

PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E INOVAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL
MESTRADO EM ENGENHARIA AMBIENTAL
MODALIDADE PROFISSIONAL

EXTRAÇÃO DE CONHECIMENTO PARA PREVISÃO DA ECOTOXICIDADE DE FLUIDOS
DE PERFURAÇÃO: UMA APLICAÇÃO DA MINERAÇÃO DE DADOS

LEOMIR SAMUEL TORMEN REIS

MACAÉ-RJ

2023

LEOMIR SAMUEL TORMEN REIS

EXTRAÇÃO DE CONHECIMENTO PARA PREVISÃO DA ECOTOXICIDADE DE FLUIDOS
DE PERFURAÇÃO: UMA APLICAÇÃO DA MINERAÇÃO DE DADOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Fluminense, área de concentração Sustentabilidade Regional, linha de pesquisa Avaliação, Gestão e Conservação Ambiental

Orientador: Dr. Victor Barbosa Saraiva

Coorientadora: Dra. Simone Vasconcelos Silva

MACAÉ-RJ

2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

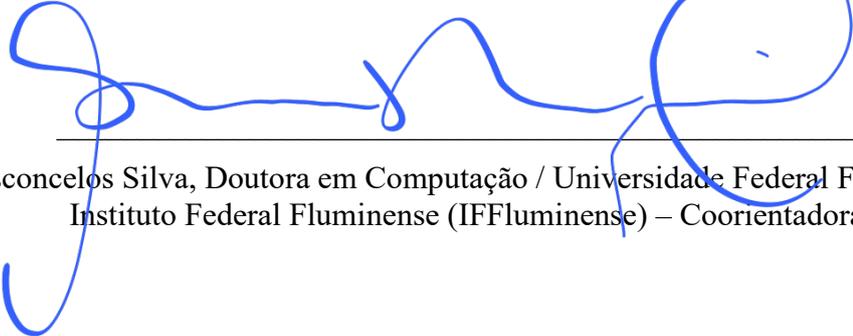
R375e	<p>Reis, Leomir Samuel Tormen, 1988-.</p> <p>Extração de conhecimento para previsão da ecotoxicidade de fluidos de perfuração: uma aplicação da mineração de dados / Leomir Samuel Tormen Reis — Macaé, RJ, 2023.</p> <p>x, 114 f.: il. color.</p> <p>Orientador: Victor Barbosa Saraiva, 1974-.</p> <p>Coorientador: Simone Vasconcelos Silva, 1974-.</p> <p>Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) — Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Fluminense, Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental, Macaé, RJ, 2023.</p> <p>Inclui referências.</p> <p>Área de concentração: Sustentabilidade Regional.</p> <p>Linha de Pesquisa: Avaliação, Gestão e Conservação Ambiental.</p> <p>1. Ecotoxicidade. 2. Ecotoxicologia. 3. Fluidos de perfuração. 4. Mineração de dados. I. Saraiva, Victor Barbosa, 1974-, orient. II. Silva, Simone Vasconcelos, 1974-, coorient. III. Título.</p> <p>CDD 571.95 (23. ed.)</p>
-------	---

Dissertação intitulada **EXTRAÇÃO DE CONHECIMENTO E MINERAÇÃO DE DADOS APLICADOS À PREVISÃO DA ECOTOXICIDADE DE FLUIDOS DE PERFURAÇÃO**, elaborada por **Leomir Samuel Tormen Reis** e apresentada, publicamente perante a Banca Examinadora, como requisito para obtenção do título de Mestre em Engenharia Ambiental pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental do Instituto Federal Fluminense - IFFluminense, na área de concentração Sustentabilidade Regional, linha de pesquisa Avaliação, Gestão e Conservação Ambiental.

Aprovado em: 31/08/2023.

Banca Examinadora:

Victor Barbosa Saraiva, Doutor em Ciências Biológicas / Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Instituto Federal Fluminense (IFFluminense) – Orientador(a)



Simone Vasconcelos Silva, Doutora em Computação / Universidade Federal Fluminense (UFF), Instituto Federal Fluminense (IFFluminense) – Coorientadora

Manildo Marcião de Oliveira, Doutor em Ciências Biológicas / Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ), Instituto Federal Fluminense (IFFluminense)

Marcelo Lisboa Rocha, Doutor em Engenharia Elétrica / Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) e Pós-Doutor em Modelagem Computacional pela Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ), Universidade Federal do Tocantins (UFT)

DEDICATÓRIA

À Elis.

AGRADECIMENTOS

À minha filha Elis, que chegou ao mundo durante esta jornada e mesmo ainda tão pequena, me ensina lições valiosas e me reconecta com o presente, enfatizando aquilo que realmente importa. Amo você.

À minha esposa Lívia pelo exemplo, apoio incondicional, incentivo e amor.

À minha mãe e meus irmãos por estarem sempre próximos, mesmo que fisicamente distantes.

Ao Instituto Federal Fluminense por confiar em mim o potencial desta pesquisa e me proporcionar esta oportunidade de estudo e dedicação ao tema.

Aos meus orientadores Victor e Simone pela contribuição técnica, paciência, apoio, gentileza, motivação e confiança.

À Petrobras por acreditar que a proposta desta pesquisa irá agregar valor e contribuir para a geração de conhecimento.

Aos meus amigos e colegas de trabalho que muito me auxiliaram, direta ou indiretamente, no desenvolvimento deste trabalho.

Muito obrigado.

LISTA DE FIGURAS – ARTIGO CIENTÍFICO 1

Figura 1: Linha do tempo do arcabouço legal a respeito da regulamentação para uso e descarte de fluidos de perfuração utilizados na perfuração de poços marítimos.....	24
--	----

LISTA DE FIGURAS – ARTIGO CIENTÍFICO 2

Figura 1: Desenho esquemático de um ensaio de toxicidade.....	53
Figura 2: Análise dos resultados da busca na literatura.	56
Figura 3: Método PRISMA adaptado (PAGE et. al, 2021). Ecotoxicologia de fluidos de perfuração.	58
Figura 4: Método PRISMA adaptado (PAGE et. al, 2021). Previsão de toxicidade.....	59
Figura 5: Número de relatos por ano de publicação.	61
Figura 6: Mapa esquemático do número de relatos por país.....	62
Figura 7: Relação entre os tipos de teste e a substância testada.	62
Figura 8: Número de relatos por tipo de substância.....	63
Figura 9: Número de relatos por tipo de ensaio ecotoxicológico.	66
Figura 10: Número de relatos por ano.	68
Figura 11: Mapa esquemático do número de relatos por país.....	70
Figura 12: Percentual de técnicas utilizadas em relação ao total de técnicas apresentadas nos estudos.	75
Figura 13: Técnica de Mineração de Dados aplicada a ecotoxicidade de fluidos de perfuração	80

LISTA DE FIGURAS – ARTIGO CIENTÍFICO 3

Figura 1: Representação do método Knowledge Discovery in Databasis de Fayyad, Piatetsky-Shapiro. Smith (1996).....	89
Figura 2: Esquemático das etapas realizadas para a geração da base de dados de ensaios ecotoxicológicos de fluidos de perfuração.	92
Figura 3: Rótulos atribuídos às instâncias para o balanceamento entre as classes relativas ao CL50-96h.....	94
Figura 4: Metodologia para exclusão de instâncias para balanceamento das classes. C1, C2 e C3 correspondem a critério 1, critério 2 e critério 3, respectivamente.	95
Figura 5: KDD aplicado à base de dados ecotoxicológicos de fluidos de perfuração aquosos.	99
Figura 6: Árvore de decisão gerada pelo algoritmo j48 configurado no Caso A. Taxa de acertos: tóxica	

= 67,6%; baixa toxicidade = 51,3%; não tóxica = 56,8%. Parâmetros: instâncias por folha = 2; <i>umpruned (True)</i> ; redução de erro da poda (<i>False</i>) e correção MDL (<i>True</i>).	102
Figura 7: Árvore de decisão gerada pelo algoritmo j48 após a exclusão dos atributos realizada por meio da avaliação das informações extraídas da árvore gerada na Figura 6, com os mesmos parâmetros de configuração do algoritmo (instâncias por folha = 2; <i>umpruned (True)</i> ; redução de erro da poda (<i>False</i>) e correção MDL (<i>True</i>)).	106
Figura 8: Árvore de decisão com os atributos pH, glutaraldeído, glicerina, antiespumante e MgO.	109
Figura 9: Esquemático dos grupos formados. No eixo horizontal: número da instância (corresponde ao número de determinada amostra); no eixo vertical, a classe à qual as amostras pertencem; as cores indicam o grupo gerado pelo algoritmo SimpleKMeans.	111

LISTA DE TABELAS – ARTIGO CIENTÍFICO 1

Tabela 1: Comparativo dos pontos críticos antes e depois da publicação da IN nº 1/2018 apresentados na Informação Técnica 233/2020-COEXP/CGMAC/DILIC, anexa ao Processo nº 48610.006818/2018-11 (BRASIL, 2018d).	40
---	----

LISTA DE TABELAS – ARTIGO CIENTÍFICO 2

Tabela 1: Principais informações dos relatos analisados sobre ecotoxicologia de fluídos de perfuração.	60
Tabela 2: Principais dados dos estudos analisados, contendo as bases de dados e modelos ou algoritmos.	66

LISTA DE TABELAS – ARTIGO CIENTÍFICO 3

Tabela 1: Casos para a configuração do algoritmo j48 e resultados dos modelos de classificação gerados (MCC e número de acerto das classes tóxica, baixa toxicidade e não tóxica).	100
Tabela 2: Matriz de confusão gerada pelo algoritmo j48, no Caso A. Taxa de acertos: tóxica = 67,6%; baixa toxicidade = 51,3%; não tóxica = 56,8%. Parâmetros: instâncias por folha = 2; <i>umpruned (True)</i> ; redução de erro da poda (<i>False</i>) e correção MDL (<i>True</i>).	101
Tabela 3: Atributos, função no fluido, composto químico associado ao componente e informações ecotoxicológicas disponíveis na FISPQ.	102

Tabela 4: Regras de associação geradas pelo algoritmo <i>j48</i> para cada classe. As regras mais relevantes (com maior número de ocorrências) estão destacadas em negrito.....	107
Tabela 5: Grupos obtidos pela utilização do algoritmo <i>SimpleKMeans</i> , com $k = 4$	110
Tabela 6: Número de regras de associação geradas pelo algoritmo <i>Apriori</i> para cada nível de confiança e classe de toxicidade encontrada. Parâmetros: <i>car = True; lowerBoundMinSupport = 0,1; metricType = Confidence; numRules = 250</i>	114
Tabela 7: Principais regras de associação geradas pelo algoritmo <i>Apriori</i> e nível de confiança (Parâmetros: <i>car = True; lowerBoundMinSupport = 0,1; metricType = Confidence; numRules = 250</i>)	116
Tabela 8: Regras geradas pelo algoritmo <i>Apriori</i> e nível de confiança (Parâmetros: <i>car = True; lowerBoundMinSupport = 0,1; metricType = Confidence; numRules = 10</i>)	116

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AGU – Advocacia Geral da União

ANN – *Artificial Neural Network*

ANP – Agência Nacional do Petróleo

CL50-96h – Concentração Letal após 96 horas

CONAMA – Conselho Nacional do Meio Ambiente

DNN – *Deep Neural Network*

DT – *Decision Tree*

FPS – Fração particulada suspensa

MCC – Coeficiente de Correlação de Mathews

IBAMA – Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis

KDD – *Knowledge Discovery in Databasis*

FISPQ – Ficha de Informações de Segurança de Produtos Químicos

kNN – *k-Neares Neighbors*

PNMA – Política Nacional do Meio Ambiente

PNRS – Política Nacional dos Resíduos Sólidos

QSAR – *Quantitative Structure-Activity Relationship*

QSP – Quantidade Suficiente Para

RF – *Random Forest*

SAR - *Structure-Activity Relationship*

SISNAMA – Sistema Nacional do Meio Ambiente

SVM – *Support Vector Machine*

EXTRAÇÃO DE CONHECIMENTO E MINERAÇÃO DE DADOS APLICADOS À PREVISÃO DA ECOTOXICIDADE DE FLUIDOS DE PERFURAÇÃO

RESUMO

Os fluidos aquosos utilizados na perfuração de poços de óleo e gás, em determinados casos e atendendo a critérios estabelecidos na legislação ambiental brasileira, podem ser descartados no mar após o uso. A ecotoxicidade aguda é um destes critérios e deve ser reportada ao órgão ambiental compondo o monitoramento ambiental da atividade de perfuração. Contudo, a ecotoxicidade é determinada em laboratório em momento posterior ao descarte do fluido no mar, na locação da perfuração. Esta dissertação encontra justificativa diretamente neste fato, uma vez que o fluido pode ter sido descartado antes da determinação de sua ecotoxicidade. O objetivo desta dissertação é encontrar padrões em uma base de dados de ensaios de ecotoxicidade aguda em coluna d'água de fluidos de perfuração aquosos para descobrir informações úteis e gerar conhecimento por meio delas, utilizando-se tarefas de mineração de dados. Para tanto, inicialmente foi levantado o estado legislativo atual no que diz respeito às condições ecotoxicológicas para descarte de fluidos aquosos no mar. Foi elaborada uma revisão sistemática da literatura na qual foram elucidados estudos a respeito do comportamento ecotoxicológico de fluidos de perfuração, utilizando-se mineração de dados. Por fim, foi realizada uma análise exploratória de dados em uma base de dados de ecotoxicidade de fluidos de perfuração real. Concluiu-se que a legislação traz a ecotoxicidade como um dos parâmetros a serem avaliados para balizar a possibilidade de descarte dos fluidos de perfuração aquosos após o uso e que o critério atual é o mais protetivo ao qual o ambiente marinho já foi submetido nesta atividade. Além disto, foi possível verificar que a literatura documenta estudos relacionados à previsão do comportamento toxicológico de substâncias químicas, bem como estudos ecotoxicológicos de fluidos de perfuração, mas pouco trata do estudo preditivo da ecotoxicologia de fluidos de perfuração. Por fim, foi possível determinar, por meio de mineração de dados (com as tarefas de classificação, agrupamento e associação), que o glutaraldeído é principal componente relacionado à toxicidade dos fluidos, além de que a conservação da amostra de fluido é determinante na manutenção das propriedades originais, o que influencia diretamente em sua toxicidade.

Palavras-chave: Ecotoxicidade. Fluidos de perfuração. Ecotoxicologia. Mineração de dados. Análise de dados.

**KNOWLEDGE DISCOVERY AND DATA MINING APPLIED TO ECOTOXICITY
PREDICTION OF DRILLING FLUIDS**

ABSTRACT

The aqueous drilling fluids used in offshore drilling of oil and gas wells, in some cases and obeying to several requirements settled down in the Brazilian environmental legislation, can be dump on the sea after their use. The acute ecotoxicity is one of these requirements and must be reported to the environmental agency to ensure the environmental monitoring of offshore drilling. However, the ecotoxicity test is made in the laboratory after the disposal of the fluid on the sea, at the drilling location. This document finds relevancy in this fact, due to the drilling fluid could be disposed of before the conclusion of the ecotoxicity teste. The aim of this study is to find patterns in an ecotoxicity tests database of aqueous drilling fluids to discover useful information and create knowledge by them, using data mining techniques. To achieve this goal, at first, it was obtained the current legislation about the ecotoxicological conditions to disposal of aqueous drilling fluids on the sea. Then, a systematic review was carried out to know and assess the studies about the ecotoxicological behavior of drilling fluids, by data mining. Lastly, an exploratory data analysis in a real database was made. The conclusions obtained are that the Brazilian legislation brings the ecotoxicity as one of the requirements that must be evaluated to determine the possibility of disposal of the aqueous drilling fluids after use and the current protection state is the most protective one ever experimented by the environment impacted for drilling activities. Besides this, it was possible to see that literature documents studies related to the prediction of toxicologic behavior of chemicals, as well as studies related to ecotoxicological behavior of drilling fluids, but there were no studies about the prediction of drilling fluids ecotoxicity. At last, it was possible to determine, by data mining (with classify, cluster and association algorithms) that the glutaraldehyde is the principal component of the drilling fluids related to their ecotoxicity, moreover the conservation of the fluid sample is crucial in maintaining their original properties, which directly influences its toxicity.

Keywords: *Drilling fluids. Ecotoxicology. Data mining. Data analysis.*

SUMÁRIO

APRESENTAÇÃO	15
ARTIGO CIENTÍFICO 1	19
A BUSCA DA SUSTENTABILIDADE NA LEGISLAÇÃO BRASILEIRA REFERENTE AO USO E DESCARTE DE FLUIDOS DE PERFURAÇÃO E O PRINCÍPIO DA PROIBIÇÃO DO RETRO- CESSO AMBIENTAL	19
1. INTRODUÇÃO	21
2. HISTÓRICO DA LEGISLAÇÃO AMBIENTAL NAS ATIVIDADES DE PERFURAÇÃO DE PO- ÇOS MARÍTIMOS NO BRASIL	26
2.1. Período anterior a 1981	26
2.2. Período compreendido entre 1981 e 1999	26
2.3. Período compreendido entre 2000 e 2010	29
2.4. Período posterior a 2011	31
3. O PRINCÍPIO DA PROIBIÇÃO DE RETROCESSO AMBIENTAL	33
4. A SUSPENSÃO DA INSTRUÇÃO NORMATIVA nº 1/2018 E O PRINCÍPIO DA PROIBIÇÃO DO RETROCESSO AMBIENTAL	38
5. CONCLUSÃO	43
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	45
ARTIGO CIENTÍFICO 2	50
MINERAÇÃO DE DADOS E PREVISÃO DA ECOTOXICIDADE DE FLUIDOS DE PERFURA- ÇÃO – UMA REVISÃO SISTEMÁTICA	50
1. INTRODUÇÃO	52
2. MATERIAL E MÉTODO	55
2.1. Ecotoxicologia de fluidos de perfuração.....	56
2.2. Previsão de toxicidade	57
3. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	60
3.1. Ecotoxicologia de fluidos de perfuração.....	60
3.2. Previsão de toxicidade	66
3.2.1. Pré-processamento e padronização dos dados	72
3.2.2. Codificação dos compostos químicos.....	73
3.2.3. Modelagem, avaliação e calibração do modelo	74
3.2.3.1. SVM – <i>Support Vector Machine</i>	76

3.2.3.2. RF – <i>Random Forest</i>	76
3.2.4. SVM – Determinação do domínio de aplicabilidade do modelo	77
4. DISCUSSÃO	78
5. CONCLUSÃO	81
5.1. Agenda de trabalhos futuros.....	81
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	82
ARTIGO CIENTÍFICO 3	85
MINERAÇÃO DE DADOS APLICADA À ECOTOXICOLOGIA DE FLUIDOS DE PERFURAÇÃO	85
1. INTRODUÇÃO	87
1.1. Mineração de Dados	88
2. MATERIAL E MÉTODO	90
2.1. Preparação da base de dados.....	91
2.2. Aplicação do KDD.....	93
2.2.1. Seleção	93
2.2.2. Pré-processamento e Transformação	96
2.2.3. Mineração de dados	97
2.2.4. Interpretação e Avaliação	97
3. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	99
3.1. Classificação	99
3.2. Agrupamento.....	109
3.3. Associação.....	113
3.4. Considerações a respeito da base de dados e dos resultados encontrados nas tarefas de mineração de dados	117
5. CONCLUSÃO	119
5.1. Limitações deste trabalho	120
5.2. Perspectivas para Pesquisas Futuras	120
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	121
CONCLUSÃO	124

APRESENTAÇÃO

Na perfuração de poços marítimos de petróleo e gás, são utilizados fluidos de perfuração, que podem ser de base aquosa ou não aquosa (GRAY; DARLEY; CAENN, 2016). Estes fluidos possuem diversas funções adequadas à necessidade operacional.

Uma composição típica de um fluido de perfuração contém produtos químicos (componentes) com funções específicas, a depender da base (aquosa ou não aquosa). Para um fluido de base aquosa, os principais componentes são: água, viscosificantes (polímeros), sais (NaCl ou outros), adensante (baritina – minério de sulfato de bário), redutores de filtrado (carbonato de cálcio ou outros), bactericidas, controladores de pH (óxido de magnésio, hidróxido de sódio) e inibidores do inchamento de argilas (polímeros, KCl, entre outros). Para um fluido base não aquosa, tem-se: fluido base (parafina, olefina, éster ou outros), salmoura (NaCl, CaCl₂ ou outras), emulsificantes, adensantes e redutores de filtrado (BAKER HUEGUES, 2016).

A legislação ambiental que regulamenta a utilização de fluidos de perfuração e complementares, bem como o descarte e destinação de resíduos, é ditada pelo IBAMA (Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis) no Despacho N° 5540547/2019 (BRASIL, 2019). Há, portanto, diversos critérios para uso e descarte de fluidos de perfuração, que devem ser obedecidos e reportados ao órgão ambiental. Dentre eles, está a ecotoxicidade aguda em coluna d'água, que deve ser determinada por meio dos procedimentos descritos nas normas NBR 15308 (ABNT, 2017) e NBR 15469 (ABNT, 2015).

De acordo com a NBR 15308 (ABNT, 2017), podem ser utilizados os organismos testes das espécies *Mysidopsis juniae* e *Mysidopsis gracile*. Estes organismos são expostos a diluições da amostra de fluido de perfuração e é observado o efeito de letalidade comparado a um controle, sob as mesmas condições de ensaio, durante um tempo de 96 ± 2 horas. Ao final do ensaio, é calculada a porcentagem de letalidade para cada concentração e determinada a concentração letal (CL) da amostra na qual há mortalidade de 50% dos organismos (CL50) decorridas 96 horas de teste (CL50-96h). O resultado em conformidade com as diretrizes descritas no Despacho N° 5540547/2019 (BRASIL, 2019), corresponde uma concentração de amostra, chamada de fração particulada suspensa (FPS), maior ou igual a 30.000 ppm. Desta forma, amostras de fluidos que apresentem CL50-96h maiores ou iguais a 30.000 ppm da FPS, são consideradas não tóxicas e, caso contrário, tóxicas aos organismos teste.

A ecotoxicidade dos fluidos, portanto, está diretamente relacionada à sua composição química, sendo que cada um de seus componentes pode influenciar de diferentes formas na ecotoxicidade da mistura (fluido de perfuração).

Para atender aos requisitos ambientais e agregar segurança e rastreabilidade ao monitoramento ambiental da atividade de construção de poços marítimos, amostras dos fluidos de perfuração são enviadas a laboratórios externos às operadoras para a realização do teste de ecotoxicidade, além de outros ensaios relevantes e necessários para atendimento às condicionantes ambientais. Entretanto, estes testes são realizados após a utilização e/ou descarte do fluido no mar após o uso, e, em caso de reprovação, são aplicadas sanções às operadoras, uma vez que o descarte já foi realizado.

Portanto, o conhecimento a respeito da ecotoxicidade dos fluidos de perfuração é importante não só para as operadoras que utilizam os fluidos e estão sujeitas à regulação de descarte, mas também aos fabricantes e produtos químicos utilizados e principalmente ao órgão ambiental fiscalizador.

Considerando que a ecotoxicidade é um dos critérios para descarte de fluidos de perfuração, faz-se necessário o estudo e a compreensão da influência da composição e propriedades destes fluidos em sua ecotoxicidade, evitando que sejam utilizados fluidos que não atendam aos critérios ecotoxicológicos para descarte no mar.

Os resultados dos testes de ecotoxicidade são reportados ao IBAMA. O relatório informa não somente o resultado do teste propriamente dito, mas também propriedades físico-químicas e a concentração de cada componente utilizados no fluido de perfuração, além de dados referentes aos poços nos quais os fluidos foram utilizados. Este conjunto de dados pode ser utilizado para a avaliação do comportamento ecotoxicológico dos fluidos de perfuração.

Devido a diversidade de produtos químicos utilizados como componentes dos fluidos de perfuração, a interação entre eles e as propriedades resultantes da composição da mistura, a descoberta de informações úteis acerca dos padrões contidos nestes dados demanda uma análise complexa.

Para evidenciar padrões presentes nos dados e que corroborem com a geração de conhecimento pode-se realizar uma análise exploratória dos dados de forma a extrair padrões contidos neles e interpretá-los, gerando informações úteis que podem ser utilizadas, por exemplo, para tomada de decisão.

A mineração de dados (*data mining*) permite a realização desta análise exploratória. Por meio de tarefas específicas utilizando algoritmos de aprendizado de máquina (*machine learning*) pode ser possível o reconhecimento de padrões ecotoxicológicos relacionados à composição dos fluidos de perfuração e suas propriedades. Para tanto, necessita-se dispor de uma base de dados que contenha os resultados dos testes de ecotoxicidade, associados às propriedades físico-químicas e às concentrações de cada um dos componentes do fluido analisado.

O objetivo geral deste estudo é encontrar padrões em uma base de dados de ensaios de ecotoxicidade aguda em coluna d'água de fluidos de perfuração aquosos para descobrir informações úteis e gerar conhecimento por meio delas, utilizando-se tarefas de mineração de dados.

Os objetivos específicos são:

- Elucidar, à luz da legislação ambiental brasileira, a evolução das normativas relacionadas ao descarte de fluidos de perfuração no mar, para verificar o estado legislativo atual em relação à ecotoxicidade destes fluidos;
- Realizar uma revisão sistemática da literatura para investigar estudos relacionados à previsão da ecotoxicidade de fluidos de perfuração e as técnicas computacionais mais amplamente utilizadas para realizar esta previsão e
- Realizar uma análise exploratória dos dados utilizando tarefas de mineração de dados (classificação, agrupamento e associação) para encontrar padrões passíveis de interpretação e gerar conhecimento por meio deles.

São, portanto, apresentados três artigos científicos produzidos com esta temática, conforme se segue.

- Artigo Científico 1:

O primeiro artigo científico apresentado a seguir traz um apanhado a respeito do arcabouço legal e regulamentação das operações de construção de poços envolvendo o descarte dos fluidos de perfuração no mar. Na linha do tempo da evolução deste arcabouço, o artigo busca, no âmbito do Direito Ambiental, avaliar a ocorrência de retrocesso ambiental no processo de suspensão da Instrução Normativa nº 1/2018 do IBAMA (BRASIL, 2018), por meio de análise documental das Leis e Decretos ao longo desta linha do tempo, observando-se a busca pela sustentabilidade, bem como as decisões dos órgãos competentes no que diz respeito à análise dos motivos que geraram a suspensão em questão.

Foi possível observar, além da evolução referente à busca constante de um estado ambiental mais protetivo, os motivos pelos quais a Instrução Normativa nº 1/2018 (BRASIL, 2018) foi suspensa e as alternativas que surgiram para a manutenção do estado de proteção ao ambiente em vigor no momento da suspensão.

- Artigo Científico 2:

O segundo artigo consiste em uma revisão sistemática da literatura com o objetivo de analisar e investigar estudos que tratam da utilização de análises de dados para extração de conhecimento utilizando-se bases de dados ecotoxicológicas, seja para a geração de informações e conhecimento ou para a previsão da ecotoxicidade de fluidos de perfuração.

Observou-se que muitos estudos utilizam análise de dados para a previsão de toxicidade (campo conhecido como toxicologia computacional ou toxicologia *in silico*), porém não havia, até o momento da realização da pesquisa, estudos que utilizassem bases de dados ecotoxicológicas de fluidos de perfuração. Contudo, foi possível verificar que a mineração de dados pode ser aplicada no cenário dos fluidos de perfuração para a extração de conhecimento e foram elucidadas quais as tarefas de mineração e algoritmos de aprendizado de máquina são mais amplamente utilizadas no campo da toxicologia computacional.

- Artigo Científico 3:

Por fim, o último artigo trata da aplicação da análise de dados para a extração de conhecimento em uma base de dados ecotoxicológicos de fluidos de perfuração real.

Foi possível verificar que existem padrões nos dados, além de determiná-los por meio de tarefas de mineração de dados de classificação, agrupamento e associação, interpretá-los de forma a gerar conhecimento a respeito da ecotoxicidade dos fluidos de perfuração em relação aos seus componentes e propriedades físico-químicas.

ARTIGO CIENTÍFICO 1

A BUSCA DA SUSTENTABILIDADE NA LEGISLAÇÃO BRASILEIRA REFERENTE AO USO E DESCARTE DE FLUIDOS DE PERFURAÇÃO E O PRINCÍPIO DA PROIBIÇÃO DO RETROCESSO AMBIENTAL

THE SEARCH OF SUSTAINABILITY IN THE BRAZILIAN LEGISLATION ABOUT USE AND DISPOSAL OF DRILLING FLUIDS AND THE ENVIRONMENTAL THROWBACK PRINCIPLE

Leomir Samuel Tormen Reis - IFFluminense/PPEA

Augusto Eduardo Miranda Pinto - IFFluminense/PPEA

Victor Barbosa Saraiva – IFFluminense/PPEA

Simone Vasconcelos Silva – IFFluminense/SAEG

RESUMO

A legislação brasileira referente ao uso e descarte de fluidos de perfuração de poços marítimos foi construída visando o aumento contínuo à proteção ambiental. Em 2018, foi publicada a Instrução Normativa nº 1/2018 (IN nº 1/2018) pelo Instituto do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis (IBAMA) instituindo novas práticas a serem adotada pelas operadoras. Contudo, a IN nº1/2018 foi suspensa em 2019, por divergências jurídicas apontadas pela Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP). Esta suspensão ocasionou a retomada das normas anteriores à publicação da IN nº 1/2018. Neste sentido, o Princípio da Proibição do Retrocesso Ambiental (PPRA), foi utilizado como base para a análise da avaliação da ocorrência de retrocesso, após a suspensão da IN nº 1/2018. O objetivo deste artigo é apresentar a evolução da legislação referente ao uso e descarte de fluidos de perfuração, quanto à ocorrência de retrocesso nos princípios constitucionais de proteção ao meio ambiente e suas consequências. Para tanto, foram analisados: Leis, Decretos, Resoluções, Notas Técnicas, Instruções Normativas, atos administrativos e jurisprudência, avaliando a natureza da suspensão IN nº1/2018 e os aspectos jurídicos e sociais quanto a aplicabilidade da mesma, concluindo pela manutenção das condições atuais de proteção ao ecossistema marinho.

Palavras-chave: fluidos de perfuração; perfuração marítima; retrocesso ambiental; sustentabilidade ambiental, proteção ambiental.

ABSTRACT

The Brazilian legislation about the use and disposal of drilling fluids in offshore drilling operations was built to achieve the raise of the environmental protection. In 2018, was published the Normative Instruction 1/2018 (NI 1/2018) by the Environmental and Natural Renewable Resources Institute (IBAMA) that established new guidelines to be followed by the companies. However, the NI 1/2018 was suspended in 2019, because of legal differences pointed by the National Agency of Oil, Gas and Biofuels (ANP) to the IBAMA. So, in that sense, the Environmental Throwback Principle (ETP) was used as a basis to assess whether there was a throwback or not, after the suspension of the NI 1/2018. The aim of this article is to introduce the evolution of Brazilian legislation about use and disposal of drilling fluids, evaluating, if there was a setback based in the constitutional principles of environmental protection and their consequences. To achieve this goal, it was considered: Laws, Decrees, Resolutions, Technical Notes, Normative Instructions, Administrative Acts and Jurisprudence about this matter, analyzing the nature of the NI 1/2018 suspension and the legal and social aspects about the applicability of this NI, concluding that the current conditions of environmental protection to the marine ecosystem was maintained.

Keywords: *Standstill principle. Drilling fluids. Environmental setback. Environmental Sustainability. Environmental protection. Maritime drilling.*

1. INTRODUÇÃO

As diretrizes para o licenciamento ambiental brasileiro no que diz respeito à perfuração de poços marítimos de óleo e gás foram construídas ao longo de muitos anos e ainda existem tratativas de aumento do controle e, conseqüentemente, da proteção ao meio ambiente em relação aos impactos desta atividade. Mais especificamente, o monitoramento ambiental da atividade de perfuração de poços marítimos em relação aos fluidos de perfuração utilizados nesta, bem como a geração, o descarte e a destinação de resíduos associados a estes fluidos já vinham evoluindo nos últimos anos (SCHAFFEL, 2002).

Contudo, essa regulação ainda é alvo de estudos que visam avaliar se a aplicação do modelo atual é tão benéfica quanto se pretendia ou mesmo outros que objetivam ampliar as restrições às operadoras buscando uma maior proteção ao meio ambiente, observando o nível de tecnologia atual e em desenvolvimento.

De uma forma geral, desde 1981 por meio da Lei nº 6938 (BRASIL, 1981) que trata sobre a Política Nacional do Meio Ambiente (PNMA), na qual foi instituído o licenciamento ambiental, desdobraram-se diversas medidas para a sua aplicação e o escopo do licenciamento foi sendo ampliado na tentativa de mitigação do impacto ambiental relacionado à implantação dos mais diversos tipos de empreendimentos potencialmente poluidores. O órgão normativo que trata deste assunto é o Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA). Este órgão é responsável por emitir as resoluções que façam com que a Lei nº 6938/1981 (BRASIL, 1981) seja cumprida.

Por meio da Resolução CONAMA nº 23, de 1994 (BRASIL, 1994), foram instituídos procedimentos específicos para o licenciamento ambiental das atividades relacionadas à exploração e produção de óleo e gás no Brasil, incluindo a perfuração de poços e produção para pesquisa sobre viabilidade econômica e produção para fins comerciais.

Outro marco importante desta época foi a promulgação da Emenda Constitucional nº 9 (BRASIL, 1995) em novembro de 1995. Por meio desta emenda, tornou-se possível que o mercado do petróleo brasileiro pudesse ser explorado não somente pela Petrobras, mas também por qualquer outra empresa nacional ou estrangeira. Este mercado inclui todas as atividades relacionadas ao setor do petróleo, e concede às empresas que assim desejem, o direito de explorar, produzir, refinar e transportar petróleo e derivados no país.

A regulamentação da Emenda Constitucional nº 9/1995 (BRASIL, 1995) foi estabelecida por meio da Lei nº 9478 / 1997 (BRASIL, 1997a) conhecida informalmente como “Lei do Petróleo”, que versa sobre a política energética nacional e as atividades relativas ao monopólio do petróleo e, além disto, institui o Conselho Nacional de Política Energética e cria a Agência Nacional do Petróleo (ANP).

Ainda em 1997, o CONAMA vislumbrou a necessidade de rever os procedimentos e critérios utilizados no licenciamento ambiental tornando-o mais robusto, de forma a possibilitar a aplicação do sistema de licenciamento como ferramenta de gestão ambiental. Assim, a Resolução nº 237/1997 (BRASIL, 1997b) apresenta as etapas do procedimento de licenciamento ambiental, prevendo audiências públicas, quando for o caso, de acordo com a regulamentação pertinente e com a PNMA (Lei nº 6938/1981).

A primeira lei que se referiu de forma direta à descarga de resíduos sólidos das operações de perfuração de poços de petróleo em ambiente offshore foi a Lei nº 9966 de 28 de abril de 2000 (BRASIL, 2000) que versa sobre a prevenção, controle e fiscalização da poluição causada por lançamento de óleo ou outras substâncias nocivas ou perigosas em águas sob jurisdição nacional.

Em 2010, foi instituída por meio da Lei nº 12.305 de 02 de agosto (BRASIL, 2010), a Política Nacional de Resíduos Sólidos (PNRS) que trouxe a regulamentação para o descarte, transporte e destinação de diversos tipos de resíduos. Esta lei não menciona especificamente os resíduos gerados na operação de perfuração de poços, porém tem seu entendimento extrapolado para que estes não sejam descartados ou destinados indevidamente.

A partir de então, não foram emitidas novas leis que alterassem ou instituísem novas medidas regulatórias no que diz respeito aos fluidos utilizados na perfuração de poços. Entretanto o órgão ambiental competente a este assunto, o Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis (IBAMA) publicou uma série de Notas Técnicas e Instruções Normativas com base nas diversas leis citadas anteriormente.

A partir do estabelecimento dos Termos de Ajustamento de Conduta (TAC) do licenciamento da atividade de exploração e produção de petróleo e gás natural, os procedimentos adotados para a aprovação do uso e do descarte de fluidos de perfuração e cascalhos baseavam-se em avaliação prévia. Ou seja, as características físico-químicas e ecotoxicológicas destes fluidos eram apresentadas previamente ao órgão ambiental e a permissão de utilização e descarte era avaliada (SCHAFFEL, 2002).

As operadoras deveriam utilizar apenas os fluidos aprovados e descartar ou destiná-los de acordo com a forma acordada previamente no Termo de Referência (TR) do TAC. Esta forma, inclusive, poderia ser diferente para cada licença de uma mesma operadora ou entre operadoras diferentes, pois era analisada individualmente (SCHAFFEL, 2002).

Em janeiro de 2018, foi publicada pelo IBAMA a Instrução Normativa nº 1 (BRASIL, 2018a) que alterou de forma considerável os requisitos para utilização e descarte de fluidos de perfuração. Esta Instrução previa algumas práticas já adotadas em algumas licenças de operação (LOs), que desatrelavam a concessão das licenças à aprovação prévia do fluido de perfuração. Assim, antes da

entrada em vigor da Instrução Normativa nº 1/2018, não havia regulamentação específica unificada para o uso e descarte de fluidos de perfuração que abrangesse todas as LOs emitidas. Anteriormente, os fluidos eram previamente aprovados em Processo Administrativo específico, e estabelecidos nos Termos de Referências (TRs) das licenças de operação.

Em fevereiro do mesmo ano (2018), o IBAMA publicou a Instrução Normativa nº 8/2018 (BRASIL, 2018b) que prorrogou os efeitos da Instrução Normativa nº 1/2018 para 30 de junho do ano corrente. Alcançada esta data, foi publicada a Instrução Normativa Nº 16/2018 (BRASIL, 2018c) que revogou alguns itens exigidos na Instrução Normativa Nº 1/2018 (IN nº 1/2018) para atividades que já estavam em andamento, ou seja, já possuíam suas licenças de operação, até 30 de setembro de 2019.

Por fim, em março de 2019, a Instrução Normativa 11/2019 (BRASIL, 2019a) do IBAMA suspendeu o início da vigência da Instrução Normativa nº 1/2018 (revisada pela Instrução Normativa nº 8/2018) até que ocorresse uma manifestação definitiva da Advocacia Geral da União (AGU) para a resolução de uma divergência jurídica entre os órgãos de assessoramento do próprio IBAMA e da ANP.

Esta divergência reside na instituição do chamado “descarte zero” pela IN nº 1/2018, com base na Política Nacional de Resíduos Sólidos (Lei nº 12.305/2010) que proíbe a destinação ou disposição final de resíduos sólidos ou rejeitos em praias, no mar ou quaisquer corpos hídricos (BRASIL, 2010).

Contudo, a ANP, por meio do processo 48610.006818/2018-11 junto ao IBAMA (BRASIL, 2018d) argumenta que a PNRS não expressa explicitamente as operações de perfuração de poços de petróleo e que esta temática deve ser regida pela Lei nº 9966/2000, que não impõe tal restrição. Em resposta a este processo, a AGU confirmou, por meio do parecer nº 00007/2019/DEPCONSU/PGF/AGU, anexo ao processo 48610.006818/2018-11 (BRASIL, 2018d), que fica conferida ao IBAMA a opção de instaurar ou não o “descarte zero”, contudo não é obrigado a fazê-lo de acordo com o exposto na Lei nº 12.305/2010.

