenas com a Convenção sobre Poluentes Orgânicos Persistentes de Estocolmo de 23 de maio de 2001, da qual o Brasil é signatário e que integra o ordenamento jurídico brasileiro desde 7 de maio de 2004 com a promulgação pelo presidente do Senado do Decreto Legislativo n. 200, é que o produto foi definitivamente proibido no país. No texto da convenção o HCH está identificado pela sigla BCH. A desativação da fábrica não se deveu a qualquer proibição sobre o produto (pois na época sua produção e comercialização eram legalizadas), mas sim, devido aos seus altos custos de operação.

Estudo de caso: Cidade dos Meninos

metodologia consistiu na avaliação da população local através de tecidos e secreções e de marcadores biológicos de exposição e de efeito. A avaliação dos marcadores foi inconclusiva.

Concluiu-se que os contaminantes “foram encontrados nos compartimentos ambientais em níveis que podem causar dano ao ambiente e/ou à saúde”. Não houve qualquer quantificação do risco. Não foram consideradas situações futuras.

²⁶

Com base neste estudo, procedeu-se à remoção de todos os habitantes do local.

6.1.3. Caracterização hidrogeológica

Os aspectos fisiográficos, geomorfológicos, geológicos e pedológicos da região da Cidade dos Meninos foram abordados em detalhe por Barreto (1998).

Para a simulação do transporte de contaminantes dissolvidos através de modelos analíticos (o que propõe o presente trabalho), utilizam-se, em geral, valores médios para os parâmetros hidrogeológicos como, por exemplo, a permeabilidade e o gradiente hidráulico.

O gradiente hidráulico foi estudado por Barreto (1998) através de dados de uma série histórica de três anos levando em consideração sua variação nas diferentes estações do ano. Este estudo conclui que, para a região do foco

²⁶ O trabalho desenvolvido pelo Ministério da Saúde não se configura como uma análise de risco propriamente dita. Dentro do esquema proposto pelo RAGS (**Figura 1**), verifica-se que o referido estudo preocupou-se em identificar a contaminação (primeiro passo), proceder a uma coleta de dados (segundo passo), passar por um critério de validar os dados coletados (terceiro passo), avaliar a toxicidade dos compostos envolvidos (quarto passo) e avaliar a exposição a que os indivíduos estão submetidos (quinto passo). O passo seguinte para a avaliação do risco, seria a sua quantificação (sexto passo). A partir deste estágio o tomador de decisão estaria munido de um estudo técnico completo e conclusivo a respeito da posição política a ser tomada. A quantificação do risco não foi feita.

principal de contaminação, o gradiente hidráulico aponta uma preponderância acentuada na direção sudoeste e intensidade variando entre 1,2E-03 e 2,0E-03.

6.1.4. Caracterização da contaminação

Diversos estudos apontam para a existência de contaminação na região (Borges, 1996; Barreto, 1998; Ministério da Saúde, 2002).

A unidade industrial existente na Cidade dos Meninos tinha como principal processo a produção do hexacloroetano (HCH). Este composto é classificado como um organo-clorado de fórmula molecular $C_6H_6Cl_6$, representado na **Figura 10**.

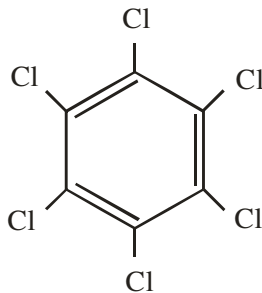


Figura 10 – Representação esquemática do HCH.

O HCH tem uma série de isômeros sendo os mais abundantes no seu grau técnico o α -HCH, β -HCH, γ -HCH, δ -HCH e o ϵ -HCH.

O γ -HCH é o único isômero que apresenta características inseticidas, enquanto os demais isômeros são obtidos como subprodutos do processo industrial.

Além dos isômeros α , β , γ e δ , foram detectados em amostra de água subterrânea da Cidade dos Meninos: o diclorodifeniltricloroetano (DDT) e seus metabólitos (DDD e DDE), triclorobenzenos (TCB), triclorofenóis (TCP),

Estudo de caso: Cidade dos Meninos

poloclorados dibenzodioxina (PCDD) e policlorados dibenzeno furano (PCDF), (MS, 2002).

A **Tabela 2** apresenta os compostos (em suas maiores concentrações) detectados pela Cetesb na Cidade dos Meninos, bem como a comparação destas concentrações com alguns limites legais:

Tabela 2 – Maiores concentrações.

Composto	Concentração máxima (µg/L)	Concentração Máxima Permitida (µg/L)			
		Brasil (MS)	CE	Holanda	OMS
α-HCH	928,46	NE	0,1	0,1	NE
β-HCH	62,61	NE	0,1	0,1	NE
γ-HCH	1.208,62	2,0	NE	NE	2,0
δ-HCH	1.265,37	NE	NE	NE	NE
o,p'-DDT*	0,37	2,0	0,1	0,1	2,0
p,p'-DDT	0,89	NE	NE	NE	NE
o,p'-DDD	0,03	NE	NE	NE	NE
p,p'-DDD	0,20	NE	NE	NE	NE
o,p'-DDE*	ND	2,0	0,1	0,1	1,0
p,p'-DDE	0,22	NE	NE	NE	NE
2,4,6-TCF	9,19	200,0	NE	NE	NE
2,4,5-TCF**	6,48	NE	1,0	1,0	NE
PCF	ND	9,0	NE	0,1	9,0
1,2,4-TCB	91,11	20,0	NE	1,0	20,0
HCB	ND	1,0	NE	NE	1,0

Fonte: (CETESB, 2002, *apud* Ministério da Saúde, 2002). Os dados do Brasil são os das portarias do Ministério da Saúde.

Legendas: ND – Não Detectado. NE – Não Existe. Limite de detecção do método: 0,01 µg/kg

* Somatória dos metabólitos. ** Clorofenóis totais

Para os padrões, os dados da tabela são comparados em como referência a Portaria n. 1.469, de 29/12/2000, da Anvisa. Os dados holandeses são fornecidos pelo MVRM (Ministério do Planejamento da Habitação e Espaço Público e da Política do Meio Ambiente, 1999). Dados da Comunidade Européia e da Organização Mundial de Saúde têm como fonte a OMS (Organização Mundial de Saúde).

6.2. Modelo conceitual

6.2.1. Justificativa dos parâmetros utilizados

As principais fontes para a estimativa dos parâmetros hidrogeológicos da Cidade dos Meninos são as dissertações de Borges (1996) e Barreto (1998). Ressalta-se que tais estudos não se propuseram a ser exaustivos no sentido de se determinar todos os parâmetros.

Neste sentido, Borges (1996) ressalta que as informações de sua pesquisa *não* são suficientes para a completa determinação dos parâmetros de transporte de HCH na Cidade dos Meninos.

Estas lacunas podem ser mitigadas se forem utilizadas distribuições estatísticas para os parâmetros no lugar de valores fixos.

O presente trabalho admitirá que todas as variáveis da equação de Domenico sejam independentes e dadas por distribuições normais. As distribuições normais podem ser completamente representadas pelos dois primeiros momentos (média e variância).

Uma vez que o modelo analítico adotado parte da idealização do meio homogêneo e isotrópico, a variabilidade dos parâmetros refere-se exclusivamente à sua distribuição em torno do valor médio para todo o domínio. Portanto, esta variação em torno da média não se confunde com a variabilidade espacial. Esta última é de grande relevância na aplicação de modelos numéricos discretos.

Borges (1996) também sugere que se proceda a uma simulação numérica para melhor determinar a extensão da contaminação.

Um modelo analítico, contudo, pode ser útil como estágio preliminar para uma simulação numérica.

Mais ainda, uma avaliação através de um modelo analítico simples, feita a análise de sensibilidade a que se propõe, poderá indicar quais os principais parâmetros que deverão ser estudados num posterior modelo numérico.

Como os modelos numéricos em geral tendem a necessitar de uma maior quantidade de resultados de ensaios, a avaliação prévia pelo modelo analítico poderá minimizar os futuros custos com ensaios.

6.2.1.1. Determinação do contaminante de interesse

Os isômeros alfa-, beta-, e gama-, da família do HCH, são classificados como possivelmente cancerígenos pela USEPA e apresentam fator de carcinogenicidade (*SF*) de 6,30; 1,80; e 1,30 (mg/kg-dia)⁻¹ respectivamente. Conclui-se, portanto, que o isômero α é o que apresenta o maior potencial cancerígeno para uma mesma concentração.

As proporções em que se encontram os isômeros do HCH (grau técnico) foram colacionadas por Borges (1996) e estão apresentadas na **Tabela 3**.

Tabela 3 – Proporções para os isômeros do HCH.

Isômero	Posição dos átomos de cloro	Porcentagem		
		OMS	Melnikok	CECAB e FEEMA
α -HCH	AAEEEE	65-70	53-70	40-60
β -HCH	EEEEEE	7-10	3-14	5-13
γ -HCH	AAAE	14-15	11-18	0,1-9
δ -HCH	AE	~7	6-10	2-4
ϵ -HCH	AE	1-2	-	-
Demais	-	1-2	3-5	-

Fonte: Borges (1996)

Legenda: A-Axial, E-Equatorial

A quantidade diminuta do isômero gama encontrada nos resultados analíticos se deve ao fato de que a área era utilizada pela fábrica como depósito para o resíduo originado na produção do lindano, formado pelos demais isômeros e outras impurezas (Borges, 1996).

Tomando-se as concentrações da **Tabela 2** como representativas, pode-se estimar, a grosso modo, a relevância de cada um dos compostos em relação ao seu potencial cancerígeno multiplicando-se o *SF* pela maior concentração detectada.

O grau de relevância assim obtido está apresentado a seguir na **Tabela 4**.

Tabela 4 – Grau de relevância dos compostos envolvidos.

Composto	Concentração máxima ($\mu\text{g/L}$)	Slope Factor (mg/kg-d^{-1})	Relevância Relativa ($\mu\text{g/L}$) x (mg/kg-d^{-1})
α -HCH	928,46	6,3	5849,30
β -HCH	62,61	1,8	112,70
γ -HCH	1.208,62	1,3	1572,51

Conclui-se que, se um receptor estiver submetido a concentrações de HCH cuja proporção de cada isômero seja dada pela tabela acima, tem-se que a suscetibilidade de desenvolvimento de câncer se deverá na seguinte proporção: 77,63% devido ao α -HCH, 1,5% devido ao β -HCH e 20,87% devido ao isômero γ -HCH.

Opta-se, com base no grau de relevância obtido acima pelo estudo isolado do α -HCH (CASRN 319-84-6). Ressalta-se, contudo, como dito no Capítulo 1,

que a metodologia de *AqR* sugere que todos os riscos, obtidos para cada composto individualmente, sejam somados. Para LaGrega, por exemplo, a escolha dos compostos de interesse (COC) deve corresponder a 99% do risco (1994).

Os estudos atuais sugerem um *SF* para o α -HCH de $6,3 \text{ (mg/kg-dia)}^{-1}$. Este valor foi estimado em 1996 com base em estudos com roedores e atualmente não há subsídio suficiente para crer que haja alguma mudança neste parâmetro (USEPA, 2002).

A revisão feita pela ATSDR (1999) bem como pela USEPA (2002) indicam que não há na literatura qualquer novo estudo capaz de modificar o atual entendimento acerca do *Slope Factor* do α -HCH.

Outro parâmetro de grande importância no estudo do risco ambiental é o coeficiente de partição octanol-água K_{ow} . Trata-se de uma propriedade intrínseca do composto e dá a medida de quão hidrofóbico ele é. Quanto maior o K_{ow} , menos solúvel ele será em água, e maior será sua afinidade com a matéria orgânica do solo. O K_{ow} é obtido da mistura do composto com octanol e água. Mede-se, daí, a proporção do composto que é dissolvida por cada uma das fases. A relação entre a concentração do composto no octanol pela concentração do composto da água é o coeficiente de partição (Fetter, 1999).

O K_{ow} do α -HCH é 6.610 ($\log K_{ow} = 3,82$), considerado um valor alto, o que indica que o composto é sorvido preponderantemente na matéria orgânica do solo, mesmo para solos com teores de matéria orgânica extremamente baixos (Borges, 1996).

A pressão de vapor do α -HCH é de 2,67 Pa (0,02 mmHg) e sua densidade relativa é de $1,87 \text{ g/cm}^3$ a 20°C . É considerado estável em meios ácidos e instável em meios alcalinos (INCHEM, 2005).

6.2.1.2. Concentração na água subterrânea (C_0)

A maior concentração (na água subterrânea) para o α -HCH é de 928,46 $\mu\text{g/L}$ (Tabela 4). Considerando-se um desvio padrão para este parâmetro de 20% do valor adotado, tem-se uma variância de $34.481 (\mu\text{g/L})^2$.

A solubilidade do α -HCH em água é de 1,63 mg/L a 25°C (Borges, 1996). O que pode significar que a concentração acima inclua o contaminante tanto na fase dissolvida quanto em sua fase livre (particulada).

A mobilidade da fase particulada é sensivelmente menor que a do contaminante dissolvido em água. Contudo, assume-se aqui que toda a concentração esteja dissolvida em água subterrânea. Esta idealização tende a aumentar consideravelmente o valor do risco calculado.

6.2.1.3. Decaimento da concentração na fonte (K_S)

É plausível considerar a fonte constante (o que implicaria em K_S nulo) dado o comportamento do contaminante: baixa solubilidade e baixa mobilidade da fase livre, o que faria que a fase livre funcionasse como uma fonte secundária de contaminação por um longo período.

Contudo, para o fim de avaliar a influência deste parâmetro no modelo de AqR , adota-se o valor modesto de $0,04 \text{ ano}^{-1}$ e de $6,4\text{E-}05$ para sua variância.

6.2.1.4. Tempo de simulação (t):

A contaminação na área é estimada em aproximadamente 50 anos (Borges, 1996). Considerando uma estimativa futura de mais 30 anos tem-se um tempo de

Estudo de caso: Cidade dos Meninos

simulação de 80 anos, com um desvio padrão para este parâmetro de 20% do valor adotado, deste modo tem-se uma variância de 256 a^2 .

Esta estimativa parte da idealização de que o maior valor de concentração é válido para o tempo de 50 anos de contaminação.

Esta estimativa é feita para se avaliar o risco num período razoavelmente iminente. Contudo, para efeitos de planejamento a longíssimo prazo, é razoável se estimar em que tempo haveria a maior concentração no ponto considerado. Obviamente que, quanto maior o tempo considerado, menor será a credibilidade da resposta dada pelo modelo adotado.

6.2.1.5. Distância ao longo da linha central (x)

Não há qualquer indício de que haja algum poço de extração de água para o consumo humano nos arredores da região do foco. Conseqüentemente, não é possível se identificar uma rota real de exposição por ingestão de água subterrânea. Por recomendação da RBCA, em casos onde não haja efetiva contaminação, a análise de risco se procede tendo em conta um receptor hipotético próximo ao foco principal (ASTM-RBCA, item 3.2.61).

O ponto de interesse, que simula a existência de um poço de onde se extrairia água para o consumo humana, localiza-se na direção do fluxo (ao longo da linha central) a uma distância de 50 m, conforme a **Figura 6**. Considerando igualmente um desvio padrão para este parâmetro de 20% do valor adotado, tem-se uma variância de 100 m^2 .

6.2.1.6. Permeabilidade (k)

A permeabilidade está na faixa de 2,5E-04 a 6,0E-04 cm/s (Borges, 1996); valor médio, portanto de 4,25E-04 cm/s (134,03 m/ano). Tais valores são coerentes com a estimativa de Barreto (1998) que constatou permeabilidades na ordem de 10^{-4} a 10^{-6} cm/s.

Ao se considera que o maior valor encontrado para a permeabilidade esteja no 95,45º percentil de uma distribuição normal, pode-se estimar seu desvio padrão (σ) da seguinte forma (Spiegel, 1961):

$$\sigma = \frac{k_{MAX} - \bar{k}}{2} \quad (41)$$

O desvio padrão seria, então, 8,75E-05 cm/s (27,59 m/ano) e sua variância será de $7,66 \text{ (cm/s)}^2$ equivalente a $761,49 \text{ (m/ano)}^2$.

6.2.1.7. Gradiente hidráulico (i)

Considerando as diversas estações do ano, estimou-se o gradiente hidráulico médio entre 1,2E-03 e 2,0E-03 (Barreto, 1998).

Procedendo as mesmas considerações estatísticas da permeabilidade, tem-se um valor médio de 1,6E-03 m/m e um desvio padrão de 2,0E-04 m/m, para o gradiente hidráulico. Conseqüentemente, a variância considerada será de $4,0E-08 \text{ (m/m)}^2$.

6.2.1.8. Porosidade efetiva (θ_e)

Assume-se o valor de 0,30 para a porosidade com um desvio padrão de 20% de seu valor, portanto com variância de 0,0036. O valor de 30 para porosidade é um valor típico na literatura (Lambe, 1969).

6.2.1.9. Fator de retardamento (R)

O menor fator de retardamento para o HCH, para o solo da Cidade dos Meninos, foi estimado em 9. Para o isômero alfa, o fator de retardamento está dentro da faixa de 28 a 60 (Borges, 1996).

O retardamento leva em consideração os teores de argila e de matéria orgânica de, respectivamente 17,6% e 0,58% (Borges, 1996).

Retardamentos desta magnitude, considerando válida a idealização do meio homogêneo, garantem que neste meio século de contaminação a pluma tenha avançado poucos metros.

Mesmo que se adotasse o menor valor para esta propriedade, ainda assim, haveria um problema de convergência para a presente metodologia, visto que a pluma sequer chegaria ao ponto de interesse. Ao se considerar, por exemplo, o retardamento nulo ($R=0$), estar-se-ia garantindo uma análise protetória, a princípio, pois os resultados indicariam maiores concentrações para o tempo considerado. Contudo, a desconsideração do retardamento não tornaria possível a estimativa de sua influência dentro de toda a metodologia. Por esta razão, meramente com o objetivo de se estimar a sensibilidade da metodologia de AqR para os demais parâmetros de transporte, adota-se um fator de retardamento igual a 3, e de forma análoga para demais parâmetros, uma variância de 0,36.

6.2.1.10. Velocidade de percolação (v)

Velocidade de percolação (média) = 10^{-10} cm/s (Borges, 1996).

Observar que da forma em que o problema está montado há uma correlação entre a velocidade de percolação média, a permeabilidade, o gradiente hidráulico e a porosidade efetiva. Isto significa que a velocidade não é um parâmetro de entrada para o modelo.

6.2.1.11. Dispersividades (α_x , α_y e α_z)

A dispersividade longitudinal (direção x) pode ser estimada pela equação de Xu e Eckstein (Fetter, 1999):

$$\alpha_x = 0,83(\log L_s)^{2,414} \quad (42)$$

onde L_s é a distância de fluxo. Para $L_s = 50$ m, tem-se $\alpha_x = 2,98$ m.

É prática comum estimar as dispersividades nas direções y e z nas seguintes proporções: $\alpha_y = \alpha_x/3$ e $\alpha_z = \alpha_y/87$ (American Petroleum Institute *apud* Risc, 2001). Seus valores são, respectivamente, 9,93E-01 m e 1,14E-02 m.

Considerando-se igualmente um desvio padrão para estes parâmetros de 20% dos valores adotados, obtêm-se variâncias de 3,55E-01 m², 3,94E-02 m² e 5,20E-06 m² para α_x , α_y e α_z respectivamente.

O coeficiente de difusão = 2,0E-07 cm/s (Borges, 1996), também não é um dado de entrada para o modelo.

6.2.1.12.**Fator de decaimento de primeira ordem (λ)**

Sabe-se que a meia vida do contaminante não é função exclusivamente do composto químico, mas também do meio considerado. Fatores como o pH e o caráter aeróbico ou anaeróbico podem influenciar a meia vida em muitas ordens de grandeza.

Considerando o decaimento de primeira ordem tem-se que:

$$C(t) = C_0 e^{-\lambda t} \quad (43)$$

Faz-se referência na literatura de uma meia vida de dois anos em água (UNEP, 2002). Como não há dados para a meia vida no meio em estudo, o composto poderia, em uma perspectiva protetoria, ser considerado 100% persistente, isto é, com meia vida infinita. Ainda assim, é uma estimativa bastante comedida supor que o α -HCH tenha uma meia vida superior a 17 anos, /T13 11.2A1171.T06.92 -19.38

6.2.1.14.**Distância perpendicular à linha central (ponto de interesse y)**

Assumiu-se que a distância é de 50m na direção do fluxo (na linha central). Neste caso, considerando um erro de alvo entre 1% e 2% da distância longitudinal, isto é, estimando-se que o ponto onde idealmente se encontra o poço receptor esteja a 0,8 m da direção principal do fluxo. Para este parâmetro, eminentemente incerto, pode-se adotar um desvio padrão de 20% de seu valor, o que implica numa variância de $0,0256 \text{ m}^2$.

6.2.1.15.**Profundidade da fonte (Z)**

De 3 a 10 m de profundidade (de Campos, 2004, comunicação pessoal). Adota-se o valor de 10 m.

Considerando igualmente um desvio padrão para este parâmetro de 20% do valor adotado, obtém-se uma variância de $4,0 \text{ m}^2$.