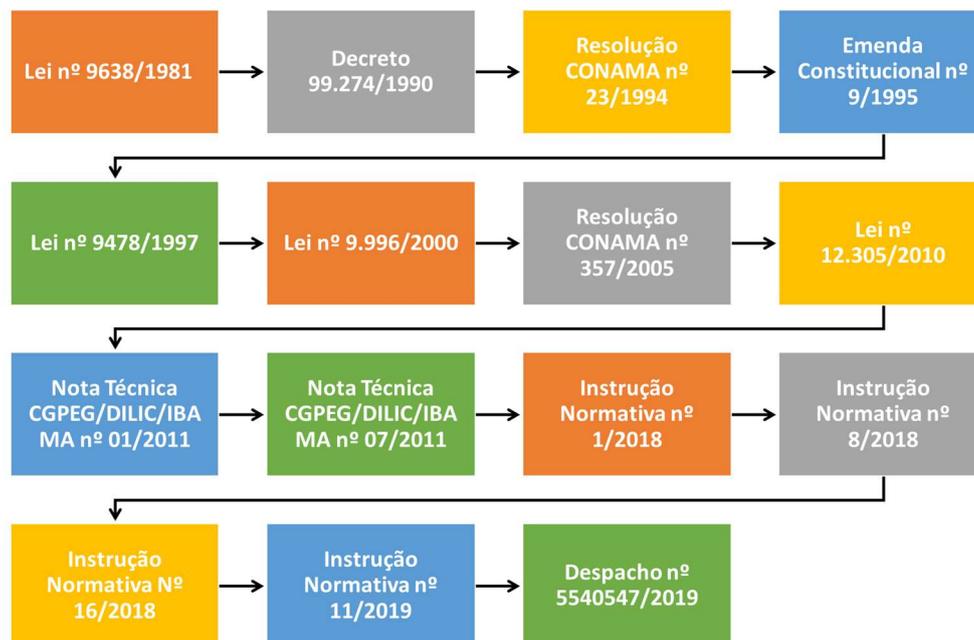
Assim, está pendente a publicação da revisão da Instrução Normativa nº 1/2018 e para que não ocorresse vácuo regulatório, o IBAMA instituiu as:

Diretrizes para o uso e descarte de fluidos de perfuração e cascalhos, fluidos complementares e pastas de cimento nos processos de licenciamento ambiental dos empreendimentos de perfuração marítima de poços de exploração e produção de petróleo e gás nas atividades de perfuração marítima de poços e produção de petróleo o gás. (BRASIL, 2019b).

Estas diretrizes são muito próximas ao texto da Instrução Normativa nº 1/2018, porém sem a instauração do ‘descarte zero’ e de outros pontos também questionados ao IBAMA pela ANP no processo 48610.006818/2018-11.

A Figura 1 apresenta uma linha do tempo da história da legislação ambiental brasileira no que se refere à perfuração de poços, com ênfase nos fluidos de perfuração.

Figura 1: Linha do tempo do arcabouço legal a respeito da regulamentação para uso e descarte de fluidos de perfuração utilizados na perfuração de poços marítimos.



Fonte: própria (autores).

Observando-se a construção do arcabouço legal que culminou na publicação da IN nº 1/2018, percebe-se a busca crescente pela proteção ambiental na regulamentação efetiva das atividades de perfuração marítimas, sobretudo no que se refere ao uso e descarte de fluidos de perfuração, além de outros fatores. Contudo, após a suspensão da IN nº 1/2018, mais restritiva que as diretrizes licenciadas nas Licenças de Operação (LOs) emitidas até então, nota-se um retorno a um estado legislativo prévio, ou seja, a suspensão da IN nº 1/2018 tornou menos restritivas as diretrizes para uso e descarte de fluidos de perfuração.

Neste sentido, pode-se observar o entendimento apresentado por Barcellos (2002) a respeito da vedação (ou proibição) do retrocesso, mais especificamente detalhando o retrocesso social. Para a autora:

A vedação do retrocesso desenvolveu-se especialmente tendo em conta os princípios constitucionais e, em particular, aqueles que estabelecem fins materiais relacionados aos direitos fundamentais, para cuja consecução é necessária a edição de normas infraconstitucionais. Consciente de que estas normas infraconstitucionais é que formarão o caminho capaz de levar ao fim pretendido, o propósito da vedação é evitar que o legislador vá tirando as tábuas e destrua o caminho porventura já existente, sem criar alternativa que conduza ao objetivo em questão. (BARCELLOS, 2002, p. 80-81).

Nota-se, portanto, que as normas infraconstitucionais garantidoras de direitos sociais, uma vez colocadas, não devem retroceder a um estado anterior no qual menos direitos eram garantidos, ou seja, deve-se vedar ao legislador o poder de alterar o estado legislativo de forma a desfazer conquistas

sociais então já estabelecidas. Da mesma forma, Barroso (2003, p. 158-159) explica que o princípio da vedação ou proibição do retrocesso social é um princípio implícito e consequência do sistema jurídico constitucional, implicando que, se uma norma se estabelecer como mandamento constitucional e conceder direitos sociais, estes passam a fazer parte do patrimônio da cidadania e, conseqüentemente, é vedada a sua supressão.

Então, ampliando o entendimento do princípio da proibição do retrocesso social e extrapolando-o à temática ambiental, e entendendo que um retrocesso ambiental pode ser também considerado retrocesso social, Vilani (2013) estudou os riscos de retrocesso ambiental atrelados ao desenvolvimento sustentável e apontou que muitas vezes em uma busca imediatista pela sustentabilidade, o próprio Estado por meio de políticas públicas pode acabar por calcar-se pela preponderância de aspectos econômicos de curtíssimo prazo, aumentando o risco de retrocesso ambiental. Tal risco consiste em uma das ameaças à proibição do retrocesso ambiental, que serão abordadas adiante.

A regressão, ou o retrocesso ambiental, foram colocados na Conferência da Organização das Nações Unidas sobre o Desenvolvimento Sustentável como condição para o desenvolvimento sustentável. Assim, diversos países buscaram adaptar o seu sistema jurídico no âmbito do Direito Ambiental. No Brasil, foi adotado o termo Princípio da Proibição do Retrocesso Ambiental (BRASIL, 2012). Este é considerado por Brasil (2012) mais um Princípio do Direito Ambiental, pois não se trata de uma cláusula simples, tendo em vista que objetiva salvaguardar os progressos obtidos no passado para evitar ou limitar a deterioração do ambiente (PRIEUR, 2012).

Com o exposto, o objetivo deste artigo é apresentar a evolução da legislação ambiental a respeito do uso e descarte de fluidos de perfuração nas atividades de perfuração de poços marítimos ao longo dos anos, e que culminou na publicação da IN nº 1/2018, bem como analisar, à luz do princípio da proibição do retrocesso ambiental, a suspensão desta Instrução Normativa, visando a avaliação da ocorrência ou não de retrocesso ambiental.

Para tanto, o artigo está dividido em três partes. Na primeira, apresenta-se o histórico do arcabouço legal ao longo dos anos, no sentido da evolução das normas e diretrizes na busca da proteção ambiental até a publicação da IN nº 1/2018. A segunda, trata-se de um apanhado geral do princípio da proibição do retrocesso ambiental para servir de base para a terceira parte que visa a avaliação da configuração ou não de retrocesso ambiental na suspensão da IN nº 1/2018.

2. HISTÓRICO DA LEGISLAÇÃO AMBIENTAL NAS ATIVIDADES DE PERFURAÇÃO DE POÇOS MARÍTIMOS NO BRASIL

2.1. Período anterior a 1981

Como foi exposto na introdução deste artigo, até a entrada em vigor da Lei nº 6938/1981 não estava previsto o licenciamento ambiental no Brasil para atividades potencialmente poluidoras. Essa lei, portanto, trata da instauração da Política Nacional do Meio Ambiente (PNMA), seus fins e mecanismos de formulação e aplicação. Ela institui o Sistema Nacional do Meio Ambiente (SISNAMA) e cria o Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA) (BRASIL, 1981).

O principal objetivo da PNMA (Lei nº 6938/1981) é a preservação, melhoria e recuperação da qualidade ambiental propícia à vida, visando assegurar condições ao desenvolvimento socioeconômico, aos interesses da segurança nacional e à proteção da dignidade da vida humana. Para tanto, foram instituídos diversos instrumentos, dentre eles o licenciamento e a revisão de atividades efetiva ou potencialmente poluidoras. Ficou declarado que a construção, instalação, ampliação e funcionamento de estabelecimentos e atividades utilizadoras de recursos ambientais dependerão de um licenciamento prévio, caracterizado pelas licenças prévias, de instalação e de operação, por meio do órgão estadual competente e integrante do SISNAMA (BRASIL, 1981).

A Lei nº 6938/1981 (PNMA) não citava, inicialmente, especificamente as atividades potencialmente poluidoras (elas foram indicadas mais tarde pela Lei nº 10.165/2000). Contudo é consenso que a exploração e produção de petróleo são objetos da PNMA, tendo em vista que está explícito no texto que o mar territorial é um recurso ambiental e, assim sendo, imperiosa é a sua preservação (BRASIL, 1981).

Verifica-se, portanto, que antes do licenciamento ambiental das atividades potencialmente poluidoras, ou seja, antes da PNMA (Lei nº 6938/1981), a perfuração de poços marítimos de óleo e gás e outras atividades não estavam submetidas a critérios de licenciamento voltados à proteção do meio ambiente.

2.2. Período compreendido entre 1981 e 1999

Após a publicação da Lei nº 6938/1981 (PNMA) o período compreendido entre 1981 e 1990 foi marcado pela publicação de decretos com a finalidade de regulamentar esta lei, além da promulgação da Carta Constitucional Federal de 1988 (CF88). Em junho de 1990 foi publicado o Decreto 99.274, que, dentre outros objetivos, dispõe sobre a regulamentação da PNMA. Neste decreto,

ficou estabelecido que cabe ao CONAMA fixar os critérios básicos segundo os quais serão exigidos Estudos de Impacto Ambiental (EIA) para fins de licenciamento, contendo o diagnóstico ambiental da área, a descrição da ação proposta e suas alternativas e a identificação, análise e previsão dos impactos significativos, positivos e negativos. Além disto, os EIAs devem constituir o Relatório de Impacto Ambiental (RIMA).

Um dos pontos relevantes também abordados neste decreto é a possibilidade de determinação, pelos órgãos estaduais ou pelo IBAMA, da redução das atividades geradoras de poluição com a finalidade de manter as emissões gasosas ou efluentes líquidos e resíduos sólidos nas condições limite estipuladas pelo licenciamento concedido. Em outras palavras, os órgãos estaduais ou o IBAMA podem determinar que as atividades potencialmente poluidoras e licenciadas sejam reduzidas (BRASIL, 1990).

Ainda neste mesmo decreto (Decreto nº 99.274/1990), foram estipulados os tipos de licenças a serem solicitados pelas empresas e concedidos pelos órgãos ambientais. Dentre elas, a Licença Prévia (LP), na fase preliminar do planejamento da atividade; a Licença de Instalação (LI), que autoriza o início da implantação do empreendimento e, por fim, a Licença de Operação (LO) que, após realizadas as verificações necessárias, autoriza o início da atividade licenciada, bem como o funcionamento de seus equipamentos de controle da poluição, como previsto nas LPs e LIs (BRASIL, 1990).

Já em dezembro de 1994, foi publicada a Resolução CONAMA nº 23, que “institui procedimentos específicos para o licenciamento de atividades relacionadas à exploração e lavra de jazidas de combustíveis líquidos e gás natural”, ou seja, é uma resolução que se baseia na Lei nº 6938/1981 e no Decreto 99.274/1990 para tratar especificamente do licenciamento ambiental para a exploração e produção de petróleo e gás natural no Brasil, considerando que estas atividades são de intenso dinamismo com baixo intervalo de tempo entre uma etapa e outra (BRASIL, 1994).

Por meio deste decreto, foi colocado que se deve instituir procedimentos específicos para o licenciamento das atividades relacionadas à exploração e produção de lavra de jazidas de combustíveis líquidos e gás natural e que tais atividades tratam-se de: perfuração de poços para a identificação de jazidas e suas extensões; produção para pesquisa sobre viabilidade econômica e produção efetiva para fins comerciais (BRASIL, 1994).

De acordo com a Resolução CONAMA nº23/1994, no caso da exploração e produção de petróleo e gás natural, além das licenças já exigidas no Decreto 99.274/1990 (LP, LI e LO), é exigida também a Licença Prévia de Produção para Pesquisa (LPpro) que autoriza a produção para a pesquisa da viabilidade econômica da jazida devendo o empreendedor apresentar o Estudo de Viabilidade Ambiental (EVA). A LPpro tem como objetivo permitir a investigação de viabilidade da exploração, uma vez que as jazidas só são de fato confirmadas após a perfuração de um ou mais poços, garantindo

que estes poços também sejam perfurados de acordo com o licenciamento aprovado para eles (BRASIL, 1994).

Em 1995, houve uma alteração importante no setor petrolífero brasileiro. Até então, apenas a Petrobras podia ser contratada pelo Estado para explorar, produzir e refinar petróleo no Brasil. Com a promulgação da Emenda Constitucional nº 9/1995 (EC nº 9/1995), o artigo 177 da Constituição Federal foi alterado de forma a permitir que o estado brasileiro pudesse contratar não somente a Petrobras, mas também outras empresas privadas para a realização destas atividades (BRASIL, 1995). A EC nº 9/1995 exigiu também a aprovação de uma lei infraconstitucional que garanta o fornecimento de derivados em todo o território nacional, especifique as condições de contratação das empresas e disponha sobre a estrutura e atribuições do órgão regulador.

Por meio desta EC, foi possível uma grande alteração na esfera petrolífera e energética nacional, sendo marcada pela quebra do monopólio estatal sobre a exploração e produção de petróleo e gás natural no Brasil, com a possibilidade de contratação de empresas privadas, as quais também devem se submeter ao licenciamento ambiental já adotado pela Petrobras (BRASIL, 1995).

Como foi determinado pela EC nº 9/1995, com as finalidades apresentadas anteriormente, foi promulgada, em agosto de 1997 a Lei nº 9478 que dispõe sobre a política energética nacional, as atividades relativas ao monopólio do petróleo, institui o Conselho Nacional de Política Energética e a Agência Nacional do Petróleo (ANP) (BRASIL, 1997a).

Conforme apresentado na redação desta lei, os objetivos da Política Energética Nacional compreendem, entre outros, a preservação do interesse nacional, a promoção da livre concorrência, a atração de investimentos na produção de energia, a ampliação da competitividade do país no mercado internacional de petróleo, a promoção do desenvolvimento, a proteção do meio ambiente e a promoção da conservação da energia.

Fica, então, a ANP responsável por: promover a regulação, a contratação e a fiscalização das atividades econômicas integrantes da indústria do petróleo. Assim, é por meio da ANP que a União controla as jazidas combustíveis localizadas em território nacional, bem como regula os mercados de exploração, produção e refino de petróleo e a distribuição de combustíveis em todo o território nacional (BRASIL, 1997a).

No fim do ano de 1997, o CONAMA publicou a Resolução nº 237/1997 considerando a necessidade de revisão dos procedimentos e critérios utilizados para o licenciamento ambiental e de se incorporar ao sistema de licenciamento ambiental os instrumentos de gestão ambiental, visando o desenvolvimento sustentável e a melhoria contínua (BRASIL, 1997b).

No Anexo 1 desta resolução, são listadas as atividades sujeitas ao licenciamento ambiental e fica expressa diretamente a perfuração de poços, a produção de petróleo e gás natural, a fabricação de

produtos derivados do processamento de petróleo e de rochas betuminosas. É também, por meio desta resolução que fica posto o papel do IBAMA no licenciamento ambiental de atividades localizadas ou desenvolvidas em dois ou mais estados brasileiros ou aquelas cujos impactos ambientais ultrapassem os limites territoriais do país ou de um ou mais estados, como é o caso da exploração e produção e petróleo e gás natural. Esta resolução traz o procedimento de licenciamento ambiental que deve seguir diversas etapas, incluindo a definição dos documentos, projetos e estudos ambientais, a realização de audiências públicas, quando couber e a emissão de parecer técnico conclusivo e/ou parecer jurídico (BRASIL, 1997b).

Além do que já foi exposto, a Resolução CONAMA nº 237/1997, com base no Decreto 99.274/1990, diz que o órgão ambiental competente, mediante decisão motivada, poderá modificar os condicionantes e as medidas de controle e adequação, suspender ou cancelar uma licença já expedida quando ocorrer a violação ou inadequação de quaisquer condicionantes ou normas legais; omissão ou falsa descrição de informações relevantes que subsidiaram a expedição da licença e superveniência de graves riscos ambientais à saúde.

Portanto, fica estabelecido que, com base em diversos critérios de motivação, os condicionantes às atividades licenciadas podem ser alterados durante a vigência de uma licença, o que permite a evolução contínua dos dados monitorados para que as licenças de operação continuem vigentes a ponto de serem revogadas, caso não sejam atendidas as novas condicionantes (BRASIL, 1997b).

2.3. Período compreendido entre 2000 e 2010

O período compreendido entre 2000 e 2010 foi marcado, basicamente, pela publicação de duas Leis Federais no âmbito da temática tratada neste artigo. A primeira, publicada em abril do ano 2000, trata-se da Lei nº 9966. A segunda, refere-se à Lei 12.305, publicada em agosto de 2010, responsável pela instituição da Política Nacional de Resíduos Sólidos (PNRS) (BRASIL, 2010).

A Lei nº 9966/2000 dispõe sobre a prevenção, o controle e a fiscalização da poluição causada por lançamento de óleo e outras substâncias nocivas ou perigosas em águas sob jurisdição nacional, além de outras providências.

Segundo esta lei, são estabelecidos princípios básicos a serem seguidos na movimentação de óleo e outras substâncias nocivas ou perigosas em portos, instalações portuárias, plataformas e navios. As substâncias nocivas ou perigosas foram categorizadas de acordo com o risco produzido quando descarregadas na água. As categorias são: A (alto risco), B (médio risco), C (risco moderado) D (baixo risco), sendo todos os riscos considerados tanto à saúde humana quanto ao ecossistema aquático (BRASIL, 2000).

Em seu Artigo 15, a Lei nº 9966/2000 expressa a proibição da descarga, em águas sob jurisdição nacional, de substâncias nocivas ou perigosas classificadas nas categorias A, B, C e D, com exceção das substâncias categorizadas em B, C e D que podem ser descarregadas desde que obedecidos alguns critérios, tais como: o navio não se encontrar em área ecologicamente sensível e os procedimentos para descarga sejam devidamente aprovados pelo órgão ambiental competente.

Contudo, o Artigo 20 desta mesma lei afirma que a descarga de resíduos sólidos das operações de perfuração será objeto de regulamentação específica pelo órgão federal de meio ambiente (BRASIL, 2000). Assim, percebe-se a falta de clareza em relação à utilização e descarte de fluidos de perfuração sendo as licenças até este momento emitidas com base nas boas práticas já adotadas pelas operadoras e não apresentando um texto claro com critérios objetivos de regulamentação (SCHAFFEL, 2002).

O CONAMA, em 17 de março de 2005, publicou a Resolução 357 que, dentre outros temas, trata do estabelecimento de condições e padrões de lançamento de efluentes. No que se refere ao lançamento de resíduos em águas salinas, como a água do mar, o Artigo 18 exige que na tentativa de manter a qualidade da água, sejam verificados os efeitos tóxicos crônicos de acordo com o critério exigido pelo órgão ambiental competente ou, na ausência destes critérios, por instituições nacionais ou internacionais renomadas e comprovado pela realização de ensaio ecotoxicológico padronizado. Exige também que não haja presença de materiais flutuantes, materiais sólidos objetáveis, óleos e graxas, entre outros (BRASIL, 2005).

Novamente, não há menção específica a fluidos de perfuração ou resíduos gerados na perfuração de poços. Contudo, a Resolução CONAMA 357/2005 foi por muito tempo utilizada como base pelas empresas operadoras, em virtude de ausência de regulação específica, nos processos de licenciamento ambiental (BRASIL, 2005), porém não se aplicava diretamente à temática de descarte de fluidos e cascalhos.

Em agosto de 2010 foi então publicada a Lei 12.305 que instituiu a Política Nacional de Resíduos Sólidos (PNRS) que foi integrada à Política Nacional do Meio Ambiente (PNMA). Conforme expresso no texto desta lei, ela se fundamenta nos Princípios da Prevenção e Prevenção, do Poluidor – Pagador, do Protetor – Recebedor e na sustentabilidade (BRASIL, 2010). A PNRS é uma lei importante no que diz respeito à perfuração de poços, uma vez que nesta atividade são gerados resíduos sólidos comumente descartados no ambiente marinho, obedecidos alguns critérios apontados nas licenças de operação. Contudo, ela não trata, cita ou menciona direta ou indiretamente os resíduos sólidos gerados nas operações de perfuração de poços marítimos (BRASIL, 2010).

2.4. Período posterior a 2011

Já em 2011, percebendo a necessidade de regulamentação específica para a atividade de perfuração de poços marítimos, mesmo após a publicação da Lei 9966/2000, da Resolução CONAMA 357 e da Lei nº 12.305/2010, o IBAMA continuou trabalhando na busca da determinação de diretrizes específicas para os resíduos (sólidos ou líquidos) gerados nesta atividade.

Em março 2011, o IBAMA publicou a Nota Técnica CGPEG/DILIC/IBAMA Nº 01/11 a respeito do Projeto de Controle da Poluição. Esta Nota Técnica, estabelece diretrizes para apresentação, implementação e elaboração de relatórios, nos processos de licenciamento ambiental dos empreendimentos marítimos de exploração e produção de óleo e gás (BRASIL, 2011a).

Nas considerações iniciais da Nota Técnica CGPEG/DILIC/IBAMA nº 01/11, consta a seguinte informação:

Embora a busca pela mitigação dos impactos decorrentes do descarte dos fluidos de perfuração e do cascalho configure uma das medidas adotadas pela CGPEG para controlar a poluição provocada pelos empreendimentos, esse tema não é abordado nesta Nota Técnica. As condições para o descarte desses efluentes, bem como o monitoramento do descarte e da disposição em terra desses materiais serão abordados em outro instrumento regulador da CGPEG, específico para essa temática. (BRASIL, 2011a).

No mesmo ano de 2011, foi publicada a Nota Técnica CGPEG/DILIC/IBAMA nº 07/11, também no âmbito do Projeto de Controle da Poluição, que direciona o entendimento a respeito da destinação correta dos resíduos nas diversas etapas do processo de exploração e produção de petróleo e gás, com dados obtidos no ano de 2009 (BRASIL, 2011b).

Contudo, esta Nota Técnica afirma que, como os resíduos de fluidos de perfuração não foram objetos da Nota Técnica CGPEG/DILIC/IBAMA Nº 01/11 não havia dados nos relatórios a respeito destes resíduos e, portanto, não foi possível estabelecer diretrizes, como ocorreu para os demais resíduos tratados na Nota (BRASIL, 2011b). Entretanto, salienta que:

Os volumes de fluidos utilizados na perfuração de poços são bastante elevados e não devem ser desconsiderados no âmbito de um levantamento sobre a situação dos resíduos das atividades de E&P de petróleo e gás. (BRASIL, 2011b).

Em virtude deste fato, a Nota Técnica afirma que o IBAMA está trabalhando juntamente com a indústria na tentativa de elaborar uma normativa específica para regulamentar esta questão, a ser emitida em breve e constituirá um conjunto normativo mais robusto para a gestão destas informações (BRASIL, 2011b). Nas considerações finais, afirma que nos casos dos resíduos de fluidos de perfuração e cascalhos, este conjunto normativo deverá prever as condições para aprovação, descarte e monitoramento destes materiais. Afirma ainda que:

A partir da implementação desta regulamentação, também serão gerados dados referentes aos fluidos não aquosos, fluidos aquosos contaminados e cascalhos contaminados desembarcados em terra, complementando o quadro de indicadores da pressão exercida pela indústria offshore na infraestrutura e logística de resíduos. (BRASIL, 2011).

Nota-se, então, como reafirmado pelo próprio IBAMA, a necessidade de elaboração de um arcabouço técnico e legal específico para a atividade de perfuração de poços marítimos, com base em dados técnicos e na legislação ambiental vigente. Neste sentido, o IBAMA publicou, em janeiro de 2018, a Instrução Normativa nº 1/2018.

Esta Instrução Normativa (IN nº 1/2018) finalmente abarcou a necessidade de regulamentação específica apontadas nas Notas Técnicas CGPEG/DILIC/IBAMA nº 01/11 e CGPEG/DILIC/IBAMA nº 07/11. Em seu texto, estabelece diretrizes para as condicionantes ambientais de uso e descarte de fluidos de perfuração e cascalhos, entre outras, em poços marítimos de petróleo e gás (BRASIL, 2018a). O Artigo 4º prevê a revisão desta mesma Instrução Normativa em quatro anos e em seu parágrafo único diz que: “Este prazo destina-se a uma transição para a destinação final ambientalmente adequada dos resíduos sólidos e rejeitos como previsto no inciso I do art. 47 da Lei nº 12.305/2010” (BRASIL, 2018a).

A IN nº 1/2018 trouxe muito do que já vinha sendo aplicado na concessão das licenças, como limites de ecotoxicidade, de presença de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos, teor de metais entre outros, porém algumas novidades. Uma delas é que afirma que não será permitido o descarte de cascalhos gerados em fases de reservatório (ou zonas produtoras) dos poços (BRASIL, 2018a).

Este é um ponto importante pois altera consideravelmente a dinâmica adotada até o momento nas perfurações de poços marítimos, tendo em vista que todo o cascalho gerado na perfuração das zonas produtoras deveria ter outra destinação, não podendo ser descartado no mar, obedecidos os critérios adotados até então. A contar da data da publicação, as determinações apresentadas na IN nº 1/2018 entrariam em vigor 30 dias após a publicação (BRASIL, 2018a).

Ocorreu que, ainda em fevereiro do mesmo ano, foi publicada a Instrução Normativa nº 8/2018 que apenas prorrogou a entrada em vigor da IN nº 1/2018 para 30 de junho do mesmo ano, considerando a necessidade de adequação das empresas às diretrizes e determinações da IN nº 1/2018 (BRASIL, 2018b).

Em 25 de junho de 2018, o IBAMA novamente se posicionou sobre a entrada em vigor da IN nº 1/2018. Foi, então, publicada a Instrução Normativa nº 16/2018 que modificou o texto original, acrescentando o fato de que para licenças de operação obtidas antes de 25 de junho de 2018, a entrada em vigor dos itens referentes à proibição do descarte de cascalhos provenientes da perfuração de zonas

produtoras será prorrogada para setembro de 2019, conferindo mais tempo para as empresas se estruturarem (BRASIL, 2018c).

Por fim, em 14 de março de 2019, o IBAMA publicou a Instrução Normativa nº 11/2019, que suspendeu o início da vigência da IN nº 1/2018 (BRASIL, 2019a). De acordo com o órgão, tramitavam processos que mostraram uma divergência de entendimento entre o próprio IBAMA e a Agência Nacional do Petróleo, ficando assim, suspensa a entrada em vigor da IN nº 1/2018 até que fosse emitida uma manifestação definitiva da Advocacia Geral da União (AGU) (BRASIL, 2019a).

Esta divergência reside no fato de que o IBAMA utilizou o Art. 47 da Lei nº 12.305/2010 (PNRS) como base legal para a elaboração da IN nº 1/2018 e a instituição do chamado “descarte zero” (modalidade em que não é permitido o descarte de qualquer fluido de perfuração ou resíduo no mar) enquanto deveria, na visão da ANP, pautar-se na Lei nº 9966/2000 (BRASIL, 2018d).

Conforme exposto anteriormente, o parecer nº 00007/2019/DEPCONS/PGF/AGU, anexo ao processo 48610.006818/2018-11, confirmou que a competência para a elaboração das normativas a respeito desta matéria é, de fato, do IBAMA e que este instituto não é obrigado tomar como base o Art. 47 da Lei nº 12.305/2010 (PNRS) para a instituição do chamado ‘descarte zero’, porém, pode adotá-lo, caso deseje (BRASIL, 2018d).

Nas palavras da Advocacia Geral da União (AGU):

no exercício de sua competência regulamentar sobre as condições ambientais de uso e descarte das substâncias nocivas e perigosas derivadas de operações de prospecção e exploração de petróleo e gás em plataformas marítimas (*offshore*), o IBAMA poderá instituir vedação ao seu lançamento nas águas nacionais; não estando, contudo, obrigado a fazê-lo pelo artigo 47, I, da Lei nº 12.305/2010. (BRASIL, 2018d).

Após a suspensão, para que não houvesse ausência de diretrizes técnicas aplicáveis à utilização e descarte de fluidos de perfuração, o IBAMA publicou as “Diretrizes para o uso e descarte de fluidos de perfuração e cascalhos, fluidos complementares e pastas de cimento nos processos de licenciamento ambiental dos empreendimentos de perfuração marítima de poços de exploração e produção de petróleo e gás nas atividades de perfuração marítima de poços e produção de petróleo o gás” (BRASIL, 2019b), em julho de 2019. Esta é a normativa em vigor atualmente.

3. O PRINCÍPIO DA PROIBIÇÃO DE RETROCESSO AMBIENTAL

O entendimento do princípio da proibição do retrocesso ambiental passa pelo entendimento do princípio da proibição do retrocesso social uma vez que se pode atrelar o retrocesso ambiental à perdas de direitos, em última instância, sociais uma vez que é assegurado pela Constituição Federal de 1988

o direito ao meio ambiente equilibrado. Assim, para Barcellos (2002, p. 80-81), a vedação ao retrocesso social deve ser colocada de forma que o legislador fique impossibilitado de retirar direitos uma vez já estabelecidos pelas normas infraconstitucionais, assim como também apontado por Barroso (2003, p. 158-159) que diz que este princípio (do retrocesso social) é implícito e consequência do sistema jurídico constitucional.

Então, com foco no Direito Ambiental, Prieur (2012) afirma que o seu principal objetivo é buscar a diminuição da poluição e a preservação da diversidade biológica e, portanto, este deveria entrar na categoria das regras jurídicas eternas, não revogáveis, em nome do interesse comum da humanidade. É um direito que possui um critério finalista, uma vez que se dirige ao meio ambiente implicando uma obrigação de resultado, ou seja, a melhoria contínua do estado do ambiente.

Como apontado por Molinaro (2012), o Direito ao meio ambiente está resguardado na Constituição Federal de 1988 (CF88), que assegura que um ambiente ecologicamente equilibrado é direito de todos, um bem comum do povo e essencial à qualidade de vida. Além disto, compete ao poder público e à coletividade, o dever de defendê-lo e preservá-lo para as gerações futuras.

Sarlet e Fenstersfeifer (2012) ampliam este entendimento ao mencionar que para o desenvolvimento humano em níveis compatíveis com a dignidade, é necessário e vital a qualidade e segurança ambiental, garantindo a promoção de um completo bem-estar existencial, o que gera a necessidade de um complexo ordenamento de direitos e deveres fundamentais e de cunho ecológico.

Ainda no que diz respeito à CF88, segundo Benjamin (2012), está prevista a função social e ecológica da propriedade, e os instrumentos do Direito Ambiental não contribuem para ameaçar a vitalidade produtiva do Brasil, e nem pesam na capacidade financeira do Estado, pensamentos que são considerados irresponsáveis ou desavisados.

Benjamin (2012) enfatiza a ideia de progresso na ordem constitucional brasileira. Segundo este autor, abraça-se na forma de conceito inovador de seu sistema, o progresso da humanidade, e neste sentido, o texto constitucional mostra-se triplamente propositivo. Isto porque se aponta que o país buscará avançar no progresso (termo apontado pelo constituinte, contudo sem detalhamento explicativo); sugere uma ideia de progresso coletivo, para a humanidade, incluindo os seres humanos e todas as outras formas de vida das quais a vida humana depende, além de estender o conceito de prosperidade não apenas à prosperidade material, mas também à ampliação e fortalecimento permanente de velhos e novos valores intangíveis, muitos deles naturalmente coletivos, ou seja, a prosperidade imaterial, um patrimônio que apesar de ser etéreo e impalpável, é de indiscutível realidade.

Conhecendo-se, portanto, o caráter progressista da carta constitucional brasileira, o que poderia então ameaçar e ensejar o recuo do Direito Ambiental? Segundo Prieur (2012), entendendo-se os

direitos ligados ao meio ambiente como direitos fundamentais, estes são considerados, assim, como direitos adquiridos e parece estar claro que a proteção constitucional do meio ambiente faz parte dos direitos adquiridos e qualificados de *pétreos*.

Sarlet e Fenstersfeifer (2012) afirmam que o mais adequado seria o tratamento integrado e interdependente dos direitos ecológicos e sociais, de modo a contemplar a evolução natural e histórica dos direitos fundamentais e humanos.

Mesmo diante de todo este entendimento, várias ameaças pairam sobre o Direito Ambiental, mais especificamente sob a ótica do retrocesso. Entre elas estão, as ameaças políticas, que se impõem na vontade demagógica de simplificação do direito e que podem levar à desregulamentação em matéria ambiental. Ameaças econômicas, favorecidas por discursos que reclamam menos obrigações jurídicas em relação ao meio ambiente, chegando a serem apontadas como freio na busca pela erradicação da pobreza e ao desenvolvimento (PRIEUR, 2012).

Contudo, como citado por Benjamin (2012), esses tipos de ameaças devem ser contrapostos com o entendimento de que a vitalidade econômica e financeira do Estado não está ameaçada, pura e simplesmente, pelo arcabouço legislativo que visa a proteção ambiental. Outro tipo de ameaça ao Direito Ambiental são as ameaças psicológicas, pois as normas sobre matérias ambientais são dificilmente entendidas por não especialistas, o que favorece o discurso em relação ao seu descrédito, uma vez que ao não se entender de forma adequada, técnica e científica do tema a ser tratado, é facilitado o discurso de negação aos fatos apontados por estudos científicos, por exemplo (PRIEUR, 2012).

Neste sentido, considerando-se o caráter progressista da CF88 e os princípios do Direito Ambiental, Prieur (2012) aponta o termo princípio de não regressão, pois não se trata apenas de uma cláusula simples, mas de um verdadeiro ordenamento de ideias que constituem um princípio geral do Direito Ambiental, uma vez que está em jogo a salvaguarda dos progressos obtidos para evitar ou limitar a deterioração do ambiente.

Além disto, a proibição do retrocesso ambiental, para ser entendido como princípio, é necessário ter apoio em uma argumentação jurídica que funda um novo princípio que irá se agregar aos já conhecidos princípios do direito ambiental, como poluidor-pagador, precaução e participação do público. Além de um princípio, carrega consigo o dever de não regressão imposto à administração.

Sarlet e Fenstersfeifer (2012) citam um entendimento consolidado na doutrina a respeito da proibição do retrocesso, apontando que esta proibição tem fundamento constitucional, entre outros, no princípio do Estado (Democrático e Social) de Direito, da dignidade da pessoa humana, da máxima eficácia e efetividade das normas definidoras de direitos fundamentais e da segurança jurídica.

Portanto, além de suas implicações práticas diretas, a proibição do retrocesso tem por escopo a preservação do bloco normativo constitucional e infraconstitucional já consolidado no ordenamento jurídico, especialmente no que diz respeito ao respeito aos direitos fundamentais. Assim, negar o reconhecimento ao princípio significa admitir, que os órgãos legislativos podem tomar decisões livremente, mesmo que estas cometam desrespeito à vontade expressa. Molinaro (2012) diz que a vedação da retrogradação (como prefere se referir à proibição de retrocesso, pois retrogradar expressa melhor a ideia de retroceder no tempo e no espaço) está intimamente entrelaçada aos princípios da dignidade humana e da segurança jurídica e que ela é essencial na atribuição de responsabilidade ambiental impressa em todas as relações com o ambiente.

Segundo Prieur (2012), no que diz respeito às ameaças à não regressão, está em jogo a vontade de supressão ou redução dos aportes de uma regra, em nome de interesses claros ou ocultos, muitas vezes colocados como superiores aos interesses ligados à proteção ambiental. Alterar esta regra significa uma ameaça direta à finalidade do texto inicial. Quando ocorre, a regressão do Direito Ambiental é insidiosa e discreta, de forma que passe despercebida, tornando-a ainda mais perigosa. A necessidade de se enunciar claramente um princípio de não regressão vem da ideia de que retrocessos discretos ameaçam todo o ordenamento do Direito Ambiental.

Molinaro (2012) diz que, além do principal objetivo que já foi exposto, o direito ambiental visando proteger, promover e evitar a degradação do ambiente, deve coibir intensamente a retrogradação, pois esta representa uma violação dos direitos humanos e uma transgressão a direitos fundamentais, de forma que ao se atingir um estado superior, em termos de proteção ambiental, não se deve retornar a estágios inferiores.

O ato retrogressivo em si não é o causador do dano ambiental, uma vez que este está no efeito causado pelo ato. Portanto, a prudência é um farol guia de todo princípio de forma que, neste caso, a mudança é importante para melhorar, ou seja, no sentido positivo da coisa. Contudo, o pior pode vestir-se de melhor muitas vezes, sobretudo em matérias técnicas não dominadas por muitos. Molinaro (2012) acrescenta ainda que é necessário pensar o princípio da proibição do retrocesso também como um processo que possibilite a coexistência no presente e no futuro, processado pelas relações humanas em um ambiente sociopolítico, objetivando regular e controlar o percurso da atividade humana para assegurar as condições de vida no planeta.

Pensando em uma condição mínima à qual não se deve retroceder, os autores citam o mínimo existencial ecológico. Para Prieur (2012), a não regressão vai se situar em um cursor entre o maior nível de despoluição possível, que evolui no tempo de acordo com os progressos tecnológicos, e o nível mínimo de proteção ambiental (ou mínimo existencial ecológico), que também evolui constantemente.

Considerando esta evolução, Molinaro (2012) diz que a interdição da retrogradação ambiental gera uma ecocidadania responsável, como uma razão de meios que permite a existência do mínimo existencial ecológico, entrelaçando os conceitos de cidadania e ecologia na busca pelo direito ao ambiente equilibrado, além de citar que a garantia da intangibilidade de um mínimo ecológico é firmada também pela proteção da continuidade ou da existência. No que diz respeito ao espaço, afirma que o princípio da vedação da retrogradação objetiva a proteção das condições atuais da mutualidade existencial dos espaços ambientais, evitando sua regressão.

Já Sarlet e Fenstersfeifer (2012) afirmam que é dever do Estado a garantia do mínimo existencial socioambiental que nesse contexto é uma espécie de garantia dos direitos fundamentais econômicos, sociais, culturais e ambientais.

Em relação aos deveres do Estado, Sarlet e Fenstersfeifer (2012) mostram que não há margem de não atuação do Estado, pois esta não atuação resultaria em prática inconstitucional, pois, neste contexto, o Estado deve adotar práticas positivas ou negativas na sua atuação, porém buscando uma saída na mesma direção, no caso, a potencialização da proteção ambiental no que diz respeito às funções estatais de todos os entes da federação e outras instituições, como o Ministério Público e a Defensoria Pública.

No que diz respeito à jurisprudência no tema do princípio da proibição do retrocesso, segundo Prieur (2012), no Brasil, ela já foi admitida no âmbito dos direitos sociais. Este entendimento foi fundamentado sabendo-se que o legislador não pode intervir em direitos fundamentais e é imperativo manter um regime tão protetor quanto o atual. E, mesmo quando faltam dispositivos constitucionais ou internacionais suficientemente explícitos ou de jurisprudência devido ao caráter inovador da matéria, é fato que se pode assumir conceitos largamente utilizados de forma que os resultados seriam análogos à aplicação formal do princípio da não regressão.

Ainda em relação ao arcabouço legal do princípio da proibição do retrocesso, mesmo que não se consagre com este nome em forma de princípio, Molinaro (2012) afirma que a Política Nacional do Meio Ambiente, que foi recepcionada pela CF88, foi um dos primeiros instrumentos legais a abarcar a questão do retrocesso ao conter o chamado mandamento da vedação da retrogradação, implícito na disposição sobre o dever da ação governamental na manutenção do equilíbrio ecológico e considerando o meio ambiente como um bem público, de uso coletivo assegurado.

Segundo Sarlet e Fenstersfeifer (2012), desde a CF88, figuram valores referentes à implantação das liberdades nas quais se pressupõe uma ação positiva do governo no sentido de remover qualquer obstáculo de ordem social, econômica ou mesmo cultural que impeçam o pleno desenvolvimento da pessoa humana.

Por fim, Sarlet e Fenstersfeifer (2012) percebem que o princípio da proibição do retrocesso ambiental pode ser fundamentado pelos diversos motivos expostos aqui, que deve ser garantido, executado e moderado (quando necessário) pelo Estado de forma a promover uma relação justa entre as gerações humanas, devendo a geração presente ter a responsabilidade de assegurar às gerações futuras pelo menos condições ambientais tendencialmente idênticas àquelas experimentadas atualmente e, portanto, vedar a alteração (em termos negativos) das condições ecológicas.