6.2.1.16.**Profundidade do ponto de interesse (z)**

O modelo de Domenico, na forma que foi concebida neste trabalho, assume que no ponto de interesse, a concentração será sempre aquela do nível d'água, isto é, a profundidade de interesse será igual a zero.

6.3. Validação por Monte Carlo

Em simulações de Monte Carlo, assumindo parâmetros de solução analítica da equação de transporte em problemas de avaliação de risco Kennedy (2004) utilizou 500 realizações (iterações).

O SeRis trabalha com 16 variáveis aleatórias, portanto, para uma precisão de 67%, de acordo com a eq. (18), são necessárias 136.880 realizações sendo 9.126 para cada parâmetro.

Dado o caráter exponencial da eq. (18), a adoção de uma precisão de 99% só seria alcançada com 2,08E63 realizações, o que geraria tempos de simulação excessivamente longos para os atuais microcomputadores.

6.4. Validação pelo RISC4

O RISC4® (Risc Integrate Software for Clean-ups) é um programa comercial desenvolvido com o objetivo de estimar o risco cancerígeno devido a uma determinada área contaminada.

O RISC difere do SeRis pelo modelo analítico adotado. O RISC utiliza para estimativa do transporte em águas subterrâneas o modelo AT123D (Analytical Transient One-, Two-, and Three-Dimensional Simulation of Waste Transport in Aquiphjer System) desenvolvido por Yeh (1981).

O modelo de Yeh difere do de Domenico em vários aspectos, como por exemplo, no formato da fonte: prismática para o AT1

O RISC não estima a sensibilidade devido às incertezas na estimativa dos parâmetros de transporte. Por esta razão a validação se presta apenas para comparar os riscos calculados deterministicamente.

7. Apresentação e análise dos resultados

7.1. Análise gráfica

A concentração inicial funciona como um fator que multiplica toda a equação de Domenico. Por esta razão, qualquer variação neste parâmetro implicará em uma variação linear no risco, conforme se apresenta na **Figura 11**.

Uma vez que se conheça a fonte de contaminação, e se suas dimensões forem pequenas em relação ao domínio considerado, concentração inicial é um parâmetro que pode ser estimado com razoável precisão, uma vez que poucos ensaios são suficientes para determiná-la com razoável precisão.

Matematicamente, contudo, a concentração inicial influi de forma bastante simples e linearmente direta.

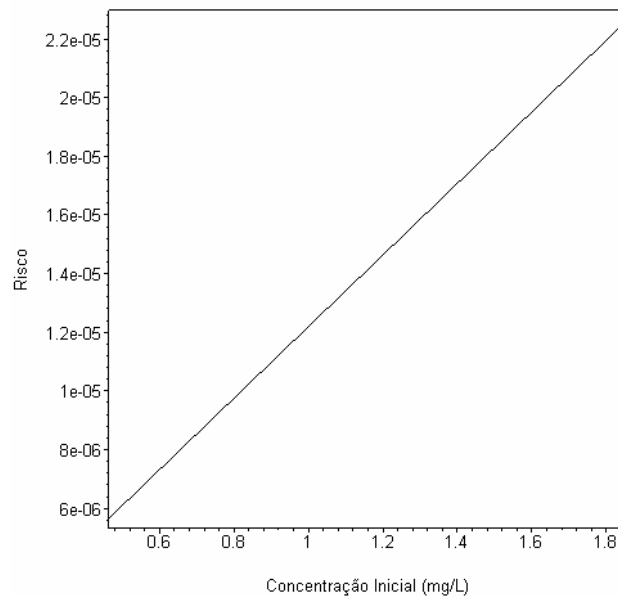


Figura 11 – Comportamento da concentração inicial.

Considerando um amplo espaço de variação para a taxa de degradação da fonte ($10E-03$ a $10E-02$ ano⁻¹), verifica-se que este parâmetro comporta-se de forma não-linear numa curva suave e contínua até anular o risco (**Figura 12**).

Uma curvatura suave e constante para um grande domínio indica que a derivada da função é um valor aproximadamente constante o que indica que as sensibilidades locais também são aproximadamente constantes de ponto para ponto. Neste caso o cálculo do coeficiente de sensibilidade não depende da estimativa inicial do valor médio do parâmetro.

A curvatura leve também indica que há uma relação direta, quase que linear, entre o parâmetro (degradação da fonte) e a resposta do sistema (risco).

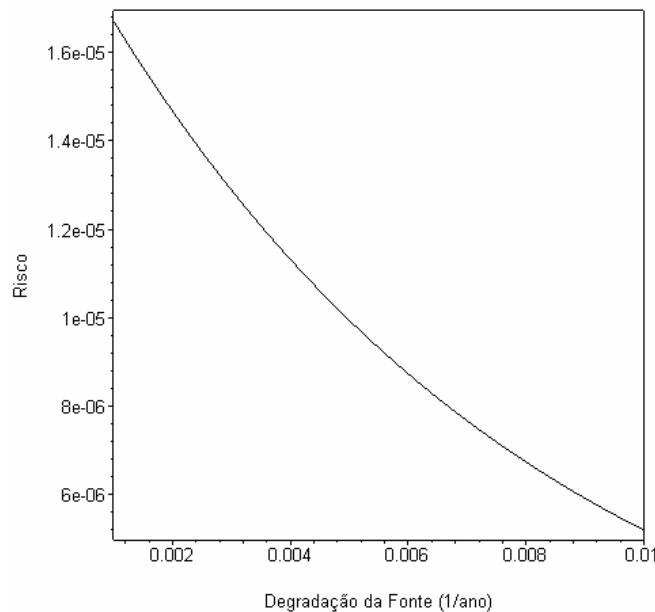


Figura 12 – Comportamento da taxa de degradação da fonte.

O comportamento do risco em função do tempo é regido pelos princípios análogos aos que regem as curvas de chegada em ensaios de coluna. Há um período inicial em que não chega qualquer quantidade de contaminante ao ponto de interesse. Processos de advecção e dispersão vão conduzindo concentrações cada vez maiores para um ponto a jusante da fonte até que, se a concentração da

fonte for mantida constante e considerando um regime permanente de fluxo, haverá um valor limite estacionário.

Os processos de degradação, tanto do contaminante quanto da concentração da fonte, induzem o gráfico a uma descendente após seu pico. Se estes fenômenos de degradação forem ignorados o gráfico tenderia a uma assíntota horizontal (condição estacionária).

Outra informação importante é o crescimento exponencial do risco após 60 anos de simulação. A **Figura 13** mostra que nas duas décadas entre o tempo de 80 anos e o tempo de 100 anos, o risco aumenta em proporções muito maiores do que nos 80 primeiros anos (do tempo 0 até o tempo 80 anos). Uma avaliação de 80 anos é considerada longo prazo para efeitos de gestão ambiental.

Visto que o início da contaminação se deu no início da década de 1950, há menos de 30 anos, a serem considerados simulação futura, propriamente. Ainda assim, isto é, considerando-se mais de duas décadas, tem-se uma estimativa a longo prazo.

A avaliação mais protetória possível ocorre para o tempo $t = 160$ anos. Esta informação, mesmo que não seja razoável para efeitos de gestão ambiental, é importante para o entendimento do fenômeno.

Outro aspecto relevante é o fato da sensibilidade local do tempo variar consideravelmente de ponto para ponto. Há regiões de derivada nula até regiões com altos valores para a derivada do risco em relação ao tempo.

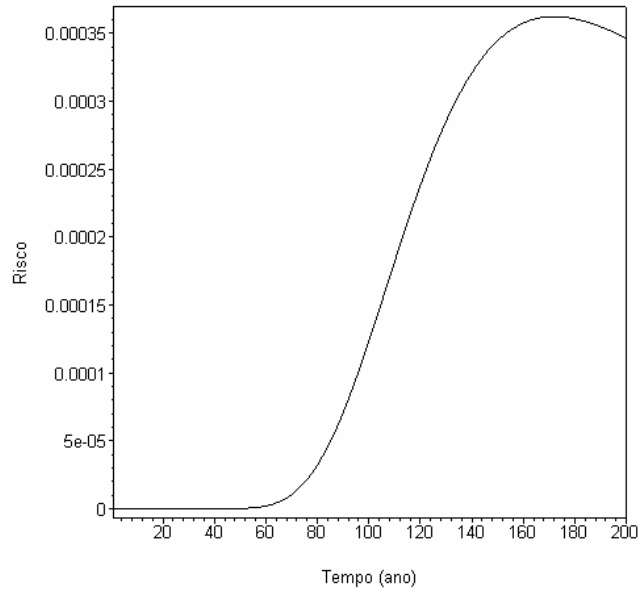


Figura 13 – Comportamento do tempo.

O risco tende a se anular rapidamente à medida que se afasta o ponto interesse (ponto de captação hipotético). Evidentemente que, para um ponto mais distante, o tempo necessário para a pluma alcançá-lo é maior. Neste sentido um risco nulo não significa, necessariamente, que o ponto é seguro, mas apenas que para o tempo de simulação empregado nenhuma porção do contaminante foi transportada até o ponto de interesse.

A **Figura 14** indica que a zona de influência da contaminação está restrita às primeiras dezenas de metros, após o quê, o comportamento passa a tender assintoticamente para zero.

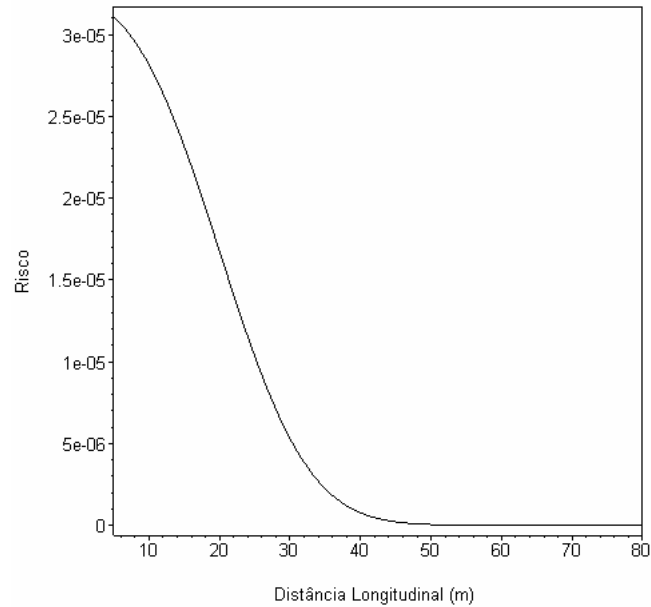


Figura 14 – Comportamento da distância longitudinal.

A permeabilidade (**Figura 15**), bem como o gradiente hidráulico (**Figura 16**) de certa forma dão a medida da velocidade em que o contaminante chega ao ponto de interesse. Se forem tomados intervalos exageradamente grandes para estes dois parâmetros os resultados mostrariam uma curva de chegada tendendo assintoticamente para o valor da concentração inicial. Estes intervalos, contudo, não têm significância física relativa, pois possivelmente não se encontram meios geológicos nos quais a permeabilidade ou o gradiente hidráulico estejam nesta magnitude.

Para os tempos considerados, a permeabilidade passa a exercer maior influência a partir de 120 m/ano ($3,81E-06$ m/s). Em torno de 200 m/ano ($6,34E-06$), um acréscimo de 10% na permeabilidade implica em um aumento de aproximadamente 100% no risco.

O gradiente hidráulico passa a ser relevante a partir do 0,002 m/m.

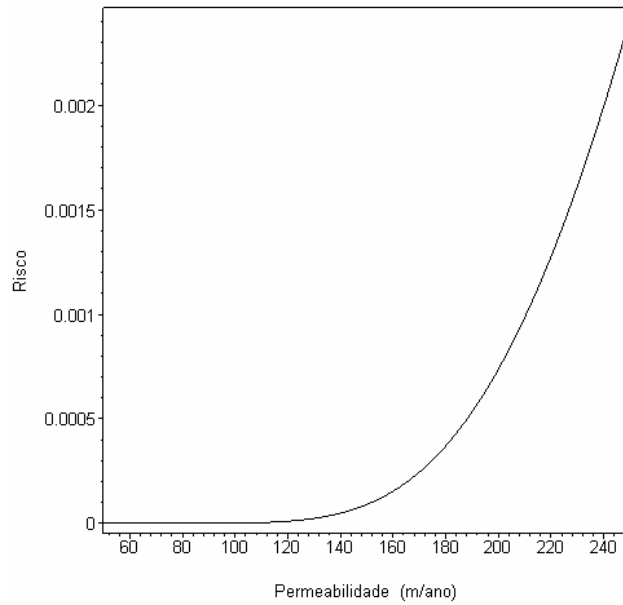


Figura 15 – Comportamento da permeabilidade.

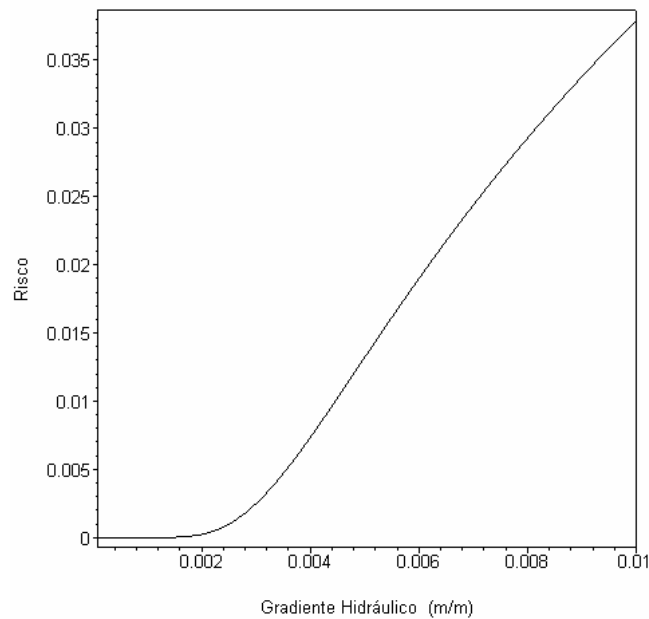


Figura 16 – Comportamento do gradiente hidráulico.

Quanto maior a porosidade, maior tende a ser a permeabilidade. A equação empírica de *Kozeny-Carman*, por exemplo, sugere que a permeabilidade seja diretamente proporcional ao cubo da porosidade (Lambe, 1969 e Mitchell, 1993). Desta forma, quanto maior for a porosidade de um solo, maior será sua permeabilidade.

Da **Figura 17** abaixo verifica-se uma diminuição do risco com o aumento da porosidade. Tal comportamento explica-se pelo fato de que ao se variar a porosidade, mantêm-se os demais parâmetros constantes. Isso significa que para uma maior porosidade, mantendo-se fixos a permeabilidade, o gradiente hidráulico e o retardamento, tem-se uma menor velocidade de percolação e, conseqüentemente, menor a concentração no ponto de interesse.

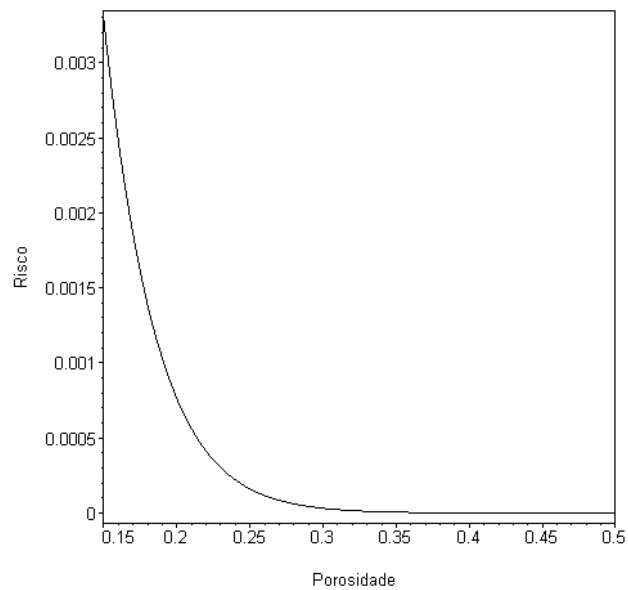


Figura 17 – Comportamento da porosidade.

O retardamento (**Figura 18**), a exemplo da porosidade, influi no sentido de diminuir a velocidade de modelagem, conseqüentemente, o risco será inversamente proporcional ao retardamento. Nota-se que a partir do retardamento igual a 4, mantendo-se os demais parâmetros, o risco estimado é aproximadamente nulo.

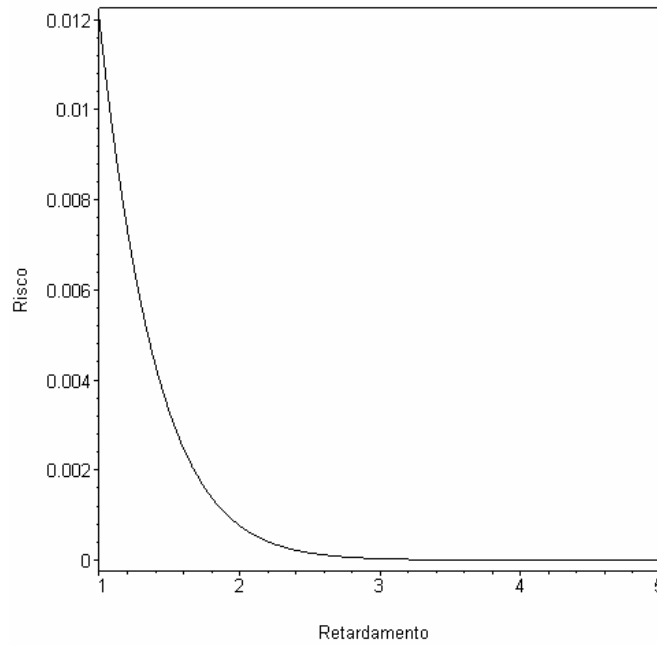


Figura 18 – Comportamento do retardamento.

As dispersividades dão idéia da tendência da pluma de contaminação se alongar ou de se alargar mais ou menos. Uma alta dispersividade longitudinal indica que a pluma tenderá a se alongar na direção do fluxo, alcançando mais rapidamente os pontos a jusante. As dispersividades transversal e vertical indicam a tendência da pluma de alargar e aprofundar diminuindo a concentração central. As **Figuras 19 a 21** apresentam o comportamento das dispersividades.

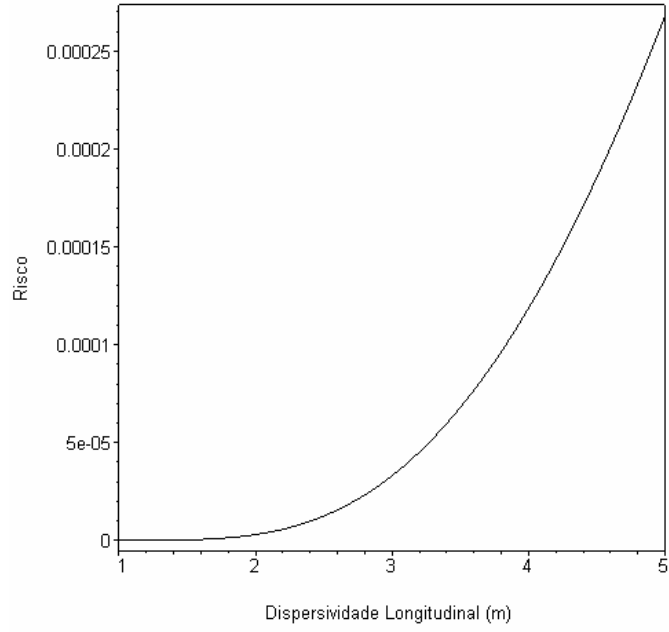


Figura 19 – Comportamento da dispersividade longitudinal.

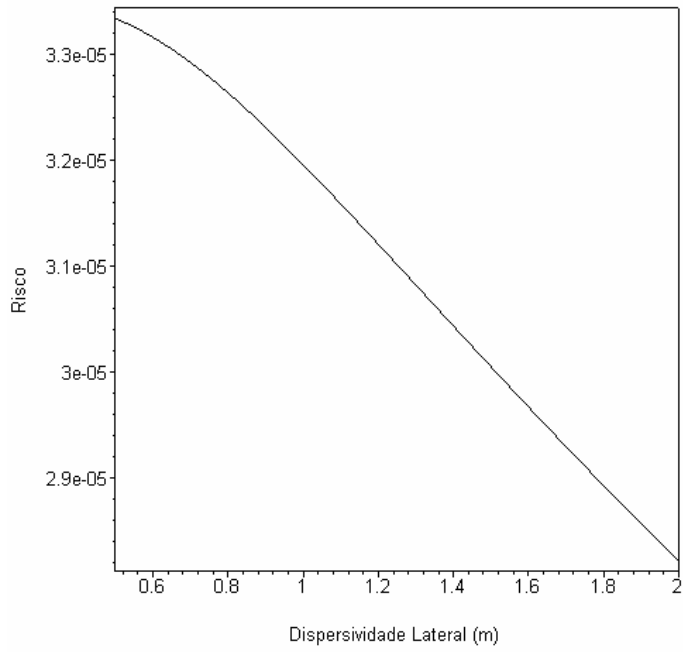


Figura 20 – Comportamento da dispersividade lateral.