4. A SUSPENSÃO DA INSTRUÇÃO NORMATIVA nº 1/2018 E O PRINCÍPIO DA PROIBIÇÃO DO RETROCESSO AMBIENTAL

Como pode ser observado pelo que já foi exposto até aqui, percebe-se o caráter evolutivo da legislação ambiental brasileira no sentido positivo de proteção ao meio ambiente de uma forma geral e especificamente quando se trata da regulamentação da atividade de perfuração de poços marítimos, assim como preconizado pela Política Nacional do Meio Ambiente e pela Constituição Federal de 1988.

A atuação do legislador e do executivo apresentam-se no sentido de conferir proteção aos ecossistemas relacionados à esta atividade, evoluindo a cada passo temporal. Esta evolução é possível graças ao monitoramento e levantamento de dados ambientais solicitados no passo temporal anterior, o que possibilita a tomada de decisão no sentido de restringir as diretrizes, garantindo uma maior proteção ao meio ambiente, que é o objetivo final.

Assim, todo o processo de evolução das normas, resoluções, diretrizes, entre outras ferramentas legais, relacionadas à perfuração de poços marítimos e mais especificamente ao uso e descarte de fluidos de perfuração, foi gradativamente aprimorado para se fazer refletir de forma prática, na busca de seus efeitos, as normas constitucionais e o direito ao meio ambiente ecologicamente equilibrado, preconizado na Constituição Federal.

Portanto, pode-se enxergar a publicação IN nº 1/2018 como mais um passo na determinação e exigência de parâmetros técnicos mais restritivos impostos à atividade de perfuração de poços na busca constante pela melhoria contínua do arcabouço de práticas operacionais com o intuito de aumentar o nível de proteção ambiental, assim como preconiza o princípio da proibição do retrocesso ambiental, que objetiva este processo evolutivo e protecionista e refuta qualquer medida que se retorne a um estado inicial anteriormente já superado.

Contudo, a suspensão da IN nº 1/2018 nos faz pensar, à luz do princípio da proibição do retrocesso, se esta suspensão pode ou não ser considerada retrocesso ambiental e quais as consequências diretas dessa suspensão na busca constante da evolução da proteção ambiental. Há de

se ressaltar que a IN nº 1/2018 não é uma lei, mas sim um conjunto de diretrizes que devem ser obedecidas pelas empresas operadoras no Brasil para que se façam cumprir as leis que foram consideradas para a sua elaboração, possuindo um viés mais técnico que normativo. Para esta avaliação, é necessário passar pelos pontos técnicos que foram analisados para que a suspensão da IN nº 1/2018 ocorresse. Como apontado por Molinaro (2012), os aspectos técnicos desta avaliação dificultam o entendimento por não especialistas e acentuam o risco de ameaça à análise em questão.

Para iniciar a análise técnica, pode-se avaliar os pontos que foram considerados para a suspensão da IN nº 1/2018 à luz da configuração das técnicas atuais, de forma a diferenciá-las em termos de impacto ambiental. Estes pontos estão estruturados na Informação Técnica 223 (reflexos da proibição do descarte de fluidos aquosos e cascalhos na fase reservatório e descarte zero nas atividades de perfuração e manutenção de poços), anexa ao processo nº 48610.006818/2018-11 assinada pelo Instituto Brasileiro de Petróleo Gás e Biocombustíveis (IBP), encaminhada ao IBAMA pela ANP (BRASIL, 2018d).

Este processo é uma resposta da ANP à publicação da IN nº 1/2018 no qual a agência recorre ao IBAMA por meio de uma análise das possíveis consequências do atendimento integral ao texto apresentado na IN nº 1/2018, contendo as principais dificuldades neste atendimento, no que diz respeito ao nível de tecnologia atual, além de questionamentos a respeito da interpretação das solicitações. Cabe ressaltar, que a Informação Técnica 223 foi encaminhada ao IBAMA no dia 30 de maio de 2018, ainda no período de adaptação para a entrada em vigor da IN nº 1/2018, portanto, ainda em tempo hábil conferido para o ajuste das operadoras ao novo texto normativo (BRASIL, 2018d).

Segundo a Informação Técnica 223, considera-se positivo o monitoramento ambiental da atividade como vem sendo realizado, pautado na análise de parâmetros físico-químicos e ecotoxicológicos do material efetivamente utilizado e descartado (BRASIL, 2018d). Contudo, outros pontos apresentados na IN nº 1/2018 conferem risco às atuais atividades de perfuração e ao atendimento da referida Instrução Normativa e estes riscos serão o foco desta análise.

A Tabela 1 apresenta uma comparação entre o que vigorava antes da publicação da IN nº 1/2018 e o novo modelo proposto nesta. É importante ressaltar que na Tabela 1 estão destacados apenas três pontos, porém o documento analisado (Informação Técnica 233/2020-COEXP/CGMAC/DILIC, BRASIL, 2018d) apresenta diversos outros pontos que tratam, sobremaneira, da interpretação do texto apresentado na IN nº 1/2018, mas que não impactam significativamente no objetivo da análise realizada por este estudo, principalmente no que diz respeito à verificação de retrocesso.

Como pode-se observar na Tabela 1, a IN nº 1/2018 busca a prática do não descarte no mar, no longo prazo, inicialmente limitando o descarte de uma fase do poço (fase na qual é perfurada a zona produtora) e por fim, em todas as fases da construção do poço ao longo da operação de perfuração. Ou

seja, visa que todo o fluido de perfuração e cascalhos gerados não sejam descartados no mar, como realizado até o momento (desde que atendidos outros critérios ecotoxicológicos, físico-químicos e operacionais), mas sim enviados para a chamada destinação ambiental adequada, que não é mencionada na referida Instrução Normativa (BRASIL, 2018d).

Tabela 1: Comparativo dos pontos críticos antes e depois da publicação da IN nº 1/2018 apresentados na Informação Técnica 233/2020-COEXP/CGMAC/DILIC, anexa ao Processo nº 48610.006818/2018-11 (BRASIL, 2018d).

Antes da IN nº 1/2018	Proposto na IN nº 1/2018
É permitido o descarte em águas marinhas de cascalhos gerados e fluidos aquosos utilizados nas fases de reservatório (ou zonas produtoras) desde que atendidos critérios físico-químicos e ecotoxicológicos.	Não será permitido o descarte de em águas marinhas de cascalhos gerados e fluidos aquosos utilizados nas fases de reservatório (ou zonas produtoras) dos poços.
É permitido o descarte em águas marinhas de cascalhos com fluidos não aquosos aderidos utilizados nas fases de reservatório (ou zonas produtoras) desde que atendidos critérios físico-químicos e ecotoxicológicos.	Não será permitido o descarte em águas marinhas de cascalhos com fluidos não aquosos aderidos, gerados nas fases de reservatório (ou zonas produtoras) de poços.
Não há a previsão de outro tipo de destinação ambientalmente adequada para os resíduos e rejeitos que se enquadrem nas condições físico-químicas e ecotoxicológicas.	A IN nº 1/2018 deverá ser revista em quatro anos a contar da sua publicação e este prazo destina-se a uma transição para a destinação final ambientalmente adequada dos resíduos sólidos e rejeitos, na busca da prática do descarte zero.

Fonte: Brasil (2018d).

Segundo o Instituto Brasileiro de Petróleo e Gás (IBP), por meio da Informação Técnica 233, vários problemas de ordem prática podem surgir da implementação desta prática (do descarte zero no mar), a saber: adaptação dos operadores, equipamentos e processos; indisponibilidade ocasional de recursos; saturação ocasional das áreas destinadas à disposição final de resíduos ou plantas de tratamento de efluentes. Além destas, são elencados impactos na segurança operacional, em virtude do reajuste da operação necessário para o atendimento à IN nº 1/2018 (BRASIL, 2018d).

Portanto, percebe-se que a indústria, por meio da ANP e do IBP, apresentou ao IBAMA, através do Processo nº 48610.006818/2018-11, as dificuldades e possíveis impactos relacionados ao atendimento à IN nº 1/2018. Um grande foco na apresentação é dado no dispêndio de energia que será realizado para transportar os fluidos de perfuração e cascalhos gerados da locação marítima até as estações de tratamento localizadas em terra (BRASIL, 2018d), além do fato da transferência do local do impacto ambiental, pois antes, havia o impacto apenas ao ecossistema marítimo e agora, passariam a impactar também os ecossistemas aéreos (pelas emissões de combustíveis utilizados no transporte) e terrestre, pela localização das plantas de tratamento de resíduos para a disposição final.

Até aqui, percebe-se claramente a tentativa da busca por práticas mais restritivas no sentido da proteção do ambiente marítimo no qual os poços são perfurados, por parte do IBAMA, assim como preconizado pelo caráter progressista do direito socioambiental, mas também as consequências desta proteção que podem não ter sido analisadas no escopo da IN nº 1/2018, pelo órgão ambiental, de forma mais abrangente. Portanto, diante das informações técnicas apresentadas até aqui, nota-se que as práticas adotadas na IN nº 1/2018 buscam uma proteção ao ecossistema marítimo ainda não praticada nas operações de perfuração de poços, o que configura um caráter positivo, conforme conduta esperada. Contudo, a prática destas ações gera consequências também ainda não praticadas em outros ecossistemas até o momento não afetados, ou pouco afetados, pelo uso e descarte de fluidos de perfuração.

No que se refere aos aspectos técnicos, é válido o questionamento da ANP ao IBAMA no sentido de avaliar os ganhos e perdas, em uma análise de riscos e benefícios, da implantação destas práticas. Neste sentido, são relevantes estudos que busquem quantificar os novos impactos aos ecossistemas terrestre e aéreo, gerados pela implementação da IN nº 1/2018, o que a princípio parece ser controverso, mas faz todo o sentido considerando a interação entre os ecossistemas e a busca contínua por uma relação harmônica entre eles.

Esta é, portanto, uma discussão interessante a ser trabalhada. Poderia o IBAMA, na tentativa positiva de restringir os critérios de descarte de fluidos de perfuração no ambiente marinho, estabelecer medidas que gerem consequências negativas a outros ecossistemas? Talvez sejam situações como esta que Molinaro (2012) se refira como sendo de difícil entendimento para não especialistas, quando diz que o pior pode vestir-se de melhor, uma vez que, analisando-se apenas a causa e efeito, parece que a proibição do descarte de fluidos de perfuração e cascalhos na locação, ou seja, no ambiente marinho, gera um efeito positivo de proteção a este ambiente, contudo, não pode ser analisada separadamente de um contexto maior no qual todas as relações entre os ecossistemas se encontram presentes.

Neste âmbito, Vilani (2013) coloca que, na busca pelo desenvolvimento sustentável, muitas vezes a própria dimensão ambiental é desconsiderada, em virtude da priorização do imediatismo a partir de uma racionalidade econômica, e isto ocorre muitas vezes pela forma como a máquina pública trabalha a questão da sustentabilidade. Extrapolando-se este entendimento, observa-se um exemplo prático de como a máquina pública, neste caso representada pelo IBAMA, buscando resolver de uma vez por todas o problema do descarte de fluidos de perfuração e cascalhos de poços marítimos, extinguindo a possibilidade de se realizar este descarte no mar e contribuindo para a sustentabilidade nas perfurações, acabou por gerar consequências diretas que podem, talvez, criar outros impactos ambientais não mapeados inicialmente.

Além dos aspectos técnicos, vale também analisar a matéria em si, na tentativa de verificar se houve ou não retrocesso na suspensão da IN nº 1/2018. Cabe ressaltar, que esta Instrução Normativa foi suspensa antes de sua entrada em vigor, integralmente, apesar de já ter sido publicada e postergada (BRASIL, 2019a).

Como já foi mencionado, a IN nº 1/2018 foi publicada em janeiro de 2018 e entraria em vigor em 30 dias (BRASIL, 2018a). Contudo, em fevereiro de 2018, a entrada em vigor foi adiada para 30 de junho do mesmo ano (BRASIL, 2018b) e, alcançada esta data, alguns dos itens aqui analisados (itens 1 e 2 apresentados na Tabela 1) foram adiados (pontos de controvérsia e motivos dos adiamentos) para setembro de 2019, apenas para os projetos que já possuíam licença de operação ativa antes desta data (BRASIL, 2018c). Ainda antes de setembro de 2019, em julho do mesmo ano, toda a IN foi suspensa (BRASIL, 2019a).

Poderia, portanto, haver a configuração legítima do retrocesso ambiental pelo ato da suspensão, uma vez que esta ocorreu em momento anterior à entrada em vigor, mesmo já tendo sido publicada e havendo sido considerado certo tempo de adaptação da indústria? É plausível pensar que não, uma vez que com base no que foi dito por Sarlet e Fenstersfeifer (2012) o ambiente físico nunca experimentou o maior nível de proteção (neste caso, o não descarte no mar das zonas produtoras e no futuro, o ‘descarte zero’), portanto, não há ao que retroceder, tendo em vista que na prática, não houve evolução. A evolução foi apenas textual, não chegando a entrar de fato em vigor. Ou seja, não houve alteração positiva, uma vez que não se submeteu as gerações futuras a condições ambientais aquém daquelas experimentadas atualmente.

Entretanto, ficaria claro o retrocesso caso a entrada em vigor não tivesse sido prorrogada, ainda antes da suspensão. Contudo, para se configurar este retrocesso, seria necessário provar que as medidas propostas na IN nº 1/2018 eram de fato mais protecionistas. Portanto, há de se considerar que esta afirmação (que não houve retrocesso) só poderia ser comprovada ou confirmada algum tempo após a entrada em vigor da IN nº 1/2018, permitindo a avaliação de seus efeitos e a realização de estudos que avaliassem o retrocesso.

Ainda analisando-se a resposta do IBAMA ao questionamento da Agência Nacional do Petróleo, Gás e Biocombustíveis (ANP) (Processo nº 48610.006818/2018-11) a respeito da entrada em vigor da IN nº 1/2018, verifica-se que foi tido como viável e necessário aguardar o posicionamento da Advocacia Geral da União (AGU) para a resolução da divergência jurídica entre os órgãos de assessoramento do IBAMA e a ANP. Após o posicionamento da AGU, para evitar-se o vácuo regulatório, foram estabelecidas diretrizes (BRASIL, 2019b) a serem seguidas até o posicionamento final e a publicação de um novo texto pelo IBAMA, o que ainda não ocorreu.

Portanto, além do que aqui já foi exposto em termos da técnica, a avaliação que culminou na suspensão da IN nº1/2018 ocorreu com base jurídica, uma vez que foi considerado pela ANP (e pelo IBP) no Processo nº 48610.006818/2018-11 que a Política Nacional dos Resíduos Sólidos (Lei nº 12.305/2010) não deveria ser o instrumento jurídico legal para basear a IN nº 1/2018 (no que diz respeito ao ‘descarte zero’ na locação), mas sim a Lei nº 9966/2000 que trata especificamente do controle da poluição gerada pelo lançamento de óleo e outras substâncias nocivas em águas sob jurisdição nacional (BRASIL, 2018d). Esta divergência serviu de baliza para a suspensão da IN nº 1/2018.

Conclui-se que: os efeitos do impacto ambiental a outros ecossistemas além do marítimo, a suspensão da IN nº 1/2018 antes de sua entrada em vigor e a utilização da Lei nº 12.305/2010 para a instituição do ‘descarte zero’, apontada pela ANP como equivocada, parece justificar, na prática, a ausência de retrocesso ambiental, de acordo com o conceito do Princípio da Proibição do Retrocesso, uma vez que o ambiente físico da locação das perfurações não experimentou uma condição mais protecionista como a proposta na IN nº 1/2018. Contudo, cabe ressaltar, que esta conclusão só é possível tendo em vista as prorrogações de prazo para atendimento à IN nº1/2018 e que a sua suspensão ocorreu antes da entrada em vigor. Caso contrário, estaria caracterizado o retrocesso ambiental, a partir do momento em que fosse provado que as medidas propostas na IN nº1/2018 traria, de fato, avanço na proteção ao meio ambiente.

5. CONCLUSÃO

Foi possível, pela análise da legislação apresentada neste artigo, a observação da busca pelo aprimoramento do arcabouço legal no que diz respeito à necessária procura pelo aumento da proteção ambiental, preconizada pelo caráter progressista da Constituição Federal de 1988. Desde 1981 até 2018 foram colocadas diversas leis, decretos, resoluções, notas técnicas e instruções normativas com este objetivo de regulamentar, licenciar e conceder permissão de operação dos empreendimentos marítimos de perfuração de poços de petróleo e gás.

Atentou-se para o detalhe da suspensão da Instrução Normativa nº 1/2018, o que chamou atenção na quebra da busca constante citada anteriormente, uma vez que suspendeu o início da aplicação de regras mais restritivas ao descarte de fluidos de perfuração, o que poderia colocar em risco de retrocesso o ecossistema marinho.

Em face a esta situação, percebe-se a relevância do Princípio da Proibição do Retrocesso Ambiental na busca constante pelo meio ambiente ecologicamente equilibrado, sustentado pela

Constituição Federal, com o objetivo, alinhado à sustentabilidade, de garantir às gerações futuras uma condição ambiental mais protecionista ou pelo menos igual à vivenciada no presente.

Ao analisar especificamente o caso da suspensão da Instrução Normativa nº 1/2018, percebe-se uma série de óbices considerados na avaliação desta suspensão. O primeiro deles está relacionado às consequências diretas da aplicação do texto da IN nº 1/2018. Admitindo-se a aplicação da totalidade deste texto, abriu-se uma série de questionamentos válidos a respeito de novos impactos ambientais gerados através da necessidade de transporte, coleta e destinação adequada dos fluidos de perfuração e cascalhos, atualmente descartados no ambiente marinho (obedecidos uma série de critérios), em estações de tratamento de efluentes terrestres, estendendo o impacto das atividades de perfuração não somente ao ambiente marinho, mas também ao ambiente aéreo (pelas emissões geradas no transporte) e terrestre (no qual se localizam as estações de tratamento de efluentes).

Outra é a questão da temporalidade, uma vez que, de fato, as medidas mais restritivas não chegaram a ser colocadas em vigor na prática, o que configura uma não alteração das condições ambientais já experimentadas nas locações dos empreendimentos e, conseqüentemente, não há como afirmar que houve retrocesso uma vez que não há ao que se retroceder se de fato o progresso não ocorreu.

Por fim, em relação à natureza jurídica da IN nº 1/2018, foi considerado para a sua elaboração o texto da Lei nº 12.305/2010 para a instituição do ‘descarte zero’ e isto foi motivo de impugnação por parte da ANP que, considerou imprópria a utilização desta lei, uma vez que, segundo este órgão, este tema deve ser pautado pela Lei nº 9966/2000, o que foi prontamente considerado na análise do pleito de pedido de providências que acabou culminando na suspensão da IN nº 1/2018. Contudo, cabe ressaltar que, após o parecer da Advocacia Geral da União (AGU), as discussões em relação ao texto da IN nº 1/2018 puderam ser retomadas, devido ao fato deste parecer ser favorável à visão do IBAMA no que tange a sua competência regulamentadora, o qual poderá instituir o não descarte no mar ou o ‘descarte zero’ se assim desejar, não precisando necessariamente fazê-lo pautado na Lei nº 12.305/2010.

Aparentemente, portanto, não há como afirmar que houve retrocesso ambiental na suspensão da IN nº 1/2018 por todos os motivos apontados anteriormente. Contudo, cabe ressaltar que a evolução na proteção ambiental é dever do Estado, e apenas o ato de suspender as novas medidas não é suficiente. É preciso mais.

É preciso e esperado que se garanta que novas ações serão colocadas no sentido de caminhar na direção de ampliar a proteção ao meio ambiente, de forma a não gerar controvérsias como ocorreu no caso da IN nº 1/2018 e ainda assim garantir a progressão da proteção ambiental. Como foi visto

neste artigo, ameaças à evolução da proteção ao meio ambiente são recorrentes e é preciso cautela na análise de pleitos que visem a revogação ou suspensão de alguma normativa.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BARCELLOS, Ana Paula de. **A eficácia jurídica dos princípios constitucionais: o princípio da dignidade da pessoa humana**. Rio de Janeiro/São Paulo: Renovar, 2002.

BARROSO, Luís Roberto. **O direito constitucional e a efetividade de suas normas**. Rio de Janeiro: Renovar, 2003.

BENJAMIN, A. H. Princípio da Proibição do Retrocesso Ambiental. In: COMISSÃO DE MEIO AMBIENTE, DEFESA DO CONSUMIDOR E FISCALIZAÇÃO E CONTROLE DO SENADO FEDERAL. **O princípio da proibição do retrocesso ambiental**. Brasília: Senado Federal, 2012, p. 55- 72.

BRASIL. Lei nº 6938, de 31 de agosto de 1981. Dispõe sobre a Política Nacional do Meio Ambiente, seus fins e mecanismos de formulação e aplicação, e dá outras providências. Disponível em: https://www.planalto.gov.br/ccivil_03/leis/16938.htm. Acesso em 12 de setembro de 2021. 1981.

BRASIL. Decreto nº 99.274 de 6 de junho de 1990. Regulamenta a Lei nº 6.902, de 27 de abril de 1981, e a Lei nº 6.938, de 31 de agosto de 1981, que dispõem, respectivamente sobre a criação de Estações Ecológicas e Áreas de Proteção Ambiental e sobre a Política Nacional do Meio Ambiente, e dá outras providências. Disponível em: https://www.planalto.gov.br/ccivil_03/decreto/antigos/d99274.htm. Acesso em 12 de setembro de 2021. 1990.

BRASIL. Resolução CONAMA nº 23 de 7 de dezembro de 1994. Institui procedimentos específicos para o licenciamento de atividades relacionadas à exploração e lavra de jazidas de combustíveis líquidos e gás natural. **Diário Oficial da União**, Brasília, DF, seção 1, p. 21345 – 21346, 30 de dezembro de 1994.

BRASIL. Emenda Constitucional nº 9, de 9 de novembro de 1995. Dá nova redação ao art. 177 da Constituição Federal, alterando e inserindo parágrafos. Disponível em: http://www.planalto.gov.br/ccivil_03/Constituicao/Emendas/Emc/emc09.htm. Acesso em 12 de

setembro de 2021. 1995.

BRASIL. Lei nº 9478, de 6 de agosto de 1997. Dispõe sobre a política energética nacional, as atividades relativas ao monopólio do petróleo, institui o Conselho Nacional de Política Energética e a Agência Nacional do Petróleo e dá outras providências. Disponível em: <http://www.planalto.gov.br/ccivil_03/LEIS/L9478.htm. Acesso em 12 de setembro de 2021. 1997a.

BRASIL. Resolução CONAMA nº 237 de 19 de dezembro de 1997. Dispõe sobre a revisão e complementação dos procedimentos e critérios utilizados para o licenciamento ambiental. Disponível em:

https://www.icmbio.gov.br/cecav/images/stories/downloads/Legislacao/Res_CONAMA_237_1997.pdf. Acesso em 12 de setembro de 2021. 1997b.

BRASIL. Lei nº 9.996 de 28 de abril de 2000. Dispõe sobre a prevenção, o controle e a fiscalização da poluição causada por lançamento de óleo e outras substâncias nocivas ou perigosas em águas sob jurisdição nacional e dá outras providências. Disponível em: https://www.planalto.gov.br/ccivil_03/leis/19966.htm. Acesso em 12 de setembro de 2021. 2000.

BRASIL. Resolução CONAMA nº 357 de 17 de março de 2005. Dispõe sobre a classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para o seu enquadramento, bem como estabelece as condições e padrões de lançamento de efluentes, e dá outras providências. **Diário Oficial da União**, nº 53, p. 58-63. Brasília, DF, 18 de março de 2005. 2005.

BRASIL. Lei nº 12.305 de 2 de agosto de 2010. Institui a Política Nacional de Resíduos Sólidos; altera a Lei nº 9.605, de 12 de fevereiro de 1998; e dá outras providências. Disponível em: https://www.planalto.gov.br/ccivil_03/_ato2007-2010/2010/lei/112305.htm. Acesso em 12 de setembro de 2021. 2010.

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. Nota Técnica CGPEG/DILIC/IBAMA nº 01/11. Projeto de Controle da Poluição. Diretrizes para apresentação, implementação e para elaboração de relatórios, nos processos de licenciamento ambiental dos empreendimentos marítimos de exploração e produção de petróleo e gás. Disponível em: <http://www.ibama.gov.br/phocadownload/licenciamento/petroleo-e-gas/notas-tecnicas/1-2011-01-nota-tecnica-programa-de-controle-da-poluicao.pdf>. Acesso em 12 de setembro de 2021. Rio de Janeiro, 22 de março de 2011. 2011a.

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. Nota Técnica CGPEG/DILIC/IBAMA nº 07/11. Projeto de

Controle da Poluição. Resíduos sólidos das atividades de Exploração e Produção de petróleo e gás em bacias sedimentares marítimas do Brasil no ano de 2009 – Consolidação dos resultados da Nota Técnica CGPEG/DILIC/IBAMA nº 08/ 08. Disponível em: <http://www.ibama.gov.br/phocadownload/licenciamento/petroleo-e-gas/notas-tecnicas/1-2011-07-nota-tecnica-projeto-de-controle-da-poluicao.pdf>. Acesso em 12 de setembro de 2021. Rio de Janeiro, 04 de novembro de 2011. 2011b.

BRASIL. Senado Federal. **O Princípio da Proibição do Retrocesso Ambiental**. Comissão de Meio Ambiente, Defesa do Consumidor e Fiscalização e Controle. Disponível em: <https://www.mpma.mp.br/arquivos/CAUMA/Proibicao%20de%20Retrocesso.pdf>. Acesso em 12 de setembro de 2021. Brasília, 2012.

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. Instrução Normativa nº 1/2018, de 02 de janeiro de 2018. Define diretrizes que regulamentam as condições ambientais para o uso e descarte de fluidos, cascalhos e pastas de cimento nas atividades de perfuração marítima de poços e produção de petróleo e gás, estabelece o Projeto de Monitoramento de Fluidos e Cascalhos, e dá outras providências. Brasília, Instituto Nacional do Meio Ambiente e Recursos Naturais Renováveis, 2018. Disponível em: <http://www.ibama.gov.br/component/legislacao/?view=legislacao&legislacao=137998>. Acesso em: 12 de setembro de 2021. 2018a.

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. Instrução Normativa Nº 08/2018, de 23 de fevereiro de 2018. A entrada em vigor da Instrução Normativa nº 1, de 02 de janeiro de 2018, publicada no Diário Oficial da União de 11 de janeiro de 2018, fica prorrogada para 30 de junho de 2018. Brasília. Instituto Nacional do Meio Ambiente e Recursos Naturais Renováveis, 2018. Disponível em: <https://www.ibama.gov.br/component/legislacao/?view=legislacao&force=1&legislacao=138200>. Acesso em 20 de agosto de 2021. 2018b.

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. Instrução Normativa Nº 16/2018, de 25 de junho de 2018. Art. 5º da Instrução Normativa nº 1, de 02 de janeiro de 2018, publicada no Diário Oficial da União de 11 de janeiro de 2018, passa a vigorar acrescida do seguinte dispositivo. **Diário Oficial da União**, Brasília, DF, seção 1, p. 44. 26 de junho de 2018c.

BRASIL, Ministério do Meio Ambiente. Instituto do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis (IBAMA). Sistema Eletrônico de Informações. Processo nº 48610.006818/2018-11.

Disponível em: https://sei.ibama.gov.br/sip/login.php?sigla_orgao_sistema=IBAMA&sigla_sistema=SEI. Acesso em 12 de setembro de 2021. 2018d.

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. Instrução Normativa nº 11/2019, de 14 de março de 2019. Suspender o início de vigência da Instrução Normativa nº 1, de 02 de janeiro de 2018. **Diário Oficial da União**, Brasília, DF, seção 1, p. 184. 18 de março de 2019a.

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. Despacho nº 5540547/2019, SEI 5533803 de 29 de julho de 2019. Define diretrizes para uso e descarte de fluidos de perfuração e cascalhos, fluidos complementares e pastas de cimento nos processos de licenciamento ambiental dos empreendimentos de perfuração marítima de poços de exploração e produção de petróleo e gás nas atividades de perfuração marítima de poços e produção de petróleo e gás. Brasília: Instituto Nacional do Meio Ambiente e Recursos Naturais Renováveis, 2019. Disponível em: https://sei.ibama.gov.br/controlador_externo.php?acao=usuario_externo_logar&id_orgao_acesso_externo=0. Acesso em 12 de setembro de 2021. 2019b.

MOLINARO, C. A. Interdição da Retrogradação Ambiental. In: COMISSÃO DE MEIO AMBIENTE, DEFESA DO CONSUMIDOR E FISCALIZAÇÃO E CONTROLE DO SENADO FEDERAL. **O princípio da proibição do retrocesso ambiental**. Brasília: Senado Federal, 2012, p.73- 120.

PRIEUR, M. Princípio da Proibição do Retrocesso Ambiental. In: COMISSÃO DE MEIO AMBIENTE, DEFESA DO CONSUMIDOR E FISCALIZAÇÃO E CONTROLE DO SENADO FEDERAL. **O princípio da proibição do retrocesso ambiental**. Brasília: Senado Federal, 2012, p.11 - 54.

SARLET, I. W. FENTERSEIFER, T. Notas Sobre a Proibição de Retrocesso em Matéria (Socio)Ambiental. In: COMISSÃO DE MEIO AMBIENTE, DEFESA DO CONSUMIDOR E FISCALIZAÇÃO E CONTROLE DO SENADO FEDERAL. **O princípio da proibição do retrocesso ambiental**. Brasília: Senado Federal, 2012, p. 121 – 206.

SCHAFFEL, S. B. **A questão ambiental na etapa de perfuração de poços marítimos de óleo e gás no Brasil**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2002. 130f.

VILANI, R. M. Legislação e política ambiental no Brasil: as possibilidades do desenvolvimento sustentável e os riscos do retrocesso ambiental. **Revista Brasileira de Pós-graduação**, v. 10, n. 21, p.817- 847, 2013.

ARTIGO CIENTÍFICO 2

MINERAÇÃO DE DADOS E PREVISÃO DA ECOTOXICIDADE DE FLUIDOS DE PERFURAÇÃO – UMA REVISÃO SISTEMÁTICA

DATA MINING AND ECOTOXICITY PREDICTION OF DRILLING FLUIDS – A SYSTEMATIC REVIEW

Leomir Samuel Tormen Reis - IFFluminense/PPEA

Victor Barbosa Saraiva – IFFluminense/PPEA

Simone Vasconcelos Silva – IFFluminense/SAEG

RESUMO

O comportamento ecotoxicológico de fluidos de perfuração pode ser estudado pela relação entre a ecotoxicidade de um fluido com suas propriedades físico-químicas e a concentração de seus componentes. Por se tratar de uma mistura complexa, os componentes do fluido influenciam de formas diferentes na ecotoxicidade da mistura. De posse de uma base de dados contendo resultados de testes de ecotoxicidade de amostras de fluidos de perfuração conhecidas, pode-se aplicar técnicas computacionais, como a Mineração de Dados, objetivando a previsão e extração de conhecimento, que podem ser empregadas em ferramentas de análises de risco e tomada de decisão. Este artigo tem como objetivo elaborar uma revisão sistemática da literatura para responder à questão de pesquisa: Quais são as técnicas computacionais mais utilizadas para a previsão e/ou conhecimento do comportamento toxicológico de fluidos de perfuração, conhecida a sua composição e suas propriedades físico-químicas? Para tanto, foram utilizadas três bases de dados e os resultados mostraram que a toxicologia computacional tem sido amplamente utilizada na previsão de toxicidade, contudo não há estudos relacionados a fluidos de perfuração nas bases de dados utilizadas. Foi possível concluir que para a previsão e/ou conhecimento do comportamento toxicológico dos fluidos são aplicadas técnicas computacionais de Mineração de Dados, utilizando a tarefa de Classificação por meio dos algoritmos *Support Vector Machines* e *Random Forest*.

Palavras-chave: Mineração de dados. Ecotoxicidade. Toxicologia. Toxicidade. Fluidos de perfuração.

ABSTRACT

The ecotoxicological behavior of drilling fluids can be studied by the relationship between the fluid ecotoxicity with its physical-chemical properties and the components's concentrations. Because it is a complex mixture, the components of the fluid influence the ecotoxicity of the mixture in different ways. With a database containing ecotoxicity test results of known drilling fluid samples, computational techniques such as Data Mining can be applied, aiming at forecasting and extracting knowledge, which can be used in analysis tools risk and decision making. This article aims to elaborate a systematic review of the literature to answer the research question: What are the most used computational techniques for the prediction and/or knowledge of the toxicological behavior of drilling fluids, knowing their composition and their physical-chemical properties? For that, three databases were used and the results showed that computational toxicology has been widely used in the prediction of toxicity, however there are no studies related to drilling fluids in the databases used. It was possible to conclude that for the prediction and/or knowledge of the toxicological behavior of the fluids, computational techniques of Data Mining are applied, using the Classification task through the Support Vector Machines and Random Forest algorithms.

Keywords: *Data mining. Ecotoxicity. Toxicology. Toxicity. Drilling fluids.*

1. INTRODUÇÃO

Fluidos de perfuração são utilizados na perfuração de poços de petróleo, terrestres ou marítimos, e possuem diversas funções tais como: transportar os fragmentos de rocha perfurados (cascalhos) até a superfície da plataforma de perfuração; promover a estabilidade do poço; controlar a pressão em subsuperfície e conferir lubricidade às ferramentas de perfuração (BAKER HUEGUES, 2016).

Estes fluidos são, em geral, constituídos por uma mistura de produtos químicos que tem por finalidade conferir as propriedades físico-químicas necessárias aos fluidos para que atendam às funções requeridas na perfuração. No que diz respeito à composição, os fluidos de perfuração podem ser de base aquosa ou não aquosa. Além disto, a formulação (composição) destes fluidos deve estar de acordo com diversos critérios ambientais para seu uso e descarte, assim como os cascalhos associados aos fluidos. Estes critérios são, no Brasil, normatizados pelo Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis (IBAMA) (BRASIL, 2018; BRASIL, 2019).

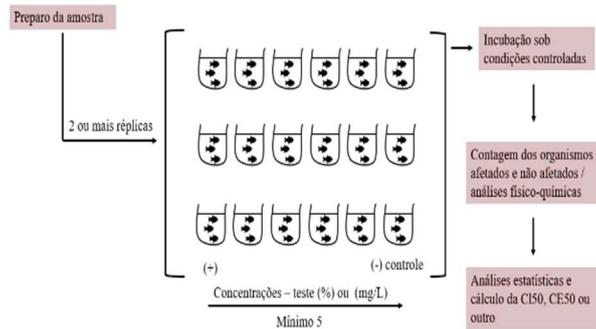
Os critérios para uso e descarte de fluidos de perfuração atualmente adotados para a perfuração de poços marítimos no Brasil estão apresentados pelo IBAMA no Despacho nº 5540547/2019 (BRASIL, 2019). Um destes critérios é a ecotoxicidade aguda, que deve ser determinada por meio de teste laboratorial seguindo os procedimentos apresentados normas NBR 15308 (ABNT, 2017) e NBR 15469 (ABNT, 2015) e está relacionada diretamente à composição dos fluidos, uma vez que os seus componentes conferem maior ou menor grau de toxidez à mistura.

Conforme esta metodologia, o teste consiste na exposição de uma série de diluições do material a ser analisado à um organismo teste. Neste caso específico, podem ser utilizados organismos *Mysidopsis juniae* e *Mysidopsis gracile* (ABNT, 2017). A Figura 1 apresenta um desenho esquemático da realização do teste de ecotoxicidade aguda.

Ao final do teste é calculada a porcentagem de letalidade para cada uma das diluições e, assim, determinada a concentração letal (CL) da amostra na qual ocorreu a letalidade de 50% dos organismos testes, após 96 horas de exposição, chamada de CL50-96h.

O valor da CL50-96h é o critério adotado pelo IBAMA no Despacho nº 5540547/2019 e deve ser igual ou superior a 30.000 ppm (30.000 mg/L). Neste caso, as amostras não são consideradas tóxicas e, conseqüentemente, obedecem ao critério de ecotoxicidade para uso e descarte de fluidos de perfuração e cascalhos associados a estes fluidos. Caso seja menor que 30.000 ppm, a amostra é considerada tóxica e neste caso, o fluido e os cascalhos associados não podem ser descartados no ambiente marinho (BRASIL, 2019).

Figura 1: Desenho esquemático de um ensaio de toxicidade.



Fonte: VEIGA (2010), adaptado.

Cabe ressaltar que a ecotoxicidade é apenas um dos critérios do monitoramento ambiental da atividade e, portanto, não pode ser utilizado isoladamente para determinação da permissão do uso e descarte de fluidos de perfuração.

Portanto, para atender aos requisitos ambientais e ao monitoramento ambiental da perfuração de poços, amostras dos fluidos de perfuração utilizados são encaminhadas aos laboratórios para a realização do teste de ecotoxicidade aguda e assim é determinada a CL50-96h de cada um dos fluidos utilizados. Contudo, os testes são realizados após a utilização e descarte dos fluidos e cascalhos e, em caso de reprovação, ou seja, constatada a CL50-96h menor que 30.000 ppm, o fluido não pode ser descartado no mar.

Logo, considerando-se que a ecotoxicidade aguda dos fluidos de perfuração está associada aos componentes deste fluido e de suas propriedades físico-químicas, é relevante o estudo da influência de cada um destes componentes, ou da mistura como um todo, na ecotoxicidade aguda apresentada pelo fluido de perfuração.

Em uma revisão sistemática, Aslan (2018) mostrou que muitos estudos avaliam a influência de determinados componentes do fluido em sua toxicidade. Outros, como o apresentado por Veiga (1998), avaliam os efeitos ecotoxicológicos de um mesmo fluido em diferentes organismos. Entretanto, poucos estudos avaliam a resposta ecotoxicológica considerando um maior número de variáveis, o que é relevante tendo em vista que os fluidos de perfuração são constituídos por uma mistura de produtos químicos.

Assim, de posse de uma base de dados contendo os componentes utilizados na formulação dos fluidos de perfuração, suas concentrações e o resultado dos testes de ecotoxicidade já realizados, pretende-se utilizar a mineração de dados para averiguar a relação entre as concentrações dos componentes do fluido, assim como suas propriedades físico-químicas e o CL50-96h, buscando gerar conhecimento e a possibilidade de prever o valor do CL50-96h, conhecendo-se a composição do fluido, sem a necessidade de realização do teste de laboratório.

Esta previsão pode ser realizada em momento anterior à utilização do fluido, evitando ou diminuindo as chances de utilização de algum fluido de perfuração que venha a ser considerado tóxico após a realização do teste laboratorial de ecotoxicidade aguda.

A previsão do comportamento toxicológico de substâncias químicas por métodos computacionais de análises de dados vem sendo amplamente estudada recentemente. Esta área de estudo é conhecida como toxicologia computacional e lida com três desafios principais: i) modelagem de processos contínuos de substâncias químicas de fontes de que possuam efeito ecológico adverso; ii) avaliação de riscos de utilização de diferentes substâncias e iii) previsão do risco de substâncias químicas expostas a organismos de diversas espécies (TANG et al., 2019).

Na toxicologia computacional é possível fornecer ferramentas úteis para tomada de decisão por meio da utilização da modelagem computacional e de técnicas de mineração de dados, podendo reduzir ou eliminar a necessidade de realização dos testes tradicionais, como toxicidade aguda, diminuindo, portanto, a necessidade de testes em animais (MISHRA; FEI; HUAN, 2013).

A mineração de dados (MD) pode ser descrita como uma exploração de base de dados por meio do uso de tarefas adequadas para extração de conhecimento no formato de padrões e regras (FERRARI e SILVA, 2017). Nesse sentido, Lorenzetti e Teloken (2016) destacam que a MD é composta por diversas tarefas criadas para facilitar a descoberta de algo novo e que possa contribuir no conhecimento a partir de milhares de informações. Desse modo, os algoritmos de MD são baseados em um tipo de tarefa.

As tarefas mais utilizadas são classificação, regressão, agrupamento e associação (WITTEN; FRANK; HALL, 2016): (i) classificação é o processo de encontrar um modelo que descreve e distingue classes ou conceitos de dados; (ii) regressão modela funções de valor contínuo, envolvendo a identificação de tendências de distribuição com base nos dados disponíveis; (iii) agrupamento é descrito como um conjunto de dados, onde é possível agrupar os dados iguais juntos em um mesmo grupo e os desiguais em grupos distintos; e (iv) associação tem como objetivo elaborar uma representação explícita entre os objetos, visando determinar relacionamentos entre conjuntos de itens de associação.

Nesse contexto, o objetivo inicial deste trabalho visava a elaboração de uma revisão sistemática da literatura capaz de responder à questão de pesquisa geral: QP - Quais são as técnicas computacionais mais utilizadas para a previsão e/ou conhecimento do comportamento toxicológico de fluidos de perfuração, conhecida a sua composição e suas propriedades físico-químicas?

Para tal, foi realizada a busca na literatura nas bases de dados *Scopus*, *Web of Science* e Catálogo de Teses e Dissertações da CAPES. Esta busca foi realizada da mesma forma nas três bases, utilizando-

se os seguintes tesouros: toxicidade, ecotoxicidade, fluidos de perfuração, mineração de dados e aprendizado de máquina.

O termo de busca, em todas as bases foi: (*toxicity OR ecotoxicity*) AND (“*drilling fluid** OR “*drilling mud**”) AND (“*data mining*” OR “*machine learning*”). Este termo foi escolhido para ampliar os resultados aderentes ao tema em questão, uma vez que: i) o termo ecotoxicidade é também expresso na literatura como toxicidade ambiental ou apenas toxicidade; ii) o termo fluido de perfuração é também relatado como lama de perfuração em alguns casos e iii) mineração de dados e aprendizado de máquina são temas entrelaçados e uma análise minuciosa nos achados literários deve ser realizada para se determinar a aderência ao tema em questão.

A busca foi realizada no primeiro trimestre de 2022, e não retornou resultados, o que indica que não foi encontrado até o momento da busca estudos relacionando os três temas relevantes a esta pesquisa (ecotoxicidade - ou toxicidade, mineração de dados e fluidos de perfuração). Além disto, a ausência de resultados indica também uma lacuna na documentação científica relacionada à previsão da ecotoxicidade de fluidos de perfuração.

Diante deste cenário, o objetivo do presente trabalho foi alterado, provendo a elaboração de uma revisão sistemática da literatura a fim de responder as seguintes questões específicas de pesquisa: QEP1 – Como é feita a Ecotoxicologia de fluidos de perfuração? e QEP2 – Como a Mineração de Dados é utilizada para previsão da toxicidade? Por meio das respostas obtidas para as duas questões acima, este trabalho visa propor uma resposta para a questão de pesquisa geral proposta (QP).

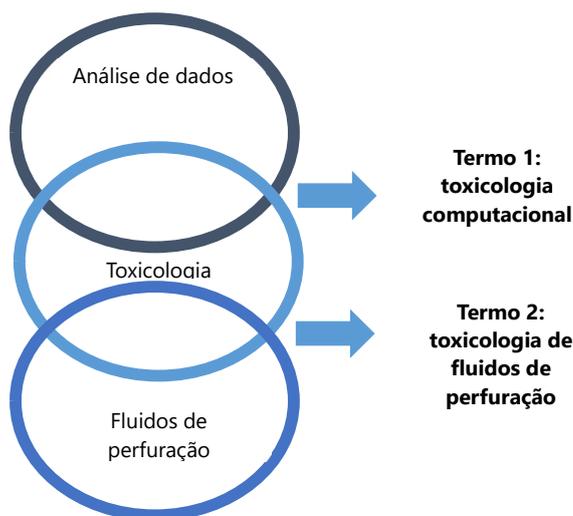
2. MATERIAL E MÉTODO

Foram realizadas buscas nas bases Scopus, Web of Science e Catálogo de Teses e Dissertações da CAPES. As buscas realizadas foram divididas em duas categorias, de modo a responder as duas questões de pesquisa propostas: i) para QP1, utilizando os seguintes termos: (*toxicity OR ecotoxicity*) AND (“*drilling fluid** OR “*drilling mud**”); e ii) para QP2, utilizando os seguintes termos: (“*toxicity prediction*” OR “*ecotoxicity prediction*”) AND (“*data mining*” OR “*machine learning*”).

Optou-se pela busca do termo já combinado “previsão de toxicidade (ou ecotoxicidade)” em função de que estudos relacionados à toxicidade de substâncias químicas voltadas à área médica estão amplamente descritos na literatura, sobretudo com foco em fármacos e, portanto, o termo escolhido foi utilizado para a obtenção de resultados que tratam da previsão de toxicidade.

A Figura 02 mostra um desenho esquemático do comportamento observado dos relatos encontrados na busca na literatura, no que diz respeito às interseções das áreas afins.

Figura 2: Análise dos resultados da busca na literatura.



Fonte: própria (autores).

Observando-se a Figura 2, percebe-se que estão documentadas na literatura as previsões ecotoxicológicas por meio de métodos computacionais de mineração de dados e aprendizado de máquina, bem como análises de estudos de dados ecotoxicológicos de fluidos de perfuração.

A interseção dos temas mineração de dados, aprendizado de máquina e ecotoxicologia, corresponde à área de previsão de toxicidade (ou toxicologia computacional), por meio da qual é possível a utilização de métodos computacionais para a previsão da ecotoxicidade de uma determinada amostra, seja substância pura ou mistura.

A interseção dos temas ecotoxicologia e fluidos de perfuração corresponde à ecotoxicologia de fluidos de perfuração, amplamente documentada tendo em vista que a ecotoxicidade é um dos critérios para uso e descarte de fluidos de perfuração no Brasil e no mundo.

2.1. Ecotoxicologia de fluidos de perfuração

A busca dos dados referentes à ecotoxicologia de fluidos de perfuração foi realizada com o seguinte termo de busca: (*toxicity* OR *ecotoxicity*) AND (“*drilling fluid**” OR “*drilling mud**”). Utilizou-se como critério para refinamento, a busca de relatos publicados nos últimos 20 anos e relatos que sejam artigos publicados em periódicos, teses ou dissertações, o que exclui resumos e artigos de conferências.

O filtro temporal de 20 anos foi utilizado em função do avanço das legislações ambientais a partir do ano 2000 e pelo fato de que pesquisas em anos anteriores podem estar defasadas em relação às legislações atuais, bem como em relação ao tema propriamente dito.

Utilizou-se a metodologia PRISMA (*Preferred Reporting Items for Systematic Reviews and Meta-Analyses*) (PAGE et. al., 2021) adaptada para a seleção dos relatos relevantes e que foram lidos integralmente. A Figura 3 apresenta um desenho esquemático do método utilizado na busca dos dados da literatura, bem como os principais resultados e os refinamentos utilizados.

A análise dos títulos e resumos limitou-se a selecionar os relatos que apresentam a relação entre um ou mais componentes dos fluídos de perfuração com sua toxicidade e relatos que tratam de análise de risco e/ou tomada de decisão no que diz respeito à toxicidade de fluidos de perfuração.

Foram descartados estudos que tinham foco em fornecer formulações de fluídos de perfuração para determinado cenário operacional e que traziam pouca ou nenhuma informação toxicológica, mencionando apenas que a formulação proposta atende a determinados critérios toxicológicos.

Foram, então, selecionados 15 relatos para análise e discussão nesta revisão.

2.2. Previsão de toxicidade

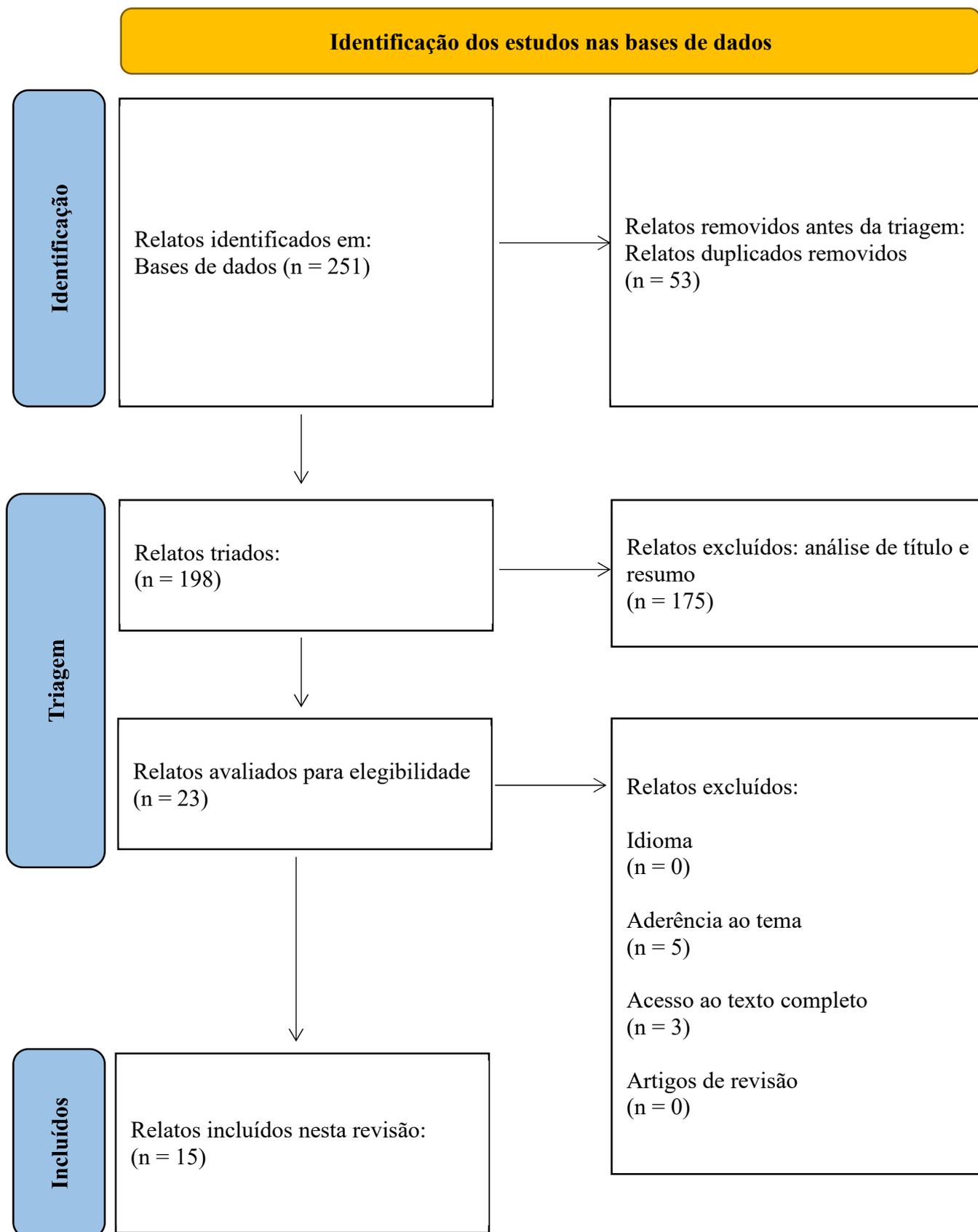
A segunda busca por relatos na literatura foi realizada utilizando-se o seguinte termo de busca, em todas as bases: ("*toxicity prediction*" OR "*ecotoxicity prediction*") AND ("*data mining*" OR "*machine learning*"). Utilizou-se como critério para refinamento, a busca de relatos publicados nos últimos 10 anos e relatos que sejam artigos publicados em periódicos, excluindo-se, portanto, resumos e artigos de conferências.

O filtro temporal de 10 anos foi utilizado, pois, diferentemente da pesquisa relacionada à ecotoxicologia de fluídos de perfuração, a previsão de toxicidade por métodos computacionais é mais recente e está atrelada ao desenvolvimento e disponibilização destes métodos e por isto relatos mais antigos não foram considerados relevantes para este estudo.

Utilizou-se, também, a metodologia PRISMA (PAGE et. al., 2021) adaptada para a seleção dos relatos relevantes. A Figura 4 apresenta um desenho esquemático do método utilizado. A análise dos títulos e resumos limitou-se a selecionar os relatos que apresentam estudos a respeito da previsão da toxicidade de substâncias químicas ou misturas frente a organismos testes, sendo, portanto, excluídos relatos da área da saúde, de toxicidade a humanos, notadamente relacionados a testes de novos fármacos.

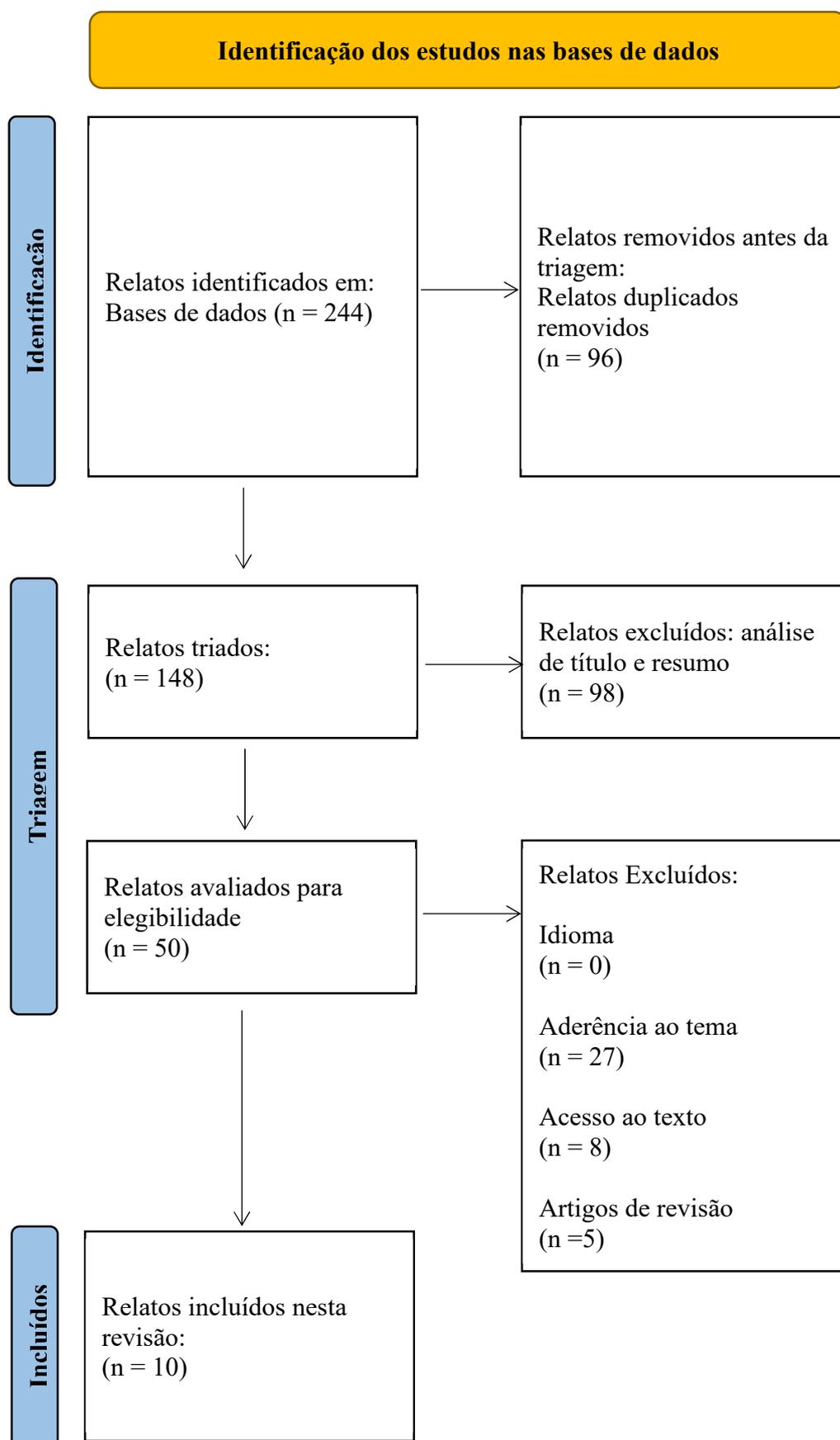
Como pode ser observado na Figura 04, foram selecionados 10 relatos para análise e discussão. O número total de relatos obtidos da literatura e que contemplam estudos sobre a ecotoxicologia de fluídos de perfuração e sobre a previsão de toxicidade, considerando os critérios descritos no método de pesquisa realizado, e elegidos para análise e discussão nesta revisão é de 25 relatos.

Figura 3: Método PRISMA adaptado (PAGE et. al, 2021). Ecotoxicologia de fluidos de perfuração.



Fonte: própria (autores)

Figura 4: Método PRISMA adaptado (PAGE et. al, 2021). Previsão de toxicidade.



Fonte: própria (autores)

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta seção serão apresentados os resultados dos relatos selecionados, assim como uma discussão dos principais resultados obtidos.

3.1. Ecotoxicologia de fluidos de perfuração

A Tabela 1 apresenta uma síntese dos principais resultados encontrados em cada estudo selecionado sobre ecotoxicologia de fluidos de perfuração.

Tabela 1: Principais informações dos relatos analisados sobre ecotoxicologia de fluidos de perfuração.

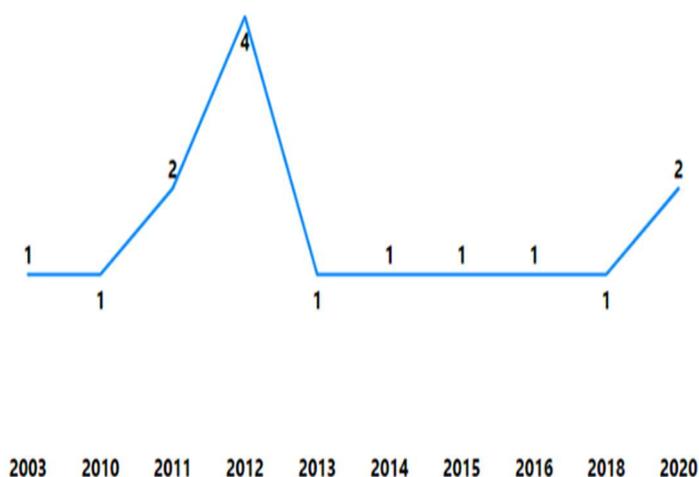
Autores	Ano	País	Periódicos	Quartil	Substância testada	Tipo de ensaio
Qu et. al.	2020	China	<i>Chemistry and Technology of Fuels and Oils</i>	Q3	Componente	Toxicidade aguda e biodegradabilidade
Sun et. al.	2020	China	<i>Frontiers in Chemistry</i>	Q1	Fluido	Toxicidade aguda
Aslan	2018	Brasil	Catálogo de teses e dissertações	---	Fluido e componentes	Toxicidade aguda e toxicidade crônica
Chen et. al.	2016	China	<i>Journal of Cleaner Production</i>	Q1	Fluido e componentes	Toxicidade aguda
Durgut et. al.	2015	Noruega	<i>Marine Pollution Bulletin</i>	Q1	Fluido	Toxicidade aguda e toxicidade crônica
Steliga, Uliasz	2014	Polônia	<i>Mineral Resources Management</i>	Q3	Fluido	Toxicidade aguda e biodegradabilidade
Gagnon, Bakhtyar	2013	Austrália	<i>PLoS ONE</i>	Q1	Componente	Toxicidade crônica
Bakhtyar, Gagnon	2012	Austrália	<i>Environmental Monitoring and Assessment</i>	Q2	Componente	Toxicidade crônica
Sil et. al.	2012	Índia	<i>Journal of Hazardous, Toxic, and Radioactive Waste</i>	Q2	Fluido	Toxicidade aguda e biodegradabilidade
Ge et. al.	2012	China	<i>Petroleum Science and Technology</i>	Q2	Fluido	Toxicidade aguda e biodegradabilidade
Xie et. al.	2012	China	<i>Petroleum science and technology</i>	Q2	Fluido	Toxicidade aguda e biodegradabilidade
Lira et. al.	2011	Bélgica e Brasil	<i>Marine Environmental Research</i>	Q3	Componente	Toxicidade crônica

Ogeleka, Tudararo-Aherobo	2011	Nigéria	<i>African journal of aquatic science</i>	Q3	Fluido	Toxicidade aguda
Favour, Vincent-Akpu, et. al.	2010	Nigéria	Ciência Rural	Q3	Fluido	Toxicidade aguda
Sadiq et. al.	2003	Canadá	<i>International Journal of Environmental Studies</i>	Q3	Fluido	Toxicidade aguda

A Figura 5 mostra o número de relatos por ano de publicação. Observa-se um número crescente de publicações entre 2010 e 2012 e um número constante nos anos seguintes.

Figura 5: Número de relatos por ano de publicação.

Fonte: Autores.



Um mapa esquemático do número de relatos por país de publicação é apresentado na Figura 6. Nota-se que os países que mais publicaram sobre a ecotoxicologia de fluidos de perfuração nos últimos anos foram a China (5 estudos), a Austrália (2 estudos) e a Nigéria (2 estudos).

Aslan (2018) observou grande representatividade dos países Nigéria e Austrália no que diz respeito ao número de estudos publicados e atribuiu este fato a estes países estarem despontando como novas fronteiras exploratórias de petróleo e, portanto, precisam conhecer a ecotoxicologia dos fluidos de perfuração em relação aos organismos da fauna local para que sejam estabelecidos os critérios a serem adotados no monitoramento ambiental da atividade de perfuração de poços de petróleo e gás destas localidades.

Figura 6: Mapa esquemático do número de relatos por país.

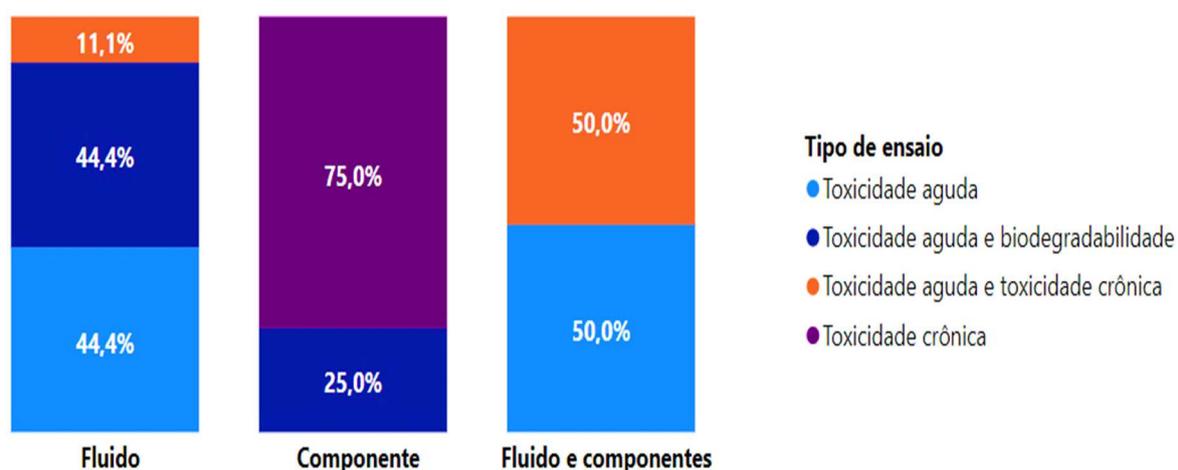


Fonte: Autores.

As Figuras 7, 8 e 9 contribuem para responder à questão de pesquisa QEP1 e são apresentadas e descritas a seguir.

A Figura 7 mostra a relação entre os dados extraídos dos relatos analisados, no que diz respeito à substância testada e ao tipo de teste ecotoxicológico realizado em cada um deles.

Figura 7: Relação entre os tipos de teste e a substância testada.



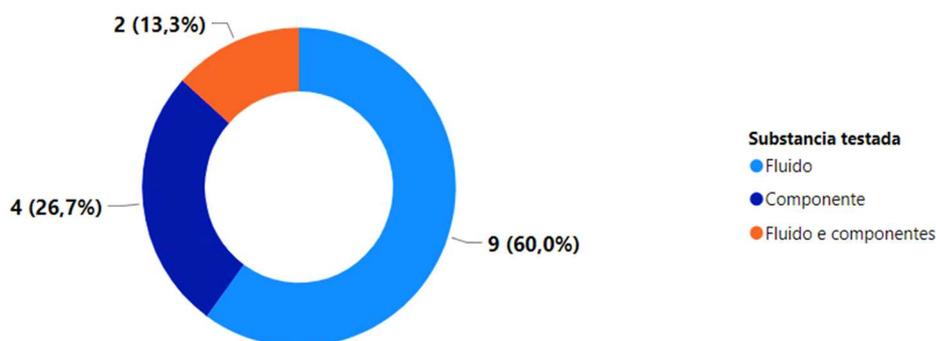
Fonte: Autores.

Observa-se que apenas 11,1% trataram de toxicidade crônica, sendo os demais relacionados a toxicidade aguda (44,4%) e toxicidade aguda e crônica (44,4%). Já em relação aos estudos que utilizaram o componente como substância testada, 75% avaliaram a toxicidade crônica, enquanto os outros 25% trataram de toxicidade aguda e biodegradabilidade. No que se refere aos estudos que

analisaram tanto o fluido como algum de seus componentes, metade deles avaliou a toxicidade aguda e crônica e a outra metade apenas toxicidade aguda.

Em relação à amostra testada nos estudos analisados (componente o fluido de perfuração), pode-se observar na Figura 8 que 60% dos estudos tiveram foco na avaliação da ecotoxicidade do fluido e 26,7% na de seus componentes. Além destes, 13,3% dos estudos avaliaram a toxicidade tanto do fluido quanto de seus componentes.

Figura 8: Número de relatos por tipo de substância.



Fonte: Autores.

Alguns estudos que tratam da análise de componentes de fluido de perfuração têm como objetivo principal a avaliação da toxicidade deste componente em uma formulação de fluidos que atenda aos requisitos ambientais, ou seja, avaliar a performance de um fluido de perfuração que atenda aos critérios operacionais e seja ambientalmente correto.

O estudo de Qu et. al (2020) mostrou que a toxicidade de aminas orgânicas diminui de acordo com a conformação carbônica desta amina, ou seja, aminas primárias são menos tóxicas que aminas secundárias que por sua vez são menos tóxicas que aminas terciárias; além disto, mostraram também que a biodegradabilidade também diminui com o aumento do número de carbonos da conformação, sendo aminas primárias mais biodegradáveis que aminas secundárias e terciárias. Este mesmo estudo mostrou que as aminas são menos tóxicas e mais biodegradáveis que as amidas, ácidos e álcoois. Aminas e amidas são frequentemente utilizadas como agentes anti-cólapse em fluidos de perfuração.

Gagnon e Bakhtyar (2013) mostraram que diferentes bases sintéticas apresentam toxicidade e biodegradabilidade diferentes. Assim, a base éster é mais biodegradável que as bases olefina interna e alfa olefina, por possuir menor peso molecular, entretanto a base apresentou maior toxicidade dentre as três. Este estudo destaca também que a exposição real (em condições de campo) dos organismos da fauna local aos compostos testados não pode ser diretamente extrapolada pela análise dos dados apresentados, que foram obtidos em laboratório.

Sun et. al. (2020) sintetizaram uma base capaz de conferir boa performance operacional a um fluido de perfuração utilizando esta base, bem como aceitação aos critérios de ecotoxicidade. A base sintética em questão possui cadeias carbônicas constituídas de 12 a 22 carbonos e apresenta 10% da toxicidade do diesel.

Sadiq et. al. (2003) mostraram que a base sintética estudada por eles é menos tóxica do que a base óleo, já em desuso. Entretanto, além da toxicidade da base sintética deve-se considerar também a presença de metais pesados como bário, presente na baritina, e de óleo da formação, presente no cascalho na avaliação do descarte de fluidos e cascalhos no ambiente marinho.

Aslan (2018), em sua revisão sistemática da literatura, mostrou que a baritina (sulfato de bário), um dos componentes dos fluidos de perfuração (adensante), contribui para o aumento da toxicidade destes fluidos.

Este comportamento foi relatado também por Chen et. al. (2016), Sadiq et. al (2003) e Lira et. al. (2011), sendo que neste último estudo foi mostrado que concentrações de bário inferiores a 300 ppm não conferiram efeitos toxicológicos à espécie testada (*Rhabditis (Pellioiditis) marina*), entretanto, concentrações entre 400 e 2000 ppm conferiram este efeito, sendo observada mortalidade total dos organismos testes na concentração de 4800 ppm de bário.

A alcalinidade do fluido também influencia em sua toxicidade (ASLAN, 2018). Fluidos de perfuração, em sua maioria, possuem pH alcalino tendo em vista a degradação do próprio fluido em meio ácido. (GE et. al, 2012). Aslan (2018) realizou uma série de testes para avaliar a influência da alcalinidade na toxicidade de fluidos de perfuração e concluiu que a toxicidade aumenta com o aumento do pH e os maiores valores de CL50-96h foram obtidos com pH em torno da neutralidade.

Um dos componentes dos fluidos de perfuração aquosos é o bactericida, que possui função controlar o crescimento de bactérias no fluido, utilizando os polímeros ou outros componentes do fluido como nutrientes, o que pode degradá-lo.

Steliga e Uliasz (2014) mostraram que a concentração de bactericida no fluido de perfuração influencia em sua biodegradabilidade, de forma que quanto maior for a concentração de bactericida, menor é a biodegradabilidade do fluido.

Bakhtyar e Gagnon (2012) evidenciaram que dos muitos componentes do fluido de perfuração, alguns não influenciam na toxicidade, tais como o agente de controle de filtrado e o viscosificante utilizados em seu estudo. Entretanto, outros componentes estão diretamente relacionados à toxicidade do fluido, tais como os emulsificantes, que causaram alterações na atividade da proteína EROD e dano ao DNA dos peixes (organismos testes) da espécie *Pagrus auratus*.

Também utilizando peixes como organismos teste, Vincent-Akpui, Allison e Sikoki (2010), utilizando a espécie de peixe *Tilapia guineenses*, estudaram o comportamento toxicológico de um

fluido de perfuração em diferentes fases da vida destes peixes e concluíram que alevinos são mais sensíveis que larvas e juvenis à exposição ao mesmo fluido. Assim, evidenciou-se que a toxicidade dos fluidos pode desequilibrar a distribuição do número de organismos (peixes) de uma mesma espécie em diferentes estágios de vida. Isto fica ainda mais crítico quando há grande diversidade de espécies vivendo no mesmo local.

No mesmo sentido, o estudo realizado por Sil et. al. (2012), mostrou que diferentes espécies de peixes (*Tilapia mossambica* e *Mugil persia*) são sensíveis ao fluido de perfuração testado e que este fato demonstra a necessidade de uma diretriz ambiental para regulamentação da atividade de perfuração de poços marinhos na Índia.

Durgut et. al. (2015) concluíram em seus estudos realizados com organismos que vivem na camada de sedimentos (comunidade bentônica) que o teor de oxigênio dissolvido no sedimento diminui quando ocorre a disposição de cascalhos de perfuração no fundo do mar em cerca de 6 cm em relação ao sedimento original. Esta diminuição é consequência da degradação da matéria orgânica depositada juntamente com os cascalhos (fluido aderido) e que a concentração original de oxigênio dissolvido é retomada cerca de 1 ano após a deposição do resíduo.

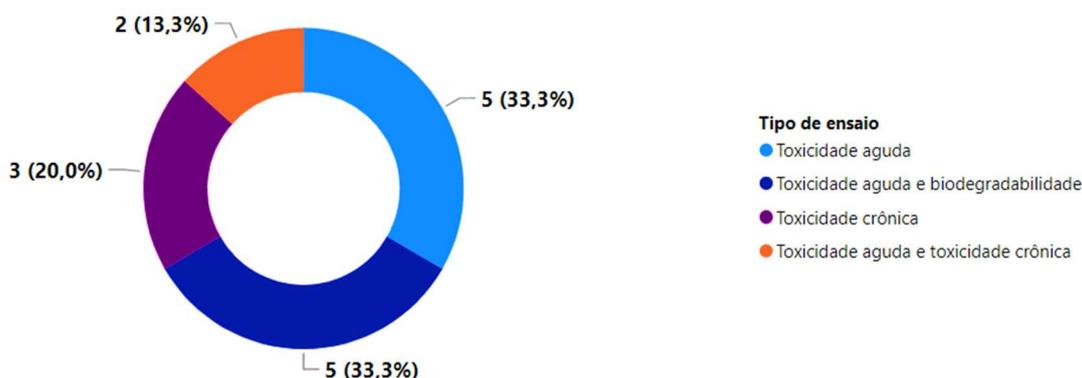
Assim como dito no estudo de Sadiq et. al (2003) deve-se resguardar a comunidade bentônica tendo em vista que a toxicidade de fluidos frente a estes organismos está diretamente relacionada às concentrações dos componentes dos fluidos de perfuração e, portanto, processos de separação sólido-líquido com foco na extração do fluido aderido ao cascalho podem contribuir na diminuição da concentração de fluido aderido ao cascalho descartado no mar.

A mesma observação está descrita por Ogeleka e Tudararo-Aherobo (2011) que enfatizam que organismos invertebrados que vivem na comunidade bentônica são fonte de alimento de outras espécies.

Devido à relação direta entre os aditivos do fluido de perfuração e a toxicidade frente a fauna bentônica, Xie et. al. (2012) estudou a possibilidade de disposição dos cascalhos com fluido aderido em um deserto na China, concluindo que após a disposição em uma camada menor que 20 cm na superfície do solo, o fluido estudado aumentou a fertilidade do solo.

No que diz respeito ao tipo de ensaio toxicológico realizado nos estudos analisados, a Figura 9 mostra que 33,3% dos estudos analisaram a toxicidade aguda e 33,3% avaliaram tanto a toxicidade aguda quanto a biodegradabilidade. Além disto, 20% dos estudos consistiam na avaliação da toxicidade crônica e dois estudos (13,3%) avaliaram tanto a toxicidade aguda quanto a crônica.

Figura 9: Número de relatos por tipo de ensaio ecotoxicológico.



Fonte: Autores.

A comparação entre toxicidade aguda e toxicidade crônica pode ser realizada nos estudos que contemplam os dois tipos de teste, utilizando os mesmos organismos testes.

Neste sentido, Aslan (2018) afirma que dos estudos analisados em seu trabalho, os fluidos não aquosos apresentaram baixa toxicidade aguda, porém se mostraram mais tóxicos quando se considera a toxicidade crônica, evidenciando que efeitos de longo prazo devem ser considerados no monitoramento ambiental.

Durgut et al. (2015), com os estudos focados nos organismos bentônicos (que vivem no sedimento marinho), mostrou que o ensaio de toxicidade crônica, associado à biodegradabilidade, foi o melhor parâmetro para a modelagem global do efeito toxicológico sobre a fauna bentônica.

3.2. Previsão de toxicidade

No que diz respeito à previsão de toxicidade, foram selecionados 10 relatos para leitura integral, por meio do método apresentado na Figura 04. As principais informações de cada um deles estão listadas na Tabela 2.

Tabela 2: Principais dados dos estudos analisados, contendo as bases de dados e modelos ou algoritmos.

Autores	Ano	País	Periódico	Quartil	Base de Dados	Algoritmos / Modelos
Morger et al.	2021	Alemanha	<i>Journal of Cheminformatics</i>	Q1	TOXCast	Análise Conformacional
Fan et al.	2021	China	<i>Science of the Total Environment</i>	Q1	ECOTOX	SVM
Shadrin et al.	2020	Rússia	<i>Ecotoxicology and</i>	Q1	Própria	SVM e ANN

<i>Environmental Safety</i>						
Duan et al.	2020	China	<i>Talanta</i>	Q1	Própria	Regressão linear, kNN, SVM, GBRT e RF
Takata et al.	2020	Japão	<i>Chemosphere</i>	Q1	Diversas	Própria
Castillo-Garrit et al.	2017	Espanha	<i>SAR and QSAR in Environmental Research</i>	Q3	MOA Data set	kNN, SVM, ANN e DT.
Mishra, Fei, Huan	2013	Estados Unidos	<i>International Journal of Data Mining and Bioinformatics</i>	Q3	TOXCast	RF
Sherhod et al.	2012	Reino Unido	<i>Journal of Chemical Information and Modeling</i>	Q1	<i>Ames mutagenicity e hERG channel inhibition</i>	CP-tree
Ma, Buontempo, Wang	2011	Reino Unido	<i>Journal of Modelling, Identification and Control</i>	Q3	Própria	DT e DF
Yin, et al.	2011	China	<i>Molecular Informatics</i>	Q2	<i>Tetrahymena pyriformis toxicity dataset e Aqueous solubility dataset</i>	SVM

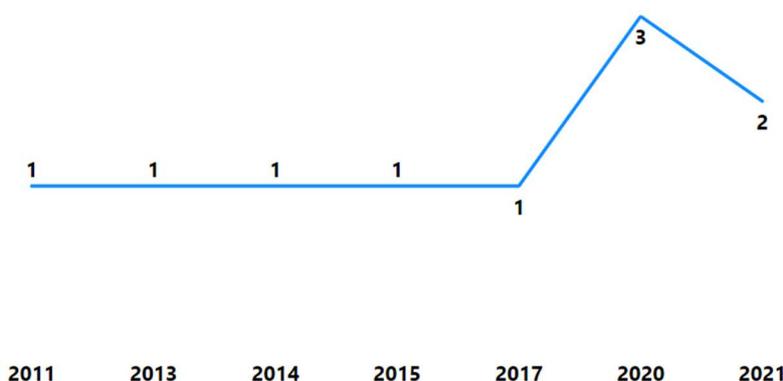
Legenda: kNN (*k-Nearest Neighbors*), SVM (*Support Vector Machine*), NB (*Naïve Bayes*), DT (*Árvores de Decisão - Decision Trees*), RF (*Random Forest*), GBRT (*Gradient Boosted Regression Tress*), CP-Tree (*Compact Pattern Tree*), NN (Redes Neurais), ANN (Redes Neurais Artificiais - *Artificial Neural Network*), DNN (*Deep Neural Network*).

A Figura 10 relaciona o número de publicações por ano ao longo da última década.

O número crescente de publicações pode estar associado ao ganho de relevância do assunto nos anos recentes, bem como à geração e armazenamento de grandes quantidades de dados que necessitam de ferramentas estatísticas atreladas à métodos computacionais apropriados para serem analisados.

Este viés é corroborado por Tang et al. (2019), que afirmam que há dados ecotoxicológicos disponíveis em bases de dados públicas e que esta quantidade de dados é muito maior do que dados de testes tradicionais *in vivo* e *in vitro*, apresentando características de big data, tais como grandes volumes de dados e de informações complexas e interligadas. Além deste aspecto, diversos relatos citam o ganho de notoriedade e a necessidade do desenvolvimento de ferramentas para a previsão de toxicidade.

Figura 10: Número de relatos por ano.



Fonte: Autores

Pérez Santín et al. (2021) dizem que a modelagem do efeito nocivo de substâncias químicas ao ambiente para a previsão de toxicidade é de grande interesse, pois é crescente o debate relacionado a problemas de segurança e degradação ambiental com foco na necessidade de redução do impacto ambiental.

Mishra, Fei, Huan (2013), neste mesmo sentido, explanam que a EPA (Environmental Protection Agency) iniciou em 2007 o projeto Tox21 (Toxicology in the twenty-first Century) que objetiva, entre outros, o desenvolvimento de assinaturas ou modelos preditivos (de toxicidade) que possam alcançar a mais alta acurácia quando comparados a qualquer método computacional existente, além de poderem ser aplicados para a previsão da toxicidade de substâncias químicas que ainda não foram exploradas, ou seja, não tiveram seu perfil toxicológico avaliado por métodos convencionais.

Como o recorte temporal utilizado para a busca de relatos científicos neste estudo foi de 10 anos, o projeto Tox21 foi lançado antes do período de análise desta revisão e, portanto, é citado em muitos dos relatos aqui analisados. Segundo Tang et al. (2019), o projeto Tox21 analisou cerca de 10000 substâncias químicas frente a mais de 70 tipos de avaliação toxicológica e, como resultado, disponibilizou estes dados que atualmente se encontram em diversas bases de dados públicas.