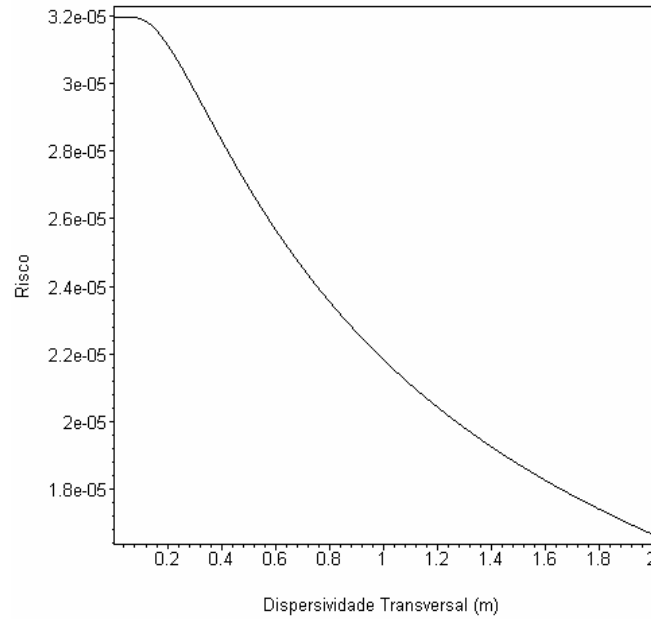


Figura 21 – Comportamento da dispersividade transversal.

A taxa com que o contaminante se degrada tem uma influência aproximadamente linear com o risco, conforme mostra-se na **Figura 22**.

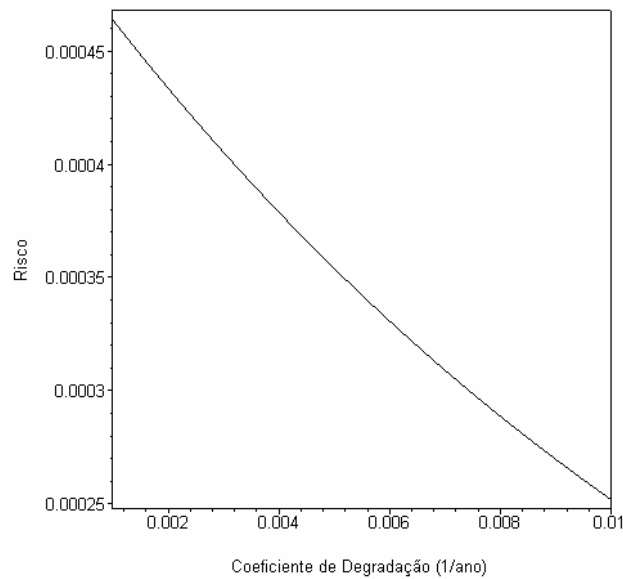


Figura 22 – Comportamento do coeficiente de degradação.

A largura da fonte, dentro das dimensões do problema, tem importância relativa até aproximadamente 40m, conforme verifica-se na **Figura 23**. A partir daí, o crescimento lateral da fonte não mais contribui para o aumento do risco no

ponto de interesse. Neste caso, seria irrelevante o esforço eventualmente empreendido para a determinação exata deste parâmetro acima do valor de 40 m.

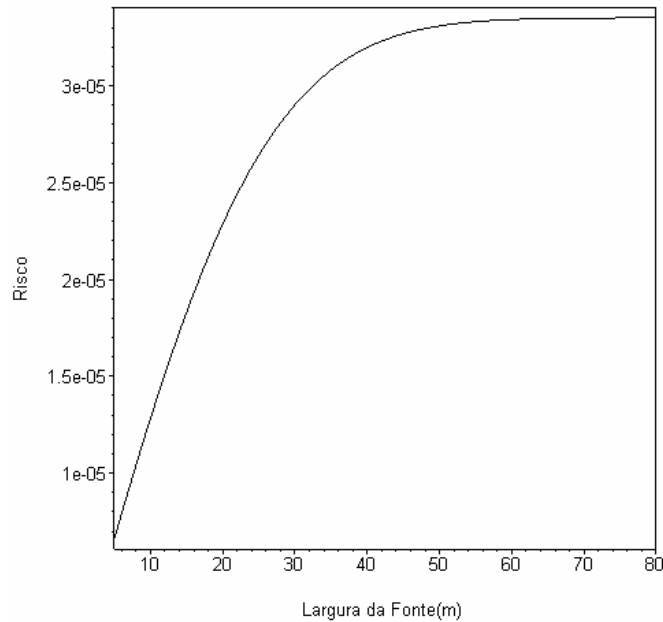


Figura 23 – Comportamento da largura da fonte.

Uma vez que o transporte é regido preponderantemente por efeitos de advecção e, considerando ainda que o fluxo se dê estritamente no plano horizontal, é razoável supor a importância diminuta da profundidade da fonte para um poço hipotético visto que o receptor capta água no nível d'água, conforme apresentado na **Figura 24**. Para o presente caso, a relevância da profundidade da fonte é indiferente para profundidades maiores que 3,0 m.

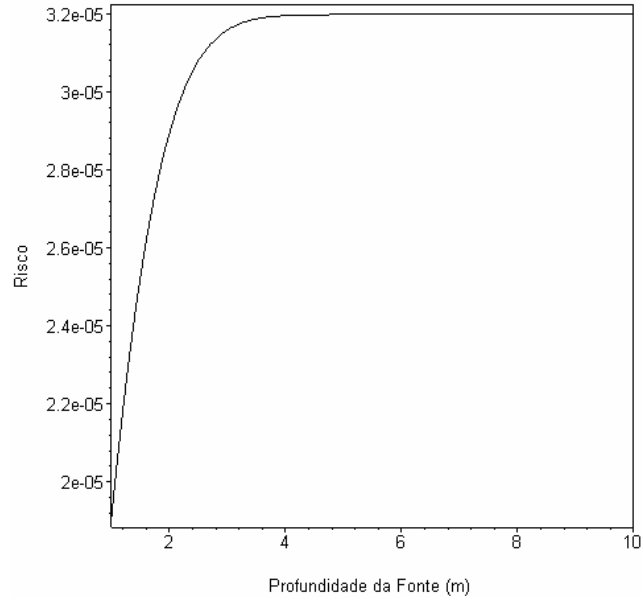


Figura 24 – Comportamento da profundidade da fonte.

7.1.1. Gráfico conjunto

Os gráficos anteriores se prestam como subsídio para uma análise do comportamento do risco calculado em relação a cada um dos parâmetros. Porém, como os domínios de análise são consideravelmente extensos, a análise gráfica anterior pouco diz sobre a sensibilidade das variáveis envolvidas na estimativa do risco.

Não é possível sobrepor diretamente todos os gráficos das funções acima porque os parâmetros, em geral, se apresentam em grandezas diversas, e, ainda aqueles que se apresentam nas mesmas dimensões, apresentam-se em domínios diferentes.

A opção de visualização da sensibilidade gráfica é a disposição das curvas acima dentro de um intervalo estatisticamente determinado. Tomando-se, para cada parâmetro um domínio ao redor do seu valor médio e limitado por uma

função de variância, a sensibilidade dos parâmetros poderia ser visualizada, a grosso modo, em um único gráfico.

A **Figura 25** apresenta o comportamento do risco em relação a variação de cada um dos parâmetros da matriz $[E]$ em um intervalo entre um valor igual a média subtraída da metade do desvio padrão, até um valor máximo igual ao valor médio mais metade do desvio padrão, para cada um dos parâmetros.

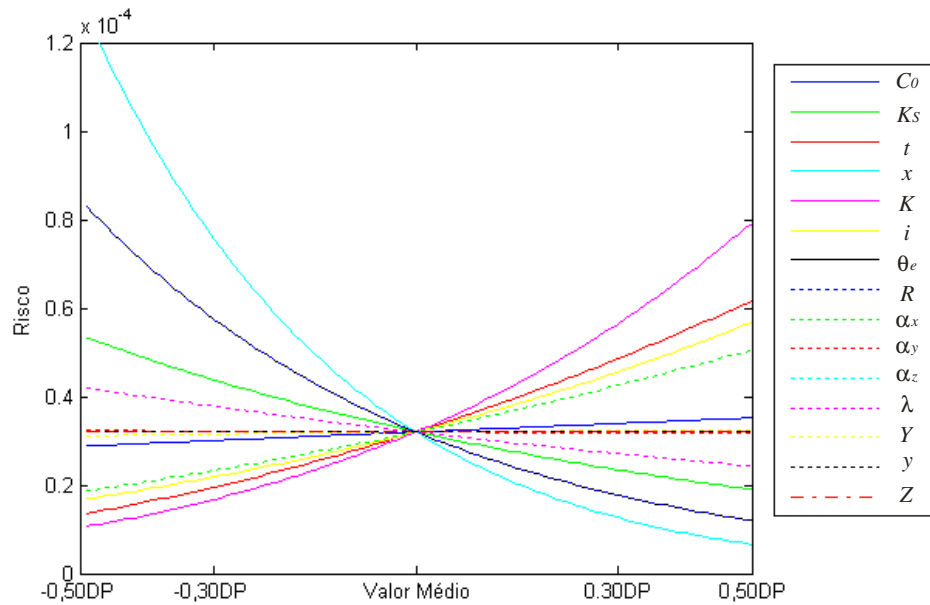


Figura 25 – Sensibilidade gráfica em torno do ponto médio.

Nesta representação, nota-se o maior peso da distância longitudinal (x), a porosidade (θ_e), a permeabilidade (k), o tempo de simulação (t), o gradiente hidráulico (i) e a dispersividade longitudinal (α_x) e o decaimento da fonte (λ). A concentração inicial (C_0), o retardamento (R), as dispersividades transversais (α_y), a degradação do contaminante (K_S), a distância transversal (y) e as dimensões da fonte (Y e Z) apresentam peso diminuto.²⁷

²⁷ Apresentam-se sobrepostos na **Figura 25** as seguintes funções: a) retardamento e porosidade e b) dispersividade na direção y , dispersividade na direção z , a largura da fonte, a distância transversal e a profundidade da fonte.

Notar que a representação acima dá uma noção aproximada, visto que o eixo horizontal não apresenta coerência dimensional.

Outra informação extraída do gráfico acima diz respeito a forma como cada parâmetro influi na metodologia. As curvas ascendentes representam parâmetros cujas grandezas são diretamente proporcionais ao risco. Analogamente, as curvas descendentes pertencem aos parâmetros que são tão maiores quanto menor for o risco.

7.2. Coeficiente de sensibilidade normalizado

Outra representação possível é a sensibilidade normalizada (**Figura 26**). O coeficiente de sensibilidade local normalizado não leva em consideração a variância dos parâmetros. É dado pela equação (12).

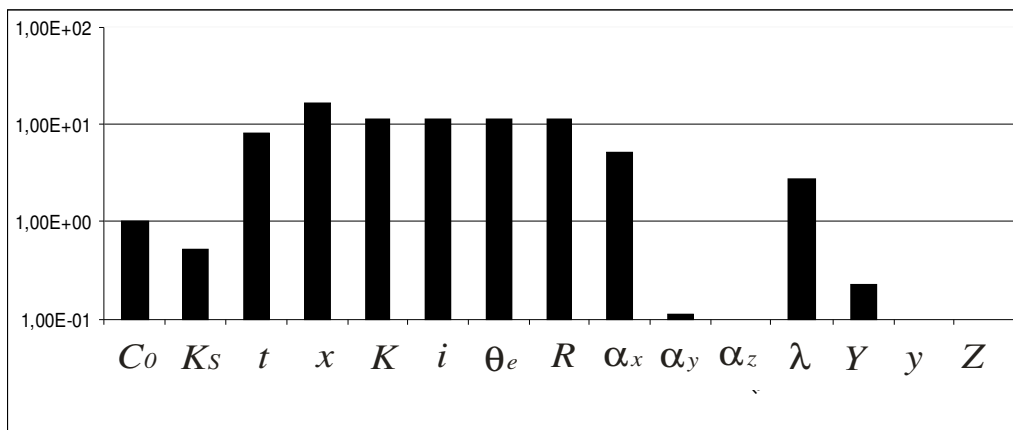


Figura 26 – Coeficiente de sensibilidade normalizado.

Os resultados fornecidos pelo coeficiente normalizado, como dito, não levam em consideração qualquer característica estatística dos parâmetros de transporte. Esta medida fornece apenas a importância que o parâmetro desempenha dentro da formulação matemática do problema. Por esta razão é que a permeabilidade (k), o gradiente hidráulico (i), o fator de retardamento (R) e a porosidade efetiva (θ_e) apresentam a mesma sensibilidade, uma vez que, dentro da solução analítica, estes parâmetros se apresentam da mesma forma.

O coeficiente normalizado se presta a fornecer a importância de cada parâmetro dentro da formulação matemática do problema para os valores médios. A aferição desta importância relativa dificilmente seria constatada da análise pura e simples das equações, em especial quando a formulação matemática se apresenta em termos de funções diferenciais.

O parâmetro da concentração inicial (C_0) constitui uma exceção a esta regra, sendo, portanto, facilmente verificado o valor unitário para o coeficiente normalizado de sensibilidade uma vez que, como se nota da formulação da metodologia, este parâmetro funciona como um fator que multiplica todo o restante da equação. Neste caso seu coeficiente de sensibilidade normalizado será sempre igual à unidade, não apenas para os valores médios, mas para qualquer valor dentro de seu domínio.

Partindo deste princípio, pode-se concluir por dedução lógica, que também seriam unitários os coeficientes de sensibilidade de todos os parâmetros da matriz $[F]$.

Note-se, que o coeficiente de sensibilidade dos parâmetros da matriz $[F]$ é unitário, em decorrência da própria formulação da metodologia e não devido à idealização de considerá-los todos constantes (com os momentos de segunda ordem e superiores nulos).

7.3. Coeficiente de sensibilidade não-normalizado

O coeficiente de sensibilidade não normalizado leva em consideração a variância dos parâmetros sendo dado na unidade de risco ao quadrado conforme a equação (13).

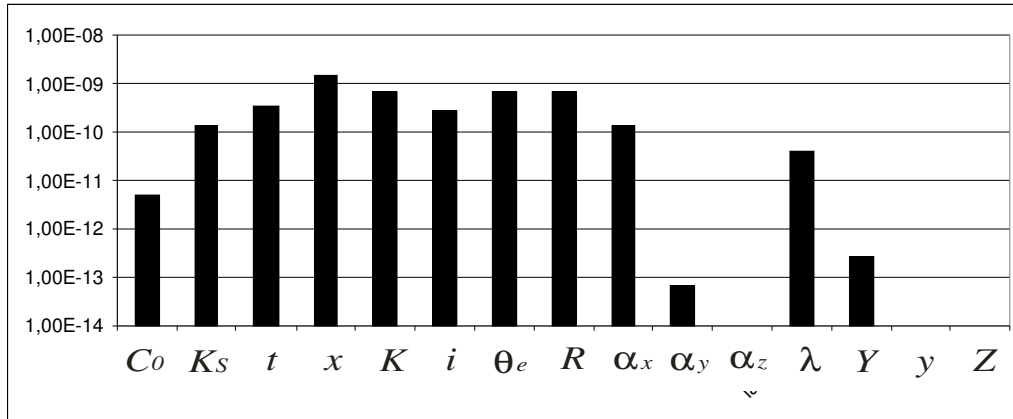


Figura 27 – Coeficiente de sensibilidade não normalizado.

A **Figura 27** apresenta a importância relativa dos parâmetros de transporte dentro da formulação matemática da AqR , em torno dos valores médios e ponderados pela variância atribuída a cada um dos parâmetros.

Informações importantes podem ser extraídas da comparação da **Figura 26** com a **Figura 27**. Não obstante a primazia da distância longitudinal, em ambas os coeficientes, pode-se observar, por exemplo, que apesar da permeabilidade, a porosidade efetiva, o gradiente hidráulico e o fator de retardamento terem algebricamente a mesma importância (daí terem iguais coeficientes de sensibilidade normalizado), estes parâmetros podem apresentar sensibilidades diferentes a depender da distribuição de probabilidade associada a cada um. Pode ocorrer, ainda, que parâmetros de menor importância da equação, como a taxa e degradação da concentração da fonte, por exemplo, a depender da distribuição estatística a ela relacionada, apresente uma sensibilidade maior que outros

parâmetros mais importantes a princípio como, por exemplo, a concentração inicial.

7.4. Risco

Em continuidade ao roteiro apresentado no Capítulo 5, procedeu-se ao cálculo do risco considerado de forma determinística (ignorando-se todas considerações estatísticas em relação às incertezas na estimativa de cada parâmetro), obtendo-se o valor de $1,13E-05$, o que significa a probabilidade aproximada de um caso de câncer para cada 100.000 habitantes que se apresentem na situação de risco da hipótese do problema.

O valor do risco determinístico calculado pelo programa RISC4® é de $7,72E-06$, aproximadamente 31,7% menor que o risco calculado pelo SeRis. Este risco indica algo entre 7 e 8 possíveis casos adicionais de câncer para cada grupo populacional de 1.000.000 de habitantes.

O valor esperado para o risco, considerando válidas as fdp atribuídas aos parâmetros de transporte, através do método FOSM é de $2,29E-05$, aproximadamente duas vezes maior que o risco considerado deterministicamente. O risco, assim considerado, é também uma *fdp*, cuja variância total calculada é de $1,64E-08$ (que significa um desvio padrão de $1,28E-04$).

Desta forma, assumindo válidas as idealizações do procedimento, pode-se, por exemplo, estimar o risco em qualquer percentil de sua distribuição. O risco correspondente ao 95,25° percentil, por exemplo, é obtido pela soma do valor médio com o dobro do desvio padrão (Spielgel, 1961), obtendo-se $2,79E-04$ (um valor aproximadamente 12 vezes maior que a média).

O risco determinístico i.e. aquele que não leva em consideração às incertezas envolvidas, foi estimado num valor de aproximadamente metade do

risco esperado pelo método FOSM e um quinto do estimado pelo MMC ($4,57E-05$), num total de 136.880 simulações (9.126 para cada parâmetro).

O valor calculado pelo FOSM apresenta-se 45% menor que aquele calculado pelo MMC. Em questões de estimativa de risco, onde os resultados tendem a variar ordens de grandeza, é plausível supor que os métodos tenham convergido.

Os parâmetros gerados aleatoriamente que apresentaram valor fora dos domínios possíveis e que, conseqüentemente foram desconsiderados, representam 6,32% do total (8.648).

8. Conclusões e Sugestões

8.1. Conclusões

A *AqR* para questões de contaminação de águas subterrâneas é um procedimento relativamente novo, de caráter transdisciplinar, e que trata de questões não triviais envolvendo incertezas e complexidade.

No aspecto legal, apesar de não estar regulado exhaustivamente por qualquer instrumento normativo brasileiro, esse procedimento pode ser aplicado desde que se observem os mandamentos de direito ambiental, especialmente seus princípios. Dentre os princípios jurídicos aplicáveis, dá-se atenção especial ao princípio da precaução que estabelece a postura adequada frente às questões que envolvem incertezas, caso típico não apenas das questões ambientais de forma geral, mas acentuadamente na metodologia da *AqR*.

Uma típica rotina determinística para se avaliar o risco cancerígeno oferecido por uma determinada área contaminada à população local, constitui-se numa seqüência de cálculos e estimativas, relativamente simples, que conduzem a um único valor final: o risco.

Este valor único, contudo, frente às incertezas inerentes à metodologia, tem sua validade bastante reduzida, uma vez que pequenas variações nas condições iniciais (dados geotécnicos, químicos, toxicológicos e ocupacionais), podem resultar em valores para o risco imensamente diferentes.

Esta limitação pode ser mitigada através do tratamento estatístico das variáveis com a aplicação do método FOSM e do coeficiente de sensibilidade estatístico não normalizado. Estas ferramentas são úteis na validação dos

resultados que, sem uma análise de sensibilidade bem conduzida, pode facilmente levar a respostas de pouca utilidade prática.

A resposta pelo método FOSM é uma *fdp*, ou seja, indica o risco a variância relacionada a este risco. Um procedimento determinístico, que ignorasse as condições estatísticas dos parâmetros terioc1.40511()-1.045(c)-15.954(uc)-.06(os)6.004 rauiumt l

Os resultados, em termos de incerteza, demonstraram que, em se assumindo válidas as idealizações (premissas) quanto às distribuições estatísticas dos parâmetros de transporte, a contaminação à jusante da fonte poderia ser estimada com razoável precisão.

É de se observar, ainda, que as idealizações para o retardamento e o tratamento do transporte como soluto, aumentam consideravelmente o risco calculado e, portanto, dentro da moldura de metodologias escalonadas, como o RBCA, sugere-se a elisão da possibilidade de risco não tolerável para o período e a ocupação do solo considerados e tendo em vista exclusivamente a via de exposição da ingestão de água subterrânea.

A análise de incertezas dos parâmetros geotécnicos pelo método FOSM pode justificar os resultados obtidos apenas no caso concreto considerado não sendo possível, *a priori*, justificar a metodologia de *AqR* como um todo.

A utilização do FOSM apresenta grande vantagem em relação a simulações por Monte Carlo. Apesar de ambos os métodos prestarem-se a estimar o valor do risco com resultados relativamente próximos, em se tratando de problemas com grande número de variáveis que exige enorme esforço computacional. O MMC, contudo, pode ser muito mais eficiente em simulações numéricas, isto é, quando a equação de transporte não for dada por uma solução analítica.

Ressalte-se ainda que a sensibilidade quanto aos parâmetros de transporte é uma análise parcial das incertezas envolvidas na *AqR*. Os dados toxicológicos, ocupacionais e populacionais também respondem como considerável fonte de incerteza e, portanto, a validação de toda a metodologia depende da análise das incertezas envolvidas em todas as etapas.

Questões epistemológicas ligadas ao estudo de sistemas complexos, que não foram abordadas, são um forte indicativo de que os resultados de uma *AqR* devem sempre ser avaliados com cautela. E, neste sentido, o princípio da precaução deve sempre sugerir uma conduta favorável à saúde humana. Em outras palavras, o

procedimento de *AqR* deve ser utilizado sempre nos limites da precaução uma vez que não existe um entendimento consolidado de sua lógica, de seu valor e de seu alcance.

Uma *AqR*, no molde das metodologias RAGS e RBCA pode e deve ser aplicada no Brasil. Seus resultados, contudo, para terem validade suficiente para informar o processo político de tomada de decisão, não prescindem de uma fase de quantificação das incertezas envolvidas. Os resultados tendem a ser tanto melhores quanto maior for a integração dos aspectos legais, toxicológicos e geotécnicos fazendo com que a *AqR* seja considerada uma metodologia eminentemente transdisciplinar e complexa o que sugere que as limitações quanto ao entendimento claro de um caso concreto sejam balizadas sempre pela precaução.

8.2. Sugestões

A rotina proposta poderá ser aprimorada para permitir que se considere mais de uma fonte. Esta rotina permitiria ainda a avaliação da importância relativa de cada fonte (considerada integralmente) na estimativa do risco total.

Em se tratando de solução analítica para a equação de transporte, toda a incerteza está relacionada com a estimativa do valor médio para cada parâmetro. Há casos, contudo, em que a variabilidade espacial impede que se faça a idealizações do meio homogêneo. Para uma solução mais geral, o método aqui proposto poderá ser implementado em soluções numéricas a fim de se avaliar tanto a incerteza na estimativa do parâmetro quanto sua variabilidade espacial. Estima-se que a economia computacional do método FOSM seja ainda mais marcante em modelos numéricos que costuma exigir ainda maiores quantidades de realizações (iterações).

A metodologia aqui proposta pode ser facilmente modularizada com o objetivo de incorporar um *software* ainda mais amplo que avalie o risco total a que um receptor hipotético esteja submetido considerando múltiplos meios (água

subterrânea, água superficial, ar e solo), múltiplas rotas (consumo direto, inalação no banho, ingestão de solo etc.) devido a múltiplos contaminantes.

O método FOSM poderá ser refinado com a incorporação das correlações entre os parâmetros. Algumas correlações derivam da própria definição dos parâmetros que fazem com que estejam correlacionados matematicamente, como por exemplo, a correlação entre a velocidade de percolação, o gradiente hidráulico, a permeabilidade, a porosidade e o retardamento. Outra correlação clara é aquela existente entre as dispersividades.

Riscos na ordem de $10E-04$ a $10E-06$ costumam ser considerados aceitáveis em outros países. O termo risco aceitável, no Brasil, deve ser interpretado com ressalvas, isso porque, tanto na responsabilidade civil do Estado, quanto na responsabilidade civil em matéria de dano ambiental, vige o princípio da responsabilização objetiva, o que significa que o causador do dano é obrigado a repará-lo independentemente de ter agido com culpa. Um estudo jurídico poderia indicar o conceito de risco aceitável no direito brasileiro e suas conseqüências legais.

Outro aspecto, de cunho filosófico, pode ser considerado. Sabe-se que a ideologia que baseia toda avaliação de risco à saúde humana tem, historicamente, forte influência do utilitarismo. Pode-se eventualmente, analisar criticamente a própria validade ontológica das metodologias de avaliação de risco dentro dos critérios de justiça e equidade, o que se sugere que seja feito.

9. Referências bibliográficas

ADES, A. E.; LU, G. Correlations Between Parameters in Risk Models: Estimation and Propagation of Uncertainty by Markov Chain Monte Carlo. **Risk Analysis**, v. 23, n. 6, p. 1165-1172, 2003.

ANTUNES, Paulo de Bessa. Cidade dos Meninos. **Revista “O Eco”**, disponível em: www.oeco.com.br em maio de 2005.

APOSTOLAKIS, George E. How Useful Is Quantitative Risk Assessment?. **Risk Analysis**, v. 24, n. 3, p. 515-520, 2004.

AMERICAN SOCIETY OF TESTING MATERIALS -ASTM. **RBCA Fate and Transport Models: Compendium and Selection Guidance**, 1999.

_____. **Guide for Risk-Based Corrective Action (RBCA) at Petroleum Release Sites**. E 1739-95, 1995.

_____. **Standard Guide for Risk-Based Corrective Action (RBCA)** E 2081-00, 2000.

BARRETO, Ana Beatriz da Cunha. **Avaliação de Condições Hidrogeológicas e Contaminação por HCH da Cidade dos Meninos, RJ**. 1998. 92 f. Dissertação de Mestrado. Departamento de Engenharia Civil – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.

BASTOS, Bernardo Leopardi Gonçalves Barretto; OMENA, Daniella Soares de; COSTA, Humberto Pimentel. A natureza jurídica das águas. **Revista do Ministério Público de Alagoas**, Maceió, v. 12, p. 27-42, 2004.

BASTOS, Celso Ribeiro. **Curso de Direito Financeiro e de Direito Tributário**. 8ª. ed. São Paulo: Saraiva, 2001.

BASTOS FILHO, Jenner Barretto. Os Problemas Epistemológicos da Realidade, da Compreensibilidade e da Causalidade na Teoria Quântica. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 25, n. 2, p. 125-147, junho de 2003.

BATU, Vedat; VAN GENUCHTEN, Martinus T. First–and Third–Type Boundary Conditions in Two-Dimensional Solute Transport Modeling. **Water Resources Research**. v. 26, n. 2, p. 339-350, 1990.

BEDSWORTH, Louise W.; KASTENBERG, William E. **Science and uncertainty in environmental regulation**: insights from the evaluation of California’s Smog Check program. *Science and Public Policy*, Guildford, v. 29, n. 1, p. 13-24, 2002.

BINKOWITZ, Bruce S.; WARTENBERG, Daniel. Disparity in Quantitative Risk Assessment: A Review of Input Distributions. **Risk Analysis**, v. 21, n. 1, p. 75-90, 2001.

BOBBIO, Norberto. **Teoria do Ordenamento Jurídico**. Traduzido por: Maria Celeste Cordeiro Leite dos Santos. 10ª ed. Brasília: Editora Universidade de Brasília, 1997.

BONAVIDES, Paulo. **Curso de Direito Constitucional**. 7ª. ed., São Paulo: Malheiros, 1998.

BOOKER, J. R.; ROWE, R. K. One-Dimensional Advective-Dispersive Transport into a Deep Layer Having a Variable Surface Concentration. **International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics**, v. 11, p. 131-141, 1987.

BORGES, Andrea Ferreira. **Avaliação dos Mecanismos de Transporte de Hexaclorociclohexano (HCH) no Solo da Cidade dos Meninos, Duque de Caxias, RJ.** 1996. 205 f. Dissertação de Mestrado. Departamento de Engenharia Civil – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.

BRAGA, Benedito. (Org.). **Introdução à Engenharia Ambiental.** São Paulo: Prentice Hall, 2002.

BURMASTER, David E.; WILSON, Andrew M. Fitting Second-Order Finite Mixture Models to Data with Many Censored Values Using Maximum Likelihood Estimation. **Risk Analysis**, v. 20, n. 2, p. 261-271, 2000.

CAMPOS, João Luiz Elias. **Análise Numérica do Transporte de Contaminantes em Meios Porosos com Reações Químicas.** 1999. 90 f. Tese de Doutorado. Departamento de Engenharia Civil – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.

CASARINI, C. P. D. **Relatório de Estabelecimento de Valores Orientadores para Solos e Águas Subterrâneas no Estado de São Paulo.** CETESB, São Paulo. 2001.

CIRPKA, O. A.; NOWAK, W. First-order variance of travel time in nonstationary formations. **Water Resources Research**, v. 40, p. 1-14, 2004.

COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL - CETESB. **Estabelecimento de valores de referência de qualidade e de intervenção para solo e água subterrânea no Estado de São Paulo.** São Paulo, CETESB/SMA, Documentos Ambientais, 1999.

_____. **Manual de Gerenciamento de Águas Contaminadas/ CETESB, GTZ.** 2ª ed. São Paulo, CETESB, em desenvolvimento desde 2001.

CONSELHO NACIONAL DO MEIO AMBIENTE - CONAMA. **Resolução n. 305, de 12 de junho de 2002.**

_____. **Resolução n. 264, de 26 de agosto de 1999.**

_____. **Resolução n. 316, de 29 de outubro de 2002.**

CONNOR, A. John; McHUGH, Thomas E. Impact of Risk-Based Corrective Action (RBCA) on State LUST Corrective Action Programs. **Human and Ecological Risk Assessment**: v. 8, n. 3, p. 573-589, 2002.

DE CAMPOS, Tácio Mauro Pereira, et al. **Estudo de Processos de Transporte de Contaminantes Orgânicos em Solos e Águas Subterrâneas para o Estabelecimento de Legislação Ambiental e de Medidas de Remediação Adequadas**. Projeto CIAMB/PADCT/FINEP n. 66.95.0355.00. Relatório Final de Pesquisa, 1998.

DOMENICO, P. A.; ROBBINS, G. A. A New Method of Contaminant Plume Analysis. **Ground Water**, v. 23, n. 4, 1985.

DOMENICO, P. A.; PALCIAUSKAS, V. V. Alternative Boundaries in Solid Waste Management. **Ground Water**, v. 20, n. 3, 1982.

DOMENICO, P. A. An Analytical Model for Multidimensional Transport of a Decaying Contaminant Species. **Journal of Hydrology**, Amsterdam, p. 49-58, 1987.

ENGLEHARDT, James D. Scale Invariance of Incident Size Distributions in Response to Sizes of Their Causes. **Risk Analysis**, v. 22, n. 2, p. 369-381, 2002.

FARROW, Scott. Using Risk Assessment, Benefit-Cost Analysis, and Real Options to Implement a Precautionary Principle. **Risk Analysis**, v. 24, n. 3, p. 727-735, 2004.

FENNER, Kathrin, et al. Joint Persistence of Transformation Products in Chemicals Assessment: Case Studies and Uncertainty Analysis. **Risk Analysis**, v. 23, n. 1, p. 35-53, 2003.

FETTER, C. W. **Contaminant Hydrogeology**. Second Edition, New Jersey: Prentice Hall, 1999.

FIORILLO, Celso Antônio Pacheco. **O Direito de Antena em Face do Direito Ambiental no Brasil**. São Paulo: Saraiva, 2000.

FREY, H. Christopher. Introduction to Special Section on Sensitivity Analysis and Summary of NCSU/USDA Workshop on Sensitivity Analysis. **Risk Analysis**, v. 22, n. 3, p. 539-545, 2002.

FREY, H. Christopher; PATIL, Sumeet R. Identification and Review of Sensitivity Analysis Methods. **Risk Analysis**, v. 22, n. 3, p. 553-578, 2002.

GAYLOR, David W.; KODELL, Ralph L. Percentiles of the Product of Uncertainty Factors for Establishing Probabilistic Reference Doses. **Risk Analysis**, v. 20, n. 2, p. 245-250, 2000.

GOLDSTEIN, Bernard; CARRUTH, Russel S. The Precautionary Principle and/or Risk Assessment in World Trade Organization Decisions: A Possible Role for Risk Perception. **Risk Analysis**, v. 24, n. 2, p. 491-499, 2004.

GOMES, Luís Roberto. Princípios constitucionais de proteção ao meio ambiente. **Revista de Direito Ambiental**, São Paulo v.16, 1999.

GOORBERGH, Rob Van Den; VLAAR, Peter. **Value-at-Risk analysis of stock returns**. Historical simulation, tail index estimation?. De Nederlandse Bank-Staff Report, 40, 1999.

GREENLAND, Sander. Sensitivity Analysis, Monte Carlo Risk Analysis, and Bayesian Uncertainty Assessment. **Risk Analysis**, v. 21, n. 4, p. 579-583, 2001.

GUIMARÃES, Cláudio Henrique Dias. **Avaliação de Risco Ambiental de Sítios Contaminados por Hidrocarbonetos de Petróleo**. 2003. 110 f. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro.

GUSMÃO, Alexandre Duarte. **Uso de Barreiras Reativas na Remediação de Aqüíferos Contaminados**. 1999. 251 f. Tese de doutorado. Departamento de Engenharia Civil – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.

HAMMERSCHMIDT, Denise. O risco na sociedade contemporânea e o princípio da precaução no direito ambiental. **Revista de Direito Ambiental**, v. 8, n. 31, jan./mar. 2003.

HARLOW, Siobán D. Science-Based Trade Disputes: A New Challenge in Harmonizing the Evidentiary Systems of Law and Science. **Risk Analysis**, v. 24, n. 2, p. 443-447, 2004.

HARR, M. E. **Reliability-Based Design in Civil Engineering**. Nova Iorque: McGraw Hill, 1987

HATFIELD, Adam J.; HIPEL, Keith W. Risk and Systems Theory. **Risk Analysis**, v. 22, n. 6, p. 1043-1057, 2002.

HAUSKEN, Kjell. Probabilistic Risk Analysis and Game Theory. **Risk Analysis**, v. 22, n. 1, p. 17-27, 2002.

HELTON, J. C.; DAVIS, F. J. Illustration of Sampling-Based Methods for Uncertainty and Sensitivity Analysis. **Risk Analysis**, v. 22, n. 3, p. 591-622, 2002.

HERTWICH, Edgar G., et al. A Systematic Uncertainty Analysis of an Evaluative Fate and Exposure Model. **Risk Analysis**, v. 20, n. 4, p. 439-454, 2000.

HULEBACK, Karen L.; SCHLOSSER, Wayne. Hazard Analysis and Critical Control Point (HACCP) History and Conceptual Overview. **Risk Analysis**, v. 22, n. 3, p. 547-552, 2002.

HSIEH, Ping-Hung. Robustness of Conditional Moments: An Application to Premium Calculation of Reinsurance Treaties. **Risk Analysis**, v. 21, n. 2, p. 225-234, 2001.

INTERNATIONAL PROGRAMME ON CHEMICAL SAFETY - IPCS-INCHEM. **Environmental health criteria 123. Alpha- and beta-hexachlorocyclohexanes**. Disponível em: [www.inchem.org /documents /ehc /ehc /ehc123.htm](http://www.inchem.org/documents/ehc/ehc/ehc123.htm). Acessado em 13 de março de 2005

ISUKAPALLI, S. S., et al. Efficient Sensitivity/Uncertainty Analysis Using the Combined Stochastic Response Surface Method and Automated Differentiation: Application to Environmental and Biological Systems. **Risk Analysis**, v. 20, n. 5, p. 591-602, 2000.

JOHNSON, Paul C. Happenings 10 Years Ago... The Rise of RBCA and ASTM – Was It Such a Good Thing?. **Ground Water Monitoring & Remediation**, v. 24, n. 1, p. 4, 2004.

KADAK, Andrew C. Intergenerational Risk Decision Making: A Practical Example. **Risk Analysis**, v. 20, n. 6, p. 883-894, 2000.

KASTENBERG, William E. **On Redefining the Culture of Risk Analysis**. Presented at the International Conference on Probabilistic Safety Assessment and Management: PSAM-6, San Juan, 2002.

KASTENBERG, William E., et al. **On Developing a Risk Analysis Framework for Post-Industrial Age Technologies**. Presented at the International Conference on Probabilistic Safety Assessment and Management: PSAM-7, Berlin, Germany, June 13-18, 2004.

KENNEDY, Christopher A. Interpretation of Monte Carlo Simulations Using Parameter Space Plots. **Risk Analysis**, v. 24, n. 2, p. 437-442, 2004.

KHAN, Faisal I.; HUSAIN, Tahir. Risk-based monitored natural attenuation – a case study. **Journal of Hazardous Materials**, B85, p. 243-272, 2001.

KOHN, Michael C. Use of Sensitivity Analysis to Assess Reliability of Metabolic and Physiological Models. **Risk Analysis**, v. 22, n. 3, p. 623-631, 2002.

KRELL, Andreas Joachim. Concretização do Dano Ambiental – Objeção à teoria do risco ambiental. **Revista Eletrônica Jusnavegandi**, n. 25, 1998.

KUNSTMANN, H., et al. Conditional first-order second-moment method and its application to the quantification of uncertainty in groundwater modeling. **Water Resources Research**, v. 38, n. 4, p. 6-1, 6-15, 2002.

LAGREGA, Michael D.; BUCKINGHAM, Phillip L.; EVANS, Jeffrey C. **Hazardous Waste Management**. Nova Iorque: McGraw-Hill, 1994.

LAMBE, William T.; WHITMAN, Robert V. **Soil Mechnics**. John Wiley & Sons Inc. Nova Iorque, 1969.

LANFREDI, Geraldo Ferreira. **Política Ambiental: Busca de Efetividade de seus instrumentos**. São Paulo: Editora Revista dos Tribunais, 2002.

L'EIJ, Feike J.; TODD, H. Skaggs; VAN GEUCHTEN, Martinus. Analytical Solutions for Solute Transport in Three-Dimensional Semi-infinite Porous Media. **Water Resources Research**, v. 27, n. 10, p. 2719-2733, 1991.

LINKOV, Igor; BURMISTROV, Dmitriy. Model Uncertainty and Choices Made by Modelers: Lessons Learned from the International Atomic Energy Agency Model Intercomparisons. **Risk Analysis**, v. 23, n. 6, p. 1297-1308, 2003.

MA, Hwong-wen. Stochastic multimedia risk assessment for a site with contaminated groundwater. **Stochastic Environmental Research and Risk Assessment**, Springer-Verlag, v. 16, p. 464-478, 2002.

_____. The incorporation of stochastic in risk analysis and management: a case study. **Stochastic Environmental Research and Risk Assessment**, Springer-Verlag, v. 14 p. 195-206, 2000.

MACHADO, Paulo Affonso Leme. **Direito Ambiental Brasileiro**. 9ª ed. São Paulo: Malheiros Editores. 1031 p. 2001.

MAXWELL, Reed M.; KASTENBERG William. E. Stochastic environmental risk analysis: an integrated methodology for predicting cancer risk from contaminated groundwater. **Stochastic Environmental Research and Risk Assessment**, v. 13, p. 27-47, Springer – Verlag, 1999.

_____. A model for assessing and managing the risks of environmental lead emissions. **Stochastic Environmental Research and Risk Assessment**, v. 13, p. 231-250, Springer – Verlag, 1999.

MAXWELL, Reed M.; KASTENBERG William. E.; RUBIN, Yoram. A methodology to integrate site characterization information into groundwater-driven health risk assessment. **Water Resources Research**, v. 35, n. 9, p. 2841-2855, 1999.

MELLO, Celso Antônio Bandeira de. **Curso de Direito Administrativo**. 16ª. ed. São Paulo: Ed. Malheiros, 2003.

MELO, Hildete Pereira de; ROCHA, Carlos F. L.; FERRAZ, Galeno; DI SABATO, Alberto; DWECK, Ruth H. **É Possível uma Política Para o Setor Serviços?**. Publicação do Convênio IPEA/UFF para o Departamento de Serviços do Ministério da Indústria, Comércio e Turismo (MICT) e ANPEC, Rio de Janeiro, 1997.

McCOMAS, Katherine A.; TRUMBO, Craig W. Source Credibility in Environmental Health-Risk Controversies: Application of Meyer's Credibility Index. **Risk Analysis**, v. 21, n. 3, p. 467-480, 2001.

MILLINGTON, J. J.; QUIRK, J. P. **Permeability of Porous Solids**. Trans, Faraday, soc., 57. 1200-1207, 1961.

MINISTÉRIO DA SAÚDE. **Exposição Humana a Resíduos Organoclorados na Cidade dos Meninos, Município de Duque de Caxias, Rio de Janeiro**. Relatório de Trabalho da Comissão Técnica Assessora ao Ministério da Saúde, instituída pela Portaria MS/GM n.º 896, de 9 de maio de 2002. Brasília, 2002.

MITCHELL, James K. **Fundamentals of Soil Behavior**. 2ª ed. John Willey & Sons, Inc., U.S. 409 p. 1993.

MUMPOWER, Jeryl L.; McCLELLAND, Gary. Measurement Error, Skewness, and Risk Analysis: Coping with the Long Tail of the Distribution. **Risk Analysis**, v. 22, n. 2, p. 277-290, 2002.

NOBRE, Manoel de Melo Maia. **An investigation of the impact of uncertainties in geological formations on groundwater flow**. 1992. 262 f. Tese: PhD, Dept. of Civil Engineering – University of Waterloo, Waterloo.