Surge então o termo Toxicologia Computacional (ou toxicologia *in silico*), que segundo a EPA é definido como uma combinação interdisciplinar de química ambiental, físico-química, toxicologia, bioinformática, quimioinformática, estatística, ciência da computação e outras áreas afins.

Yin, et al. (2011) utilizou ferramentas computacionais para construir um fluxo de trabalho eficiente para propostas de modelos de regressão quantitativos e confiáveis. Neste estudo, é afirmado que para de fato haver a substituição de testes de toxicidade tradicionais por metodologias *in silico*, estes devem possuir a mais alta eficácia e confiabilidade, além de não se limitar à previsão de e

identificação do perigo de substâncias químicas (é ou não é tóxico), estabelecendo também a potencialidade deste perigo.

Em geral, a toxicologia computacional lida com três desafios: i) modelagem de processos contínuos de substâncias químicas de fontes que possuam efeito ecológico adverso; ii) avaliação de riscos de diferentes substâncias químicas e iii) previsão do risco de substâncias químicas quando expostas a diversas espécies (TANG et al., 2019).

Yin, et al. (2011) afirmam que para de fato haver a substituição de testes de toxicidade tradicionais por metodologias *in silico*, estes devem possuir a mais alta eficácia e confiabilidade, além de não se limitar à previsão de e identificação do perigo de substâncias químicas, estabelecendo também a potencialidade deste perigo.

Neste sentido, Ma, Buontempo, Wang (2011) mostraram que a mineração de dados é uma das técnicas de descoberta de conhecimento que podem ser utilizadas neste contexto, sendo capazes de gerar bons modelos, fornecendo previsões quanti e qualitativas e ainda incorporar conhecimentos previamente estabelecidos, o que fornece vantagens sobre modelos puramente numéricos.

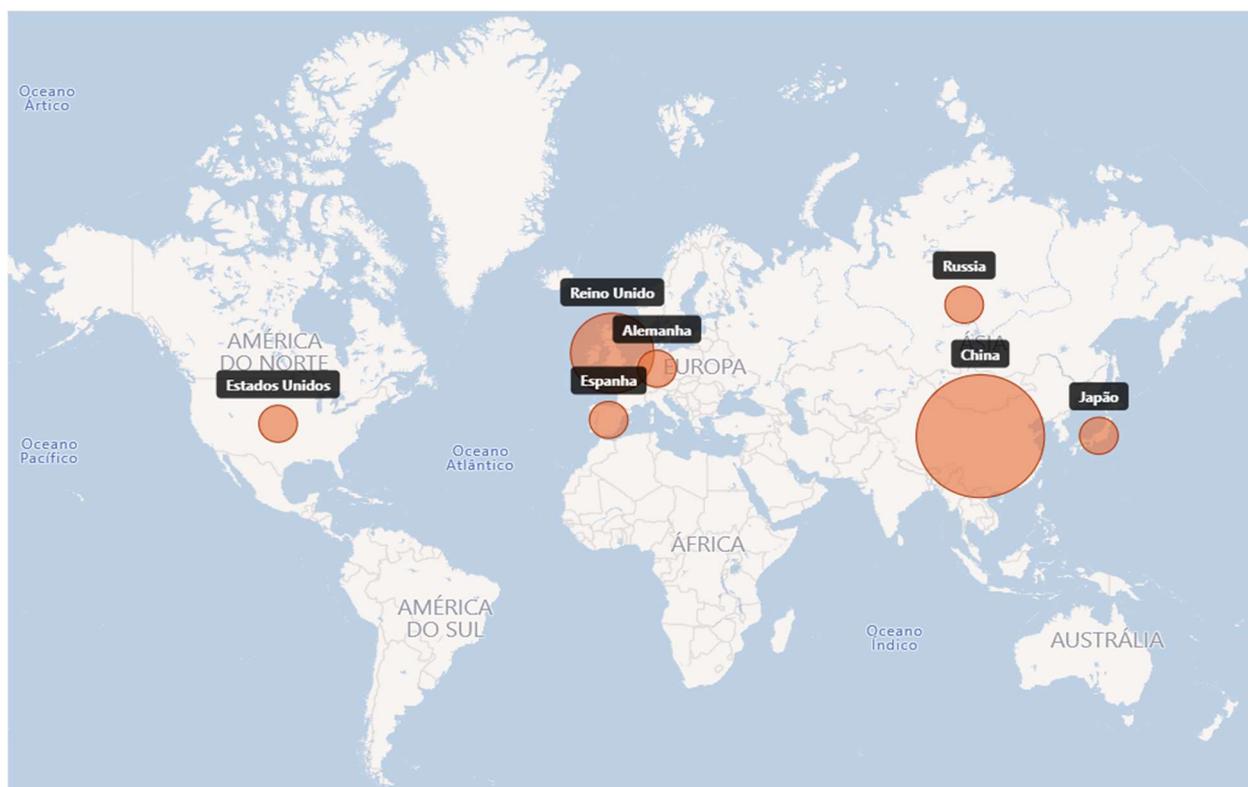
Em relação aos países nos quais os estudos analisados foram desenvolvidos, há uma concentração em poucos países, apenas 7, como mostra a Figura 11, assim como pode-se também observar que esta mesma concentração de estudos realizados na Europa (5) e na China (3). Os países que complementam os demais estudos, todos estão localizados no hemisfério norte.

Uma explicação inicial para esta questão é o projeto To21 da EPA que alavancou os estudos relacionados à previsão de toxicidade no mundo todo. Observa-se, portanto, um predomínio de países desenvolvidos nas publicações aqui analisadas. Isto pode ser explicado pelo avanço legislativo de países desenvolvidos que tem passado a adotar metodologias computacionais de previsão e toxicidade para auxílio na tomada de decisão em detrimento aos métodos tradicionais de análise, seja por questões éticas, de custo ou disponibilidade de informações.

Neste sentido, Mishra, Fei, Huan (2013) citam em seu estudo que o processo de determinação da toxicidade tradicional, que corresponde a um processo no qual um grupo de organismos vivos é exposto a uma determinada concentração de uma substância e a resposta destes organismos é medida após certo período, possui alto custo, seja este custo financeiro, de tempo ou ético (por envolver testes realizados com animais).

No debate relacionado à ética da realização de testes em animais, associado ao seu custo financeiro e de tempo, algumas autoridades regulatórias permitem a utilização de ferramentas computacionais para previsão e toxicidade e outras propriedades de substâncias químicas, quando aplicável, obedecidos alguns critérios.

Figura 11: Mapa esquemático do número de relatos por país.



Fonte: Autores

É o caso da legislação REACH (*Registration, Evaluation, Authorisation, Restriction of Chemicals*), da União Europeia (região responsável pela publicação de 5 relatos aqui analisados). Isto se tornou mais factível após a publicação, pela OCDE (Organização para a Cooperação e Desenvolvimento Econômico), dos 5 princípios para utilização de técnicas computacionais em contextos regulatórios que devem: i) possui um tipo de toxicidade (aguda, crônica etc.) definido, onde esta definição é determinante para o mecanismo de toxicidade interpretado; ii) algoritmo não ambíguo, capazes de minimizar o risco de dúvidas geradas em sua utilização; iii) domínio de aplicabilidade definido, evitando a utilização e extrapolação inadequada; iv) medida apropriada de ajuste do modelo aos dados e v) interpretação mecanística, quando possível (PÉREZ SANTÍN et al., 2021).

Um termo frequentemente utilizado nos estudos de previsão e toxicidade é o termo *in silico*. Este, é uma alusão aos termos *in vivo* e *in vitro*, que no contexto toxicológico, são consideradas metodologias de testes tradicionais.

Segundo Takata et al. (2020), o termo *in silico* é utilizado para descrever metodologias baseadas em uma abordagem computacional para previsão do comportamento toxicológico (qualitativo ou quantitativo) de determinada substância química, utilizando bases de dados contendo resultados experimentais reais, obtidos por métodos tradicionais de avaliação toxicológica.

Metodologias *in silico* para previsão de toxicidade incluem diversas técnicas tais como: aprendizado de máquina (*machine learning*), métodos SAR (*Structure-Activity-Relationship*) e aplicações *expert-based* (WANG; GOODMAN; ALLEN, 2021).

De acordo com Idakwo et al. (2019), os métodos SAR são baseados em modelos estatísticos/matemáticos e utilizados para estabelecer uma relação aproximada entre uma propriedade biológica de um composto químico e propriedades físico-químicas e/ou estruturais, por meio de seus grupos químicos funcionais. A previsão baseia-se na premissa de que moléculas químicas com estruturas e grupos funcionais similares exibem atividade biológica semelhante.

Os métodos SAR podem ser qualitativos ou quantitativos, neste último caso conhecidos como métodos QSAR (*Quantitative Structure-Activity-Relationship*). É importante ressaltar, que os métodos SAR não excluem a necessidade de aplicação de técnicas de *machine learning*. Para a aplicação de técnicas computacionais de análise de dados, os grupos funcionais das moléculas estudadas são codificados como descritores moleculares. Estes descritores, atrelados à estrutura química da molécula, são utilizados como variáveis independentes na etapa de modelagem, enquanto a variável dependente pode ser um valor numérico, tal como a concentração letal (CL) (nos casos de QSAR) ou uma variável categórica, tal como os rótulos tóxico e não tóxico (IDAKWO et al., 2019).

A modelagem computacional por métodos SAR para previsão de toxicidade é amplamente descrita na literatura, onde 60% dos estudos utilizaram esta abordagem para a previsão de toxicidade. Os demais 40% utilizam outras abordagens que não estão diretamente ligadas a relação estrutura – atividade.

Devido à premissa do método QSAR (relação estrutura – atividade quantitativa), comumente este tipo de modelo é utilizado para a modelagem toxicológica de substâncias químicas isoladas (puras), não tratando de misturas, uma vez que a estrutura da molécula é considerada para determinação dos códigos descritores moleculares. Portanto, a literatura carece de relatos que tratem da previsão da toxicidade ou do comportamento toxicológico de misturas. Esta carência pode estar relacionada a diversos motivos, dentre eles os efeitos de sinergismo, potenciação e antagonismo derivado da interação entre as espécies químicas frente ao organismo teste, além da própria natureza generalista do teste de toxicidade aguda.

Dentre os relatos aqui analisados, apenas um estudo aborda a previsão toxicidade de misturas. Trata-se do estudo de Duan et al. (2020) que utilizou algoritmos de aprendizado de máquina para prever a toxicidade de misturas de três substâncias químicas utilizando a técnica IJP (*Ink Jet Printing*) e dados de toxicidade por luminescência.

Neste método, diversas concentrações de cada componente de uma mistura ternária foram submetidas a testes de toxicidade por luminescência e a resposta colorimétrica foi impressa em placas

que, aliadas às concentrações conhecidas dos componentes químicos, serviram de base de dados para a previsão da toxicidade, sendo os algoritmos kNN (*k-Nearest Neighbors*) e SVM (*Support Vector Machine*) os que forneceram modelos de melhor performance quando comparados aos modelos de regressão linear (DUAN et al., 2020).

No que diz respeito às ferramentas e técnicas utilizadas para a previsão e toxicidade nos estudos analisados, foi observada uma diversidade de métodos e técnicas na busca pelo melhor modelo de aderência aos dados contidos nas diversas bases de dados utilizadas nos estudos. De uma forma geral, as etapas para a construção de um modelo, descritas nos estudos aqui analisados são: i) pré-processamento e padronização; ii) codificação dos compostos químicos; iii) modelagem, avaliação e calibração do modelo e iv) definição do domínio de aplicabilidade. Esta sequência de etapas foi utilizada em diversos estudos, principalmente aqueles com foco na avaliação de modelos, tais como os estudos de Morger et al. (2021), Shadrin et al. (2020), Takata et al. (2020), Castillo-Garrit et al. (2017), Mishra, Fei, Huan (2013) e Yin, et al. (2011).

3.2.1. Pré-processamento e padronização dos dados

Na etapa de pré-processamento parte-se do princípio de que os dados de testes *in vivo* ou *in vitro* estão sujeitos a diversas fontes de erro e ruído e, sabendo-se que o poder de previsão de um modelo é tão melhor quanto melhor for a qualidade dos dados contidos na base de dados, é necessário um pré-processamento para que as fontes de erro e ruídos sejam minimizadas ou eliminadas (IDAKWO et al., 2019).

A verificação e o processamento dos dados brutos, nesta etapa é de extrema importância para a geração e modelos confiáveis. Muitas vezes, a verificação a qualidade dos dados é negligenciada o que pode resultar no desenvolvimento de modelos ruins. Em alguns casos, eles podem até representar bem os dados, mas não refletem bons resultados quando submetidos à um novo conjunto de dados de teste (WANG; GOODMAN; ALLEN, 2021).

Segundo Idakwo et al. (2019), a qualidade dos dados utilizados para o treinamento de um modelo é mais importante do que a escolha do algoritmo a ser utilizado. Entretanto, em alguns trabalhos, o método utilizado para limpeza e padronização dos dados não é claro.

Castillo-Garrit et al. (2017) afirmam que a utilização de atributos não necessários pode confundir o sistema e estes devem ser eliminados na etapa de pré-processamento.

Segundo Wang, Goodman, Allen (2021), a base de dados normalmente é processada de forma a se adequar para a aplicação dos algoritmos de aprendizado de máquina ou outros. Tarefas comuns nesta etapa incluem a remoção de valores em branco, inválidos ou considerados, por experiência

própria ou de estudos anteriores, desnecessários. Além disto, problemas relacionados à bases de dados desbalanceadas devem ser mitigados nesta etapa e existem alguns métodos para esta mitigação e o mais comum deles é a reamostragem.

O desbalanceio do conjunto de dados ocorre quando, dentro deste conjunto, há um número significativamente diferente entre compostos ativos (tóxicos) e não ativos (não tóxicos), frente a um mesmo organismo teste e nas mesmas condições de estudo, o que é frequente em bases de dados toxicológicas, uma vez que são analisados mais compostos não tóxicos do que tóxicos (TANG et al., 2019).

Idakwo et al. (2019) que mostrou que uma possível solução para problemas de desbalanceio é a reamostragem. Morger et al. (2021) utilizou análise conformacional para avaliar a calibração de um modelo. O estudo verificou que, devido ao desbalanceio dos dados na base de dados, o fator de calibração foi negativamente afetado e que isto pode ser melhorado utilizando-se bases de dados maiores ou contendo um maior número de observações de compostos tóxicos.

Esta questão do desbalanceio foi também observada por Tang et al. (2019) que concluiu que para à obtenção de modelos de alta performance, são necessários dados balanceados e suficientes, o que geralmente não ocorre.

Nos métodos de previsão QSAR, devem também ser retirados dos dados: sais, misturas, compostos inorgânicos ou organometálicos e demais compostos iônicos. Isto porque a relação estrutura-atividade compreende bem o comportamento biológico de moléculas orgânicas (YIN et al., 2015).

De todos os relatos aqui analisados, apenas o estudo de Takata et al. (2020) traz um modelo capaz de lidar com compostos orgânicos com múltiplos grupos funcionais, compostos inorgânicos e compostos iônicos, contudo, a técnica de modelagem foi desenvolvida pelos autores, não sendo, portanto, uma técnica comumente utilizada para previsão de toxicidade.

3.2.2. Codificação dos compostos químicos

Para o desenvolvimento de modelos QSAR, no que diz respeito à codificação dos compostos químicos com base em seus grupos funcionais, existem algumas formas de codificação frequentemente utilizadas e comumente descritas na literatura, tais como: descritores moleculares e *fingerprints* moleculares. *Fingerprints* moleculares, em geral, representam as moléculas por meio de rótulos (*labels*) binários em que cada parte (*bit*) representa fragmentos ou subestruturas da molécula. Já os descritores moleculares incluem características tais como contagem atômica, solubilidade, entre outros

(WANG; GOODMAN; ALLEN, 2021, YANG et al., 2020; IDAKWO et al., 2019; CASTILLO-GARRIT et al., 2017; MISHRA; FEI; HUAN, 2013; SHERHOD et al., 2014).

3.2.3. Modelagem, avaliação e calibração do modelo

Na etapa de modelagem, o modelo propriamente dito é desenvolvido por meio da utilização de técnicas capazes de extrair padrões nos dados de forma a possibilitar a previsão de resposta a um novo conjunto de dados e assim, prever a toxicidade de novos compostos. A confiabilidade do modelo recém-gerado é então avaliada e o modelo pode ser calibrado e reavaliado inúmeras vezes até que os melhores resultados da avaliação sejam obtidos (IDAKWO et al., 2019).

Técnicas de aprendizado de máquina são comumente utilizadas para a análise dos dados de previsão ou determinação de padrões toxicológicos de substâncias químicas, sendo a abordagem QSAR ou outra. A Tabela 2 apresenta as técnicas utilizadas em cada um dos estudos, bem como a base de dados utilizada.

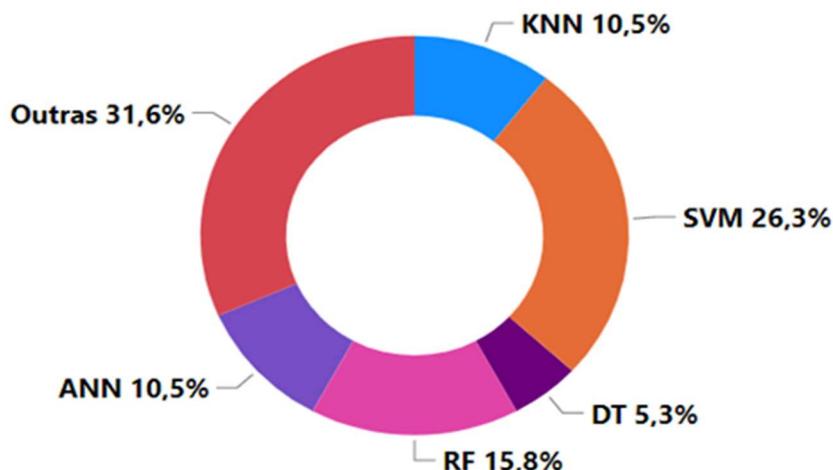
Segundo Wang, Goodman, Allen (2021), o aprendizado de máquina é um campo recentemente utilizado na química computacional com inúmeras aplicações, sobretudo na descoberta de novas drogas, quimioinformática e previsão de toxicidade.

Ainda de acordo com Wang, Goodman, Allen (2021), na literatura estão descritos diversos algoritmos utilizados nesta previsão, sendo os mais comuns: kNN (*k-Nearest Neighbors*), SVM (*Support Vector Machine*), *Naïve Bayes* (NB), Árvores de Decisão (*Decision Trees – DT*), *Random Forest* (RF) e Redes Neurais (NN), podendo ser Redes Neurais Artificiais (*Artificial Neural Network – ANN*) ou *Deep Neural Network* (DNN). Técnicas que possuem maior facilidade de utilização, entendimento e generalização, são mais amplamente utilizadas.

A Figura 12 apresenta os modelos/algoritmos utilizados nos trabalhos analisados neste estudo e colabora para responder a questão de pesquisa QEP2. Nota-se, portanto, o predomínio de SVM e RF para a previsão de toxicidade nos estudos aqui analisados, o que corrobora os dados encontrados na revisão de Wang, Goodman, Allen (2021).

A calibração do modelo está relacionada à sua confiabilidade, ou seja, o quão bem o modelo proposto representa e/ou descreve os dados do conjunto de dados. A confiabilidade do modelo pode ser mensurada de diversas formas, a depender do modelo e do que está sendo previsto. Para os modelos QSAR, os parâmetros comuns de avaliação de confiabilidade são: sensibilidade, especificidade, acurácia e acurácia balanceada.

Figura 12: Percentual de técnicas utilizadas em relação ao total de técnicas apresentadas nos estudos.



Fonte: Autores.

As formas de determinação de cada um destes parâmetros estão descritas no estudo de Tang et al, 2019. Outras formas de determinar a adesão do modelo aos dados e calibrá-los também são apresentadas no mesmo estudo, sendo a acurácia balanceada mais utilizada para modelos QSAR, pois estes frequentemente apresentam dados desbalanceados e modelos binários, comumente de classificação.

Além desta, é corriqueira a utilização da área abaixo da curva ROC (*Receiving Operation Curve*), chamada de AUC (*area under curve*) que se trata da área abaixo da curva plotada pela sensibilidade em relação à taxa de falsos positivos, equivalente a uma especificidade (TANG et al., 2019).

Shadrin et al. (2020), mostraram que SVM e RF tiveram maiores correlações com os dados reais de fitotoxicidade que outros modelos, sendo que SVM apresentou $R^2 = 0,8$ e RMSE cerca de 11 a 12, enquanto ANN apresentou uma RMSE 11,05. Quando se trata de modelos de regressão, os parâmetros utilizados mais frequentemente são o coeficiente de determinação R^2 e o erro quadrático médio (RMSE) (IDAKWO et al., 2019).

Uma das principais ocorrências que devem ser avaliadas nesta etapa é o *overfitting*, que ocorre quando o modelo aprende tão bem com os dados durante a etapa de treino que acaba por memorizá-los, e quando, ao prever novos dados não utilizados no conjunto de dados de treino, o modelo performa mal ou pior que o esperado (WANG; GOODMAN; ALLEN, 2021).

Em contrapartida, os resultados de previsão utilizando-se o conjunto de dados de treino são muito precisos. Portanto, *overfitting* é um problema de alta importância no desenvolvimento de modelos por métodos computacionais e algoritmos mais complexos são considerados mais propensos a esta ocorrência. Por isto, frequentemente é necessário o uso de técnicas de regularização ou validação

externa para limitar os efeitos do *overfitting*, porém isto não estabelece o quão aplicável o modelo é a novos dados. Para isto, é necessária a determinação e boa documentação do domínio de aplicabilidade do modelo (WANG; GOODMAN; ALLEN, 2021).

3.2.3.1. SVM – *Support Vector Machine*

SVM são classificadores de margem máxima, os quais minimizam o erro da classificação empírica e maximizam a margem geométrica que separa os dados. Normalmente resultam em um espaço de atributos no qual os dados são linearmente separados por um vetor, até mesmo quando o espaço inicial não é linear. São bons em reconhecimento de padrões, generalizam bem e lidam bem com dados de diversas dimensões (WANG; GOODMAN; ALLEN, 2021).

Yin, et al. (2011) afirmam que o SVM foi desenvolvido para reconhecimento de padrões, sendo aplicado para analisar a linearidade entre os dados e, para dados não linearmente separados, amostras não linearmente separadas de um espaço de baixa dimensão são convertidas em um vetor que as separa linearmente em um espaço vetorial de alta dimensão, o que permite uma análise linear em um espaço de atributos não linearmente separados. Além disto, SVM é baseado na teoria da minimização de risco estrutural para construir o hiperplano de segmentação ótimo no espaço dos atributos.

De acordo com Fan et al. (2021), SVM é um algoritmo muito utilizado em previsão de toxicidade uma vez que o modelo gerado normalmente permite que a toxicidade conhecida de um composto químico pode ser utilizada para prever a toxicidade do mesmo composto frente a outras espécies não testadas. Além disto, oferece vantagens quando se trata de modelos de regressão com dados limitados, mesmo para dados toxicológicos nos quais o efeito tóxico observado em diferentes espécies por diferentes substâncias químicas, mesmo que semelhantes, apresenta uma relação não linear.

Por este motivo, Shadrin et al. (2020) afirmam que SVM é considerado um algoritmo promissor e eficiente no que tange à interpretação de dados altamente não lineares e dimensionais corriqueiramente utilizados em ciências ambientais, concluindo que a melhor previsão de fitotoxicidade, utilizando uma base de dados própria, foi encontrada utilizando-se SVMs.

3.2.3.2. RF – *Random Forest*

Random Forest (RF) é um método baseado em árvores de decisão (*decision tree* ou DT). Uma árvore de decisão trata-se de um método de avaliação em árvore constituído por raízes, nós e folhas, sendo que cada nó possui um único caminho desde a raiz e nele é tomada alguma decisão, pré-

estabelecida de acordo com o conjunto de dados e o que se deseja obter como resposta, dependendo, portanto, de regras que por sua vez dependem dos parâmetros da base de dados (WANG; GOODMAN; ALLEN, 2021).

Em uma DT, começando pela raiz, a árvore se divide em dois ou mais ramos que se dividem em dois ou mais ramos até que em uma folha seja tomada a decisão final, o que, no caso de previsão e toxicidade, pode ser um rótulo: tóxico ou não tóxico (IDAKWO et al., 2019).

Mishra, Fei, Huan (2013) mostraram que ao reduzir o tamanho das DTs e manter apenas as que contribuem para uma correta tomada de decisão em um modelo RF, pode-se obter melhores performances. Além disso, afirmam que em previsão de toxicidade por RF, um dos desafios é o elevado número de atributos (descritores moleculares ou *fingerprints* moleculares) para descrever uma única molécula, o que causa uma alta dispersão no espaço de dados dos atributos, quando da utilização de abordagens QSAR.

RF é um método que opera pela construção de múltiplas DTs. A ideia básica de um método RF utilizado para previsão de toxicidade QSAR é a combinação de DTs desenvolvidas utilizando-se um conjunto de dados de descritores ou *fingerprints* moleculares para treinamento. Nesta etapa, os dados de treino são selecionados aleatoriamente e isto faz com que as DTs geradas sejam muito diversas e as previsões mais generalizáveis.

Duan et al. (2020), ao analisar os dados de uma fonte própria utilizando regressão linear, kNN, SVM, RF e outros, concluíram que o de melhor aderência aos dados foi o RF. Este estudo é o único aqui analisado que se refere à previsão do efeito tóxico de misturas de substâncias químicas e, por ser um método composto, o RF pode ter performado melhor nesta previsão, tendo em vista a complexidade de previsão do comportamento toxicológico de misturas.

3.2.4. SVM – Determinação do domínio de aplicabilidade do modelo

Por fim, após a criação e determinação da acurácia do modelo, deve-se determinar e bem documentar o seu domínio de aplicabilidade. Conforme já mencionado, dentre os 5 propósitos propostos pela OCDE para o uso de técnicas computacionais em contextos regulatórios, está a necessidade de determinação de um domínio de aplicabilidade (PÉREZ SANTÍN et al., 2021).

Este fato é corroborado por Wang, Goodman, Allen (2021) que afirmam que a determinação e documentação do domínio de aplicabilidade é uma prática comum em metodologias QSAR e que este domínio tem sido relatado como um elemento chave na previsão de toxicidade *in silico*, tendo em vista que tais modelos podem subsidiar tomadas de decisão ou mesmo legislações. A utilização equivocada inclui a previsão, onde o dado de entrada do modelo não está contido no domínio de aplicabilidade.

De acordo com Yang et al. (2020), há diversas estratégias de determinação do domínio de aplicabilidade de modelos. Entretanto, cada uma delas tem suas próprias vantagens e desvantagens e para modelos que utilizam a metodologia QSAR, técnicas que combinem múltiplos métodos, tais como RF, apresentam domínios de aplicabilidade mais estruturados.

4. DISCUSSÃO

No que tange à ecotoxicologia de fluidos de perfuração, a maioria dos estudos analisados utiliza o fluido como amostra para a determinação da ecotoxicidade, assim como exige a legislação brasileira (não limitada a este parâmetro) e diversas outras ferramentas regulatórias ao redor do mundo. A maior parte dos estudos considerou também a toxicidade aguda como parâmetro principal de avaliação, contudo, estão amplamente documentados estudos que avaliam a biodegradabilidade e toxicidade crônica.

A toxicidade de um fluido de perfuração é determinada pelos seus componentes e por suas propriedades físico-químicas. Contudo, alguns componentes dos fluidos de perfuração não influenciam positiva ou negativamente em sua toxicidade.

Seja por razões éticas, econômicas ou sociais, a utilização de organismos vivos para a realização de testes toxicológicos tradicionais *in vitro* ou *in vivo* vem sendo questionada. Neste sentido, a toxicologia computacional, por meios de métodos *in silico* é uma área de estudo que vem ganhando notoriedade por possibilitar a minimização da realização de testes tradicionais, sobretudo para fins regulatórios.

Assim, o estabelecimento de metodologias *in silico* capazes de determinar os padrões toxicológicos de fluidos de perfuração comumente utilizados na indústria de óleo e gás pode viabilizar a redução do número de testes realizados com organismos vivos e possibilitar a geração de conhecimento científico, atrelado à descoberta dos padrões toxicológicos destes fluidos, com base em sua composição e propriedades físico-químicas.

Um dos métodos mais amplamente descritos na literatura para a previsão de toxicidade de compostos químicos é o QSAR, que se baseia na relação estrutura – atividade de substâncias químicas. Este método necessita da codificação da estrutura molecular das substâncias químicas como dado de entrada para a geração dos modelos.

Existem bases de dados específicas que contêm estes dados codificados em descritores ou *fingerprints* moleculares. O modelo preditivo depende da quantidade de descritores ou *fingerprint* que uma molécula possui, assim como das propriedades físico-químicas desta substância, sendo utilizado

para prever a toxicidade de novas moléculas, pela codificação destas, sem a necessidade de repetir o teste tradicional.

Modelos matemáticos, com base em dados contendo resultados de testes tradicionais já realizados, podem prever a toxicidade de fluidos de perfuração ainda não testados, ou mesmo fornecer informações relevantes no que diz respeito ao comportamento toxicológico destes fluidos. Contudo, é imprescindível que os dados contidos no conjunto de dados sejam confiáveis e reprodutíveis, pois quanto melhor for sua qualidade, melhor a previsão e a acurácia do modelo gerado.

Diversas técnicas computacionais vêm sendo utilizadas para a previsão de toxicidade, sejam elas mais simples ou mais complexas, na busca pelo conhecimento e previsão de alta qualidade, com domínio de aplicabilidade bem definido de forma a possibilitar o uso desta previsão para questões regulatórias, tomadas de decisão, análises de risco, dentre outros.

Dos estudos analisados, apenas um, Duan et al. (2020), estudou o comportamento toxicológico de misturas, caso dos fluidos de perfuração. Para este cenário, parece mais interessante e relevante a aplicação de técnicas de mineração de dados para a determinação de padrões e geração de conhecimento do que para a previsão da toxicidade propriamente dita (quanti ou qualitativa), devido à complexidade das misturas.

Seja o método de previsão com base na relação estrutura-atividade (SAR) ou não, as técnicas mais utilizadas para a previsão de toxicidade são SVM e RF.

Em síntese, pode-se responder as duas questões específicas de pesquisa propostas (QEP1 e QEP2), assim como propor uma resposta para a questão de pesquisa geral (QP), já que não foi possível obter uma resposta para esta questão diretamente da literatura, conforme explicado anteriormente.

QEP1 – Como é feita a Ecotoxicologia de fluidos de perfuração?

No que tange à ecotoxicologia de fluidos de perfuração, a maioria dos estudos analisados utiliza o fluido como amostra para a determinação da ecotoxicidade, e como parâmetros principais de avaliação nos fluidos foram utilizados a toxicidade aguda e a biodegradabilidade.

QEP2 – Como a Mineração de Dados é utilizada para previsão da toxidade?

Em relação a previsão de toxicidade, os algoritmos de aprendizado de máquina mais utilizados foram SVM e RF. De acordo com os estudos selecionados, esses algoritmos possibilitaram à aplicação da tarefa de mineração de dados conhecida como classificação.

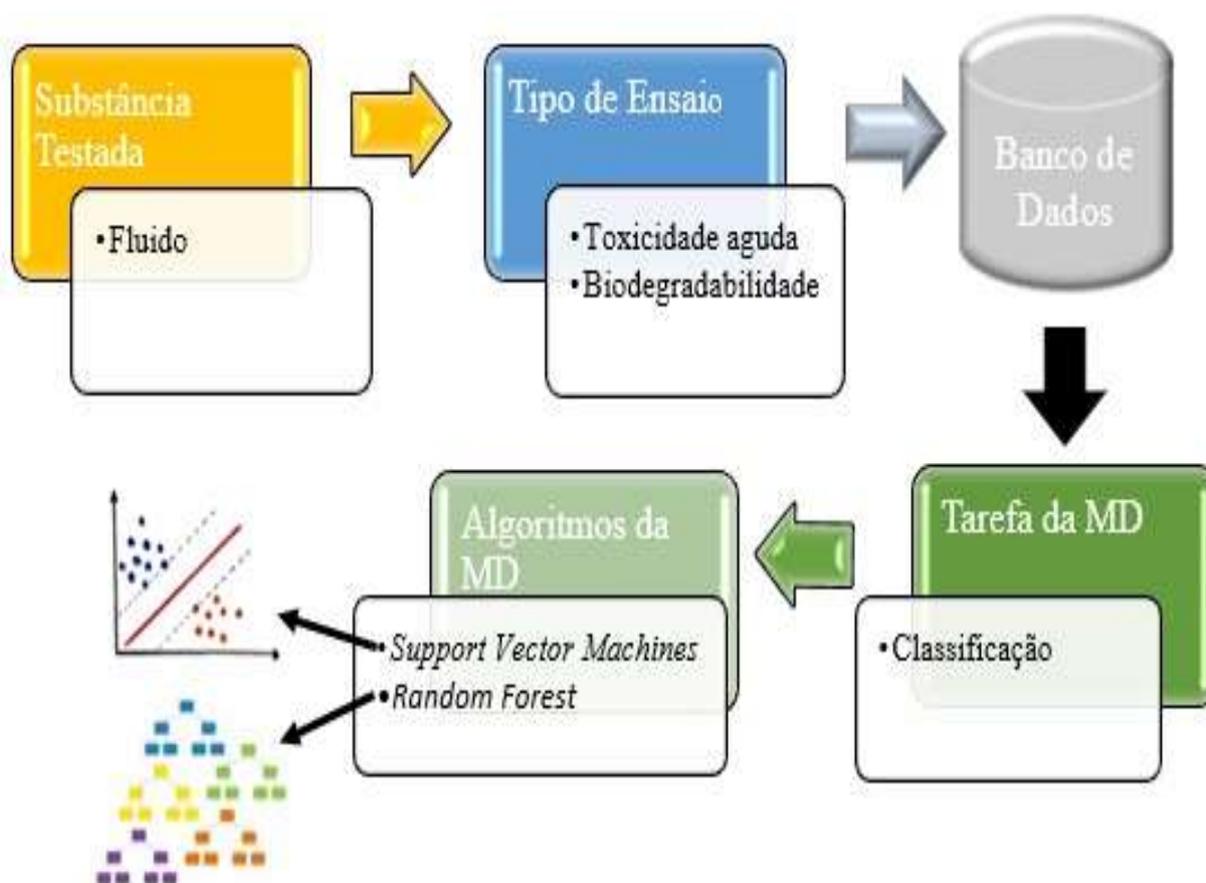
QP – Quais são as técnicas computacionais mais utilizadas para a previsão e/ou conhecimento do comportamento toxicológico de fluidos de perfuração, conhecida a sua composição e suas propriedades físico-químicas?

Fazendo uma análise das respostas obtidas para as duas questões específicas de pesquisa (QEP1 e QEP2) por meio da literatura foi possível propor uma resposta capaz de atender a questão de geral de pesquisa (QP)

Conforme mostra a Figura 13, este trabalho propõe responder à questão geral de pesquisa proposta por meio da utilização de fluido de perfuração a partir de ensaio de ecotoxicidade aguda, os quais os resultados obtidos são armazenados na base de dados.

Ainda conforme a Figura 13, para a previsão e/ou conhecimento do comportamento toxicológico dos fluidos são aplicadas técnicas computacionais de mineração de dados, também conhecida como *Machine Learning*, utilizando a tarefa de classificação por meio dos algoritmos *Support Vector Machines* (SVM) e *Random Forest* (RF).

Figura 13: Técnica de Mineração de Dados aplicada a ecotoxicidade de fluidos de perfuração



5. CONCLUSÃO

A toxicologia computacional vem sendo muito estudada nos últimos anos, o que mostra a relevância desta abordagem na previsão do comportamento toxicológico de compostos químicos.

No que se refere à ecotoxicidade de fluidos de perfuração, a literatura apresenta diversos estudos que relacionam os componentes destes fluidos com sua ecotoxicidade, contudo não há estudos que utilizem técnicas ou ferramentas computacionais para a previsão do comportamento toxicológico de fluidos de perfuração, dentro dos critérios de busca adotados no presente estudo.

Portanto, este trabalho focou em responder separadamente as questões específicas de pesquisa QEP1 e QEP2, de modo que uma análise das respostas obtidas proporcionasse uma resposta a questão geral de pesquisa, a qual não foi possível de se responder diretamente da literatura analisada.

5.1. Agenda de trabalhos futuros

A partir desta revisão sistemática foi possível observar a carência de estudos primários referentes à previsão do comportamento toxicológico de misturas. Como caso particular, de fluidos de perfuração que são amplamente utilizados nas perfurações de poços de óleo e gás. Portanto, há uma lacuna de pesquisa que pode ser suprida por estudos futuros com este foco. Em trabalhos futuros, é promissor o desenvolvimento de processos de extração de conhecimento em bases de dados ou mesmo de previsão do comportamento toxicológico de misturas.

Pode-se propor como trabalhos futuros a aplicação da MD por meio da tarefa de classificação para extração de conhecimento e previsão do comportamento toxicológico de fluidos de perfuração. Propõe-se também aplicar as demais tarefas de MD (regressão, associação e agrupamento) e comparar os resultados obtidos.

Tais estudos podem ser utilizados por operadoras, no sentido de aprofundar o conhecimento a respeito dos fluidos de perfuração utilizados atrelado à necessidade de atender aos critérios das agências reguladoras e órgãos ambientais e influenciar seus fornecedores neste sentido.

Os fabricantes e fornecedores dos produtos químicos que compõem o fluido de perfuração podem usufruir do conhecimento gerado nestes estudos no intuito de atuar no desenvolvimento de produtos mais ambientalmente amigáveis, substituindo aqueles que agregam maior toxicidade.

Além destes, os próprios órgãos ambientais e agências reguladoras também são beneficiados com estes estudos, com ênfase em aprimorar seu entendimento relacionado ao impacto ambiental causado pela utilização e descarte dos fluidos de perfuração, bem como proporcionar a minimização

ou extinção da realização de testes *in vivo* ou *in vitro* ou mesmo direcionar novas ações na busca constante da proteção ambiental.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ASLAN, J. F.; **Estudos ecotoxicológicos na perfuração de poços de Petróleo Marítimos com ênfase na atividade de cimentação**. Dissertação de Mestrado, Instituto Federal de Ciência e Tecnologia Fluminense. Macaé, 2018. 59f.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS (ABNT). **NBR 15308**: ecotoxicologia aquática – toxicidade aguda – método de ensaio com misídeos (Crustacea). Rio de Janeiro, 2017.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS (ABNT). **NBR 15469**: ecotoxicologia – coleta, preservação e preparo de amostras. Rio de Janeiro, 2015.

BAKER HUGHES. **Drilling Fluids - Reference Manual**. Fonte: Research Gate Website. 775 p, 2016. Disponível em: <https://www.researchgate.net/file.PostFileLoader.html?id=5733bd33615e2775127a46b7&assetKey=AS:360698208112640@1463008562446>. Acesso em 01 de outubro de 2022.

BAKHTYAR, S; GAGNON, M. Toxicity assessment of individual ingredients of synthetic-based drilling muds (SBMs). **Environmental Monitoring and Assessment**, v. 184, n. 9, p. 5311 – 5325, 2012.

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. **Despacho N° 5540547/2019, SEI 5533803** de 29 de julho de 2019. Define diretrizes para uso e descarte de fluidos de perfuração e cascalhos. Brasília: Instituto Nacional do Meio Ambiente e Recursos Naturais Renováveis, 2019. Disponível em: https://sei.ibama.gov.br/controlador_externo.php?acao=usuario_externo_logar&id_orgao_acesso_externo=0. Acesso em 01 de outubro de 2022.

CASTILLO-GARRIT, J. et al. Machine learning-based models to predict modes of toxic action of phenols to *Tetrahymena pyriformis*. **SAR and QSAR in Environmental Research**, v. 28, n. 9, p. 735-747, 2017.