NOBRE, Manoel de Melo Maia; NOBRE, Rosane Cunha Maia. Caracterização Hidrogeológica para o Uso Racional e Proteção dos Mananciais Subterrâneos em Maceió – AL. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 6, n. 1, jan/mar, 7-20, 2001.

NOBRE, Manoel de Melo Maia; NOBRE, Rosane Cunha Maia; BASTOS, Bernardo Leopardi Gonçalves Barretto. **Risk analysis as a tool to evaluate a soil**

NOBRE, Manoel de Melo Maia; SYKES, Jonathan F. **An Efficient Differential Approach to Assess Groundwater Flow Uncertainties**. Anais do "First Canadian Conference on Environmental Geotechnics", Canadian Geotechnical Society, Montreal, Canadá, 1991.

_____. **Sensitivity Analysis of Clay Barriers**. Water Science Technology, Pergamon Press, n. 51, p. 130-139, 1992.

OLIVEIRA, Antonio Manoel dos Santos; BRITO, Sérgio Nertan Alves de (Coord.). **Geologia de Engenharia**. São Paulo: Associação Brasileira de Geologia de Engenharia, 1998.

PATÉ-CORNELL, Elisabeth. Risk and Uncertainty Analysis in Government Safety Decisions. **Risk Analysis**, v. 22, n. 3, p. 633-646, 2002.

PATÉ-CORNELL, Elisabeth. Finding and Fixing Systems Weaknesses: Probabilistic Methods and Applications of Engineering Risk Analysis. **Risk Analysis**, v. 22, n. 2, p. 319-334, 2002.

PATIL, Sumeet R.; FREY, H. Christopher. Comparison of Sensitivity Analysis Methods Based on Applications to a Food Safety Risk Assessment Model. **Risk Analysis**, v. 24, n. 3, p. 573-585, 2004.

POUILLOT, Régis; BEAUDEAU, Pascal; DENIS, Jean-Baptiste; DEROUIN, Francis. A Quantitative Risk Assessment of Waterborne Cryptosporidiosis in France Using Second-Order Monte Carlo Simulation. **Risk Analysis**, v. 24, n. 1, p. 1-17, 2004.

PROGRAMA DAS NAÇÕES UNIDAS PARA O MEIO AMBIENTE - UNEP. **Chemicals, Regional Reports of the Regionally Based Assessment of Persistent Toxic Substances Program**. Disponível em: [http://www.chem.unep.ch/pts/regreports/North %20America% 20full% 20report.pdf](http://www.chem.unep.ch/pts/regreports/North%20America%20full%20report.pdf). Genebra, 2002.

RACKWITZ, Ruediger. Optimal and Acceptable Technical Facilities Involving Risks. **Risk Analysis**, v. 24, n. 3, p. 675-695, 2004.

RISC®. **Risk-Integrated Software for Clean-Ups**. User's Manual. BP Oil International, Sunbury, 2001.

SALTELLI, Andrea. Sensitivity Analysis for Importance Assessment. **Risk Analysis**, v. 22, n. 3, p. 579-590, 2002.

SÁNCHEZ-VILA, X.; SOLÍS-DELFIN, J. Solute transport in heterogeneous media: The impact of anisotropy and non-ergodicity in risk assessment. **Stochastic Environmental Research and Risk Assessment**, v. 13, p. 365-379, 1999.

SATTERFIELD, Terre A.; MERTZ, C. K.; SLOVIC, Paul. Discrimination, Vulnerability, and Justice in the Face of Risk. **Risk Analysis**, v. 24, n. 1, p. 115-129, 2004.

SILVA, Enio Moraes da. Os organismos geneticamente modificados e o princípio da precaução como instrumento de proteção ambiental. **Revista de Direito Ambiental**, v. 8, n. 30, jan./mar. 2003.

SILVA, José Afonso da. **Curso de Direito Constitucional Positivo**. 15ª ed. São Paulo:Malheiros Editores, 1998.

_____. **Direito Ambiental Constitucional**. 4ª ed. São Paulo: Malheiros Editores, 2002.

SILVA NETO, Manoel Jorge. **Direito Constitucional Econômico**. São Paulo: LTR, 2001.

SLOVIC, Paul; FINUCANE, Melissa L.; PETERS, Ellen; MACGREGOR, Donald G. Risk as Analysis and Risk as Feelings: Some Thoughts about Affect, Reason, Risk and Rationality. **Risk Analysis**, v. 24, n. 2, p. 311-322, 2004.

SMALL, Matthew C. **Risk-Based Corrective Action, Natural Attenuation, and Changing Regulatory Paradigms**. CRC Press LLC, p. 221-225, 1998.

SPIEGEL, M. R. **Estatística**. Traduzido por Pedro Cosentino. São Paulo: Ed. McGrawhill do Brasil, 1961.

STACKELBERG, Katherine E. Von., et al. Importance of Uncertainty and Variability to Predicted Risks from Trophic Transfer of PCBs in Dredged Sediments. **Risk Analysis**, v. 22, n. 3, p. 499-512, 2002.

STARR, Chauncey. The Precautionary Principle Versus Risk Analysis. **Risk Analysis**, v. 23, n. 1, p. 1-3, 2003.

STARR, Chauncey. The Ultimate Uncertainty – Intergenerational Planning. **Risk Analysis**, v. 20, n. 6, p. 793-800, 2000.

SYKES, J. F. **Notas de Aula**. Department of Civil Engineering, University of Waterloo, Waterloo – Ontario, , 1990.

TENÓRIO, Fernando G. **Gestão pública ou gestão social? Um estudo de caso**. VII Congreso Internacional del CLAD sobre la Reforma del Estado y de la Administración Pública, Lisboa, 2002.

THAYER, William C.; GRIFFITH, Daniel A.; GOODRUM, Philip E.; DIAMOND, Gary L.; HASSETT, James M. Application of Geostatistics to Risk Assessment. **Risk Analysis**, v. 23, n. 5, p. 945-960, 2003.

THOMPSON, Kimberly M. Variability and Uncertainty Meet Risk Management and Risk Communication. **Risk Analysis**, v. 22, n. 3, p. 647-654, 2002.

TUPIASSU, Lise Vieira da Costa. O direito ambiental e seus princípios informativos. **Revista de Direito Ambiental**, v. 8, n. 30, 2003.

UNITED STATES ENVIRONMENTAL AGENCY - USEPA . **Term of Environment**. Disponível em <http://www.epa.gov/OCEPATERMS/> aos 30 de março de 2005.

_____. **Bioscreen. Natural Attenuation Decision Support System**. EPA/600/R-96/087, 1996.

_____. **Risk Assessment Guidance for Superfund**. v. 01, Part A, Washington. EPA/540/1-89/002, 1989.

_____. **Exposure Factors Handbook**. v. 01, Washington. EPA/600/P-95/002Fa, agosto de 1997.

_____. **Integrated Risk Information System (IRIS) Screening-Level Literature Review. Alpha-Hexachlorocyclohexane (CASRN: 319-84-6)**. 2002.

_____. **Integrated Risk Information System (IRIS) Screening-Level Literature Review. Beta-Hexachlorocyclohexane (CASRN 319-85-7)**. 2002.

_____. **Integrated Risk Information System (IRIS) Screening-Level Literature Review. Gamma-Hexachlorocyclohexane- Lindane (CASRN: 58-89-9)**. 2002.

WERNER, W. Química e o Meio Ambiente. **Infarma**, v.2, n. 2, p. 18-21. Tradução de P. R. Petrovick. 1993.

WEISSTEIN, Eric W. **Moment**. Disponível em MathWorld-A Wolfram Web Resource. <http://mathworld.wolfram.com/Moment.html>.

WILSON, John L.; ASCE A. M.; MILLER, Paul J. Two-Dimensional Plume in Uniform Ground-Water Flow. **Journal of the Hydraulics Division**, p. 503-514, 1978.

WORLD HEALTH ORGANIZATION – WHO. **Guidelines for drinking-water quality**. 2a. ed. V. 2 Health criteria and other supporting information, p. 940-949, 1996.

YEH, G. T. **AT123D: Analytical Transient One-, Two-, and Three-Dimensional Simulation of Waste Transport in the Aquifer System**. ORNL 5602, 1981.

ZAGO, Livia Maria Armentano K. **O Princípio da Impessoalidade**. 1ª ed., Rio de Janeiro: Renovar, 2001.

ZHENG, J.; Frey, C. Quantification of Variability and Uncertainty Using Mixture Distributions: Evaluation of Sample Size, Mixing Weights, and Separation Between Components. **Risk Analysis**, v. 24, n. 3, p. 553-571, 2004.

ANEXO A – Rotina do programa SeRis

Rotina do Programa SeRis em Matlab®:

```

function c = SeRis(F) % Coloca a rotina em formato de função o que
possibilita chamá-la diretamente da linha de comando do programa.
clear %limpa todas as variáveis.
hold off
E=[[0.928 .03448];[-0.004 0.000064];[80 256];[50 100];[134.028
761.43];[.0016 .00000004];[.3 .0036];[3 .36];[2.98 .355];[.993
.0394];[0.0114 .00000520];[0.04 .000064];[40 64];[.5 0.316];[10
4]];
Eaux=E; %Variável auxiliar que armazena os valores iniciais da
matriz E. Assim quando houver um processo iterativo (eg Monte
Cartlo) os valores originais poderão ser restaurados.
Co = E(1,1);%Concentração na Região da Fonte quando t=0
(mg/L)
Ks = E(2,1); %Termo do decaimento de primeira ordem para a
concentração na fonte (ano -1 )
t = E(3,1); %Tempo (ano)
x = E(4,1); %Distância longitudinal da fonte (m)
K = E(5,1); %Condutividade Hidráulica (m/ano)
i = E(6,1); %Gradiente Hidráulico (m/m)
tetae = E(7,1); %Porosidade efetiva
R = E(8,1); %Fator de Retardamento
alfax = E(9,1); %Dispersividade Longitudinal (m)
alfay = E(10,1); %Dispersividade Transversal (m)
alfaz = E(11,1); %Dispersividade Vertical (m)
lambda = E(12,1); %Coeficiente de decaimento de primeira
ordem para a fase de contaminante dissolvida (ano-1)
Y = E(13,1); %Largura da Fonte (m)
y = E(14,1); %Distância da perpendicular à linha central
da fonte (m)
Z = E(15,1); %Profundidade da fonte (m)
z=0; %Distância vertical do nível d'água até o ponto de
interesse (assume-se o valor 0; A concentração é sempre
considerada no nível d'água)

VCo = E(1,2);%Variância de Co
VKs = E(2,2); %Variância de Ks
Vt = E(3,2); %Variância de t
Vx = E(4,2); %Variância de x
VK = E(5,2); %Variância de K
Vi = E(6,2); %Variância de de i
Vtetae = E(7,2); %Variância de tetae
VR = E(8,2); %Variância de R
Valfax = E(9,2); %Variância de alfax
Valfay = E(10,2); %Variância de de alfay
Valfaz = E(11,2); %Variância de de alfaz
Vlambda = E(12,2); %Variância de lambda
VY = E(13,2); %Variância de Y

```

```
Vy = E(14,2); %Variância de y
VZ = E(15,2); %Variância de Z
```

```
%Constante a
a=0.18;
```

```
%Sem Estatística
Cpuro= Co*exp(-Ks*(t-x/(K*i/(tetae*R))))*1/8*exp(x/(alfax*2)*(1-
(1+4*lambda*alfax/(K*i/(tetae*R)))^5))*erfc((x-
(K*i/(tetae*R))*t*(1+4*lambda*alfax/(K*i/(tetae*R)))^5)/(2*(alfax
*(K*i/(tetae*R))*t)^5))*(erf((y+Y/2)/(2*(alfay*x)^5))-erf((y-
Y/2)/(2*(alfay*x)^5)))*( erf((Z)/(2*(alfaz*x)^5))-(erf(-
Z/(2*(alfaz*x)^5)))));
disp('Risco Determinístico:')
Rpuro=Cpuro*a
```

```
% //// PRE-PROCESSADOR \\\\ (Pode ser colocado em uma rotina à
parte)
```

```
% Matriz [G] Matriz [H]
```

```
%Variáveis Auxiliares para o Cálculo das Derivadas
```

```
A300=exp(-Ks*(t-x/K/i*tetae*R));
A301=exp(1/2*x/alfax*(1-(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R)^5));
A302=erfc(1/2*(x-
K*i/tetae/R*t*(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R)^5)/(alfax*K*i/tetae/
R*t)^5);
A303=(erf(1/2*(y+1/2*Y)/(alfay*x)^5)-erf(1/2*(y-
1/2*Y)/(alfay*x)^5));
A304=erf(1/2*Z/(alfaz*x)^5);
A1=(-t+x/K/i*tetae*R);
A5=(erf(1/2*(y+1/2*Y)/(alfay*x)^5)-erf(1/2*(y-
1/2*Y)/(alfay*x)^5));
A37=exp(-1/4*(x-
K*i/tetae/R*t*(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R)^5)^2/(alfax*K*i/teta
e/R*t)^1.0);
A38=(-
1/2*K*i/tetae/R*(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R)^5/(alfax*K*i/tetae
/R*t)^5-.2500000000*(x-
K*i/tetae/R*t*(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R)^5)/(alfax*K*i/tetae/
R*t)^1.5*alfax*K*i/tetae/R);
A56=(1-(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R)^5);
A69=(-.5000000000/pi^(1/2)*exp(-
1/4*(y+1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)*(y+1/2*Y)/(alfay*x)^1.5*alfay+.5000
000000/pi^(1/2)*exp(-1/4*(y-1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)*(y-
1/2*Y)/(alfay*x)^1.5*alfay);
A45=exp(-1/4*Z^2/(alfaz*x)^1.0);
A77=(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R);
A85=(1/2*(-
i/tetae/R*t*(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R)^5+2.0/K*t/(1+4*lambda*
alfax/K/i*tetae*R)^5*lambda*alfax)/(alfax*K*i/tetae/R*t)^5-
.2500000000*(x-
K*i/tetae/R*t*(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R)^5)/(alfax*K*i/tetae/
R*t)^1.5*alfax*i/tetae/R*t);
A96=(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R);
```

```

A104=(1/2*(-
K/tetae/R*t*(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R)^.5+2.0/i*t/(1+4*lambda*
alfax/K/i*tetae*R)^.5*lambda*alfax)/(alfax*K*i/tetae/R*t)^.5-
.2500000000*(x-
K*i/tetae/R*t*(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R)^.5)/(alfax*K*i/tetae/
R*t)^1.5*alfax*K/tetae/R*t);
A116=(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R);
A124=(1/2*(K*i/tetae^2/R*t*A116^.5-
2.0/tetae*t/A116^.5*lambda*alfax)/(alfax*K*i/tetae/R*t)^.5+.250000
0000*(x-
K*i/tetae/R*t*A116^.5)/(alfax*K*i/tetae/R*t)^1.5*alfax*K*i/tetae^2
/R*t);
A144=(1/2*(K*i/tetae/R^2*t*A116^.5-
2.0/R*t/A116^.5*lambda*alfax)/(alfax*K*i/tetae/R*t)^.5+.2500000000
*(x-
K*i/tetae/R*t*A116^.5)/(alfax*K*i/tetae/R*t)^1.5*alfax*K*i/tetae/R
^2*t)*A5;
A151=(-1/2*x/alfax^2*A56-
1.000000000*x/alfax/A116^.5*lambda/K/i*tetae*R);
A159=(-1.000000000*t/A116^.5*lambda/(alfax*K*i/tetae/R*t)^.5-
.2500000000*(x-
K*i/tetae/R*t*A116^.5)/(alfax*K*i/tetae/R*t)^1.5*K*i/tetae/R*t);
A233=(1/2/pi^(1/2)*exp(-
1/4*(y+1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)/(alfay*x)^.5+1/2/pi^(1/2)*exp(-
1/4*(y-1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)/(alfay*x)^.5);
A173=(-.5000000000/pi^(1/2)*exp(-
1/4*(y+1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)*(y+1/2*Y)/(alfay*x)^1.5*x+.50000000
00/pi^(1/2)*exp(-1/4*(y-1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)*(y-
1/2*Y)/(alfay*x)^1.5*x);
A194=exp(-1/4*Z^2/(alfaz*x)^1.0);
A263=(1/pi^(1/2)*exp(-1/4*(y+1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)/(alfay*x)^.5-
1/pi^(1/2)*exp(-1/4*(y-1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)/(alfay*x)^.5);
A284=exp(-1/4*Z^2/(alfaz*x)^1.0);
A411=(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R);
A441=(1+4*lambda*alfax/K/i*tetae*R);
A541=(alfax*K*i/tetae/R*t);
A546=(x-K*i/tetae/R*t*A411^.5);
A457=(2.000000000/K^3*t/A411^1.5*lambda^2*alfax^2/i*tetae*R/A541^
5-.5000000000*(-
i/tetae/R*t*A411^.5+2.0/K*t/A411^.5*lambda*alfax)/A541^1.5*alfax*i
/tetae/R*t+.3750000000*A546/A541^2.5*alfax^2*i^2/tetae^2/R^2*t^2);
A480=(-t+x/K/i*tetae*R);
A481=exp(-Ks*(t-x/K/i*tetae*R));
A482=exp(1/2*x/alfax*(1-A411^.5));
A483=erfc(1/2*(x-K*i/tetae/R*t*A411^.5)/(alfax*K*i/tetae/R*t)^.5);
A484=(erf(1/2*(y+1/2*Y)/(alfay*x)^.5)-erf(1/2*(y-
1/2*Y)/(alfay*x)^.5));
A485=erf(1/2*Z/(alfaz*x)^.5);
A507=exp(-1/4*(x-
K*i/tetae/R*t*A411^.5)^2/(alfax*K*i/tetae/R*t)^1.0);
A508=(-1/2*K*i/tetae/R*t*A411^.5/(alfax*K*i/tetae/R*t)^.5-
.2500000000*(x-
K*i/tetae/R*t*A411^.5)/(alfax*K*i/tetae/R*t)^1.5*alfax*K*i/tetae/R
);
A513=(1/2*(x-
K*i/tetae/R*t*A411^.5)/(alfax*K*i/tetae/R*t)^1.0*K*i/tetae/R*A411^
.5+.2500000000*(x-
K*i/tetae/R*t*A411^.5)^2/(alfax*K*i/tetae/R*t)^2.0*alfax*K*i/tetae
/R);
A521=(.5000000000*K^2*i^2/tetae^2/R^2*A411^.5/(alfax*K*i/tetae/R*t
)^1.5*alfax+.3750000000*(x-

```



```

K*i/tetae/R*t*A411^.5)/(alfax*K*i/tetae/R*t)^2.5*alfax^2*K^2*i^2/t
etae^2/R^2);
A533=(-.5000000000/pi^(1/2)*exp(-
1/4*(y+1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)*(y+1/2*Y)/(alfay*x)^1.5*alfay+.5000
000000/pi^(1/2)*exp(-1/4*(y-1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)*(y-
1/2*Y)/(alfay*x)^1.5*alfay);
A542=exp(-1/4*Z^2/(alfaz*x)^1.0);
A550=(-
.1250000000/pi^(1/2)*(y+1/2*Y)^3/(alfay*x)^3.5*alfay^2*exp(-
1/4*(y+1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)+.7500000000/pi^(1/2)*exp(-
1/4*(y+1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)*(y+1/2*Y)/(alfay*x)^2.5*alfay^2+.12
50000000/pi^(1/2)*(y-1/2*Y)^3/(alfay*x)^3.5*alfay^2*exp(-1/4*(y-
1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)-.7500000000/pi^(1/2)*exp(-1/4*(y-
1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)*(y-1/2*Y)/(alfay*x)^2.5*alfay^2);
A570=(1/2*(K*i/tetae^2/R*t*A411^.5-
2.0/tetae*t/A411^.5*lambda*alfax)/A541^.5+.2500000000*A546/A541^1.
5*alfax*K*i/tetae^2/R*t);
A572=(-1/2*A546/A541^1.0*(K*i/tetae^2/R*t*A411^.5-
2.0/tetae*t/A411^.5*lambda*alfax)-
.2500000000*A546^2/A541^2.0*alfax*K*i/tetae^2/R*t);
A574=(1/2*(-
2*K*i/tetae^3/R*t*A411^.5+4.0/tetae^2*t/A411^.5*lambda*alfax+4.00/
tetae*t/A411^1.5*lambda^2*alfax^2/K/i*R)/A541^.5+.5000000000*(K*i/
tetae^2/R*t*A411^.5-
2.0/tetae*t/A411^.5*lambda*alfax)/A541^1.5*alfax*K*i/tetae^2/R*t+.
3750000000*A546/A541^2.5*alfax^2*K^2*i^2/tetae^4/R^2*t^2-
.5000000000*A546/A541^1.5*alfax*K*i/tetae^3/R*t);
A580=(1/2*(K*i/tetae/R^2*t*A411^.5-
2.0/R*t/A411^.5*lambda*alfax)/A541^.5+.2500000000*A546/A541^1.5*al
fax*K*i/tetae/R^2*t);
A582=(-1/2*A546/A541^1.0*(K*i/tetae/R^2*t*A411^.5-
2.0/R*t/A411^.5*lambda*alfax)-
.2500000000*A546^2/A541^2.0*alfax*K*i/tetae/R^2*t);
A584=(1/2*(-
2*K*i/tetae/R^3*t*A411^.5+4.0/R^2*t/A411^.5*lambda*alfax+4.00/R*t/
A411^1.5*lambda^2*alfax^2/K/i*tetae)/A541^.5+.5000000000*(K*i/teta
e/R^2*t*A411^.5-
2.0/R*t/A411^.5*lambda*alfax)/A541^1.5*alfax*K*i/tetae/R^2*t+.3750
000000*A546/A541^2.5*alfax^2*K^2*i^2/tetae^2/R^4*t^2-
.5000000000*A546/A541^1.5*alfax*K*i/tetae/R^3*t);
A590=(1/2*(-
K/tetae/R*t*A411^.5+2.0/i*t/A411^.5*lambda*alfax)/A541^.5-
.2500000000*A546/A541^1.5*alfax*K/tetae/R*t);
A592=(-1/2*A546/A541^1.0*(-
K/tetae/R*t*A411^.5+2.0/i*t/A411^.5*lambda*alfax)+.2500000000*A546
^2/A541^2.0*alfax*K/tetae/R*t);
A594=(2.000000000/i^3*t/A411^1.5*lambda^2*alfax^2/K*tetae*R/A541^1.
5-.5000000000*(-
K/tetae/R*t*A411^.5+2.0/i*t/A411^.5*lambda*alfax)/A541^1.5*alfax*K
/tetae/R*t+.3750000000*A546/A541^2.5*alfax^2*K^2/tetae^2/R^2*t^2);
A449=(-1/2*A546/A541^1.0*(-
i/tetae/R*t*A411^.5+2.0/K*t/A411^.5*lambda*alfax)+.2500000000*A546
^2/A541^2.0*alfax*i/tetae/R*t);
A419=(1/2*(-
i/tetae/R*t*A411^.5+2.0/K*t/A411^.5*lambda*alfax)/A541^.5-
.2500000000*A546/A541^1.5*alfax*i/tetae/R*t);