CHEN, W. et al. Life cycle toxicity assessment on deep-brine well drilling. **Journal of Cleaner Production**, v. 112, p. 326 – 332, 2016.

DUAN, Qiannan et al. Machine learning for mixture toxicity analysis based on high-throughput printing technology. **Talanta**, v. 207, p. 120299, 2020.

DURGUT, I. et. al. Dynamic modeling of environmental risk associated with drilling. **Marine Pollution Bulletin**, v. 99, n. 1 – 2, p. 240 – 249, 2015.

FAN, Juntal et al. Prediction of chemical reproductive toxicity to aquatic species using a machine learning model: An application in an ecological risk assessment of the Yangtze River, **China. Science of the Total Environment**, v. 796, p. 148901, 2021.

FERRARI, D. G.; SILVA, L. N. **Introdução a mineração de dados**. Saraiva Educação, 2017.

GAGNON, M. M.; BAKHTYAR, S. Induction of fish biomarkers by synthetic-based drilling muds. **PLoS ONE**, v. 8, n. 7, p. e69489, 2013.

GE, W. F. et. al. A “dual protection” drilling fluid system and its application. **Petroleum Science and Technology**, v. 30, n. 12, p. 1274 – 1284, 2012.

IDAKWO, Gabriel et al. A review on machine learning methods for in silico toxicity prediction. **Journal of Environmental Science and Health - Part C**, v. 36, n.4, p. 169-191, 2019.

LIRA, V. F. et. al. Effects of barium and cadmium on the population development of the marine nematode *Rhabditis (Pellioiditis) marina*. **Marine Environmental Research**, 72, n. 4, p. 151 – 159, 2011.

LORENZETT, C. D. C.; TELOKEN, A. **Estudo Comparativo entre os algoritmos de Mineração de Dados Random Forest e J48 na tomada de Decisão**. Universidade de Cruz Alta (UNICRUZ), 2016.

MA, Chao Y.; BUONTEMPO, Frances V.; WANG, Xue Z. Inductive data mining: Automatic generation of decision trees from data for QSAR modelling and process historical data analysis. **Journal of Modelling, Identification and Control**, v. 12, n. 1/2, p. 101-106, 2011.

MISHRA, Meenakshi; FEI, Hongliang; HUAN, Jun. Computational prediction of toxicity. **International Journal of Data Mining and Bioinformatics**, v. 8, n. 3, p. 338-348, 2013.

MORGER, Andrea et al. Assessing the calibration in toxicological in vitro models with conformal prediction. **Journal of Cheminformatics**, v. 13, n. 1, 2021.

OGELEKA, D. F.; TUDARARO-AHEROBO, L. E. Short-term toxicity of oil-based drilling fluid to the brackish-water shrimp *Palaemonetes africanus*. **African Journal of Aquatic Science**, v. 36, n.1, p. 109 – 112, 2011.

PAGE, M.J.; McKENZIE, J. E.; BOSSUYT, P.M.; BOUTRON I.; HOFFMAN, T.C.; MULROW, C. D. et al. The PRISMA 2020 statement: an updated guideline for reporting systematic reviews. **BMJ**, v. 372, n. 71, 2021.

PÉREZ SANTÍN, Efrén et al. Toxicity prediction based on artificial intelligence: A multidisciplinary overview. **Wiley Interdisciplinary Reviews Computational Molecular Science**, v. 99, n. 11, 2021.

QU, Y. et. al. Influence of various hydrocarbon groups on the effectiveness and environmental characteristics of anti-collapse agent for drilling fluids. **Chemistry and Technology of Fuels and Oils**, v. 56, n 3, p. 420 – 428, 2020.

SADIQ, R. et. al. Marine water quality assessment of synthetic-based drilling waste discharges. **International Journal of Environmental Studies**, v. 60, n.4, p. 313 – 323, 2003.

SHADRIN, Dmitrii et al. Artificial intelligence models to predict acute phytotoxicity in petroleum contaminated soils. **Ecotoxicology and Environmental Safety**, v. 194, p. 110410, 2020.

SHERHOD, Richard et. al. Emerging pattern mining to aid toxicological knowledge discovery. **Journal of Chemical Information and Modeling**, v. 54, n. 7, p. 1864-1879, 2014.

STELIGA, T; ULIASZ, M. Spent drilling muds management and natural environment protection.

Mineral Resources Management, v. 30, n. 2, p. 135 – 159, 2014.

SIL, A. et. al. Toxicity characteristics of drilling mud and its effect on aquatic fish populations. **Journal of Hazardous, Toxic, and Radioactive Waste**, v. 16, n.1, p. 51 – 57, 2012.

SUN, Y. et. al. Study on a New Environmentally Friendly Synthetic Fluid for Preparing Synthetic-Based Drilling Fluid. **Frontiers in Chemistry**, v. 8:539690, 2020.

TAKATA, Michiyoshi et al. Predicting the acute ecotoxicity of chemical substances by machine learning using graph theory. **Chemosphere**, v. 238, p. 124604, 2020.

TANG, Weihao et al. Deep learning for predicting toxicity of chemicals: a mini review. **Journal of Environmental Science and Health - Part C**, v. 36, n. 4, p. 252-271, 2019.

VEIGA, L. F. **Estudo da toxicidade marinha de fluidos de perfuração de poços de óleo e gás**. Dissertação de Mestrado, Instituto de Biologia Marinha, Universidade Federal Fluminense, Niterói, 1998. 120 f.

VEIGA, L. F. **Avaliação de risco ecológico dos descartes da atividade de perfuração de poços de óleo e gás em ambientes marinhos**. Tese de Doutorado, Coordenação dos Programas de Pós-graduação em Engenharia, Programa de Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2010. 253f.

VINCENT-AKPU, I. F.; ALLISON, M. E.; SIKOKI, F. D. Survival and gill morphology of different life stages of *Tilapia guineensis* exposed to the drilling fluid XP-07. **Ciência Rural**, v. 40, n.3, p. 611 – 616, 2010.

WANG, Marcus W. H; GOODMAN, Jonathan, M.; ALLEN, Timothy E. H. Machine Learning in Predictive Toxicology: Recent Applications and Future Directions for Classification Models. **Chemical Research in Toxicology**, v. 34, n. 2, p. 217-239, 2021.

WITTEN, I. H.; FRANK, E.; HALL, M. A. **Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques**. 4th edition ed. Burlington, MA: Morgan Kaufmann, 2016.

XIE, S. X. et. al. Study and application of green throwing drilling fluid. **Petroleum science and technology**, v. 30, n. 5, p. 443 – 452, 2012.

YANG, Hongbin et al. Computational Approaches to Identify Structural Alerts and Their Applications in Environmental Toxicology and Drug Discovery. **Chemical Research in Toxicology**, v. 33, n. 6, p. 1312-1322, 2020.

YIN, Yongmin et al. Quantitative Regression Models for the Prediction of Chemical Properties by an Efficient Workflow. **Molecular Informatics**, v. 34, n. 10, p. 679-688, 2015.

ARTIGO CIENTÍFICO 3

MINERAÇÃO DE DADOS APLICADA À ECOTOXICOLOGIA DE FLUIDOS DE PERFURAÇÃO

DATA MINING AND ECOTOXICOLOGY BEHAVIOUR OF DRILLING FLUIDS

Leomir Samuel Tormen Reis - IFFluminense/PPEA

Victor Barbosa Saraiva – IFFluminense/PPEA

Simone Vasconcelos Silva – IFFluminense/SAEG

RESUMO

Os dados relativos à ecotoxicidade de fluidos utilizados na perfuração de poços marítimos são reportados ao órgão ambiental brasileiro de forma a compor o monitoramento ambiental da atividade. A ecotoxicidade aguda é um dos parâmetros controlados para a possibilidade de descarte do fluido no mar e está diretamente relacionada aos seus componentes e propriedades. O objetivo deste estudo é encontrar padrões em uma base de dados de ensaios de ecotoxicidade aguda de fluidos de perfuração para descobrir informações úteis e gerar conhecimento por meio delas. De posse da base de dados, foi possível encontrar e estudar os padrões contidos nos dados, utilizando-se tarefas de mineração de dados apropriadas (classificação, agrupamento e associação). Estes padrões foram avaliados, interpretados e as informações geradas analisadas sob o ponto de vista ecotoxicológico, obtendo-se resultados úteis para a tomada de decisão, bem como a verificação dos componentes que apresentam maior correlação com a ecotoxicidade, além de elucidar as limitações da base de dados e de que forma estas limitações influenciam no conhecimento gerado.

Palavras-chave: Fluidos de Perfuração. Ecotoxicidade. Mineração de Dados. Aprendizado de Máquina. Toxicidade. Toxicologia.

ABSTRACT

Data related to the ecotoxicological behavior of drilling fluids used in offshore drilling are reported to Brazilian environmental authorities as a part of the environmental monitoring of well construction activity. The acute ecotoxicity is one of the several parameters regulated to ensure the disposal of aqueous drilling fluids on the sea and it is related to its compounds and properties. With a data base that contains acute ecotoxicity tests results and the concentration of the compounds of aqueous drilling fluids and its properties as well, it is possible to study the pattern in the data, by data mining, and extracting useful information to create knowledge related to drilling fluids ecotoxicological behavior. In this article, it was used a Petrobras data base and the pattern was obtained by using data mine techniques (classification, cluster and association). This pattern were evaluated, interpreted and the generated information was analyzed, obtained useful results for decision-making, explaining the most toxic compounds and clarifying the limitations on the data base and how these limitations influence in the knowledge extracted.

Keywords: *Drilling fluids. Ecotoxicity. Data mining. Machine learning. Toxicity. Toxicology.*

1. INTRODUÇÃO

Os dados relativos ao monitoramento ambiental da atividade de perfuração de poços marítimos, mais especificamente relacionados ao uso e descarte de fluidos de perfuração no mar, são reportados ao Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e Recursos Naturais Renováveis (IBAMA) pelas empresas operadoras que atuam na exploração de petróleo no Brasil. Após o uso, a legislação brasileira permite que os fluidos de perfuração aquosos sejam descartados no mar no local da perfuração, desde que atendendo a diversos critérios que visam a proteção do ambiente marinho atingido pelo descarte destes fluidos. Um dos requisitos para o descarte dos fluidos de perfuração aquosos no mar (fluidos não aquosos apesar de terem uso permitido, não podem ser descartados no mar) é a ecotoxicidade aguda em coluna d'água (BRASIL, 2019).

O resultado de um teste de ecotoxicidade de fluidos de perfuração é expresso quantitativamente pela CL50-96h (concentração letal a 50% dos organismos teste após 96 horas e exposição) (ABNT, 2017; ABNT, 2015). O órgão ambiental determina que para que seja permitido o descarte do fluido aquoso no mar, a CL50-96h seja igual ou superior a 30.000 ppm, com a utilização do *Mysidopsis juniae* ou *Mysidopsis gracile* como organismo teste (ABNT, 2017).

Os dados da ecotoxicidade aguda dos fluidos de perfuração utilizados e descartados no mar são, portanto, registrados, armazenados e reportados ao IBAMA pelas operadoras. Estes dados contém as informações relativas às operações nas quais os fluidos foram utilizados, informações relativas à composição dos fluidos (concentração de cada um dos componentes) e algumas propriedades físico-químicas, tais como pH, salinidade e densidade.

A relevância no estudo ecotoxicológico de fluidos de perfuração aquosos consiste no fato de que a análise da ecotoxicidade aguda é realizada em momento posterior ao descarte do fluido aquoso no mar. Amostras dos fluidos descartados são coletadas na locação de descarte, armazenadas e transportadas a laboratórios para a realização do teste de ecotoxicidade em laboratórios credenciados pelo órgão ambiental. Isto implica a determinação da CL50-96h após a realização do descarte e caso a CL50-96h seja menor que 30.000 ppm, o fluido é considerado tóxico e não deveria ter sido descartado, gerando sanções às operadoras e impacto ambiental. Portanto, o conhecimento da ecotoxicologia dos fluidos de perfuração é relevante no que diz respeito à previsão ou teste prévio da ecotoxicidade destes fluidos.

Considerando que os dados relativos às amostras de fluidos no que diz respeito às suas propriedades e composição são registrados e reportados ao IBAMA, pode-se utilizar esta massa de dados para obtenção de conhecimento por meio da determinação e interpretação de padrões contidos nos dados.

A mineração de dados (*data mining*) é um processo por meio do qual é possível descobrir os padrões, anomalias e correlações em grandes conjuntos de dados. Ela pode ser considerada uma alternativa para extração e conhecimento a partir de grandes bases de dados por possibilitar a descoberta de padrões e relações ocultas que possibilitam a geração de regras para previsão e correlação entre os dados com o objetivo de tornar a tomada de decisão mais rápida e confiável (AVELAR; ROCHA; CRUZ, 2017). Aplicada no contexto da base de dados ecotoxicológicos de fluidos de perfuração, a mineração de dados permite determinar e interpretar os padrões contidos nos dados, gerando conhecimento e informações úteis com as quais pode ser possível realizar tomadas de decisão, estudos mais direcionados e entender quais os componentes ou propriedades dos fluidos mais influenciam em sua ecotoxicidade aguda.

Reis, Saraiva, Silva (2023) observaram que a mineração de dados e o aprendizado de máquina são comumente utilizados para o estudo ecotoxicológico de substâncias, sobretudo para a previsão da ecotoxicidade, podendo até substituir os testes convencionais *in vivo* ou *in vitro*. Contudo, a previsão da toxicidade de misturas, como os fluidos de perfuração, é complexa e pouco descrita na literatura. No caso particular dos fluidos de perfuração, não há estudos relacionados à aplicação da mineração de dados ou aprendizado de máquina para a previsão de toxicidade. Neste caso, a mineração de dados é mais vantajosa na extração de conhecimento do que na previsão da ecotoxicidade.

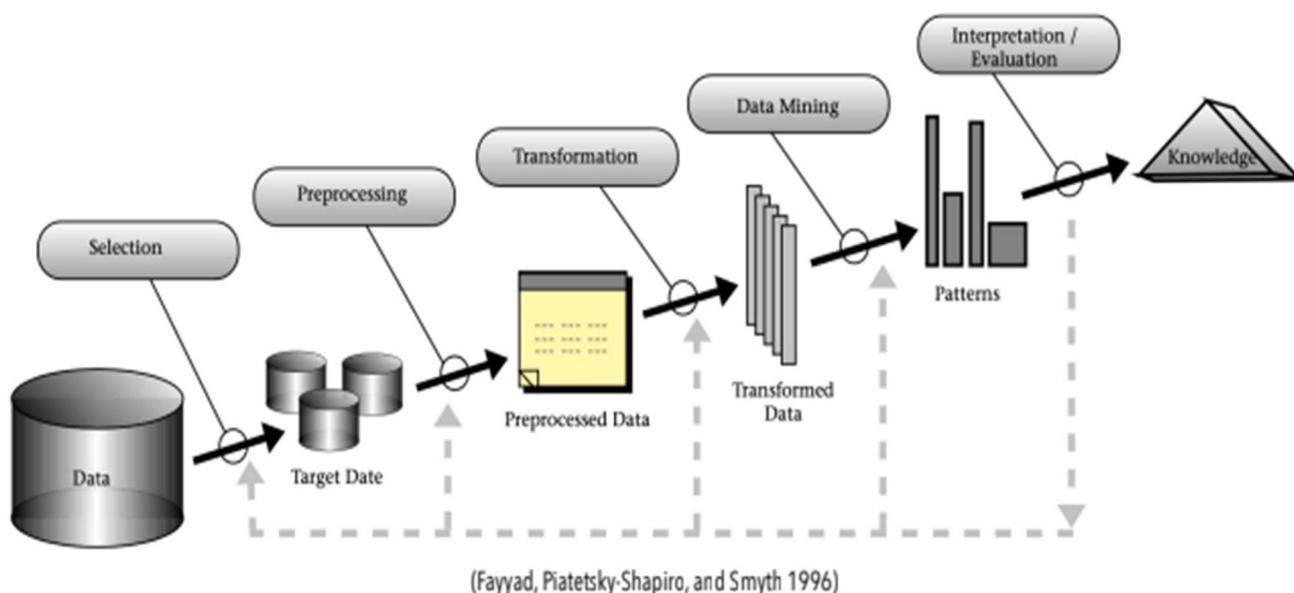
O objetivo deste artigo é encontrar padrões em uma base de dados de ensaios de ecotoxicidade aguda de fluidos de perfuração para descobrir informações úteis e gerar conhecimento por meio delas. Para tanto, foi realizada uma análise exploratória dos dados utilizando tarefas de mineração de dados (classificação, agrupamento e associação), com os algoritmos de aprendizado de máquina apropriados para cada tarefa, para encontrar padrões nos dados de ecotoxicidade de fluidos de perfuração, interpretá-los e avaliar a informação trazida de forma a gerar conhecimento.

1.1. Mineração de Dados

A mineração de dados é uma das etapas do método conhecimento como KDD (*Knowledge Discovery in Databasis*) descrito por Fayyad, Piatetsky-Shapiro, Smith (1996). Em linhas gerais o KDD consiste na aplicação de diversas etapas em série de forma a permitir que, a partir de uma base de dados, seja gerado conhecimento passível de interpretação e avaliação de aplicabilidade. As etapas do KDD até a geração de conhecimento são (já de posse da base de dados): seleção, pré-rocessamento, transformação, mineração de dados (*data mining*) e interpretação / avaliação. O conhecimento da base de dados e da relação entre os atributos (parâmetros descritivos do que se deseja avaliar, no caso deste estudo, as propriedades e a concentração dos componentes dos fluidos aquosos) e a classe

(ecotoxicidade aguda) é fundamental para a aplicação do KDD. A Figura 1 resume as etapas do KDD que serão descritas a seguir, para o escopo deste trabalho (FAYYAD, PIATETSKY-SHAPIRO, SMYTH, 1996).

Figura 1: Representação do método Knowledge Discovery in Databases de Fayyad, Piatetsky-Shapiro, Smith (1996).



Fonte: Fayyad, Piatetsky-Shapiro, Smith (1996).

Na etapa de mineração de dados, podem ser utilizadas diferentes tarefas, com objetivos distintos. Segundo Fayyad et al. (1996) a mineração de dados consiste na realização da análise de dados com a utilização de algoritmos de descoberta que, dadas suas limitações computacionais, produzem um conjunto de padrões.

Segundo Lorenzetti e Teloken (2016), a mineração de dados utiliza técnicas capazes de extrair conhecimento através de padrões e regras, revelando algo novo a partir de milhares de informações. Estas técnicas se classificam como supervisionadas e não supervisionadas e o uso de cada uma delas depende do objetivo desejado.

A diferença entre o aprendizado supervisionado e não supervisionado consiste no fato de que no aprendizado supervisionado os métodos são providos com um conjunto de dados que possuem uma variável alvo pré-definida, seja ela numérica ou categórica. Já no aprendizado não supervisionado não há a necessidade de da presença do atributo alvo. As tarefas mais comuns de aprendizado supervisionado são a classificação e a regressão; já as tarefas de agrupamento e associação são as mais comuns no aprendizado não supervisionado (CAMILO; SILVA, 2009).

A seguir são detalhadas as principais tarefas de mineração de dados, de acordo com Camilo e

Saraiva (2009):

- Classificação

A classificação visa identificar a qual classe um determinado registro pertence. Para tanto, os dados do conjunto de dados precisam estar rotulados e apresentar uma classe explícita, sendo esta um atributo categórico. Os algoritmos utilizam os dados do conjunto para aprender a classificar novas instâncias nas quais se deseja prever a classe.

- Regressão

Assim como na classificação, a regressão utiliza o conjunto de dados para determinar uma classe explícita, porém neste caso, o atributo classe é numérico. Os algoritmos utilizam o conjunto de dados contendo o atributo classe numérico para aprender a calcular o valor do atributo classe para um novo registro. Devido à natureza numérica do atributo classe, os resultados podem ser utilizados para análises estatísticas, distribuições numéricas e outros.

- Agrupamento

Também conhecida como *cluster*, a tarefa de agrupamento busca identificar e aproximar registros similares contidos no conjunto de dados. Um grupo consiste em uma coleção de registros (ou instâncias) similares entre si e diferentes das demais. Não há a necessidade da presença do atributo classe e não há a pretensão de classificar ou prever o valor de uma variável, apenas identificar os grupos contendo registros similares.

- Associação

Na tarefa de associação, são identificados quais atributos estão relacionados, de alguma forma, bem como o nível de confiança desta relação. Esta identificação é realizada item a item do conjunto de dados. As regras de associação se apresentam da seguinte forma: SE atributo X ENTÃO atributo Y, com Z nível de confiança.

2. MATERIAL E MÉTODO

A metodologia deste trabalho é a Pesquisa-Ação que, segundo Tripp (2005), consiste em um ciclo contendo etapas de uma fase investigativa na qual realiza-se o monitoramento e a descrição dos efeitos de uma ação para permitir a avaliação dos resultados desta ação, possibilitando a fase de ação propriamente dita na qual se planeja uma melhoria na prática e ações nas quais se implementam tais

melhorias. A Pesquisa-Ação requer ações tanto na área prática quanto na pesquisa e, embora seja pragmática, ela se distingue claramente da prática e, embora seja pesquisa, também se distingue claramente da pesquisa científica tradicional, pois ao mesmo tempo altera o que está sendo pesquisado e limita-se ao contexto e ética da prática.

Esta pesquisa, portanto, trata-se de uma Pesquisa-Ação pois busca, por meio da utilização de dados obtidos na prática, a descoberta e geração de conhecimento através da pesquisa, sendo limitada pelo que é praticado nas operações com fluidos de perfuração aquosos cujos dados estão explicitados em uma base de dados, da qual o próprio pesquisador também atua na prática.

Neste trabalho, utilizou-se o KDD para a análise exploratória dos dados contidos na base de dados ecotoxicológicos de fluidos de perfuração. A seguir, será descrito como a base de dados foi preparada para este estudo e como ela foi modificada em cada uma das etapas do KDD.

2.1. Preparação da base de dados

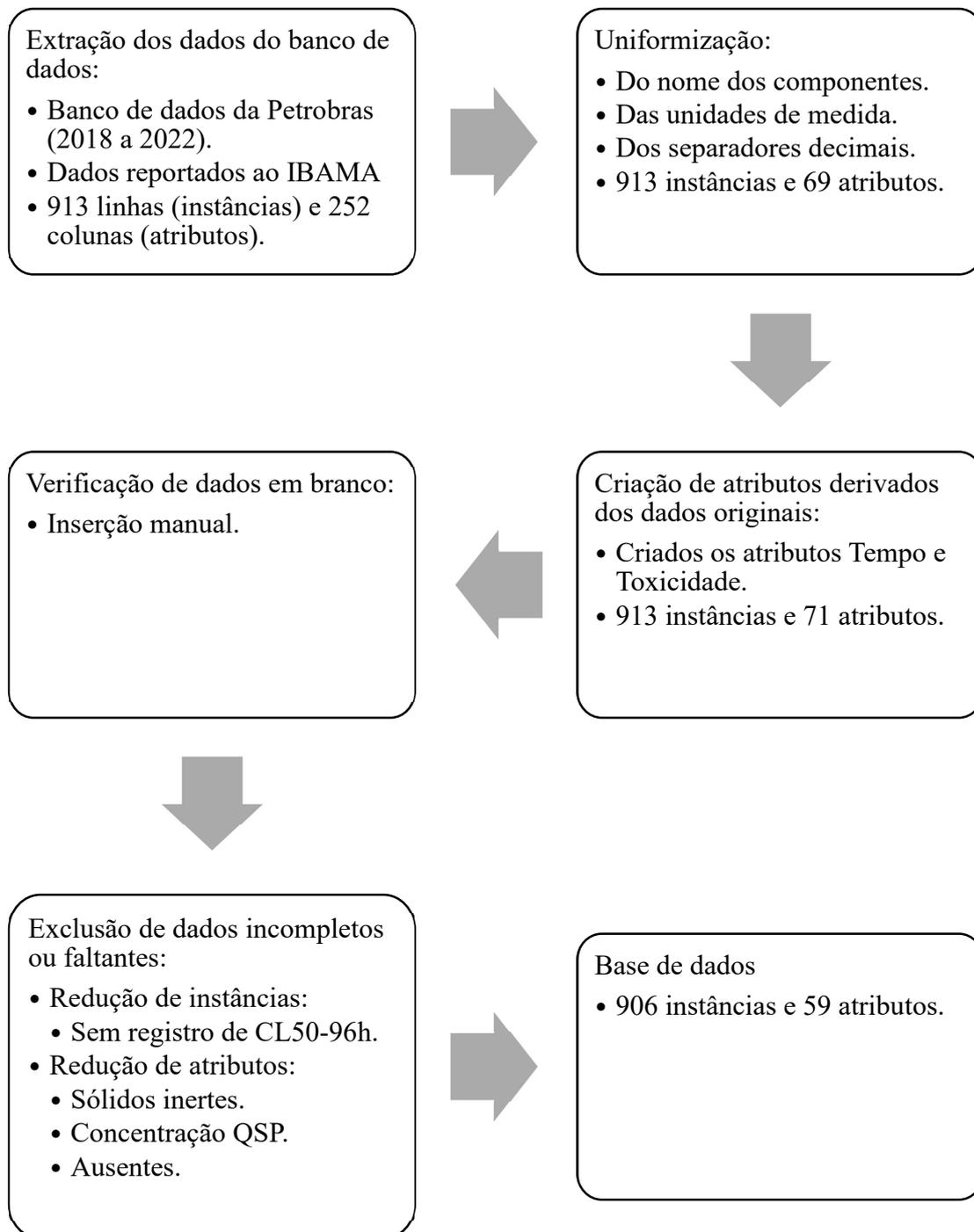
Antes da aplicação do KDD, portanto, foi necessário gerar a base de dados e prepará-la para a aplicação do método. A etapa de mineração de dados foi realizada utilizando-se o software *Weka* e para tanto, a base de dados precisou ser adaptada para conter uma matriz na qual as linhas são as instâncias (neste caso, um teste de ecotoxicidade) e as colunas são atributos, que são características das amostras relacionadas à classe (ou atributo classe). Neste caso, o atributo classe é o resultado do teste de ecotoxicidade.

A Figura 2 traz um resumo das etapas realizadas para a preparação da base de dados. Como pode-se observar, foi utilizado o banco de dados de análises de ecotoxicidade aguda da Petrobras contendo os registros realizados entre 2018 e 2022. Os dados são reportados ao IBAMA. Os registros são realizados com os nomes comerciais dos produtos químicos utilizados na formulação do fluido de perfuração. Produtos iguais podem ter nomes comerciais diferentes e, por isso, foi realizada a verificação da Ficha de Informações de Segurança de Produtos Químicos (FISPQ) de cada um dos componentes de forma a verificar quais deles se tratava do mesmo produto. Desta forma foi possível agrupar os atributos que são, essencialmente, o mesmo produto químico. As unidades de medida de concentração e separadores decimais também não estavam uniformes, sobretudo para os produtos líquidos e foi necessário realizar a conversão das unidades e uniformizar os separadores decimais.

Dois atributos foram calculados: tempo e toxicidade. O tempo corresponde ao intervalo em dias decorrido entre a coleta da amostra e a realização do teste. A toxicidade é o atributo categórico que avalia se a amostra é tóxica ($CL_{50-96h} < 30.000$ ppm) ou não tóxica ($CL_{50-96h} \geq 30.000$ ppm). Foi possível recuperar manualmente, alguns dados em branco no banco de dados, mas que estavam

explícitos no laudo do resultado do teste de ecotoxicidade. Isso permitiu que menos atributos ou instâncias tivessem que ser excluídos da base de dados.

Figura 2: Esquemático das etapas realizadas para a geração da base de dados de ensaios ecotoxicológicos de fluidos de perfuração.



Fonte: própria (autores).

Em relação às exclusões, foram excluídos tanto instâncias, como atributos. Esta etapa foi

necessária em função da ausência de alguns dados. Em relação às instâncias, foram excluídas aquelas nas quais não havia o registro do CL50-96h e não foi possível recuperá-lo. No que se refere aos atributos, foram excluídos nesta ordem:

- i) Componentes sólidos inertes em meio aquoso. Devido à metodologia de realização do teste de ecotoxicidade, ao se adicionar uma alíquota da amostra de fluido ao meio aquoso, a amostra se dilui, a fração sólida sedimenta e a análise é realizada utilizando-se a fração aquosa. Portanto, não se espera observar efeitos relativos a estes sólidos na ecotoxicidade aguda da amostra. Mantê-los poderia acrescentar informações aleatórias ao modelo e atrapalhar a qualidade dos padrões gerados.
- ii) Componentes cuja concentração era QSP (quantidade suficiente para). Isto ocorre porque estes componentes são utilizados para ajustar alguma propriedade desejada do fluido, principalmente densidade, salinidade, parâmetros de filtração, parâmetros reológicos e pH (ALMEIDA et al., 2020)
- iii) Componentes ausentes (concentração = 0) em todas as instâncias restantes.

Ao final destas etapas, a base de dados estava pronta para a aplicação do KDD, possuindo 906 instâncias e 59 atributos.

2.2. Aplicação do KDD

De posse da base de dados, foram aplicadas as etapas do KDD para a realização da análise exploratória dos dados.

2.2.1. Seleção

Nesta etapa foram selecionados os atributos que estariam envolvidos na etapa de mineração e dados. Foram excluídos atributos relacionados à organização das amostras e que não possuem influência sobre a toxicidade (como número de identificação, data de coleta, tipo do fluido).

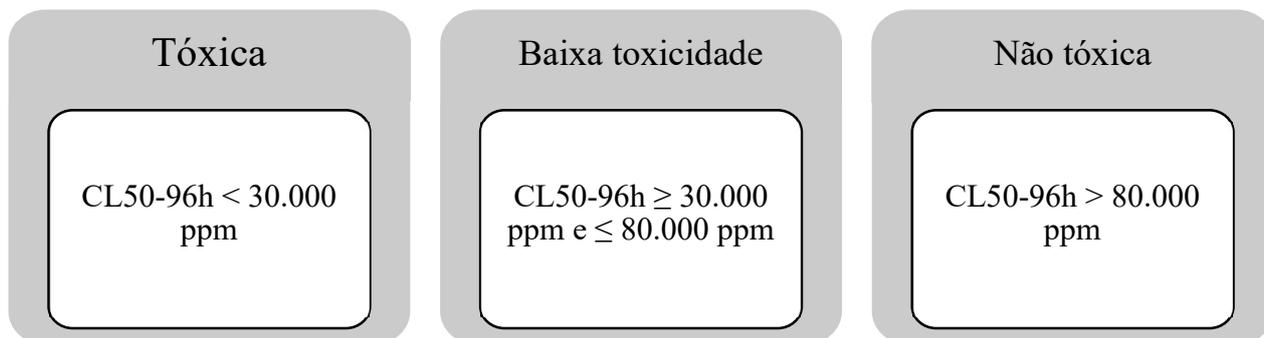
Outro atributo excluído foi o componente goma xantana, pois estava presente em todas as amostras da base de dados em diversas concentrações. Isto era esperado, tendo em vista que os fluidos da base de dados são poliméricos e que o polímero mais amplamente utilizado é a goma xantana. Considerando a etapa de mineração de dados, este componente pode dificultar o entendimento dos algoritmos devido a sua interdependência com a toxicidade, pois todas as amostras, tóxicas ou não tóxicas, o apresentam. Após esta etapa, o número de atributos foi reduzido de 59 para 53.

Não foram aplicadas, até este momento, técnicas de avaliação da contribuição de cada atributo na toxicidade (modelos matemáticos para seleção de atributos). Esta avaliação foi realizada na etapa de mineração de dados, de acordo com os resultados obtidos, dados das FISPQs e avaliação dos padrões gerados.

Até aqui, a base de dados possuía 906 instâncias, das quais 37 eram tóxicas e 869 não tóxicas. Este desbalanceio entre as classes é comum em bases de dados toxicológicas nas quais busca-se e/ou utiliza-se amostras não tóxicas (TANG et al., 2019). Algumas técnicas de pré-processamento podem ser utilizadas para reduzir ou lidar com o desbalanceio, conforme descrito por Idakwo et al. (2019). Ainda segundo Tang et al. (2019), para a obtenção de modelos de alta performance são necessários dados balanceados e suficientes. Optou-se, portanto, por trabalhar a base de dados de forma a excluir dados da classe majoritária e preservar os dados da classe minoritária, entendendo que os dados restantes seriam suficientes para atingir os objetivos deste trabalho.

As 906 instâncias foram, então, novamente rotuladas em três classes distintas, com base no CL50-96h, da forma representada na Figura 3.

Figura 3: Rótulos atribuídos às instâncias para o balanceamento entre as classes relativas ao CL50-96h.



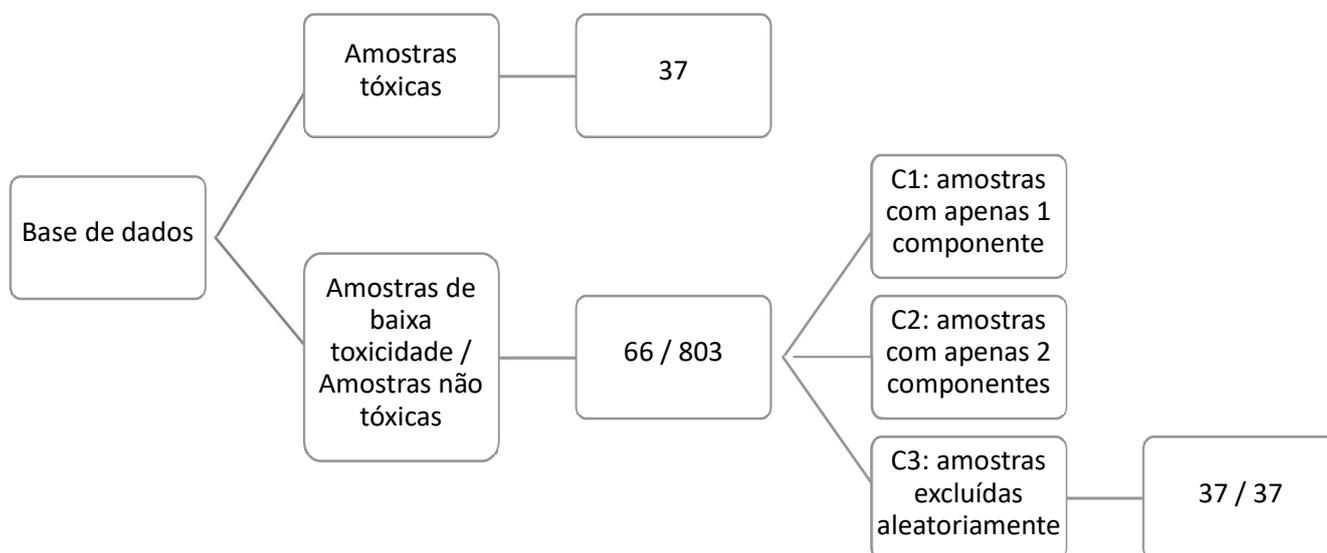
Fonte: própria (autores).

A classificação apresentada na Figura 3 foi realizada com base na utilização do fator de segurança do usuário (e por isso estas faixas de CL50-96h) e com o objetivo de balancear as classes de forma a estabelecer valores de CL50-96h limítrofes em relação às amostras tóxicas (até 80.000 ppm), criando uma hierarquia de toxicidade, na busca por padrões mais valiosos. Considerou-se importante também utilizar os dados com CL50-96h maiores que 80.000 ppm, uma vez que estes dados existem e podem ser determinantes nas descobertas dos padrões por apresentarem componentes e propriedades atrelados à baixa toxicidade das amostras.

A base de dados resultante ficou da seguinte forma: das 906 instâncias, 37 eram tóxicas; 66 de baixa toxicidade e 803 não tóxicas. Para o equilíbrio entre as classes, foram excluídas 29 amostras de baixa toxicidade e 766 não tóxicas. Considerou-se, portanto, que as 111 instâncias restantes contém

dados suficientes para a mineração de dados e geração dos padrões. A Figura 4 apresenta um resumo dos critérios de exclusão das instâncias das classes baixa toxicidade e não tóxica.

Figura 4: Metodologia para exclusão de instâncias para balanceamento das classes. C1, C2 e C3 correspondem a critério 1, critério 2 e critério 3, respectivamente.



Fonte: própria (autores).

O objetivo de excluir primeiramente amostras com um ou dois componentes é evitar a perda de informação, caso se excluíssem amostras com muitos componentes em detrimento de amostras com poucos e que podem contribuir pouco na geração dos padrões. Em relação aos atributos, após a exclusão das instâncias, alguns não constavam em mais nenhuma das instâncias restantes e foram removidos. Após esta etapa, a base de dados constituía-se de 111 instâncias e 32 atributos.

As próximas etapas do KDD são diretamente influenciadas pelos objetivos que se desejam atingir ao executar a mineração de dados, bem como aos algoritmos utilizados para a execução de cada tarefa. Para atender aos objetivos deste trabalho, foram utilizadas tarefas de classificação (com algoritmo *j48*), agrupamento (algoritmo *SimpleKMeans*) e associação (algoritmo *Apriori*). Estes algoritmos foram escolhidos pois são comumente utilizados para a realização destas tarefas.

Na classificação, o objetivo foi gerar árvores de decisão com base nos atributos que levem à geração de conhecimento por meio da visualização destas árvores, através das quais é possível avaliar a tendência da contribuição de cada componente ou propriedade, ou da combinação destes, na toxicidade da amostra. O atributo classe precisa ser categórico, porém os demais atributos podem ser numéricos.

No agrupamento, o objetivo foi agrupar os dados de forma a observar grupos com toxicidade

distinta, facilitando a compreensão do comportamento toxicológico de cada grupo. O atributo classe pode ser categórico ou numérico. Neste estudo foi utilizada a toxicidade como atributo classe.

Na associação, o objetivo foi avaliar as regras de associação geradas de forma a verificar o efeito isolado e/ou combinado dos componentes ou propriedades na toxicidade da amostra como um todo. Todos os atributos precisam ser categóricos.

2.2.2. Pré-processamento e Transformação

Nesta etapa, para todas as tarefas, foi excluído o atributo CL50-96h, pois optou-se por trabalhar com o atributo categórico criado Toxicidade criado para o balanceamento entre as classes. O atributo numérico pode ser utilizado para tarefas de regressão, que não foram escopo deste estudo.

Para a classificação não foi necessário transformar os dados (normalizar ou discretizar) pois o objetivo é gerar uma ou mais árvores de decisão baseadas no conjunto de dados rotulados. Foi utilizado o algoritmo *j48*. Os parâmetros para configuração do *j48* estão apresentados na seção de resultados.

Na tarefa de agrupamento, assim como na classificação, não foi necessário transformar os dados, pois o algoritmo *SimpleKMeans* utiliza as medidas de distância entre os valores de um mesmo atributo, para direcioná-lo a um determinado grupo. Os parâmetros para a configuração do *SimpleKMeans* estão apresentados na seção de resultados.

Por fim, para a tarefa de associação, devido à necessidade de atributos categóricos para a utilização do algoritmo *Apriori*, foi necessário transformar os dados. Realizou-se uma primeira rodada na qual os componentes foram binarizados através do filtro *NumericToBinary* do *Weka*, o qual atribuiu o valor 0 para ausência do componente e 1 para presença dele. O objetivo da utilização deste filtro foi avaliar as regras de associação geradas pela presença ou ausência de determinado componente. As propriedades foram discretizadas (por meio do filtro do *Weka Discretize*) em 5 intervalos. Aqui foi necessário retornar à etapa de seleção, uma vez que com os recursos computacionais disponíveis, não foi possível executar o algoritmo *Apriori* pelo alto número de atributos, no *Weka*. Foram então selecionados para esta tarefa apenas os atributos considerados na árvore de decisão obtida na tarefa de classificação pelo algoritmo *j48* (Figura 6). Em uma segunda rodada, na tentativa de obtenção de regras de associação mais úteis que refletissem a concentração dos componentes e não apenas a presença ou ausência, foram selecionados os atributos que apareceram na árvore de decisão otimizada da tarefa de classificação (Figura 8). Para a execução, o valor dos atributos relativos tanto às propriedades quanto aos componentes foram discretizados em 5 intervalos.