```

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

```

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a Co:

$$G(1)=1/4*A300*A301*A302*A303*A304;$$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a Ks:

$$G(2)=1/4*Co*A1*A300*A301*A302*A5*A304;$$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a t:

$$G(3)=-1/4*Co*Ks*A300*A301*A302*A5*A304-1/2*Co*A300*A301/pi^{(1/2)}*A37*A38*A5*A304;$$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a x:

$$G(4)=1/4*Co*Ks/K/i*tetae*R*A300*A301*A302*A5*A304+1/8*Co*A300/alfax*A56*A301*A302*A5*A304-1/4*Co*A300*A301/pi^{(1/2)}*A37/(alfax*K*i/tetae/R*t)^{.5*A5*A304+1/4*Co*A300*A301*A302*A69*A304-.1250000000*Co*A300*A301*A302*A5/pi^{(1/2)}*A45*Z/(alfaz*x)^{1.5*alfaz};$$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a K:

$$G(5)=-1/4*Co*Ks*x/K^2/i*tetae*R*A300*A301*A302*A5*A304+.2500000000*Co*A300*x/A77^{.5*lambda/K^2/i*tetae*R*A301*A302*A5*A304-1/2*Co*A300*A301/pi^{(1/2)}*A37*A85*A5*A304;$$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a i:

$$G(6)=-1/4*Co*Ks*x/K/i^2*tetae*R*A300*A301*A302*A5*A304+.2500000000*Co*A300*x/A96^{.5*lambda/K/i^2*tetae*R*A301*A302*A5*A304-1/2*Co*A300*A301/pi^{(1/2)}*A37*A104*A5*A304;$$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a tetae:

$$G(7)=1/4*Co*Ks*x/K/i*R*A300*A301*A302*A5*A304-.2500000000*Co*A300*x/A116^{.5*lambda/K/i*R*A301*A302*A5*A304-1/2*Co*A300*A301/pi^{(1/2)}*A37*A124*A5*A304;$$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a R:

$$G(8)=1/4*Co*Ks*x/K/i*tetae*A300*A301*A302*A5*A304-.2500000000*Co*A300*x/A116^{.5*lambda/K/i*tetae*A301*A302*A5*A304-1/2*Co*A300*A301/pi^{(1/2)}*A37*A144*A304;$$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a alfax:

$$G(9)=1/4*Co*A300*A151*A301*A302*A5*A304-1/2*Co*A300*A301/pi^{(1/2)}*A37*A159*A5*A304;$$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a alfay:

$$G(10)=1/4*Co*A300*A301*A302*A173*A304;$$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a alfaz:

$$G(11)=-.1250000000*Co*A300*A301*A302*A5/pi^{(1/2)}*A194*Z/(alfaz*x)^{1.5*x};$$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a lambda:

$$G(12)=-.2500000000*Co*A300*x/A116^{.5/K/i*tetae*R*A301*A302*A5*A304+.5000000000*Co*A300*A301/pi^{(1/2)}*A37*t/A116^{.5*alfax/(alfax*K*i/tetae/R*t)^{.5*A5*A304};$$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a Y:

$$G(13)=1/4*Co*A300*A301*A302*A233*A304;$$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a y:
 $G(14)=1/4*Co*A300*A301*A302*A263*A304;$

%Derivada da Função de DOMENICO em relação a Z:
 $G(15)=1/4*Co*A300*A301*A302*A5/pi^(1/2)*A284/(alfaz*x)^.5;$

%%%

%Derivada segunda da Função de Domenico em relação a Co:
 $H(1)=0;$

%Derivada segunda da Função de Domenico em relação a Ks:
 $H(2)=1/4*Co*A480^2*A481*A482*A483*A484*A485;$

%Derivada segunda da Função de Domenico em relação a t:
 $H(3)=1/4*Co*Ks^2*A481*A482*A483*A484*A485+Co*Ks*A481*A482/pi^(1/2)*A507*A508*A484*A485-1/2*Co*A481*A482/pi^(1/2)*A513*A507*A508*A484*A485-1/2*Co*A481*A482/pi^(1/2)*A507*A521*A484*A485;$

%Derivada segunda da Função de Domenico em relação s x:
 $H(4)=1/2*Co*Ks/K/i*tetae*R*A481*A482*A483*A533*A485+1/4*Co*Ks^2/K^2/i^2*tetae^2*R^2*A481*A482*A483*A484*A485+1/4*Co*Ks/K/i*tetae*R*A481/alfax*(1-A411^.5)*A482*A483*A484*A485-1/2*Co*Ks/K/i*tetae*R*A481*A482/pi^(1/2)*A507/A541^.5*A484*A485-.2500000000*Co*Ks/K/i*tetae*R*A481*A482*A483*A484/pi^(1/2)*A542*Z/(alfaz*x)^1.5*alfaz+1/4*Co*A481/alfax*(1-A411^.5)*A482*A483*A485+1/16*Co*A481/alfax^2*(1-A411^.5)^2*A482*A483*A484*A485-1/4*Co*A481/alfax*(1-A411^.5)*A482/pi^(1/2)*A507/A541^.5*A484*A485-.1250000000*Co*A481/alfax*(1-A411^.5)*A482*A483*A484/pi^(1/2)*A542*Z/(alfaz*x)^1.5*alfaz-1/2*Co*A481*A482/pi^(1/2)*A507/A541^.5*A533*A485+1/8*Co*A481*A482/pi^(1/2)*A546/A541^1.5*A507*A484*A485+.2500000000*Co*A481*A482/pi*A507/A541^.5*A484*A542*Z/(alfaz*x)^1.5*alfaz+1/4*Co*A481*A482*A483*A550*A485-.2500000000*Co*A481*A482*A483*A533/pi^(1/2)*A542*Z/(alfaz*x)^1.5*alfaz+.1875000000*Co*A481*A482*A483*A484/pi^(1/2)*A542*Z/(alfaz*x)^2.5*alfaz^2-.3125000000e-1*Co*A481*A482*A483*A484/pi^(1/2)*Z^3/(alfaz*x)^3.5*alfaz^2*A542;$

%Derivada segunda da Função de Domenico em relação a K:
 $H(5)=1/2*Co*Ks*x/K^3/i*tetae*R*A481*A482*A483*A484*A485+1/4*Co*Ks^2*x^2/K^4/i^2*tetae^2*R^2*A481*A482*A483*A484*A485-.5000000000*Co*Ks*x^2/K^4/i^2*tetae^2*R^2*A481/A411^.5*lambda*A482*A483*A484*A485+Co*Ks*x/K^2/i*tetae*R*A481*A482/pi^(1/2)*A507*A419*A484*A485+.5000000000*Co*A481*x/A411^1.5*lambda^2/K^4/i^2*tetae^2*R^2*A482*A483*A484*A485*alfax-.5000000000*Co*A481*x/A411^.5*lambda/K^3/i*tetae*R*A482*A483*A484*A485+.2500000000*Co*A481*x^2/A411^1.0*lambda^2/K^4/i^2*tetae^2*R^2*A482*A483*A484*A485-1.0000000000*Co*A481*x/A441^.5*lambda/K^2/i*tetae*R*A482/pi^(1/2)*A507*A419*A484*A485-1/2*Co*A481*A482/pi^(1/2)*A449*A507*A419*A484*A485-1/2*Co*A481*A482/pi^(1/2)*A507*A457*A484*A485;$

%Derivada segunda da Função de Domenico em relação a i:
 $H(6)=1/2*Co*Ks*x/K/i^3*tetae*R*A481*A482*A483*A484*A485+1/4*Co*Ks^2*x^2/K^2/i^4*tetae^2*R^2*A481*A482*A483*A484*A485-.5000000000*Co*Ks*x^2/K^2/i^4*tetae^2*R^2*A481/A411^.5*lambda*A482$

```
*A483*A484*A485+Co*Ks*x/K/i^2*tetae*R*A481*A482/pi^(1/2)*A507*A590
*A484*A485+.5000000000*Co*A481*x/A411^1.5*lambda^2/K^2/i^4*tetae^2
*R^2*A482*A483*A484*A485*alfax-
.5000000000*Co*A481*x/A411^1.5*lambda/K/i^3*tetae*R*A482*A483*A484*
A485+.2500000000*Co*A481*x^2/A411^1.0*lambda^2/K^2/i^4*tetae^2*R^2
*A482*A483*A484*A485-
1.0000000000*Co*A481*x/A411^1.5*lambda/K/i^2*tetae*R*A482/pi^(1/2)*A
507*A590*A484*A485-
1/2*Co*A481*A482/pi^(1/2)*A592*A507*A590*A484*A485-
1/2*Co*A481*A482/pi^(1/2)*A507*A594*A484*A485;
```

%Derivada segunda da Função de Domenico em relação a tetae:

```
H(7)=1/4*Co*Ks^2*x^2/K^2/i^2*R^2*A481*A482*A483*A484*A485-
.5000000000*Co*Ks*x^2/K^2/i^2*R^2*A481/A411^1.5*lambda*A482*A483*A4
84*A485-
Co*Ks*x/K/i*R*A481*A482/pi^(1/2)*A507*A570*A484*A485+.5000000000*C
o*A481*x/A411^1.5*lambda^2/K^2/i^2*R^2*A482*A483*A484*A485*alfax+.
2500000000*Co*A481*x^2/A411^1.0*lambda^2/K^2/i^2*R^2*A482*A483*A48
4*A485+1.0000000000*Co*A481*x/A411^1.5*lambda/K/i*R*A482/pi^(1/2)*A5
07*A570*A484*A485-
1/2*Co*A481*A482/pi^(1/2)*A572*A507*A570*A484*A485-
1/2*Co*A481*A482/pi^(1/2)*A507*A574*A484*A485;
```

%Derivada segunda da Função de Domenico em relação a R:

```
H(8)=1/4*Co*Ks^2*x^2/K^2/i^2*tetae^2*A481*A482*A483*A484*A485-
.5000000000*Co*Ks*x^2/K^2/i^2*tetae^2*A481/A411^1.5*lambda*A482*A48
3*A484*A485-
Co*Ks*x/K/i*tetae*A481*A482/pi^(1/2)*A507*A580*A484*A485+.50000000
00*Co*A481*x/A411^1.5*lambda^2/K^2/i^2*tetae^2*A482*A483*A484*A485
*alfax+.2500000000*Co*A481*x^2/A411^1.0*lambda^2/K^2/i^2*tetae^2*A
482*A483*A484*A485+1.0000000000*Co*A481*x/A411^1.5*lambda/K/i*tetae*
A482/pi^(1/2)*A507*A580*A484*A485-
1/2*Co*A481*A482/pi^(1/2)*A582*A507*A580*A484*A485-
1/2*Co*A481*A482/pi^(1/2)*A507*A584*A484*A485;
```

%Derivada segunda da Função de Domenico em relação a alfax:

```
H(9)=1/4*Co*A481*(x/alfax^3*(1-
A411^1.5)+2.000000000*x/alfax^2/A411^1.5*lambda/K/i*tetae*R+2.000000
000*x/alfax/A411^1.5*lambda^2/K^2/i^2*tetae^2*R^2)*A482*A483*A484*
A485+1/4*Co*A481*(-1/2*x/alfax^2*(1-A411^1.5)-
1.000000000*x/alfax/A411^1.5*lambda/K/i*tetae*R)^2*A482*A483*A484*A
485-Co*A481*(-1/2*x/alfax^2*(1-A411^1.5)-
1.000000000*x/alfax/A411^1.5*lambda/K/i*tetae*R)*A482/pi^(1/2)*A507
*(-1.000000000*t/A411^1.5*lambda/A541^1.5-
.2500000000*A546/A541^1.5*K*i/tetae/R*t)*A484*A485-
1/2*Co*A481*A482/pi^(1/2)*(1.000000000*A546/A541^1.0*t/A411^1.5*lam
bda+.2500000000*A546^2/A541^2.0*K*i/tetae/R*t)*A507*(-
1.000000000*t/A411^1.5*lambda/A541^1.5-
.2500000000*A546/A541^1.5*K*i/tetae/R*t)*A484*A485-
1/2*Co*A481*A482/pi^(1/2)*A507*(2.000000000*t/A411^1.5*lambda^2/A5
41^1.5/K/i*tetae*R+1.000000000*t^2/A411^1.5*lambda/A541^1.5*K*i/teta
e/R+.3750000000*A546/A541^2.5*K^2*i^2/tetae^2/R^2*t^2)*A484*A485;
```

%Derivada segunda da Função de Domenico em relação a alfax:

```
H(10)=1/4*Co*A481*A482*A483*(-
.1250000000/pi^(1/2)*(y+1/2*Y)^3/(alfay*x)^3.5*x^2*exp(-
1/4*(y+1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)+.7500000000/pi^(1/2)*exp(-
1/4*(y+1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)*(y+1/2*Y)/(alfay*x)^2.5*x^2+.125000
0000/pi^(1/2)*(y-1/2*Y)^3/(alfay*x)^3.5*x^2*exp(-1/4*(y-
1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)-.7500000000/pi^(1/2)*exp(-1/4*(y-
1/2*Y)^2/(alfay*x)^1.0)*(y-1/2*Y)/(alfay*x)^2.5*x^2)*A485;
```

%Derivada segunda da Função de Domenico em relação a alfaz:
H(11)=-.3125000000e-

```

for hh=1:size(E,1)%hh e zz são meros contadores.
  for zz=1:9126 %136880 %500
    aux(hh)=randn; %aux é a variavel reduzida (média 0 e desvio
    padrão 1). Equivale a uma normalização.
    E(hh,1)=aux(hh)*E(hh,2)^.5+E(hh,1); %Este passo transforma a
    variavel reduzida num evento dentro da distribuição do parâmetro
    (V. Edison Lima p.11 e p. 48)
    if E(hh,1)<0 %esse if retira os parâmetros negativos
      E(hh,1)=1E-99;
      AA=AA+1;
    end

    %Realimentando a Matriz E com os parametros aqui estimados:
    Co = E(1,1);
    Ks = E(2,1);
    t = E(3,1);
    x = E(4,1);
    K = E(5,1);
    i = E(6,1);
    tetae = E(7,1);
    R = E(8,1);
    alfax = E(9,1);
    alfay = E(10,1);
    alfaz = E(11,1);
    lambda = E(12,1);
    Y = E(13,1);
    y = E(14,1);
    Z = E(15,1);
    z=0;

    C(zz, hh)=Co*exp(-Ks*(t-
    x/(K*i/(tetae*R))))*1/8*exp(x/(alfax*2))*(1-
    (1+4*lambda*alfax/(K*i/(tetae*R)))^5)*erfc((x-
    (K*i/(tetae*R))*t*(1+4*lambda*alfax/(K*i/(tetae*R)))^5)/(2*(alfax
    *(K*i/(tetae*R))*t)^5))*(erf((y+Y/2)/(2*(alfay*x)^5))-erf((y-
    Y/2)/(2*(alfay*x)^5)))*( erf((Z)/(2*(alfaz*x)^5))-(erf(-
    Z/(2*(alfaz*x)^5)))));
    R=C*a; %Transforma os valores de concentrações em valores de
    risco.
    E=Eaux; %Reseta os valores iniciais da matriz E.
  end
end

disp('Quantidade de parâmetros negativos descartados:')
AA

Rmontecarlo = mean(mean(R))%A função mean dá a média de cada
coluna. Assim uma matriz plana será transformada em um vetor com
cada elemento sendo a média de uma coluna. A média dos elementos
deste vetor é idêntica à média geral da matriz inicial.

% Coeficiente de sensibilidade de Sykes - Tem Unidade da Função
(risco)
disp('Coeficiente de Sykes')
for ff=1:size(E,1)
  Coef1(ff)=(G(ff))^2*E(ff,2);
  Coef1(ff);
end

disp('Coeficiente Normalizado')

```

```
% Coeficiente Normalizado de sensibilidade
for ff=1:size(E,1)
    Coef2(ff)=G(ff)*E(ff,1)/Rpuro;
    Coef2(ff);
end
```

ANEXO B – Valores da função φ

Valores da função $\varphi(h)$ para a distribuição normal padrão. Fonte Harr, 1987, p. 46.



$$\varphi(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^h \exp\left[-\frac{x^2}{2}\right] dx$$

h	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	0	.003969	.007978	.011966	.015953	.019939	.023922	.027903	.031881	.035856
.1	.039828	.043795	.047758	.051717	.055670	.059618	.063559	.067495	.071424	.075345
.2	.079260	.083166	.087064	.090954	.094835	.098706	.102568	.106420	.110251	.114092
.3	.117911	.121720	.125516	.129300	.133072	.136831	.140576	.144309	.148027	.151732
.4	.155422	.159097	.162757	.166402	.170031	.173645	.177242	.180822	.184386	.187933
.5	.191462	.194974	.198466	.201944	.205401	.208840	.212260	.215661	.219043	.222405
.6	.225747	.229069	.232371	.235653	.234914	.242154	.245373	.248571	.251748	.254903
.7	.258036	.261148	.264238	.267305	.270350	.273373	.276373	.279350	.282305	.285236
.8	.288145	.291030	.293892	.296731	.299546	.302337	.305105	.307850	.310570	.313267
.9	.315940	.318589	.321214	.323814	.326391	.328944	.331472	.333977	.336457	.338913
1.0	.341345	.343752	.346136	.348495	.350830	.353141	.355428	.357690	.359929	.362143
1.1	.364334	.366500	.368643	.370762	.372857	.374928	.376976	.379000	.381000	.382977
1.2	.384930	.386861	.388768	.390651	.392512	.394350	.396165	.397958	.399727	.401475
1.3	.403200	.404902	.406582	.408241	.409877	.411492	.413085	.414657	.416207	.417736
1.4	.419243	.420730	.422196	.423641	.425066	.426471	.427855	.429219	.430563	.431888
1.5	.433193	.434476	.435745	.436992	.438220	.439429	.440620	.441792	.442947	.444083
1.6	.445201	.446301	.447384	.448449	.449497	.450529	.451543	.452540	.453521	.454486
1.7	.455435	.456367	.457284	.458185	.459070	.459941	.460796	.461636	.462462	.463273
1.8	.464070	.464852	.465620	.466375	.467116	.467843	.468557	.469258	.469946	.470621
1.9	.471283	.471933	.472571	.473197	.473810	.474412	.475002	.475581	.476148	.476705
2.0	.477250	.477784	.478308	.478822	.479325	.479818	.480301	.480774	.481237	.481691
2.1	.482136	.482571	.482997	.483414	.483823	.484222	.484614	.484997	.485371	.485738
2.2	.486097	.486447	.486791	.487126	.487455	.487776	.488089	.488396	.488696	.488989
2.3	.489276	.489556	.489830	.490097	.490358	.490613	.490863	.491106	.491344	.491576
2.4	.491802	.492024	.492240	.492451	.492656	.492857	.493053	.493244	.493431	.493613
2.5	.493790	.493963	.494132	.494297	.494457	.494614	.494766	.494915	.495060	.495201
2.6	.495339	.495473	.495604	.495731	.495855	.495975	.496093	.496207	.496319	.496427
2.7	.496533	.496636	.496736	.496833	.496928	.497020	.497110	.497197	.497282	.497365

2.8	.497445	.497523	.497599	.497673	.497744	.497814	.497882	.497948	.498012	.498074
2.9	.498134	.498193	.498250	.498305	.498359	.498411	.498462	.498511	.498559	.498605
3.0	.498650	.498694	.498736	.498777	.498817	.498856	.498893	.498930	.498965	.498999
3.1	.499032	.499065	.499096	.499126	.499155	.499184	.499211	.499238	.499264	.499289
3.2	.499313	.499336	.499359	.499381	.499402	.499423	.499443	.499462	.499481	.499499
3.3	.499517	.499534	.499550	.499566	.499581	.499596	.499610	.499624	.499638	.499651
3.4	.499663	.499675	.499687	.499698	.499709	.499720	.499730	.499740	.499749	.499758
3.5	.499767	.499776	.499784	.499792	.499800	.499807	.499815	.499822	.499828	.499835
3.6	.499841	.499847	.499853	.499858	.499864	.499869	.499874	.499879	.499883	.499888
3.7	.499892	.499896	.499900	.499904	.499908	.499912	.499915	.499918	.499922	.499925
3.8	.499928	.499931	.499933	.499936	.499938	.499941	.499943	.499946	.499948	.499950
3.9	.499952	.499954	.499956	.499958	.499959	.499961	.499963	.499964	.499966	.499967

ANEXO C – Derivadas da função de Domenico

Função de Domenico:

$$C(x, y, t) = \frac{1}{8} C_0 e^{\left(-K_S \left(t - \frac{x \theta R}{K i}\right)\right)} e^{\left(\frac{x}{1/2} \frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}\right)}{\alpha}\right)} \left(\operatorname{erf}\left(\frac{1}{2} \frac{Z}{(\gamma x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{1}{2} \frac{Z}{(\gamma x)^{0.5}}\right) \right)$$

onde C é a função a concentração em um ponto do plano (x, y) no tempo t . C_0 é a concentração inicial; K_S é a constante de decaimento da concentração da fonte; x e y são respectivamente a distância longitudinal e transversal do ponto de interesse em relação ao centro da fonte; θ é a porosidade efetiva, R é o fator de retardamento, K é a permeabilidade; i ó o gradiente hidráulico; λ é a taxa de degradação do contaminante, α é a dispersividade na direção x ; β é a dispersividade na direção y ; γ é a dispesividade na direção z ; Y é a largura do fonte e Z é a profundidade da fonte.

Derivadas de Primeira ordem:

Em relação a C_0 :

$$\text{derivada} := \frac{1}{4} e^{\left(-K_S \left(t - \frac{x \theta R}{K i}\right)\right)} e^{\left(\frac{x}{2 \alpha} \frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}\right)}{\alpha}\right)} \operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}}\right) \right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}}\right)$$

Em relação a K_S :

$$\begin{aligned} \text{derivada} &:= \frac{1}{4} Co \left(-t + \frac{x \theta R}{K i} \right) e^{(-K_S \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\ &\text{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \left(\text{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \text{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \\ &\text{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) \end{aligned}$$

Em relação a t :

$$\begin{aligned} \text{derivada} &:= -\frac{1}{4} Co K_S e^{(-K_S \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\ &\text{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \left(\text{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \text{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \\ &\text{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) - \frac{1}{2} Co e^{(-K_S \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\ &e^{\left(-\frac{\left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \\ &\left(-\frac{K i \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{2 \theta R \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} - \frac{1/4}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R} \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha K i \right) \\ &\left(\text{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \text{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \text{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi} \end{aligned}$$

Em relação a x :

$$\begin{aligned}
 \text{derivada} &:= \frac{1}{4} Co Ks \theta R e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \\
 &\text{erfc}\left(\frac{K i t \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}\right) \left(\text{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \text{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) \\
 &\text{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / (K i) + \frac{1}{8} Co e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right) \\
 &e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \text{erfc}\left(\frac{K i t \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{2\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\
 &\left(\text{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \text{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) \text{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / \alpha - \frac{1}{4} Co e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} \\
 &e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} e^{\left(-\frac{\left(\frac{K i t \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)^2}{4\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{1.0}}\right)} \\
 &\left(\text{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \text{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) \text{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / \left(\sqrt{\pi} \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}\right) + \frac{1}{4} Co \\
 &e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \text{erfc}\left(\frac{K i t \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{2\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\
 &\left(-\frac{1/2 e^{\left(-\frac{\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)^2}{4(\beta x)^{1.0}}\right)} \left(y + \frac{Y}{2}\right) \beta}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{1.5}} + \frac{1/2 e^{\left(-\frac{\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)^2}{4(\beta x)^{1.0}}\right)} \left(y - \frac{Y}{2}\right) \beta}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{1.5}}\right) \\
 &\text{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) - \frac{1}{8} Co e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)}
 \end{aligned}$$

$$\operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}} \right) \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) e^{\left(-\frac{z^2}{4 (\gamma x)^{1.0}} \right)}$$

$$Z \gamma / (\sqrt{\pi} (\gamma x)^{1.5})$$

Em relação a K :

$$\text{derivada} := -\frac{1}{4} Co Ks x \theta R e^{\left(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)}$$

$$\operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}} \right) \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right)$$

$$\operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / (K^2 i) + \frac{1}{4} Co e^{\left(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} x \lambda \theta R$$

$$e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}} \right)$$

$$\left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} K^2 i \right)$$

$$-\frac{1}{2} Co e^{\left(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} e^{\left(-\frac{\left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{1.0}} \right)}$$

$$\frac{i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} + \frac{2.0 t \lambda \alpha}{K \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}$$

$$2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}$$

$$\left. \frac{1/4 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha i t}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R} \right) \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi}$$

Em relação a i :

$$\begin{aligned} \text{derivada} &:= \frac{1}{4} Co Ks x \theta R e^{(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\ &\operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \\ &\operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / (K i^2) + \frac{1}{4} Co e^{(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} x \lambda \theta R \\ &e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\ &\left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} K i^2 \right) \\ &-\frac{1}{2} Co e^{(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \left(\frac{\left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right) \left(\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{K t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R} + \frac{2.0 t \lambda \alpha}{i \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}} \\
& \frac{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}}{\left. - \frac{1/4 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}\right) \alpha K t}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{1.5} \theta R} \right)} \\
& \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) \right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

Em relação a θ

$$\begin{aligned}
\text{derivada} & := \frac{1}{4} C o K s x R e^{(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i}\right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}\right)}{2 \alpha}\right)} \\
& \operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) \right) \\
& \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / (K i) - 1/4 C o e^{(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i}\right))} x \lambda R e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}\right)}{2 \alpha}\right)} \\
& \operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) \right) \\
& \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / \left(\left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5} K i \right) - \frac{1}{2} C o e^{(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i}\right))}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} e^{\left(- \frac{\left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\right. \\
& \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta^2 R} - \frac{2.0 t \lambda \alpha}{\theta \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}} \\
& \left. \frac{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}}{+ \frac{1/4 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha K i t}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta^2 R}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

Em relação a R :

$$\begin{aligned}
\text{derivada} & := \frac{1}{4} C o K s x \theta e^{\left(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \\
& \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / (K i) - 1/4 C o e^{\left(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} x \lambda \theta e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \\
& \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} K i \right) - \frac{1}{2} C o e^{\left(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} e^{\left(- \frac{\left(\frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R^2} - \frac{2.0 t \lambda \alpha}{R \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}} \right) \\
& \frac{1/4}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R^2} \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha K i t \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

Em relação a α

$$\begin{aligned}
\text{derivada} & := \frac{1}{4} C o e^{\left(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} \\
& \left(- \frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha^2} - \frac{1.00 x \lambda \theta R}{\alpha \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} K i} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) - \frac{1}{2} C o \\
& e^{(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} e^{\left(- \frac{\left(\frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\right. \\
& - \frac{1.00 t \lambda}{\left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \\
& \left. - \frac{0.250 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) K i t}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

Em relação a β :

$$\begin{aligned}
\text{derivada} & := \frac{1}{4} C o e^{(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right)
\end{aligned}$$

$$\left(-\frac{0.500 e^{-\left(\frac{y+\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{1.0}}\right)^2}}{\sqrt{\pi}(\beta x)^{1.5}} \left(y+\frac{Y}{2}\right)x + \frac{0.500 e^{-\left(\frac{y-\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{1.0}}\right)^2}}{\sqrt{\pi}(\beta x)^{1.5}} \left(y-\frac{Y}{2}\right)x \right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right)$$

Em relação a γ

$$\begin{aligned} \text{derivada} &:= -0.125 Co e^{-\left(-Ks\left(t-\frac{x\theta R}{Ki}\right)\right)} e^{\left(\frac{x\left(1-\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \\ &\operatorname{erfc}\left(\frac{x-\frac{Kit\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\ &\left(\operatorname{erf}\left(\frac{y+\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)-\operatorname{erf}\left(\frac{y-\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) e^{\left(-\frac{z^2}{4(\gamma x)^{1.0}}\right)} Zx / (\sqrt{\pi}(\gamma x)^{1.5}) \end{aligned}$$

Em relação a λ :

$$\begin{aligned} \text{derivada} &:= -0.250 Co e^{-\left(-Ks\left(t-\frac{x\theta R}{Ki}\right)\right)} x\theta R e^{\left(\frac{x\left(1-\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \\ &\operatorname{erfc}\left(\frac{x-\frac{Kit\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\ &\left(\operatorname{erf}\left(\frac{y+\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)-\operatorname{erf}\left(\frac{y-\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / \left(\right. \\ &\left. \left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5} Ki\right) + 0.500 Co e^{-\left(-Ks\left(t-\frac{x\theta R}{Ki}\right)\right)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& e^{\left(x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right) \right)} e^{\left(- \frac{\left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} t \alpha \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\sqrt{\pi} \right. \\
& \left. \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5} \right)
\end{aligned}$$

Em relação a Y:

$$\begin{aligned}
\text{derivada} & := \frac{1}{4} Co e^{\left(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} e^{\left(x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right) \right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \left(\frac{1}{2} \frac{e^{\left(- \frac{\left(y + \frac{Y}{2} \right)^2}{4 (\beta x)^{1.0}} \right)}}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{0.5}} + \frac{1}{2} \frac{e^{\left(- \frac{\left(y - \frac{Y}{2} \right)^2}{4 (\beta x)^{1.0}} \right)}}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{0.5}} \right) \\
& \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right)
\end{aligned}$$

Em relação a Z:

$$\begin{aligned}
\text{derivada} & := \frac{1}{4} Co e^{\left(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} e^{\left(x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right) \right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) e^{\left(- \frac{Z^2}{4 (\gamma x)^{1.0}} \right)} / \left(\sqrt{\pi} (\gamma x)^{0.5} \right)
\end{aligned}$$

Derivadas de Segunda Ordem:

Em relação a C_0 :

$$DERIVADA2 := 0$$

Em relação a K_S :

$$DERIVADA2 := \frac{1}{4} C_0 \left(-t + \frac{x \theta R}{K i} \right)^2 e^{-K_S \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)}$$

$$\operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right)$$

$$\left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right)$$

Em relação a t :

$$DERIVADA2 := \frac{1}{4} C_0 K_S^2 e^{-K_S \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)}$$

$$\operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right)$$

$$\left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) + C_0 K_S$$

$$e^{-K_S \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} e^{\left(\frac{\left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)}$$

$$- \frac{K i \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{2 \theta R \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{0.250 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha K i}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R} \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi} - \frac{1}{2} C o \\
& e^{-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right) \\
& \frac{\left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) K i \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0} \theta R} \\
& + \frac{0.250 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha K i}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{2.0} \theta R} \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right) \left(\frac{K i \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{2 \theta R \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& - \frac{0.250 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha K i}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R} \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi} - \frac{1}{2} C o
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} e^{\left(-\frac{\left(\frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{\theta R}\right)^2}{4\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{1.0}}\right)} \\
& \frac{0.500 K^2 i^2 \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5} \alpha}{\theta^2 R^2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{1.5}} \\
& + \frac{0.375 \left(\frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}\right) \alpha^2 K^2 i^2}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{2.5} \theta^2 R^2} \\
& \left(\operatorname{erf}\left(\frac{+\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{-\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

Em relação a **X**

$$\begin{aligned}
DERIVADA2 & := \frac{1}{4} Co Ks^2 \theta^2 R^2 e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \\
& \operatorname{erfc}\left(\frac{\frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\
& \left(\operatorname{erf}\left(\frac{+\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{-\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / (K^2 i^2) + \frac{1}{4} Co \\
& \frac{x\theta R}{Ki} \left(\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right) e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \frac{1}{\theta R} e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} \\
& \operatorname{erfc}\left(\frac{\frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5}}\right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) / (Ki \alpha) + \frac{1}{2} Co \\
& Ks \theta R e^{(-Ks(t - \frac{x \theta R}{Ki}))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\frac{0.500 e^{\left(-\frac{\left(y + \frac{Y}{2} \right)^2}{4(\beta x)^{1.0}} \right)} \left(y + \frac{Y}{2} \right) \beta}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{1.5}} + \frac{0.500 e^{\left(-\frac{\left(y - \frac{Y}{2} \right)^2}{4(\beta x)^{1.0}} \right)} \left(y - \frac{Y}{2} \right) \beta}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{1.5}} \right) \\
& \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) / (Ki) - \frac{1}{2} Co e^{(-Ks(t - \frac{x \theta R}{Ki}))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\
& e^{\left(\frac{x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R}}{4 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)^2} \\
& \left(\frac{0.500 e^{\left(-\frac{\left(y + \frac{Y}{2} \right)^2}{4(\beta x)^{1.0}} \right)} \left(y + \frac{Y}{2} \right) \beta}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{1.5}} + \frac{0.500 e^{\left(-\frac{\left(y - \frac{Y}{2} \right)^2}{4(\beta x)^{1.0}} \right)} \left(y - \frac{Y}{2} \right) \beta}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{1.5}} \right) \\
& \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\sqrt{\pi} \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5} \right) + \frac{1}{16} Co e^{(-Ks(t - \frac{x \theta R}{Ki}))} \\
& \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)^2 e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) / \alpha^2 - \frac{1}{4} Co
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& e^{\left(-Ks\left(t - \frac{x\theta R}{Ki}\right)\right)} \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right) e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \\
& e^{\left(\frac{\left(\frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}\right)^2}{4\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{1.0}}\right)} \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) \\
& \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / \left(\alpha\sqrt{\pi}\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5}\right) - 0.125 Co e^{\left(-Ks\left(t - \frac{x\theta R}{Ki}\right)\right)} \\
& \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right) e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& e^{\left(\frac{\left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \\
& \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(Kit \sqrt{\pi} \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5} \right) - 0.250 Co Ks \theta R \\
& e^{(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) e^{\left(-\frac{z^2}{4 (\gamma x)^{1.0}} \right)} Z \gamma / (Kit \sqrt{\pi}) \\
& (\gamma x)^{1.5} - 0.250 Co e^{(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\frac{0.500 e^{\left(-\frac{\left(y + \frac{Y}{2} \right)^2}{4 (\beta x)^{1.0}} \right)} \left(y + \frac{Y}{2} \right) \beta}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{1.5}} + \frac{0.500 e^{\left(-\frac{\left(y - \frac{Y}{2} \right)^2}{4 (\beta x)^{1.0}} \right)} \left(y - \frac{Y}{2} \right) \beta}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{1.5}} \right) \\
& e^{\left(-\frac{z^2}{4 (\gamma x)^{1.0}} \right)} Z \gamma / (\sqrt{\pi} (\gamma x)^{1.5}) + \frac{1}{8} Co e^{(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right))} \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \\
& e^{\left(\frac{\left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) \Big/ \left(\sqrt{\pi}\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{1.5}\right) + 0.250 C o e^{\left(-K s\left(t-\frac{x \theta R}{K i}\right)\right)} \\
& e^{\left(\frac{x\left(1-\left(1+\frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}\right)}{2 \alpha}\right)} e^{\left(\frac{x-\frac{K i t\left(1+\frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{4\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{1.0}}\right)^2} \\
& \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y+\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)-\operatorname{erf}\left(\frac{y-\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) e^{\left(-\frac{Z^2}{4(\gamma x)^{1.0}}\right)} Z \gamma \Big/ \left(\pi\right. \\
& \left.\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}(\gamma x)^{1.5}\right) + \frac{1}{4} C o e^{\left(-K s\left(t-\frac{x \theta R}{K i}\right)\right)} e^{\left(\frac{x\left(1-\left(1+\frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}\right)}{2 \alpha}\right)} \\
& \operatorname{erfc}\left(\frac{x-\frac{K i t\left(1+\frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \left(\frac{0.125\left(y+\frac{Y}{2}\right)^3 \beta^2 e^{\left(-\frac{\left(y+\frac{Y}{2}\right)^2}{4(\beta x)^{1.0}}\right)}}{\sqrt{\pi}(\beta x)^{3.5}}\right. \\
& \left. + \frac{0.750 e^{\left(-\frac{\left(y+\frac{Y}{2}\right)^2}{4(\beta x)^{1.0}}\right)}\left(y+\frac{Y}{2}\right) \beta^2}{\sqrt{\pi}(\beta x)^{2.5}} + \frac{0.125\left(y-\frac{Y}{2}\right)^3 \beta^2 e^{\left(-\frac{\left(y-\frac{Y}{2}\right)^2}{4(\beta x)^{1.0}}\right)}}{\sqrt{\pi}(\beta x)^{3.5}}\right. \\
& \left. - \frac{0.750 e^{\left(-\frac{\left(y-\frac{Y}{2}\right)^2}{4(\beta x)^{1.0}}\right)}\left(y-\frac{Y}{2}\right) \beta^2}{\sqrt{\pi}(\beta x)^{2.5}}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) + 0.188 C o \\
& e^{\left(-K s\left(t-\frac{x \theta R}{K i}\right)\right)} e^{\left(\frac{x\left(1-\left(1+\frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}\right)}{2 \alpha}\right)} \\
& \operatorname{erfc}\left(\frac{x-\frac{K i t\left(1+\frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\
& \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y+\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)-\operatorname{erf}\left(\frac{y-\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) e^{\left(-\frac{Z^2}{4(\gamma x)^{1.0}}\right)} Z \gamma^2 \Big/ \left(\sqrt{\pi}(\gamma x)^{2.5}\right) \\
& - 0.0312 C o e^{\left(-K s\left(t-\frac{x \theta R}{K i}\right)\right)} e^{\left(\frac{x\left(1-\left(1+\frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}\right)}{2 \alpha}\right)}
\end{aligned}$$

$$\operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}}\right)\right) Z^3 \gamma^2 e^{\left(-\frac{Z^2}{4 (\gamma x)^{1.0}}\right)} / (\sqrt{\pi} (\gamma x)^{3.5})$$

Em relação a K :

$$\begin{aligned} \text{DERIVADA2} &:= \frac{1}{2} C_o K_s x \theta R e^{\left(-K_s \left(t - \frac{x \theta R}{K i}\right)\right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}\right)}{2 \alpha}\right)} \\ &\operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\ &\left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}}\right)\right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}}\right) / (K^3 i) + \frac{1}{4} C_o \\ &K_s^2 x^2 \theta^2 R^2 e^{\left(-K_s \left(t - \frac{x \theta R}{K i}\right)\right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}\right)}{2 \alpha}\right)} \\ &\operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\ &\left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}}\right)\right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}}\right) / (K^4 i^2) - 0.500 \\ &C_o K_s x^2 \theta^2 R^2 e^{\left(-K_s \left(t - \frac{x \theta R}{K i}\right)\right)} \lambda e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}\right)}{2 \alpha}\right)} \\ &\operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(K^4 i^2 \right. \\
& \left. \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right) + Co Ks x \theta R e^{(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right))} \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} e^{\left(\frac{\left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\right. \\
& \left. - \frac{it \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} + \frac{2.0 t \lambda \alpha}{K \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}} \right. \\
& \left. \left. \frac{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}}{0.250 \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha it} \right) \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) / (K^2 i \sqrt{\pi}) + \\