2.2.3. Mineração de dados

A etapa de mineração de dados consiste na aplicação propriamente dita das tarefas de mineração, por meio de algoritmos previamente selecionados. A ferramenta *Weka* possibilitou a execução de todas as tarefas de mineração de dados propostas neste estudo. Foram selecionados os algoritmos comumente utilizados nas análises exploratórias de dados, para cada tarefa.

Para a tarefa de classificação foi utilizado o algoritmo *J48*. O objetivo de se utilizar este algoritmo é a geração de uma ou mais árvores de decisão que se trata de classificadores diretamente interpretáveis e fáceis de entender. Cada folha da árvore possui um valor de atributo classe (tóxico, baixa toxicidade ou não tóxico); cada ramo corresponde ao resultado do teste dos atributos que constam no nó, que por sua vez é o ponto no qual o atributo é testado (COSTA; BERNARDINI; FILHO, 2014). A força desta classificação (probabilidade de classificar corretamente) é medida pelos dados do modelo gerado e avaliada na etapa de interpretação / avaliação do KDD.

Para a tarefa de agrupamento foi utilizado o algoritmo *SimpleKMeans*, com o objetivo de criar grupos (ou *clusters*) que contenham uma determinada classe, sendo possível avaliar as características de cada um desses *clusters* no que se refere à média do valor do atributo atribuído a determinado grupo. Este algoritmo é eficiente para grandes conjuntos de dados e é facilmente escalável uma vez que é calculada a média (centroide) de cada atributo (que precisa ser numérico) em um grupo definido que pode ou não conter o atributo classe (que pode ser categórico). É necessário informar o parâmetro *k* que equivale ao número de grupos a ser gerado (NUNES, 2016).

Por fim, para a tarefa de associação foi utilizado o algoritmo *Apriori* o qual estabelece regras de associação entre cada atributo ou combinação de atributos entre eles mesmos e com o atributo classe. Cada regra de associação possui um nível de confiança associado. No caso deste estudo a associação entre atributos não tem sentido prático e buscou-se regras de associação que apresentassem como consequência o atributo classe Toxicidade.

2.2.4. Interpretação e Avaliação

A avaliação dos resultados da utilização das técnicas de mineração de dados foi realizada com base nas medidas de confiança dos modelos gerados dentro do domínio de aplicação para cada uma destas tarefas.

Para classificação, foram utilizados os parâmetros MCC (Coeficiente de correlação de Mathews) e número de acertos na classificação da classe tóxica. Ivaniuc (2008) mostra que o MCC está relacionado à performance do modelo como um todo e utiliza os dados da matriz de confusão (TP

- número de verdadeiros positivos; FN - número de falsos negativos; TN - número de verdadeiros negativos e FP - número de falsos positivos). O *Weka* fornece diretamente tanto a matriz de confusão quanto o valor do MCC que varia de -1 a +1, sendo +1 a classificação perfeita. A Equação 1 descreve como é calculado o MCC.

$$MCC = \frac{TP \times TN - FP \times FN}{\sqrt{(TP+FP) \times (FN+TN) \times (FP+TN) \times (TP+FN)}} \quad \text{Equação 1}$$

Para a validação e verificação da assertividade da classificação, foi utilizada validação cruzada (*k-fold-crossvalidation*, com $k = 10$).

Optou-se por utilizar, além do MCC, o número de classificações corretas da classe tóxica, na avaliação do modelo de classificação. Em problemas relacionados à previsão de toxicidade, é mais grave classificar erroneamente uma amostra tóxica como baixa toxicidade ou não tóxica e a busca pelo modelo ideal deve considerar não só a performance do modelo como um todo, mas também a redução do número de classificações incorretas da classe tóxica. O custo da classificação incorreta para determinada classe pode ser levado em consideração na geração do modelo otimizado de forma que a penalização por uma classificação incorreta da classe tóxica seja maior do que o erro de classificação das demais classes.

Para a geração dos grupos na tarefa de agrupamento, os dados foram divididos em dados de treinamento por meio da opção *using training set* padrão do *Weka* e os dados de teste foram utilizados para avaliação através da determinação da porcentagem de instâncias corretamente agrupadas, ao se considerar o atributo classe. Este parâmetro foi gerado pelo *Weka* utilizando-se a opção *Classes to cluster evaluation*.

Para associação, foi utilizado o nível de confiança. As regras de associação geradas pelo algoritmo *Apriori*, em geral, possuem o seguinte formato: X (antecedente) => Y (consequente). O nível de confiança mínimo (especificado pelo usuário) corresponde à garantia mínima na qual o nível de confiança requerido que satisfaz X também satisfaz Y (ROMÃO et al., 1999).

Cabe ressaltar que neste estudo buscou-se o melhor modelo para cada algoritmo utilizado, através da variação dos parâmetros do algoritmo com o foco em encontrar padrões mais representativos nos dados. Para a determinação de um modelo de previsão de toxicidade, é necessário ampliar esta análise com a busca do melhor algoritmo com os parâmetros otimizados que gerem modelos capazes de realizar a previsão com a mais alta eficácia possível.

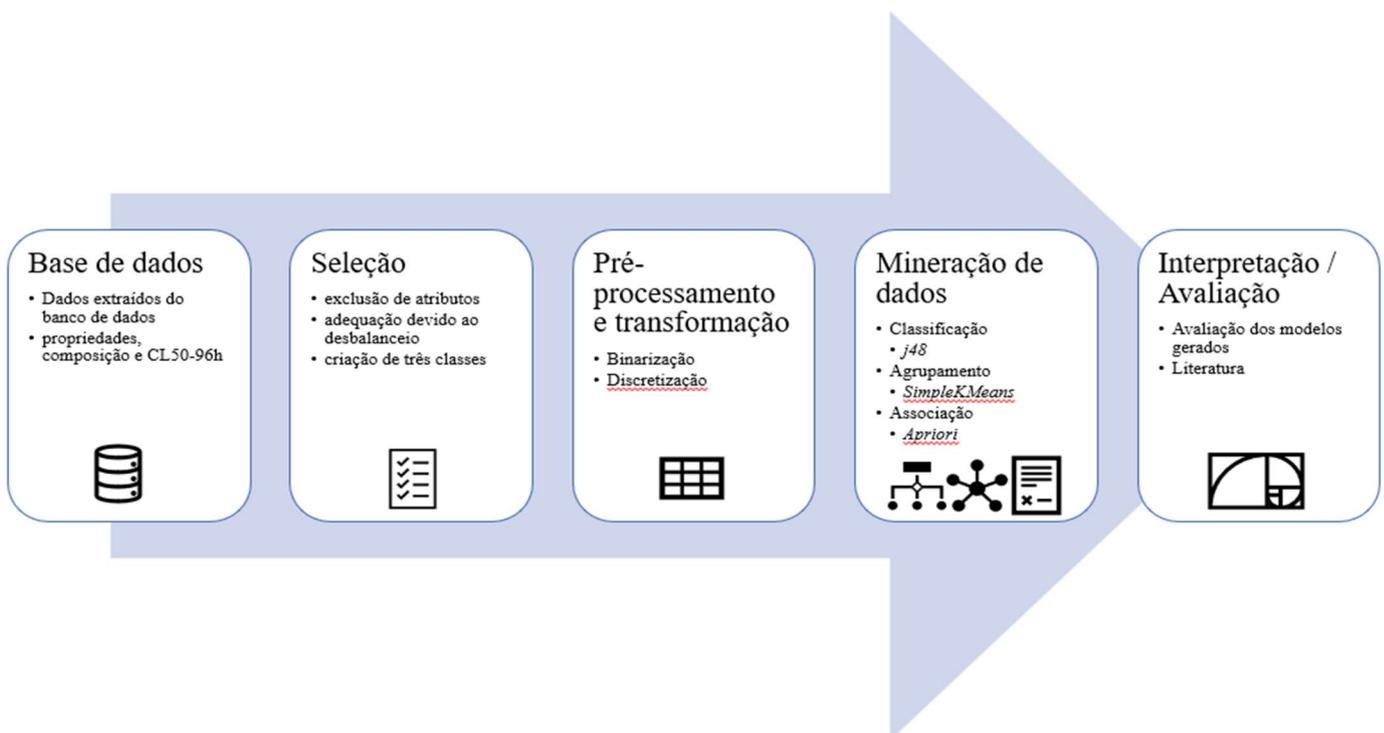
Além da avaliação da performance dos modelos, é necessário realizar a interpretação dos resultados obtidos das árvores de decisão, dos agrupamentos e das regras de associação. Esta etapa foi

realizada analisando-se o objetivo da aplicação de cada tarefa, dados das FISPQs de cada um dos atributos componentes do fluido de perfuração e informações relevantes a respeito dos testes de ecotoxicidade aguda.

A combinação entre avaliação do modelo e interpretação dos dados obtidos foi um processo contínuo a partir de cada informação gerada e que retroalimentou tanto a etapa anterior (de mineração de dados) quanto etapas ainda mais iniciais do KDD, pois ela evidencia os fatores mais relevantes para cada algoritmo e possibilita aumentar a acurácia dos modelos para que melhor representem os dados.

A Figura 5 consiste na apresentação do KDD aplicado a este trabalho e resume a metodologia realizada.

Figura 5: KDD aplicado à base de dados ecotoxicológicos de fluidos de perfuração aquosos.



Fonte: própria (autores).

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A seguir serão descritos os resultados obtidos em cada uma das tarefas de mineração de dados.

3.1. Classificação

Para a geração da árvore de decisão pelo algoritmo *j48*, utilizando-se o *Weka*, alguns dos parâmetros da configuração deste algoritmo foram testados de forma a se obter a árvore mais otimizada (mais aderente aos dados). Cada um dos resultados obtidos foi classificado como um caso e o caso

mais aderente aos dados foi considerado para análise dos resultados.

A Tabela 1 apresenta 6 casos com diferentes parâmetros utilizados para a configuração do algoritmo j48, assim como o valor de MCC médio obtido e o número de acertos para cada instância. A validação do modelo, em todos os casos, foi realizada por meio de validação cruzada (*k-fold-cross-validation*, com $k=10$). Não é escopo deste trabalho detalhar cada um dos parâmetros da configuração do algoritmo j48. Estes estão elucidados no trabalho de Quinlan (1993).

Tabela 1: Casos para a configuração do algoritmo j48 e resultados dos modelos de classificação gerados (MCC e número de acerto das classes tóxica, baixa toxicidade e não tóxica).

Caso	Instâncias por folha	<i>Umpruned</i> (poda)?	Redução de erro da poda?	Correção MDL?	MCC	Número de acertos		
						Tóxica	Baixa toxicidade	Não tóxica
A	2	<i>True</i>	<i>False</i>	<i>True</i>	0,379	25	19	21
B	2	<i>True</i>	<i>False</i>	<i>False</i>	0,175	18	19	13
C	2	<i>False</i>	<i>False</i>	<i>False</i>	0,163	16	21	12
D	2	<i>False</i>	<i>False</i>	<i>True</i>	0,343	23	18	21
E	3	<i>True</i>	<i>False</i>	<i>True</i>	0,354	23	19	21
F	3	<i>True</i>	<i>False</i>	<i>False</i>	0,258	21	19	16
G	3	<i>False</i>	<i>False</i>	<i>False</i>	0,176	20	18	12
H	3	<i>False</i>	<i>False</i>	<i>True</i>	0,371	21	21	22

Analisando os parâmetros MCC e número de acertos da Tabela 1, observa-se que os Casos A e E apresentaram melhores resultados no que diz respeito à classificação das instâncias da base de dados (maiores MCCs e número de acertos de todas as classes). O Caso E resultou em menor taxa de acertos para a classe tóxica quando comparado ao Caso A (23 e 25, respectivamente).

O Caso A foi então escolhido para o estudo da árvore de decisão gerada pelo modelo. Em uma análise global, o modelo classificou corretamente 58,6% das instâncias, com MCC de 0,379. É uma baixa taxa de acertos, contudo considerando o objetivo deste trabalho em uma base de dados prática e ainda não estudada, é um ponto de partida para a extração de conhecimento através da interpretação das regras de classificação.

A Tabela 2 representa a matriz de confusão gerada pelo modelo por meio da qual pode-se avaliar o número de erros e acertos na classificação de cada amostra, sendo o total, em cada classe, 37.

Da matriz da Tabela 2, observa-se que:

- i) Classe tóxica: 25 instâncias foram corretamente classificadas, enquanto 6 instâncias foram classificadas como baixa toxicidade e 6 como não tóxicas.
- ii) Classe Baixa toxicidade: 19 instâncias foram classificadas corretamente, outras 5 foram classificadas como tóxica e outras 13 como não tóxicas.

- iii) Classe não tóxica: 21 instâncias foram classificadas conforme os dados originais, 7 foram classificadas como tóxica e 9 como não tóxica.

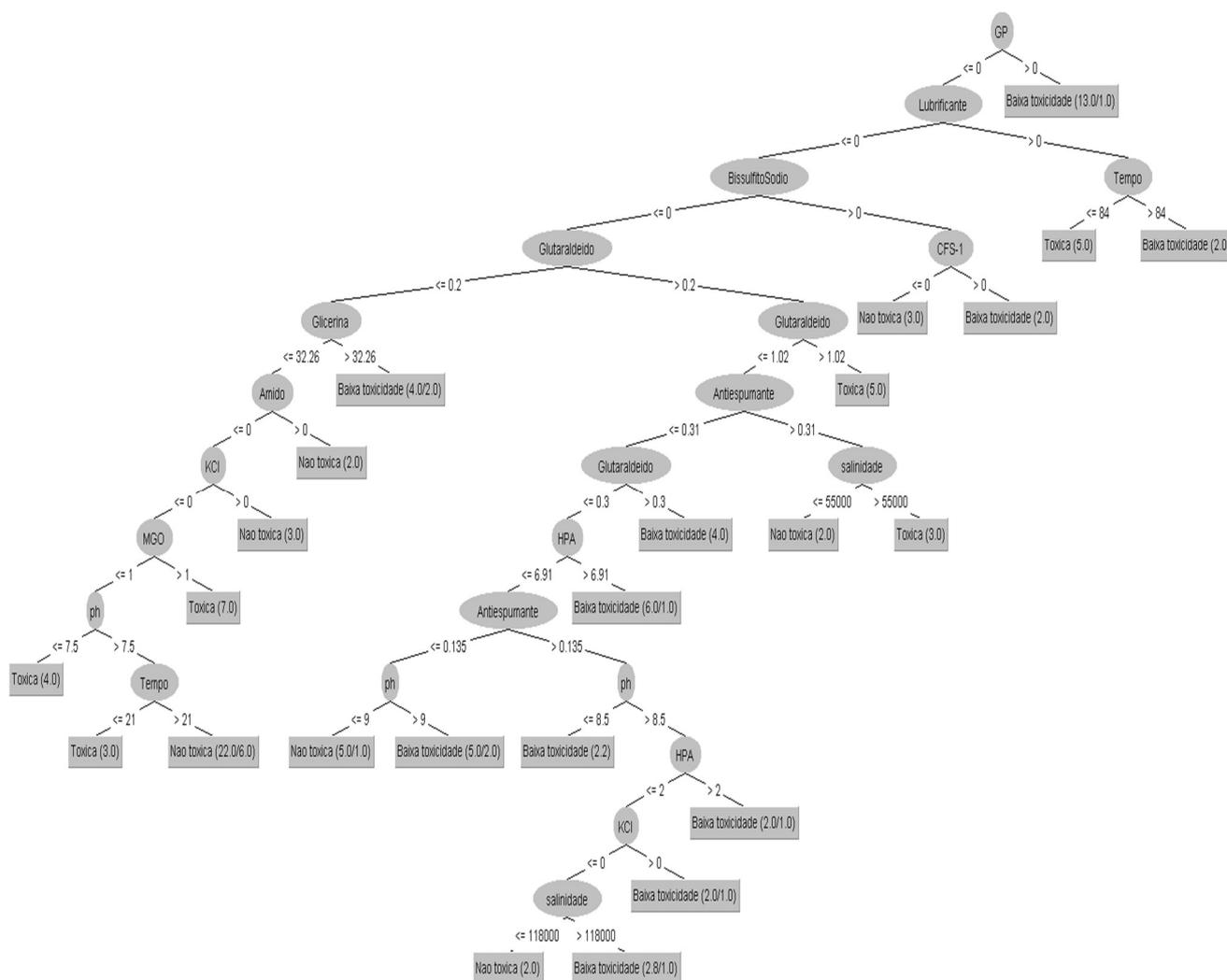
Tabela 2: Matriz de confusão gerada pelo algoritmo j48, no Caso A. Taxa de acertos: tóxica = 67,6%; baixa toxicidade = 51,3%; não tóxica = 56,8%. Parâmetros: instâncias por folha = 2; *unpruned (True)*; redução de erro da poda (*False*) e correção MDL (*True*).

Classificado como:			Classificação original
Tóxica	Baixa toxicidade	Não tóxica	
25	6	6	Tóxica
5	19	13	Baixa toxicidade
7	9	21	Não tóxica

Os erros de classificação podem ocorrer devido a fatores tais como: qualidade da base de dados no que diz respeito à descrição da classe pelos atributos e atributos que possuem dados aleatórios em relação ao atributo classe

Pode-se observar na Figura 6 a complexidade da árvore de decisão gerada para a classificação. Observa-se, também, que dos 31 atributos utilizados para a geração da árvore de classificação, foram considerados como pontos de decisão (nós) apenas 14 deles. A seguir será detalhado cada um dos nós de decisão no que diz respeito à relação do atributo listado no nó com a toxicidade descrita na literatura. A Tabela 3 apresenta um resumo dos atributos relacionados a componentes dos fluidos, com informações retiradas de suas FISPQs.

Figura 6: Árvore de decisão gerada pelo algoritmo j48 configurado no Caso A. Taxa de acertos: tóxica = 67,6%; baixa toxicidade = 51,3%; não tóxica = 56,8%. Parâmetros: instâncias por folha = 2; *unpruned* (True); redução de erro da poda (False) e correção MDL (True).



Fonte: própria (autores).

Tabela 3: Atributos, função no fluido, composto químico associado ao componente e informações ecotoxicológicas disponíveis na FISPQ.

Atributo	Função no fluido	Composto químico	Informações de ecotoxicidade aguda	Concentração no fluido (mg/L)
GP	Estabilizador de folhelhos	Éter butílico de polietilenoglicol (60% a 100%)	EC50(48h) > 3200 mg/L (<i>Daphnia magna</i>)	5711 a 49.969
Lubrificante	Redutor de fricção	Mistura de ésteres, hexadec-1-eno e octadec-1-eno. Oleato de poliglicol	EC50(48h) > 1000 mg/L (organismo não informado)	4758 a 18300
Bissulfito de sódio	Sequestrante de oxigênio	Bissulfito de sódio 40% a 50% v/v em água	LC50(96h) = 75,5 mg/L (<i>Mysidopsis juniae</i>)	12,9 a 583,9 (10 e 450 ppm)

Glutaraldeído	Bactericida	1,5-pentanodial a 40% v/v	CE50(48h) > 14,87 mg/L (<i>Daphnia magna</i>)	57,1 a 3198
Glicerina	Estabilizador de folhelhos	1,2,3-propanotriol a 80% v/v	CL50(96h) > 54000 mg/L (<i>Oncorhynchus mykiss</i>)	37800 a 630000
Amido	Viscosificante e redutor de filtrado	Polissacarídeo / Carboidrato (amido de milho modificado)	Não informado (considerado não tóxico ao ambiente)	5711 a 28553
KCl	Estabilizador de folhelhos	Cloreto de potássio 60% a 100% m/m	TLM(96h) = 100-330 ppm (<i>Daphnia magna</i>)	37120 a 50540
MgO	Controle de pH	Óxido de Magnésio 60% a 100% m/m	TLM(96h) 665500 mg/L (<i>Mysidopsis bahia</i>) EC50(48h) 129,9 mg/L (<i>Daphnia magna</i>)	571 a 5710
CFS-1	Desemulsificante	Etanol (1% a 5% v/v); nonifeniletoxilado (1% a 5% v/v) e alcoxilato de poliamina (1 a 5% v/v)	Etanol: LC50(9h) - 14,221 mg/L (<i>Daphnia magna</i>) nonifeniletoxilato: sem informações. alcoxilato de poliamina: EC50 (48h) >100 mg/L (<i>Daphnia magna</i>)	1999
Antiespumante	Agente antiespumante	Dimetilpolisiloxano	EC50 (48h) >100 mg/L (<i>Daphnia magna</i>)	400 a 4000
HPA	Viscosificante e redutor de filtrado	Amido hidroxipropilado	Não informado (considerado não tóxico ao ambiente)	5711 a 28553

Nota: as FISPQs utilizadas como referência são de um fabricante específico. Os dados de ecotoxicidade podem variar de acordo com o fabricante do produto químico.

Analisando a Tabela 3 vê-se que muitos valores de parâmetros relativos aos ensaios ecotoxicológicos utilizaram como organismo teste a *Daphnia magna*. Este organismo, além de ser de água doce, é relativamente mais simples que o *M. juniae*, conseqüentemente mais sensível e por isso observam-se valores dos resultados dos testes ecotoxicológicos com ordem de grandeza inferior aos comumente praticados para as concentrações utilizadas nos fluidos de perfuração.

Quando o dado ecotoxicológico foi obtido utilizando-se o próprio *M. juniae* ou o *M. bahia* (MgO e bissulfito de sódio), as concentrações utilizadas no fluido tem ordem de grandeza semelhante ao dado das FISPQs destes produtos. Isto facilita a análise dos resultados obtidos neste estudo; as empresas operadoras quando optam pela utilização de determinado produto, tendo um dado mais próximo ao que lhes é exigido pelo órgão ambiental, além do próprio órgão ambiental que poderá possuir a informação de ecotoxicidade relativa ao ecossistema impactado pelos produtos, uma vez que o *M. juniae* é representativo desse ecossistema e justamente por isto escolhido como organismo teste na legislação atual.

Para a realização do teste de ecotoxicidade, a amostra de fluido é diluída em 10 vezes, sendo, portanto, a concentração testada 10 vezes menor que a concentração do componente no fluido de perfuração. Observa-se, portanto, que tanto o bissulfito de sódio quanto o MgO, não foram utilizados em concentrações acima do seu limite de toxicidade especificado.

Independente o organismo utilizado nos testes ecotoxicológicos, nota-se que apenas o amido e o HPA não apresentam toxicidade. Isto indica que os produtos utilizados nos fluidos de perfuração e explicitados na árvore de decisão gerada possuem algum grau de toxicidade ambiental. O amido e o HPA são polissacarídeos e de fato, não é esperado efeito tóxico ao *M. juniae*. Contudo, conforme dito anteriormente, fluidos aquosos de base polimérica podem se degradar. O processo de degradação consiste na fermentação dos polissacarídeos por bactérias, abaixando o pH e alterando outras propriedades do fluido (BAKER HUGHES, 2016), o que influencia na sua toxicidade. Quanto maior a concentração dos polissacarídeos, maior é a fonte de matéria orgânica e conseqüente potencial de degradação. Uma vez iniciado, o processo de fermentação dificilmente é interrompido até o esgotamento da fonte de matéria orgânica.

O que pode ter contribuído, portanto, para que o modelo de classificação considerasse estes atributos como relevantes é o favorecimento da fermentação das amostras que continham estes polissacarídeos. Analisando-se a base de dados, o amido e o hidroxipropilamido estavam presentes em 60% das instâncias. Além destes, a goma xantana, outro polissacarídeo, estava presente em todas as amostras (este atributo foi removido da base de dados na etapa de seleção).

Como nem todos os atributos foram considerados na geração da árvore de decisão (são irrelevantes para a classificação com o algoritmo *j48*), bem como, pela análise dos resultados obtidos, alguns atributos mesmo tendo sido considerados, não possuem influência física, química ou biológica na toxicidade da amostra, de acordo com os dados de suas próprias FISPQs.

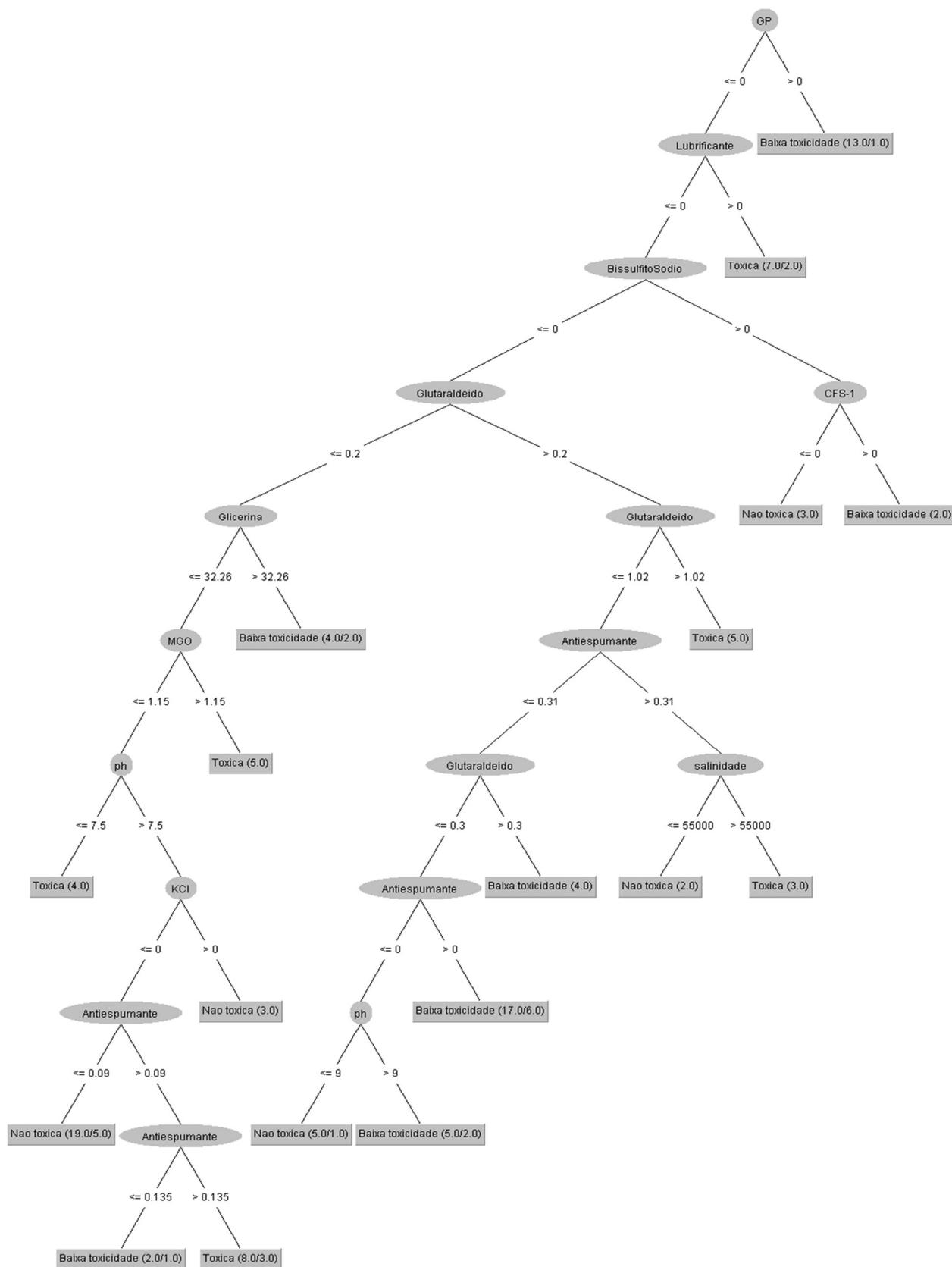
Em relação ao atributo tempo, apesar de ter sido considerado pela árvore de decisão, os resultados mostraram efeito inverso ao esperado (esperado = quanto maior o tempo, maior a probabilidade de a amostra ser tóxica). Isto pode ser explicado pelo fato de que cada etapa do processo

compreendido desde a coleta da amostra até o desembarque da sonda de perfuração e chegada ao laboratório depende de fatores não controlados na base de dados, tais como: o tempo logístico e a conservação da amostra. Desta forma, observam-se amostras que foram analisadas rapidamente sendo tóxicas, não tóxicas ou de baixa toxicidade, bem como o inverso. A legislação ambiental (Brasil, 2019) determina que o tempo decorrido desde a coleta até a realização do teste deve ser inferior a 60 dias (ABNT, 2019; ABNT, 2015).

Diante do exposto e na tentativa de obtenção do modelo de classificação mais representativo pelo algoritmo *j48*, todos os atributos que não apareceram na árvore da Figura 6 foram excluídos, assim como os atributos amido, HPA e tempo, restando 12 atributos para a geração de uma nova árvore, apresentada na Figura 7.

Os parâmetros do modelo de classificação da nova árvore foram: MCC = 0,382, instâncias classificadas corretamente = 58,6%, área sobre a curva ROC = 0,705 e precisão = 0,595. Observa-se uma ligeira melhora nos parâmetros MCC, área sobre a curva ROC e precisão, mantendo-se a taxa de instâncias classificadas corretamente. Isto permite concluir que os atributos excluídos de fato não contribuíam para a árvore de classificação e a ausência do atributo tempo contribuiu para que um melhor modelo de classificação fosse gerado pelo *j48*.

Figura 7: Árvore de decisão gerada pelo algoritmo j48 após a exclusão dos atributos realizada por meio da avaliação das informações extraídas da árvore gerada na Figura 6, com os mesmos parâmetros de configuração do algoritmo (instâncias por folha = 2; *unpruned* (True); redução de erro da poda (False) e correção MDL (True)).



Fonte: própria (autores).

A Tabela 4 resume as regras de classificação obtidas da análise da Figura 7 para cada classe.

Tabela 4: Regras de associação geradas pelo algoritmo j48 para cada classe. As regras mais relevantes (com maior número de ocorrências) estão destacadas em negrito.

Tóxica							
Regra	1	2	3	4	5	6	
GP (lb/bbl)	0	0	0	0	0	0	
Lubrificante (% v/v)	> 0	0	0	0	0	0	
Bissulfito (% v/v)		0	0	0	0	0	
CFS-1 (lb/bbl)							
Glutaraldeído (lb/bbl)		≤ 0,2	≤ 0,2	≤ 0,2	> 0,2 e ≤ 1,02	> 1,02	
Glicerina (% v/v)		≤ 32,26	≤ 32,26	≤ 32,26			
MgO (lb/bbl)		≤ 1,15	≤ 1,15	> 1,15			
pH		≤ 7,5	> 7,5				
KCl (lb/bbl)			0				
Antiespumante (% v/v)			> 0,135		> 0,31		
Salinidade (mg/L)					> 55000		
Número de ocorrências	7	4	8	5	3	5	
Baixa toxicidade							
Regra	7	8	9	10	11	12	13
GP (lb/bbl)	≥ 0	0	0	0	0	0	0
Lubrificante (% v/v)	0	0	0	0	0	0	0
Bissulfito (% v/v)	> 0	0	0	0	0	0	0
CFS-1 (lb/bbl)	> 0						
Glutaraldeído (lb/bbl)			≤ 0,2	≤ 0,2	≤ 0,3 e > 0,2	≤ 0,3 e > 0,2	> 0,3 e ≤ 1,02
Glicerina (% v/v)			≤ 32,26	> 32,26			
MgO (lb/bbl)			≤ 1,15				
pH			> 7,5		> 9,0		
KCl (lb/bbl)			0				
Antiespumante (% v/v)			> 0,09 e ≤ 0,135		0	> 0 e ≤ 0,31	≤ 0,31
Salinidade (mg/L)							
Número de ocorrências	13	2	2	4	5	17	27

Regra	Não tóxica					
	14	15	16	17	18	
GP (lb/bbl)	0	0	0	0	0	
Lubrificante (% v/v)	0	0	0	0	0	
Bissulfito (% v/v)	0	0	0	0	0	
CFS-1 (lb/bbl)	≤ 0					
Glutaraldeído (lb/bbl)		≤ 0,2	≤ 0,2	> 0,2 e ≤ 0,3	> 0,2 e ≤ 1,02	
Glicerina (% v/v)		≤ 32,26	≤ 32,26	≤ 32,26		
MgO (lb/bbl)		≤ 1,15	≤ 1,15			
pH		> 7,5	> 7,5	≤ 9,0		
KCl (lb/bbl)		0	> 0			
Antiespumante (% v/v)		≤ 0,09		0	> 0,31	
Salinidade (mg/L)						≤ 55.000
Número de ocorrências	5	19	3	19	2	

As regras de classificação que tiveram maior relevância para cada classe são:

- i) Tóxica: [glutaraldeído] ≤ 2 lb/bbl e [glicerina] ≤ 32,26 % v/v e [MgO] ≤ 1,15 lb/bbl e pH > 7,5 e [antiespumante] > 0,135 % v/v.
- ii) Baixa toxicidade: 0,3 lb/bbl < [glutaraldeído] ≤ 1,02 lb/bbl e [antiespumante] ≤ 0,31 % v/v.
- iii) Não tóxica: [glutaraldeído] ≤ 0,2 lb/bbl e [glicerina] ≤ 32,26 % v/v e [MgO] ≤ 1,15 lb/bbl e pH > 7,5 e [antiespumante] ≤ 0,09 % v/v.
- iv) Não tóxica: 0,2 < [glutaraldeído] ≤ 0,3 e [glicerina] ≤ 32,26 % v/v e pH ≤ 9,0.

Observando as principais regras de classificação extraídas da árvore de decisão, nota-se que o glutaraldeído é um atributo diretamente relacionado à toxicidade da amostra, aparecendo as principais regras de associação para todas as classes. Amostras com concentrações altas deste componente (1,02 a 2 lb/bbl) tendem a ser tóxicas. Concentrações entre 0,3 e 1,02 lb/bbl atenuam o efeito tóxico e as amostras tendem a ser de baixa toxicidade. Em baixas concentrações (≤ 0,3 lb/bbl) a tendência da amostra é ser não tóxica.

A concentração do antiespumante também influencia, porém em menor grau do que o glutaraldeído, na toxicidade da amostra, sendo esta, uma combinação da concentração desses dois componentes. A concentração de antiespumante ≤ 0,31 % v/v, combinada com concentrações de glutaraldeído entre 0,3 e 1,02 lb/bbl tendem a tornar a amostra com baixa toxicidade ou não tóxica.

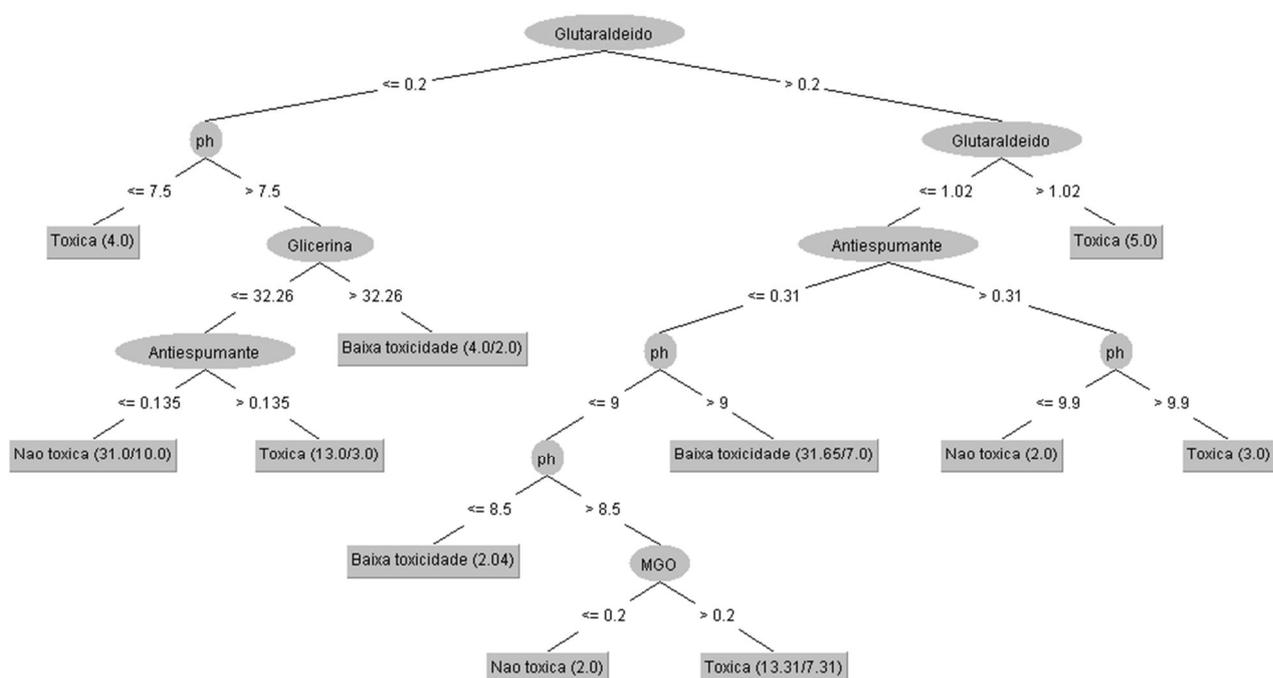
O MgO está diretamente relacionado ao pH. Nas classes tóxica e não tóxica, nas quais este componente aparece nas principais regras de associação, com concentração ≤ 1,15 lb/bbl, o pH é maior que 7,5. Portanto, em pH maior que 7,5 as amostras tendem a não ser tóxicas.

Em relação a glicerina, para as três classes a concentração ≤ 32,26 % v/v apareceu nas regras

de associação. Portanto, não se espera que a glicerina contribua para o efeito de toxicidade das amostras para este intervalo de concentração. Acima deste valor, a amostra tende a ser de baixa toxicidade, em baixas concentrações ($\leq 0,2$ lb/bbl) de glutaraldeído.

A Figura 8 apresenta uma nova árvore de decisão gerada utilizando-se os atributos: pH, glutaraldeído, glicerina, antiespumante e MgO. Observa-se o glutaraldeído como nó principal, portanto o mais determinante na toxicidade das amostras. Além disto, observa-se uma nova regra de associação na qual em pH acima de 9,9 e concentrações elevadas de glutaraldeído (acima de 1,02 lb/bbl), a amostra é tóxica.

Figura 8: Árvore de decisão com os atributos pH, glutaraldeído, glicerina, antiespumante e MgO.



Fonte: própria (autores).

3.2. Agrupamento

Para a utilização da técnica de agrupamento, pelo algoritmo *SimpleKMeans* foi utilizada a base de dados com os 32 atributos, da mesma forma que para classificação. Primeiramente, foi utilizado o filtro “*NumericToBinary*” para todos os componentes. Este filtro transforma os dados numéricos escolhidos em binários o que, neste caso, determina se o componente está (1) ou não presente (0). O objetivo de utilizar este filtro é observar, nos grupos formados, quais são independentes da presença de um determinado componente. Desta forma, foi possível verificar quais componentes, considerando

as configurações e premissas deste algoritmo, não estavam relacionados à toxicidade, ou seja, não estavam presentes em nenhum grupo formado.

A configuração do *SimpleKMeans* que apresentou melhores resultados foi: $k = 3$; *distanceFunction = EuclideanDistance* e os demais parâmetros foram os pré-estabelecidos pelo *Weka*. Com $k=3$, o algoritmo gerou três grupos em cada um continha dados de uma classe de toxicidade. Em relação à performance do modelo, após a verificação das instâncias agrupadas, houve êxito em 45,1%.

De todos os componentes, estavam presentes em algum cluster, os seguintes: antiespumante, amido, HPA, glutaraldeído e MgO. Todos estes também estavam presentes nos resultados da tarefa de classificação.

Foram, então, excluídos todos os demais componentes e, pela mesma razão que na classificação, foram também retirados os atributos amido, HPA e tempo. O *SimpleKMeans* foi utilizado novamente, após a seleção de atributos e com os valores da concentração dos componentes originais (numéricos). Ao se utilizar $k=3$, o *SimpleKMeans* retornou um grupo para a classe tóxica e dois grupos para a classe não tóxica e a classe baixa toxicidade não foi representada. Portanto, o melhor resultado foi encontrado com $k = 4$ e *distanceFunction = EuclideanDistance*. Com esta configuração foi possível observar grupos com as três classes da base de dados, portanto, um resultado mais útil. Contudo, a presença de dois grupos para a mesma classe reduziu a performance do agrupamento para 37,4% das instâncias.