& 0.500 Co e^{(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right))} x \lambda^2 \theta^2 R^2 e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) \alpha / \left(\right. \\
& \left. \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{1.5} K^4 i^2 \right) - 0.500 Co e^{(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right))} x \lambda \theta R
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} K^3 i \right) + 0.250 Co e^{\left(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right) \right)} x^2 \lambda^2 \theta^2 R^2 \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{1.0} K^4 i^2 \right) - 1.00 Co e^{\left(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right) \right)} x \lambda \theta R \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} e^{\left(-\frac{\left(\frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\frac{it \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} + \frac{2.0 t \lambda \alpha}{K \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}} \right) \\
& \frac{0.250 \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha it}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R}
\end{aligned}$$

$$\left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) \right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / \left(1 + \frac{4}{\dots} \right)$$

$$\begin{aligned}
& e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} e^{\left(\frac{\left(x - \frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}\right)^2}{4\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{1.0}}\right)} \left(\right. \\
& \frac{2.00 t \lambda^2 \alpha^2 \theta R}{K^3 \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{1.5} i \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5}} \\
& \left. - \frac{0.500 \left(\frac{it\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R} + \frac{2.0 t \lambda \alpha}{K \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}} \right) \alpha i t}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{1.5} \theta R} \right) \\
& + \frac{0.375 \left(x - \frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha^2 i^2 t^2}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{2.5} \theta^2 R^2} \left. \right) \\
& \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) \right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

Em relação a i :

$$\begin{aligned}
DERIVADA2 & := \frac{1}{2} Co Ks x \theta R e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \\
& \operatorname{erfc}\left(\frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{x - \frac{\theta R}{2\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5}}}\right) \\
& \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) \right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / (Ki^3) + \frac{1}{4} Co
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& Ks^2 x^2 \theta^2 R^2 e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \\
& \operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\
& \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / (K^2 i^4) - 0.500 \\
& Co Ks x^2 \theta^2 R^2 e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} \lambda e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \\
& \operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\
& \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / \left(K^2 i^4\right. \\
& \left.\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right) + Co Ks x \theta R e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} \\
& e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} e^{\left(\frac{\left(\frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{x - \frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}}\right)^2}{4\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{1.0}}\right)} \left(\right. \\
& \left. - \frac{Kt\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R} + \frac{2.0 t \lambda \alpha}{i\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}} \right) \\
& \left. 2\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left. - \frac{0.250 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha K t}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / (K i^2 \sqrt{\pi}) + \\
& 0.500 C o e^{\left(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} x \lambda^2 \theta^2 R^2 e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) \alpha / \left(\right. \\
& \left. \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{1.5} K^2 i^4 \right) - 0.500 C o e^{\left(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} x \lambda \theta R \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\right. \\
& \left. \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} K i^3 \right) + 0.250 C o e^{\left(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} x^2 \lambda^2 \theta^2 R^2 \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{1.0} K^2 i^4 - 1.00 Co e^{\left(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} x \lambda \theta R \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} e^{\left(- \frac{\left(\frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)^2}{\theta R} \right)} \left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right) \\
& - \frac{K t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} + \frac{2.0 t \lambda \alpha}{i \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}} \\
& \frac{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R} \left(\frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha K t \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} K i^2 \sqrt{\pi} \right) - \frac{1}{2} Co e^{\left(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \left(- \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \right) \\
& \left(- \frac{K t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} + \frac{2.0 t \lambda \alpha}{i \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}} \right) / \left(2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0} \right) + \frac{0.250 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2 \alpha K t}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{2.0} \theta R}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& e^{\left(\frac{\left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\frac{K t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} + \frac{2.0 t \lambda \alpha}{i \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}} \right) \\
& \frac{0.250 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha K t}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R} \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi} - \frac{1}{2} C_0 \\
& e^{(-K_s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} e^{\left(x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right) \right)} e^{\left(\frac{\left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \\
& \frac{2.00 t \lambda^2 \alpha^2 \theta R}{i^3 \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{1.5} K \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \\
& \frac{0.500 \left(\frac{K t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} + \frac{2.0 t \lambda \alpha}{i \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}} \right) \alpha K t}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R}
\end{aligned}$$

$$\left. + \frac{0.375 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha^2 K^2 t^2}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{2.5} \theta^2 R^2} \right) \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi}$$

Em relação a θ

$$\begin{aligned} \text{DERIVADA2} &:= \frac{1}{4} Co Ks^2 x^2 R^2 e^{(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\ &\operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\ &\left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / (K^2 i^2) - 0.500 \\ &Co Ks x^2 R^2 e^{(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} \lambda e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\ &\operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\ &\left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(K^2 i^2 \right. \\ &\left. \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right) - Co Ks x R e^{(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& e^{\left(\frac{\left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta^2 R} - \frac{2.0 t \lambda \alpha}{\theta \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}} \right) \\
& \frac{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}}{+ \frac{0.250 \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha Kit}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.5} \theta^2 R}} \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / (Ki \sqrt{\pi}) + \\
& 0.500 Co e^{\left(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right) \right)} x \lambda^2 R^2 e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) \alpha / \left(\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{1.5} K^2 i^2 \right) + 0.250 Co e^{\left(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right) \right)} x^2 \lambda^2 R^2 \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{1.0} K^2 i^2 \right) + 1.00 Co e^{(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right))} x \lambda R \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} e^{\left(- \frac{\left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta^2 R} - \frac{2.0 t \lambda \alpha}{\theta \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}} \right) \\
& \frac{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}}{2} \left(\frac{0.250 \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha Kit}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.5} \theta^2 R} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} Ki \sqrt{\pi} \right) - \frac{1}{2} Co e^{(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right))} \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} \left(- \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \right) \\
& \left(\frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta^2 R} - \frac{2.0 t \lambda \alpha}{\theta \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}} \right) / \left(2 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0} - \frac{0.250 \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2 \alpha Kit}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{2.0} \theta^2 R} \Bigg) \\
& e^{\left(\frac{\left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta^2 R} - \frac{2.0 t \lambda \alpha}{\theta \left(1 + \frac{4\lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5}} \right) \\
& \frac{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}}{2 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}} \Bigg) \\
& + \frac{0.250 \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2 \alpha Kit}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.5} \theta^2 R} \Bigg) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi} - \frac{1}{2} Co \\
& e^{(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{Ki} \right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} e^{\left(\frac{\left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \Bigg) \\
& - \frac{2 Kit \left(1 + \frac{4\lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta^3 R} + \frac{4.0 t \lambda \alpha}{\theta^2 \left(1 + \frac{4\lambda \alpha \theta R}{Ki} \right)^{0.5}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{4.00 t \lambda^2 \alpha^2 R}{\theta \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{1.5} K i} \left/ \left(2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}\right)\right. \\
& + \frac{0.500 \left(\frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta^2 R} - \frac{2.0 t \lambda \alpha}{\theta \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}} \right) \alpha K i t}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{1.5} \theta^2 R} \\
& + \frac{0.375 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha^2 K^2 i^2 t^2}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{2.5} \theta^4 R^2} \\
& - \frac{0.500 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha K i t}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{1.5} \theta^3 R} \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

Em relação a R :

$$\begin{aligned}
DERIVADA2 := & \frac{1}{4} C_o K_s^2 x^2 \theta^2 e^{(-K_s \left(t - \frac{x \theta R}{K i}\right))} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}\right)}{2 \alpha}\right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / (K^2 i^2) - 0.500
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& Co Ks x^2 \theta^2 e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} \lambda e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \\
& \operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\
& \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / \left(K^2 i^2\right. \\
& \left.\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right) - Co Ks x \theta e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \\
& e^{\left(\frac{\left(\frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{x - \frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}}\right)^2}{4\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{1.0}}\right)} \left(\right. \\
& \left. \frac{Kit\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R^2} - \frac{2.0 t \lambda \alpha}{R\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}} \right. \\
& \left. \left. \frac{2\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5}}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{1.5} \theta R^2} \right) \right. \\
& \left. \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / (Ki\sqrt{\pi}) + \right. \\
& \left. 0.500 Co e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} x \lambda^2 \theta^2 e^{\left(\frac{x\left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) \alpha / \left(\right. \\
& \left. \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{1.5} K^2 i^2 \right) + 0.250 C o e^{(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} x^2 \lambda^2 \theta^2 \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\right. \\
& \left. \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{1.0} K^2 i^2 \right) + 1.00 C o e^{(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right))} x \lambda \theta \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} e^{\left(\frac{\left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\right. \\
& \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R^2} - \frac{2.0 t \lambda \alpha}{R \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}} \\
& \left. \frac{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}}{\right)} \\
& + \frac{0.250 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \alpha K i t}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R^2} \left. \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\right. \\
& \left. \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} Ki \sqrt{\pi} \right) - \frac{1}{2} Co e^{(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right))} \\
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} \left(- \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) \right. \\
& \left. \left(\frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R^2} - \frac{2.0 t \lambda \alpha}{R \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}} \right) / \left(2 \right. \right. \\
& \left. \left. \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0} \right) - \frac{0.250 \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2 \alpha Kit}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{2.0} \theta R^2} \right) \\
& e^{\left(- \frac{\left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\right. \\
& \left. \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R^2} - \frac{2.0 t \lambda \alpha}{R \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left. \frac{0.250 \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2 \alpha Kit}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R^2} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi} - \frac{1}{2} Co
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& e^{\left(-Ks\left(t-\frac{x\theta R}{Ki}\right)\right)} e^{\left(\frac{x\left(1-\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} e^{\left(\frac{\left(x-\frac{Kit\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}\right)^2}{4\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{1.0}}\right)} \left(\left(\right. \right. \\
& -\frac{2Kit\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R^3} + \frac{4.0t\lambda\alpha}{R^2\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}} \\
& + \left. \frac{4.00t\lambda^2\alpha^2\theta}{R\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{1.5}Ki} \right) / \left(2\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5} \right) \\
& + \frac{0.500\left(\frac{Kit\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R^2} - \frac{2.0t\lambda\alpha}{R\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}\right)\alpha Kit}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{1.5}\theta R^2} \\
& + \frac{0.375\left(x-\frac{Kit\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}\right)\alpha^2 K^2 i^2 t^2}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{2.5}\theta^2 R^4} \\
& - \frac{0.500\left(x-\frac{Kit\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}\right)\alpha Kit}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{1.5}\theta R^3} \left. \right) \\
& \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y+\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y-\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right) \right) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right) / \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

Em relação a α

$$\begin{aligned}
 \text{DERIVADA2} := & \frac{1}{4} Co e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} \left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{\alpha^3} \right. \\
 & + \frac{2.00 x \lambda \theta R}{\alpha^2 \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}} + \frac{2.00 x \lambda^2 \theta^2 R^2}{\alpha \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{1.5} Ki^2} \\
 & \left. e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{Ki t \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha Ki t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \right) \\
 & \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) + \frac{1}{4} Co \\
 & e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} \left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha^2} - \frac{1.00 x \lambda \theta R}{\alpha \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} Ki} \right)^2 \\
 & e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{Ki t \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha Ki t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
 & \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) - Co \\
 & e^{(-Ks(t - \frac{x\theta R}{Ki}))} \left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha^2} - \frac{1.00 x \lambda \theta R}{\alpha \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} Ki} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} e^{\left(- \frac{\left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\right. \\
& - \frac{1.00 t \lambda}{\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}} \\
& \left. - \frac{0.250 \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) Kit}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi} - \frac{1}{2} Co \\
& e^{\left(-Ks \left(t - \frac{x\theta R}{Ki} \right) \right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \right)}{2\alpha} \right)} \left(\right. \\
& \frac{1.00 \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) t \lambda}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0} \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}} \\
& \left. + \frac{0.250 \left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2 Kit}{\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{2.0} \theta R} \right) \\
& e^{\left(- \frac{\left(x - \frac{Kit \left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(- \frac{1.00 t \lambda}{\left(1 + \frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki} \right)^{0.5} \left(\frac{\alpha Kit}{\theta R} \right)^{0.5}} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{0.250 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) K i t}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R} \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi} - \frac{1}{2} C o \\
& e^{\left(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} e^{\left(- \frac{\left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\right. \\
& \frac{2.00 t \lambda^2 \theta R}{\left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{1.5} \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5} K i} \\
& + \frac{1.00 t^2 \lambda K i}{\left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \theta R} \\
& \left. + \frac{0.375 \left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right) K^2 i^2 t^2}{\left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{2.5} \theta^2 R^2} \right) \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

Em relação a β :

$$\begin{aligned}
DERIVADA2 & := \frac{1}{4} C o e^{\left(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \left(- \frac{0.125 \left(y + \frac{Y}{2} \right)^3 x^2 e^{\left(- \frac{\left(y + \frac{Y}{2} \right)^2}{4 (\beta x)^{1.0}} \right)}}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{3.5}} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{0.750 e^{\left(-\frac{\left(y+\frac{Y}{2}\right)^2}{4(\beta x)^{1.0}}\right)} \left(y+\frac{Y}{2}\right) x^2}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{2.5}} + \frac{0.125 \left(y-\frac{Y}{2}\right)^3 x^2 e^{\left(-\frac{\left(y-\frac{Y}{2}\right)^2}{4(\beta x)^{1.0}}\right)}}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{3.5}} \\
& - \frac{0.750 e^{\left(-\frac{\left(y-\frac{Y}{2}\right)^2}{4(\beta x)^{1.0}}\right)} \left(y-\frac{Y}{2}\right) x^2}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{2.5}} \left) \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{2(\gamma x)^{0.5}}\right)
\end{aligned}$$

Em relação a γ

$$\begin{aligned}
\text{DERIVADA2} := & -0.0312 Co e^{\left(-Ks\left(t-\frac{x\theta R}{Ki}\right)\right)} e^{\left(\frac{x\left(1-\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \\
& \operatorname{erfc}\left(\frac{x-\frac{Kit\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\
& \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y+\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)-\operatorname{erf}\left(\frac{y-\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) Z^3 x^2 e^{\left(-\frac{Z^2}{4(\gamma x)^{1.0}}\right)} / (\sqrt{\pi} (\gamma x)^{3.5}) \\
& + 0.188 Co e^{\left(-Ks\left(t-\frac{x\theta R}{Ki}\right)\right)} e^{\left(\frac{x\left(1-\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}\right)}{2\alpha}\right)} \\
& \operatorname{erfc}\left(\frac{x-\frac{Kit\left(1+\frac{4\lambda\alpha\theta R}{Ki}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2\left(\frac{\alpha Kit}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\
& \left(\operatorname{erf}\left(\frac{y+\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)-\operatorname{erf}\left(\frac{y-\frac{Y}{2}}{2(\beta x)^{0.5}}\right)\right) e^{\left(-\frac{Z^2}{4(\gamma x)^{1.0}}\right)} Z x^2 / (\sqrt{\pi} (\gamma x)^{2.5})
\end{aligned}$$

Em relação a λ :

DERIVADA2 0.500 Co e

$$\begin{aligned}
& e^{\left(\frac{\left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \\
& \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) / \left(\sqrt{\pi} \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.5} \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{1.0} \right) - 1.00 C o \\
& e^{\left(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} e^{\left(\frac{\left(x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R} \right)^2}{4 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{1.0}} \right)} t \alpha^2 \\
& \left(\operatorname{erf} \left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}} \right) \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right) \theta R / \left(\sqrt{\pi} \right. \\
& \left. \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{1.5} \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5} K i \right)
\end{aligned}$$

Em relação a Y :

$$\begin{aligned}
DERIVADA2 & := \frac{1}{4} C o e^{\left(-K s \left(t - \frac{x \theta R}{K i} \right) \right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5} \right)}{2 \alpha} \right)} \\
& \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i} \right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R} \right)^{0.5}} \right) \\
& \left(\frac{1}{8} \frac{\left(y + \frac{Y}{2} \right) e^{\left(-\frac{\left(y + \frac{Y}{2} \right)^2}{4 (\beta x)^{1.0}} \right)}}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{1.5}} + \frac{1}{8} \frac{\left(y - \frac{Y}{2} \right) e^{\left(-\frac{\left(y - \frac{Y}{2} \right)^2}{4 (\beta x)^{1.0}} \right)}}{\sqrt{\pi} (\beta x)^{1.5}} \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{2 (\gamma x)^{0.5}} \right)
\end{aligned}$$

Em relação a Z:

$$\begin{aligned}
 \text{DERIVADA2} &:= -\frac{1}{8} C_0 e^{\left(-Ks \left(t - \frac{x \theta R}{K i}\right)\right)} e^{\left(\frac{x \left(1 - \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}\right)}{2 \alpha}\right)} \\
 &\operatorname{erfc}\left(\frac{x - \frac{K i t \left(1 + \frac{4 \lambda \alpha \theta R}{K i}\right)^{0.5}}{\theta R}}{2 \left(\frac{\alpha K i t}{\theta R}\right)^{0.5}}\right) \\
 &\left(\operatorname{erf}\left(\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 (\beta x)^{0.5}}\right)\right) Z e^{\left(-\frac{z^2}{4 (\gamma x)^{1.0}}\right)} / (\sqrt{\pi} (\gamma x)^{1.5})
 \end{aligned}$$

ANEXO D – Função complementar de erro

Função complementar de erro (erfc):

$$\operatorname{erf}(\beta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\beta} \exp(-\varepsilon^2) d\varepsilon \quad \operatorname{erf}(-\beta) = -\operatorname{erf}(\beta) \quad \operatorname{erfc}(\beta) = 1 - \operatorname{erf}(\beta)$$

β	$\operatorname{erf}(\beta)$	$\operatorname{erfc}(\beta)$
-3,00	-0,999978	1,999978
-2,95	-0,999970	1,999970
-2,90	-0,999959	1,999959
-2,85	-0,999944	1,999944
-2,80	-0,999925	1,999925
-2,75	-0,999899	1,999899
-2,70	-0,999866	1,999866
-2,65	-0,999822	1,999822
-2,60	-0,999764	1,999764
-2,55	-0,999689	1,999689
-2,50	-0,999593	1,999593
-2,45	-0,999469	1,999469
-2,40	-0,999311	1,999311
-2,35	-0,999111	1,999111
-2,30	-0,998857	1,998857
-2,25	-0,998537	1,998537
-2,20	-0,998137	1,998137
-2,15	-0,997639	1,997639
-2,10	-0,997021	1,997021
-2,05	-0,996258	1,996258
-2,00	-0,995322	1,995322
-1,95	-0,994179	1,994179
-1,90	-0,992790	1,992790
-1,85	-0,991111	1,991111
-1,80	-0,989091	1,989091
-1,75	-0,986672	1,986672
-1,70	-0,983790	1,983790
-1,65	-0,980376	1,980376
-1,60	-0,976348	1,976348
-1,55	-0,971623	1,971623
-1,50	-0,966105	1,966105
-1,45	-0,959695	1,959695
-1,40	-0,952285	1,952285
-1,35	-0,943762	1,943762
-1,30	-0,934008	1,934008
-1,25	-0,922900	1,922900
-1,20	-0,910314	1,910314
-1,15	-0,896124	1,896124
-1,10	-0,880202	1,880202
-1,05	-0,862436	1,862436
-1,00	-0,842701	1,842701
-0,95	-0,820891	1,820891
-0,90	-0,796908	1,796908
-0,85	-0,770668	1,770668
-0,80	-0,742101	1,742101
-0,75	-0,711156	1,711156
-0,70	-0,677801	1,677801
-0,65	-0,642029	1,642029
-0,60	-0,603856	1,603856

β	$\text{erf}(\beta)$	$\text{erfc}(\beta)$
-0,55	-0,563323	1,563323
-0,50	-0,520500	1,520500
-0,45	-0,475482	1,475482
-0,40	-0,428392	1,428392
-0,35	-0,379382	1,379382
-0,30	-0,328627	1,328627
-0,25	-0,276326	1,276326
-0,20	-0,222703	1,222703
-0,15	-0,167996	1,167996
-0,10	-0,112463	1,112463
-0,05	-0,056372	1,056372
0,00	0,000000	1,000000
0,05	0,056372	0,943628
0,10	0,112463	0,887537
0,15	0,167996	0,832004
0,20	0,222703	0,777297
0,25	0,276326	0,723674
0,30	0,328627	0,671373
0,35	0,379382	0,620618
0,40	0,428392	0,571608
0,45	0,475482	0,524518
0,50	0,520500	0,479500
0,55	0,563323	0,436677
0,595	0,600000	0,400000
0,60	0,603856	0,396144
0,65	0,642029	0,357971
0,70	0,677801	0,322199
0,75	0,711156	0,288844
0,80	0,742101	0,257899
0,85	0,770668	0,229332
0,90	0,796908	0,203092
0,95	0,820891	0,179109
1,00	0,842701	0,157299
1,05	0,862436	0,137564
1,10	0,880205	0,119795
1,15	0,896124	0,103876
1,20	0,910314	0,089686
1,25	0,922900	0,077100
1,30	0,934008	0,065992
1,35	0,943762	0,056238
1,40	0,952282	0,047718
1,45	0,959695	0,040305
1,50	0,966105	0,033895
1,55	0,971623	0,028377
1,60	0,976348	0,023652
1,65	0,980376	0,019624
1,70	0,983790	0,016210
1,75	0,986672	0,013328
1,80	0,989091	0,010909
1,85	0,991111	0,008889
1,90	0,993222	0,006788
1,95	0,994179	0,005821
2,00	0,995322	0,004678
2,05	0,996258	0,003742
2,10	0,997021	0,002979
2,15	0,997639	0,002361
2,20	0,998137	0,001863
2,25	0,998537	0,001463
2,30	0,998857	0,001143
2,35	0,999111	0,000889
2,40	0,999311	0,000689
2,45	0,999469	0,000531
2,50	0,999593	0,000407
2,55	0,999689	0,000311
2,60	0,999764	0,000236
2,65	0,999822	0,000178
2,70	0,999866	0,000134
2,75	0,999899	0,000101
2,80	0,999925	0,000075

β	$\text{erf}(\beta)$	$\text{erfc}(\beta)$
2,85	0,999944	0,000056
2,90	0,999959	0,000041
2,95	0,999970	0,000030
3,00	0,999978	0,000022

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)