A Figura 9 mostra um gráfico no qual é possível visualizar a divisão de cada uma das amostras (instâncias) por grupo, para cada classe. Os pontos em azul escuro correspondem às amostras do Grupo 0, no qual as amostras são de baixa toxicidade; os pontos em verde correspondem às amostras do Grupo 2, cujas amostras são tóxicas, enquanto os pontos em azul claro e vermelho correspondem aos Grupos 1 e 3, nos quais as amostras são não tóxicas.

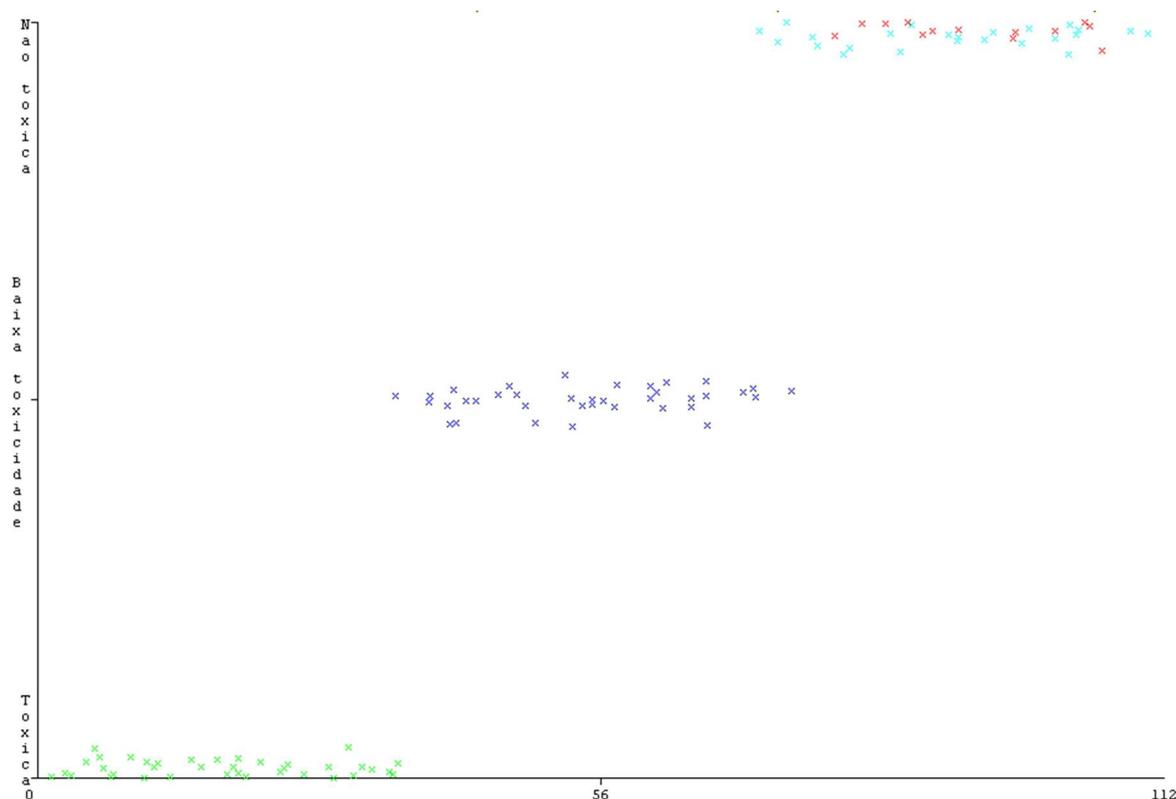
A Tabela 5 apresenta os grupos obtidos em relação aos valores médios dos atributos. O valor correspondente a cada atributo é o centróide do grupo, equivalente à média dos valores de cada atributo daquele grupo.

Tabela 5: Grupos obtidos pela utilização do algoritmo *SimpleKMeans*, com $k = 4$.

Atributo	Grupo 0	Grupo 1	Grupo 2	Grupo 3
Salinidade (mg/L)	74.539	172.385	89.431	52.102
pH	9,5	9,2	8,8	9,0
Antiespumante (% v/v)	0,18	0,12	0,14	0,09
Glutaraldeído (lb/bbl)	0,29	0,11	0,28	0,14
MgO (lb/bbl)	0,88	0,67	0,64	0,47
Classificação	Baixa toxicidade	Não tóxica	Tóxica	Não tóxica

A informação mais direta que pode ser observada na Tabela 5 é a respeito da concentração do glutaraldeído, o que corrobora com os resultados obtidos na tarefa de classificação. Observa-se que a menor concentração (0,11 lb/bbl em média) pertence ao grupo de amostras não tóxicas e, à medida que a concentração média de glutaraldeído aumenta, a amostra tende a pertencer a grupos com maior toxicidade. Isto indica que a sensibilidade do organismo teste ao glutaraldeído é, de fato, alta e determinante na toxicidade das amostras de fluidos de perfuração aquosos.

Figura 9: Esquemático dos grupos formados. No eixo horizontal: número da instância (corresponde ao número de determinada amostra); no eixo vertical, a classe à qual as amostras pertencem; as cores indicam o grupo gerado pelo algoritmo SimpleKMeans.



Fonte: própria (autores)

Nota-se também que foram formados dois grupos para a classe não tóxica. As principais diferenças entre eles são a salinidade, a concentração de antiespumante e de MgO. O Grupo 3 apresenta baixa salinidade (52.102 mg/L), baixa concentração de antiespumante (0,09 % v/v) e baixa concentração de MgO (0,47 lb/bbl). Portanto, observa-se o que é de fato esperado: baixas concentrações dos componentes e baixa salinidade tendem a deixar a amostra não tóxica, ou seja, o organismo teste é submetido a condições mais brandas tanto em relação as propriedades físico-químicas, quanto em relação a concentração dos componentes do fluido de perfuração.

Contudo, mesmo com salinidade elevada (caso do Grupo 1, com média de 172.385 mg/L), desde que com baixa concentração de glutaraldeído e antiespumante, a amostra também tende a ser

não tóxica, o que corrobora com o fato da toxicidade das amostras de fluido de perfuração ser majoritariamente impactada pela concentração de glutaraldeído. Portanto, conclui-se que para concentrações de glutaraldeído abaixo de 0,14 lb/bbl a amostra tende a ser não tóxica.

Já em relação ao grupo das amostras tóxicas (Grupo 2), observa-se alta concentração de glutaraldeído (0,28 lb/bb) e o menor valor de pH dentre todos os grupos (8,8). O Grupo 0, das amostras de baixa toxicidade, também apresenta alta concentração de glutaraldeído (0,29 lb/bbl), porém pH mais alto (9,5) e esta é basicamente a diferença entre estes dois grupos. Menores valores de pH podem indicar degradação parcial da amostra e a toxicidade pode estar relacionada a isto. Conclui-se, portanto, que a conservação da amostra é importante na determinação da toxicidade, mesmo em elevadas concentrações de glutaraldeído.

Esta é uma informação relevante, pois está atrelada ao tempo decorrido entre a coleta da amostra e a realização do teste, mas não somente ao tempo em si. Durante este o aguardo, a amostra deve permanecer em condições ambientais tais quais ela preserve suas condições originais, no que diz respeito, principalmente, ao pH. Caso isto não ocorra, o processo de fermentação pode ser iniciado, mesmo em altas concentrações de glutaraldeído, com conseqüente redução do pH.

O efeito da salinidade é inverso em relação à toxicidade frente ao *Mysidopsis juniae* (que irá definir a toxicidade da amostra como um todo) e à proliferação de bactérias, que leva à perda das propriedades originais e redução do pH. Salinidades elevadas desfavorecem o crescimento da população de bactérias, porém são mais tóxicas ao organismo teste; salinidades mais baixas são mais toleradas pelo *Mysidopsis juniae*, porém são menos eficientes em impedir o crescimento bacteriano. Pela análise dos grupos formados, nota-se que mesmo com salinidade de 172.385 mg/L, o Grupo 1 apresenta amostras não tóxicas, sobretudo pela baixa concentração de glutaraldeído (0,11 lb/bbl). Um equilíbrio entre estes dois parâmetros é fundamental para que a amostra não seja tóxica.

As principais informações geradas pela aplicação da técnica de agrupamento são as seguintes:

- i) Classe tóxica: salinidade = 89.432 ± 65.000 mg/L; pH = $8,8 \pm 0,8$; [antiespumante] = $0,14 \pm 0,12$ % v/v; [glutaraldeído] = $0,28 \pm 0,35$ lb/bbl e [MgO] = $0,64 \pm 0,50$ lb/bbl.
- ii) Classe baixa toxicidade: salinidade = 74.539 ± 67.000 mg/L; pH = $9,5 \pm 0,6$; [antiespumante] = $0,18 \pm 0,14$ % v/v; [glutaraldeído] = $0,29 \pm 0,16$ lb/bbl; [MgO] = $0,88 \pm 0,41$ lb/bbl.
- iii) Classe não tóxica: salinidade = 172.385 ± 55.000 mg/L; pH = $9,2 \pm 0,6$; [antiespumante] = $0,12 \pm 0,15$ % v/v; [glutaraldeído] = $0,11 \pm 0,14$ lb/bbl; [MgO] = $0,67 \pm 0,44$ lb/bbl.
- iv) Classe não tóxica: salinidade = 52.102 ± 28.000 mg/L; pH = $9,0 \pm 0,8$; [antiespumante] = $0,09 \pm 0,14$ % v/v; [glutaraldeído] = $0,14 \pm 0,14$ lb/bbl; [MgO] = $0,47 \pm 0,49$ lb/bbl.

3.3. Associação

Para a tarefa de associação, todos os atributos necessitam ser categóricos (AGRAWAL, SRIKANT, 1994) para a utilização do algoritmo *Apriori*. Da mesma forma que na tarefa de agrupamento, utilizou-se o filtro *NumericToBinary* para transformar a concentração de cada componente em um dado binário no qual 0 indica ausência do componente e 1 indica a presença dele. Em relação à salinidade, pH, densidade e tempo, foi utilizado o filtro *Discretize*. Este filtro cria categorias para cada atributo de forma a subdividir o conjunto de valores de cada atributo em intervalos equivalentes. Deve-se entrar com o número de intervalos desejados. Para estes, foram utilizados 5 intervalos. Desta forma, todos os atributos foram transformados em categóricos e estavam prontos para a utilização do algoritmo *Apriori*.

Devido ao elevado número de atributos, não foi possível executar o algoritmo *Apriori* nas condições computacionais utilizadas, com o *Weka*. Desta forma, a seleção de atributos para esta tarefa foi realizada utilizando-se os resultados obtidos na tarefa de classificação. Foram, então, mantidos os atributos: salinidade, pH, antiespumante, glutaraldeído, bissulfito de sódio, CFS-1, KCl, GP, lubrificante, glicerina e MgO. Da mesma forma que nas tarefas anteriores os atributos tempo, amido e HPA foram excluídos. A salinidade e o pH foram discretizados (em 5 intervalos) e os demais atributos (componentes do fluido de perfuração) foram binarizados.

Neste primeiro momento foi utilizada a configuração padrão do algoritmo *Apriori* (*car = False*; *lowerBoundMinSupport = 0,1*; *metricType = Confidence*; *minMetric = 0,9*). Contudo, as regras geradas não fazem distinção em relação ao atributo classe. Desta forma, a associação entre os componentes, bem como entre os componentes e as propriedades físico-químicas não fazem sentido prático aos objetivos deste estudo. Foi, então, alterado o parâmetro *car* para *True*. Desta forma, todas as regras de associação geradas apresentariam como consequência o atributo classe.

Ao utilizar o intervalo de confiança mínimo de 0,9, o algoritmo retornou regras de associação apenas para a classe baixa toxicidade. Foi feita, então, uma análise de variação deste parâmetro, observando-se o número de regras criadas para cada intervalo de confiança e a classe de toxicidade que aparece em alguma destas regras. A Tabela 6 apresenta estes resultados.

Observa-se na Tabela 6 que foram geradas regras de associação para a classe tóxica apenas considerando o intervalo de confiança mínimo de 0,63. Devido ao grande número de regras geradas, foram escolhidas para discussão e apresentação aquelas que mais fazem sentido prático, para cada nível de confiança. Esta avaliação foi realizada considerando-se os dados da literatura e os resultados obtidos nas tarefas de classificação e agrupamento.

Tabela 6: Número de regras de associação geradas pelo algoritmo *Apriori* para cada nível de confiança e classe de toxicidade encontrada. Parâmetros: *car = True; lowerBoundMinSupport = 0,1; metricType = Confidence; numRules = 250*).

Nível de confiança	Número de regras	Classe de toxicidade
0,92	64	Baixa toxicidade
0,75	8	Não tóxica
0,68	4	Não tóxica
0,67	27	Não tóxica e Baixa toxicidade
0,65	20	Não tóxica
0,64	20	Não tóxica e Baixa toxicidade
0,63	25	Tóxica, Não tóxica e Baixa toxicidade
0,62	4	Não tóxica
0,61	30	Não tóxica e Baixa toxicidade

Considerando-se o nível de confiança de 0,92, a principal regra de associação gerada pelo algoritmo *Apriori* é a seguinte: GP = 1 \implies Classe = Baixa toxicidade. Todas as outras 63 regras estão relacionadas à presença do componente GP e consistem na variação da presença / ausência dos demais componentes. Esta mesma regra foi encontrada utilizando-se a tarefa de classificação. Conclui-se, portanto, que a presença do GP, nas concentrações descritas na base de dados (10,5 a 17,5 lb/bbl) tende a tornar a amostra de baixa toxicidade (CL50-96h entre 30.000 e 80.000 ppm).

Nas 8 regras e associação geradas com nível de confiança de 0,75, os resultados estão relacionados à ausência de alguns componentes. Destaca-se a seguinte regra de associação: Antiespumante = 0 e Glutaraldeído = 0 \implies Classe = Não tóxica. Esta regra faz sentido prático quando avaliada em conjunto com as regras de associação e agrupamento. Ela corrobora o fato de que a toxicidade das amostras está diretamente relacionada à presença do glutaraldeído e antiespumante. Conclui-se, portanto, que amostras que não contenham glutaraldeído e antiespumante não são tóxicas, com confiança de 75%.

As regras de associação geradas com confiança de 68%, 67%, 66% e 65% são uma combinação de ausência de componentes gerando amostras não tóxicas e por isto não serão apresentadas aqui. Contudo, cabe ressaltar que este resultado faz sentido prático, uma vez que é esperado que as amostras sejam menos tóxicas quanto menos componentes contenham. Desta forma, o organismo teste é exposto a menos substâncias e variação do ambiente de cultivo é menor, resultando em amostras não tóxicas.

Ao nível de confiança de 67% destaca-se a seguinte regra de associação: KCl = 1 e Glutaraldeído = 1 \implies Classe = Baixa toxicidade. Ou seja, a presença do cloreto de potássio associada à presença do glutaraldeído tende a tornar a amostra de baixa toxicidade.

Esta é uma regra interessante. O KCl é conhecido, na prática, por ser aumentar a toxicidade de

fluidos de perfuração, sendo disponíveis na literatura estudos como o de Lucena et. al (2014) que buscam substâncias alternativas ao KCl com o intuito de obter fluidos com menor toxicidade. Contudo, este componente não apareceu de forma determinante nas regras de associação ou agrupamento neste estudo (apareceu em uma regra de classificação na classe não tóxica, apenas, com baixo número de ocorrência). A base de dados utilizada é uma base que contém dados reais e portanto, limitada a estes dados. Ao se saber previamente, na prática, do comportamento toxicológico do KCl frente ao organismo teste, a maior concentração de KCl encontrada na base de dados é de 17,7 lb/bbl. É possível que, em amostras contendo concentrações acima deste valor, a amostra seja tóxica. Mesmo não sendo observada nenhuma regra que associe diretamente a concentração de KCl com a classe tóxica, é possível afirmar que com 67% de confiança, quando este componente está presente, juntamente com o glutaraldeído, a amostra é de baixa toxicidade (ou seja, apresenta CL50-96h entre 30.000 e 80.000 ppm).

Com 64% de confiança, foram geradas diversas regras também relacionadas apenas à ausência de componentes e amostras não tóxicas. Contudo, foram também geradas algumas regras que associam o pH e a presença de glutaraldeído a amostras de baixa toxicidade. Regra: $\text{pH} = (9,4 - 10,2]$ e $\text{Glutaraldeído} = 1 \implies \text{Classe} = \text{Baixa toxicidade}$. Em outras palavras, amostras contendo glutaraldeído e com pH entre 9,4 e 10,2 são de baixa toxicidade, ao nível de confiança de 64%. Esta regra isoladamente traz poucas informações. Porém, observa-se nas regras de agrupamento que a classe baixa toxicidade apresenta pH entre 8,9 e 10,1, relativamente próximos ao intervalo obtido pela associação.

Outra regra interessante gerada e associada à regra anterior é a seguinte: $\text{pH} = (8,6 - 9,4]$ e $\text{Glutaraldeído} = 1 \implies \text{Classe} = \text{Tóxica} (0,63)$; ou seja, com nível de confiança de 63%, amostras contendo glutaraldeído e com pH entre 8,6 e 9,4 são tóxicas. Esta faixa de pH mais baixa quando comparada à regra anterior (pH entre 9,4 e 10,2) corrobora o fato de que o pH mais baixo pode indicar que está ocorrendo o processo de degradação pela proliferação bacteriana na amostra, o que a torna tóxica frente ao organismo teste. Com o mesmo nível de confiança, foi gerada a regra: $\text{glutaraldeído} = 0$ e $\text{lubrificante} = 0 \implies \text{Classe} = \text{Não tóxica} (0,63)$, que apesar de ser uma combinação de ausências, apresenta o mesmo resultado obtido na tarefa de classificação e que significa que na ausência dos componentes glutaraldeído e lubrificante, a amostra não é tóxica. As regras de associação geradas com nível de confiança de 61% não foram relevantes, sendo combinações de ausências de componentes ou repetições de regras obtidas com nível de confiança mais elevado, com poucas variações.

A Tabela 7 apresenta as seis principais regras de associação encontradas pelo algoritmo *Apriori* e o nível de confiança de cada uma delas.

Na tentativa de obtenção de melhores resultados no que diz respeito não só à presença ou

ausência de componentes, mas de suas concentrações, foi realizada uma nova seleção de atributos contendo apenas aqueles apresentados na árvore de decisão da Figura 8. Para tanto, foi necessário discretizar (com a utilização do filtro *Discretize*) os atributos numéricos em intervalos de 5 faixas de acordo com a distribuição dos valores dos atributos na base de dados. Ao se utilizar o algoritmo *Apriori* foram obtidas 9 regras de associação com nível de confiança maior que 0,6. As nove regras estão apresentadas na Tabela 8. Não foram geradas regras de associação com maior nível de confiança.

Tabela 7: Principais regras de associação geradas pelo algoritmo *Apriori* e nível de confiança (Parâmetros: *car = True*; *lowerBoundMinSupport = 0,1*; *metricType = Confidence*; *numRules = 250*)

Regra	Amostra	Classe	Nível de confiança
A1	Contém GP	Baixa toxicidade	0,92
A2	Não contém antiespumante e não contém glutaraldeído	Não tóxica	0,75
A3	Contém KCl e contém glutaraldeído	Baixa toxicidade	0,67
A4	$9,4 < \text{pH} \leq 10,2$ e contém glutaraldeído	Baixa toxicidade	0,64
A5	$8,6 < \text{pH} \leq 9,4$ e contém glutaraldeído	Tóxica	0,63
A6	Não contém glutaraldeído e não contém lubrificante	Não tóxica	0,63

Tabela 8: Regras geradas pelo algoritmo *Apriori* e nível de confiança (Parâmetros: *car = True*; *lowerBoundMinSupport = 0,1*; *metricType = Confidence*; *numRules = 10*)

Regra	Amostra	Classe	Nível de confiança
B1	$9,4 < \text{pH} \leq 10,2$ e $0,224 < [\text{glutaraldeído}] \leq 0,448$ lb/bbl	Baixa toxicidade	0,64
B2	$9,4 < \text{pH} \leq 10,2$ e $[\text{glicerina}] \leq 10$ % v/v e $0,224 < [\text{glutaraldeído}] \leq 0,448$	Baixa toxicidade	0,63
B3	$9,4 < \text{pH} \leq 10,2$ e $0,24 < [\text{antiespumante}] \leq 0,32$ % v/v e $0,224 < [\text{glutaraldeído}] \leq 0,448$ lb/bbl	Baixa toxicidade	0,63
B4	$0,24 < [\text{antiespumante}] \leq 0,32$ % v/v e $0,224 < [\text{glutaraldeído}] \leq 0,448$ lb/bbl	Baixa toxicidade	0,62
B5	$9,4 < \text{pH} \leq 10,2$ e $0,224 < [\text{glutaraldeído}] \leq 0,448$ % v/v e $0,8 < [\text{MgO}] \leq 1,2$ lb/bbl	Baixa toxicidade	0,62
B6	$0,24 < [\text{antiespumante}] \leq 0,32$ % v/v e $[\text{glicerina}] \leq 10$ % v/v e $0,224 < [\text{glutaraldeído}] \leq 0,448$ lb/bbl	Baixa toxicidade	0,62
B7	$9,4 < \text{pH} \leq 10,2$ e $[\text{glicerina}] \leq 10$ % v/v e $0,224 < [\text{glutaraldeído}] \leq 0,448$ lb/bbl e $0,8 < [\text{MgO}] \leq 1,2$ lb/bbl	Baixa toxicidade	0,62
B8	$[\text{antiespumante}] \leq 0,08$ % v/v e $[\text{glutaraldeído}] \leq 0,224$ lb/bbl	Não tóxica	0,61
B9	$[\text{antiespumante}] \leq 0,08$ % v/v e $[\text{glutaraldeído}] \leq 0,224$ lb/bbl e $[\text{glicerina}] \leq 10$ % v/v	Não tóxica	0,60

Observa-se na Tabela 8 que as 7 primeiras regras de associação se referem à classe baixa toxicidade. Apenas as regras 8 e 9 se referem a classe não tóxica e nenhuma regra para a classe tóxica foi gerada pelo *A priori*. Conclui-se, portanto, a partir da regra B8 que amostras não tóxicas possuem concentração de antiespumante $\leq 0,08\%$ v/v; concentração de glutaraldeído $\leq 0,224$ lb/bbl. Ao comparar estes valores com as concentrações destes mesmos componentes na tarefa de agrupamento, observa-se uma semelhança nos resultados no que diz respeito à concentração de glutaraldeído. Nos grupos formados, para a classe não tóxica, a concentração de glutaraldeído foi $\leq 0,28$ lb/bbl.

Em relação às regras B1 a B7, todas da classe de baixa toxicidade, observa-se uma combinação entre a concentração de glutaraldeído, antiespumante, glicerina e pH. De uma forma geral, amostras de baixa toxicidade possuem (com nível de confiança ≥ 0.62):

- i) $9,4 < \text{pH} \leq 10,2$;
- ii) $0,224 < [\text{glutaraldeído}] \leq 0,448$ lb/bbl;
- iii) $0,24 < [\text{antiespumante}] \leq 0,32$ % v/v.
- iv) $[\text{glicerina}] \leq 10$ % v/v.

Foram observados valores de concentração de glutaraldeído e pH semelhantes na árvore de decisão da Figura 7 ($\text{pH} > 9,0$; $0,2 < [\text{glutaraldeído}] \leq 1,02$ lb/bbl e $[\text{antiespumante}] \leq 0,31$ %v/v).

3.4. Considerações a respeito da base de dados e dos resultados encontrados nas tarefas de mineração de dados

A base de dados utilizada é real e são reportadas as características de uma ou mais amostras de fluido de perfuração que foram de fato utilizadas ou apenas testadas para avaliação da ecotoxicidade aguda frente ao organismo *M. juniae*. Estas características são refletidas no alto desbalanceio quantitativo entre o número de instâncias tóxicas e não tóxicas. Isto é natural, uma vez que formulações já conhecidas atendem aos critérios de toxicidade, repeti-las torna o processo de utilização destas formulações mais seguro.

Há, entretanto, um ponto de atenção a ser considerado. As amostras dos fluidos de perfuração utilizadas são coletadas ao final do uso e antes do descarte do fluido. O objetivo é que a amostra a ser analisada reflita de fato o fluido que será descartado no mar. Contudo, a concentração de cada componente do fluido registrada na base de dados se refere à concentração na qual o fluido foi fabricado. Isto faz com que qualquer consumo de algum componente durante o processo de perfuração (que pode se dar pela interação com a rocha perfurada, por exemplo), qualquer processo de diluição ou ajuste de propriedades não sejam refletidos nos registros da base de dados. Ou seja, o efeito do poço sobre o fluido não é considerado.

Este efeito do poço pode, inclusive, agregar componentes distintos dos do fluido de perfuração original, ao fluido utilizado. Desta forma, um fluido usado pode conter compostos químicos diferentes do fluido fabricado, por ter interagido com o poço perfurado. Isto explica o fato de que algumas amostras, mesmo semelhantes, apresentam CL50-96h significativamente diferentes. Isto faz com que a eficiência da interpretação dos dados na etapa de mineração de dados seja prejudicada.

Não é escopo deste trabalho avaliar a performance dos modelos gerados nas diversas tarefas de mineração de dados, porém, observa-se que na classificação, o modelo gerado teve 58,6% de acertos (amostras classificadas corretamente); em agrupamento no máximo 45,1% de instâncias agrupadas e em associação (com os atributos discretizados), foram geradas regras com nível de confiança a partir de 0,64.

Apesar de terem sido utilizados algoritmos simples, estes modelos podem não ter performado melhor devido às características da base de dados que não contempla o efeito do poço sobre o fluido de perfuração, por exemplo. Aqui vale ressaltar que a qualidade da base de dados pode ser aprimorada no que se refere ao registro das informações, sobretudo em relação à uniformização das unidades de medida de concentração dos componentes que, neste estudo, consumiu um tempo considerável e é crucial para a confiabilidade das informações. Isto pode auxiliar, também, no processo de geração das informações e registros enviados ao órgão ambiental.

Outra possível causa da baixa aderência do modelo aos dados pode ser o longo período de registros de testes contido na base de dados (o que está diretamente relacionado aos organismos utilizados e sua replicação). Organismos testes com sensibilidades diferentes produzem resultados de CL50-96h diferentes, para uma mesma amostra. Outro fato relacionado é a utilização de laboratórios diferentes, com organismos diferentes. Além disso, a replicação dos organismos em cada laboratório pode também influenciar. A base de dados utilizada não continha a informação do laboratório que realizou o ensaio e nenhum outro dado do organismo utilizado. Outro fator que pode ter contribuído é a própria qualidade da base de dados no que se refere à assertividade no registro das informações. Muitos registros estavam incompletos ou incoerentes e precisaram ser removidos para a realização deste estudo.

Outro ponto importante é a amostragem do fluido, uma vez que o volume utilizado para uma perfuração é, em geral, grande (cerca de 800 m³) e são coletadas amostras de 1L. A coleta de uma amostra representativa deste volume, por mais acurácia que se tenha e sejam seguidos os procedimentos é dificultada.

Outro fator que é crucial na toxicidade final de uma amostra é a conservação da dela no período compreendido entre a coleta e a análise. Como foi explicado anteriormente, fluidos contendo matéria orgânica estão sujeitos à ação de microrganismos que irão consumi-la e alterar as condições da

amostra. Amostras mal-conservadas, em temperatura não ideal, por exemplo, podem ser drasticamente diferentes das amostras iniciais (cujos registros estão na base de dados) e, por consequência, possuem comportamento toxicológico distinto do esperado. Isto é observado na base de dados (amostras nas quais não se espera comportamento tóxico, sendo tóxicas).

Observa-se, também, dos resultados obtidos neste estudo, que na maioria dos casos, a toxicidade da amostra não está relacionada diretamente a um componente ou uma propriedade, mas sim uma combinação entre eles. Os componentes interagem entre si o resultado desta combinação é que irá atuar sobre o organismo teste. Não há, na base de dados utilizada, parâmetros suficientes para descrição dos efeitos sinérgicos entre os componentes.

A comparação dos resultados numéricos obtidos neste estudo com os dados que constam nas FISPQs dos produtos constituintes dos componentes do fluido foi dificultada pelo não uniformização dos parâmetros ecotoxicológicos que constam nelas. Uma adequação que pode ser relevante é a explicitação dos dados para refletir a legislação ambiental, utilizando, portanto, o *M. juniae* como organismo teste uma vez que estes produtos são comumente utilizados nos fluidos de perfuração. Isto facilitaria o controle tanto dos órgãos fiscalizadores quanto das empresas operadoras que teriam mais segurança nas informações disponíveis para utilização de determinado produto.

5. CONCLUSÃO

Existem padrões na base de dados de ensaios de ecotoxicidade aguda de fluidos de perfuração. Estes padrões foram encontrados por meio das tarefas de classificação, agrupamento e associação, com a utilização dos algoritmos *j48*, *SimpleKMeans* e *Apriori*, respectivamente, implementados na plataforma *Weka*. O conhecimento gerado através destes padrões é útil para tomadas de decisão a respeito da escolha para utilização de produtos químicos com funções específicas no fluido de perfuração, guiada pela previsibilidade da toxicidade do fluido. Foi possível determinar regras de classificação, agrupamento e associação que elucidam os componentes mais diretamente associados à toxicidade da amostra, comparar os valores obtidos nestas regras com os dados de ecotoxicidade disponíveis sobre cada um destes componentes e verificar as limitações encontradas na base de dados que influenciam no conhecimento gerado. Concluiu-se que o principal componente relacionado à toxicidade das amostras é o glutaraldeído e que a conservação da amostra é determinante na manutenção das propriedades originais fluidos, o que influencia diretamente em sua toxicidade e permite que os dados originais dos registros de composição dos fluidos possam ser corretamente interpretados de acordo com o resultado do teste de ecotoxicidade.

5.1. Limitações deste trabalho

A principal limitação deste trabalho reside no fato de que a base de dados é limitada, uma vez que se trata de uma base real que não foi construída para a pesquisa, ou seja, a coleta dos dados não foi realizada de forma sistemática para se atingir determinado objetivo. Os dados, neste caso, são registrados para atender a legislação e reporte ao órgão ambiental. Desta forma, os resultados limitam-se aos dados realizados na prática e, portanto, à faixa de concentração de cada componente dos fluidos de perfuração e suas propriedades registrados no banco de dados, sendo estas determinadas pelas necessidades operacionais.

As informações de ecotoxicidade dos componentes dos fluidos de perfuração disponibilizadas pelos fabricantes não são necessariamente reportadas em relação ao organismo teste solicitado para determinação da ecotoxicidade do fluido (*M. juniae*), o que dificulta e limita a comparação dos resultados obtidos neste estudo com os dados ecotoxicológicos disponíveis para cada produto químico isolado.

Outra limitação importante é o efeito do poço sobre o fluido de perfuração. O registro no banco de dados é realizado, conforme determina o órgão ambiental, pelas concentrações dos produtos químicos utilizados na fabricação do fluido e o consumo deles ou mesmo a incorporação de outros agentes químicos eventualmente provindos da rocha perfurada, não são considerados na base dados.

5.2. Perspectivas para Pesquisas Futuras

Todos os dados obtidos e os padrões encontrados neste estudo foram calculados com a utilização de algoritmos de *machine learning*. Para o futuro da pesquisa nesta temática, pode-se utilizar como referência os padrões encontrados para a realização de testes de ecotoxicidade aguda direcionados para os componentes e propriedades elucidados neste estudo, variando as concentrações, por exemplo, e confirmando ou refutando os resultados apresentados aqui.

Este estudo teve como foco a busca por padrões ecotoxicológicos. Contudo, isto pode evoluir para a previsão de ecotoxicidade com a utilização de modelos que possuam maior aderência aos dados. Para isto, é necessário melhorar a qualidade dos dados da base, sobretudo no que se refere aos registros deles, e incorporar mais informações relevantes ao efeito ecotoxicológico, como a indicação do laboratório, lote do organismo teste, tipo de rocha perfurada, por exemplo.

A ecotoxicidade aguda em coluna d'água foi o objeto deste estudo. Uma indicação para novas pesquisas, seja de análise exploratória de dados ou com a realização de testes ou mesmo para previsão de ecotoxicidade, é estudar o efeito do fluido de perfuração no sedimento (avaliar a influência dos

componentes na toxicidade no sedimento). Isto porque, alguns dos componentes (que foram excluídos desta análise) não apresentam interação na coluna d'água (são inertes em meio aquoso), mas podem vir a se acumular no sedimento marinho, impactando-o de alguma forma.

Por fim, pode-se estudar, considerando o ganho de conhecimento *versus* a utilidade da informação potencialmente gerada, qual o mecanismo de toxicidade de um determinado componente ou propriedade no *M. juniae*.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGRAWAL, R; SRIKANT, R. Fast Algorithms for Mining Association Rules in Large Databases. Em: **20th International Conference on Very Large Data Bases**, p. 478-499, 1994.

ALMEIDA, Jefferson H. de. Estudo das Modificações das Propriedades Físico-Químicas de Fluidos de Perfuração Aquosos. **Revista Perspectivas Online: Exatas & Engenharia**, v. 10, n.28, p. 17-39, 2020.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS (ABNT). **NBR 15308**: ecotoxicologia aquática – toxicidade aguda – método de ensaio com misídeos (Crustacea). Rio de Janeiro, 2017.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS (ABNT). **NBR 15469**: ecotoxicologia – coleta, preservação e preparo de amostras. Rio de Janeiro, 2015.

AVELAR, C. F. P. de; ROCHA, T. A. H.; CRUZ, F. J. S. Mineração de dados: uma revisão da literatura em administração. **Revista Vianna Sapiens**, v. 8, n. 2, 25 p., 2017.

BAKER HUGHES. **Drilling Fluids - Reference Manual**. Fonte: Research Gate Website. 775 p, 2016.

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. **Despacho N° 5540547/2019, SEI 5533803** de 29 de julho de 2019. Define diretrizes para uso e descarte de fluidos de perfuração e cascalhos. Brasília: Instituto Nacional do Meio Ambiente e Recursos Naturais Renováveis, 2019. Disponível em: https://sei.ibama.gov.br/controlador_externo.php?acao=usuario_externo_logar&id_orgao_acesso_externo=0. Acesso em 01 de outubro de 2022.

COSTA, Jefferson de Jesus; BERNARDINI, Flávia Costa; FILHO, José Viterbo. A mineração de dados e a qualidade de conhecimentos extraídos dos boletins de ocorrência das rodovias federais brasileiras. **AtoZ: novas práticas em informação e conhecimento**, v. 3, n. 2, 2014.

CAMILO, Cássio Oliveira; SILVA, João Carlos. **Mineração de Dados: Conceitos, Tarefas, Métodos e Ferramentas**. Universidade Federal de Goiás. Disponível em: https://rozero.webcindario.com/disciplinas/fbmg/dm/RT-INF_001-09.pdf. Acesso em 18 de agosto de 2023.

DAKWO, Gabriel et al. A review on machine learning methods for in silico toxicity prediction. **Journal of Environmental Science and Health - Part C**, v. 36, n.4, p. 169 -191, 2019.

FAYYAD, U.; PIATETSKY-SHAPIRO, G; SMYTH, P. From Data Mining to Knowledge Discovery in Databases. **AI Magazine**, v. 17, n. 3, p. 37 – 54, 1996.

IVANCIUC, O. Weka Machine Learning for Predicting the Phospholipidosis Inducing Potential. **Current Topics in Medicinal Chemistry**, v. 8, n. 18, p. 1691–1709, 2008.

LORENZETT, Cassio Dal Castel; TELOKEN, A. Estudo Comparativo entre os algoritmos de Mineração de Dados Random Forest e J48 na tomada de Decisão. **Universidade de Cruz Alta (UNICRUZ)**, 2016. Disponível em: [Microsoft Word - Artigo completo TCC III \(archive.org\)](#). Acesso em: 16 de agosto de 2023.

LUCENA, Danielly Vieira de; SOUTO, Carlos Magno Rocha Almeida; LIRA, Hélio de Lucena; AMORIN, Luciana Viana. Influência De Sais De Potássio Como Inibidores De Inchamento De Folhelhos No Desempenho De Fluidos De Perfuração Poliméricos. **Tecnologia Em Metalurgia Materiais e Mineração**, v. 11, n. 4, p. 355-362, 2014.

NUNES, Diogo Henriques Freitas. Um breve estudo sobre o algoritmo K-means. 2016. 60 f. **Dissertação de Mestrado em Matemática**. Departamento de Matematica, Faculdade de Ciências e Tecnologia de Coimbra. Coimbra, 2016.

QUINLAN, Ross. C4.5: **Programs for Machine Learning**. San Mateo: Morgan Kaufmann Publishers.

TANG, Weihao et al. Deep learning for predicting toxicity of chemicals: a mini review. **Journal of Environmental Science and Health - Part C**, v. 36, n. 4, p. 252-271, 2019.

TRIPP, David. Pesquisa-ação: Uma Introdução Metodológica. **Educação e Pesquisa**, v. 31, n. 3, p. 443 – 466, 2005.

XU, T. et al. A file fragment classification method based on grayscale image. **Journal of Computers**, v. 9, n. 8, p. 1863–1870, 2014.

CONCLUSÃO

Foi possível determinar, por meio de tarefas de mineração de dados, padrões contidos na base de dados de ensaios de ecotoxicidade aguda de fluidos de perfuração. Nas três tarefas utilizadas neste estudo, foram obtidas regras de classificação, agrupamento e associação que trouxeram informações úteis e com elas foi possível gerar conhecimento. Concluiu-se que o glutaraldeído é o componente com maior grau de associação direta à ecotoxicidade e que é de suma importância a conservação das amostras, uma vez que elas se degradam com o tempo, alterando suas propriedades.

Foi observado neste estudo a evolução do arcabouço legal relacionado às ações de proteção ao meio ambiente impactado pelo descarte dos fluidos de perfuração aquosos no mar, além de que o estado regulador atual é o mais protetivo experimentado pelo ambiente marinho, mesmo após a suspensão da Instrução Normativa nº 1/2018, sendo a CL50-96h, que expressa o resultado quantitativo de um teste de ecotoxicidade, um dos critérios monitorados e reportados ao órgão ambiental pelas empresas operadoras.

A toxicologia computacional vem sendo utilizada recentemente e muitas vezes substituindo testes tradicionais de toxicidade com organismos vivos. No caso dos fluidos de perfuração, o intuito foi utilizar a CL50-96h como parâmetro para verificar os estudos que tratam da toxicologia computacional. A literatura traz trabalhos que relacionam os componentes individuais dos fluidos à sua toxicidade, porém não há, no período temporal e com as considerações utilizadas neste trabalho, estudos que utilizam mineração de dados para previsão ou extração de conhecimento em bases de dados ecotoxicológicos de fluidos de perfuração, apesar de haver estudos que utilizam a mineração de dados para a previsão da toxicidade de substâncias químicas diversas.

Na análise exploratória dos dados realizada por meio da base de dados ecotoxicológicos de fluidos de perfuração, a CL50-96h foi utilizada como base para o atributo classe nas tarefas de classificação, agrupamento e associação, com os algoritmos apropriados, e todas elas retornaram resultados que puderam ser comparados com os dados de ecotoxicidade dos componentes descritos em suas FISPQs, bem como determinar os componentes mais diretamente associados à toxicidade dos fluidos e determinar as limitações da base de dados utilizada com este propósito, bem como dos resultados obtidos.

Em relação aos três artigos científicos produzidos e apresentados, o Artigo Científico 1 foi submetido à revista Boletim do Observatório Ambiental José Ribeiro Lamego, que possui conceito B4 (Qualis / CAPES) e a submissão está em avaliação. O Artigo Científico 2 foi publicado na revista Mix Sustentável, classificada como A3 pelo Qualis / CAPES. Já o Artigo Científico 3 será submetido à revista *Journal of Cleaner Production* com classificação A1 (Qualis /CAPES).