

## 2 Modelagem de águas subterrâneas

No sentido mais amplo, um modelo de águas subterrânea pode ser considerado como a soma de múltiplos componentes, com fundamento físico e matemático, que contribui a gerar um sistema hipotético, descrever e prever mudanças artificiais (tensões aplicadas) ou naturais do sistema.

### 2.1. Conceitos fundamentais

Conceitos, definições, terminologias auxiliam na descrição dos processos de fluxo, particularmente quando envolvem procedimentos numéricos que permitem estudar, prever e calcular respostas apropriadas perante estes fenômenos complexos. Portanto, definições básicas relacionadas ao fluxo de águas subterrâneas em meios porosos (amplamente publicadas na literatura neste assunto, e.g. Bear, 1972 e Bear & Cheng, 2010) são a continuação rapidamente descritas.

#### 2.1.1. Águas subterrâneas

Águas subterrâneas, ou águas sub-superficiais, é o termo usado para denotar toda a água que se encontra abaixo da superfície do terreno, a qual se armazena nos poros entre os grãos minerais, em fraturas, ou em feições cársticas do maciço rochoso. Esta água é geralmente proveniente da precipitação ou pelo derretimento da neve que se infiltra através do solo até se armazenar em unidades rochosas subjacentes.

“O contorno entre a zona saturada e a zona não-saturada, onde a poropressão é zero ( $p = 0$ ), relativa à pressão atmosférica, é denominada de superfície freática, também conhecida como nível do lençol freático das águas subterrâneas” (Atkinson, 2001). Os materiais que se encontram abaixo desta superfície determinam o comportamento do fluxo, podendo se subdividir em dois grupos: materiais de alta condutividade (tais como rochas fraturadas, pedregulhos

e areias) que permitem uma drenagem bastante rápida, e por outro lado, materiais de baixa condutividade (tais como argilas e siltes).

A movimentação das águas subterrâneas pode ser influenciada por distintos fatores, dos quais, de acordo com Fetter (1994) a principal é a força da gravidade, a qual atua para puxar a água para baixo em direção do centro da Terra. Em segundo lugar está a pressão que vem de cima da zona saturada que gera uma pressão a qual provoca uma movimentação na água. Uma terceira força é aquela referida como atração molecular, a qual provoca que a água se adira aos contornos da superfície sólida criando uma tensão superficial quando estão expostas ao ar.

### 2.1.2. Definições Hidrogeológicas

A Figura 2.1 apresenta uma ilustração esquemática de um sistema de águas subterrâneas mostrando áreas de recarga e descarga, aquífero confinado, não confinado e em repouso, nível do lençol freático, superfície potenciométrica, camadas confinantes e a direção do fluxo das águas subterrâneas.

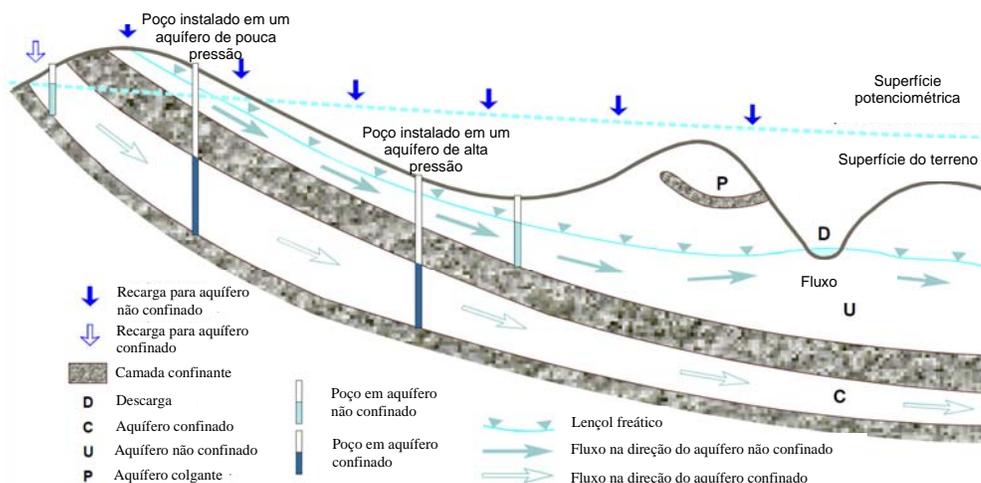


Figura 2.1 - Ilustração esquemática do fluxo de águas subterrâneas (Best, 1998)

A seguir uma breve descrição de seus componentes:

- Aquífero – Unidade hidrogeológica que pode armazenar e transmitir água subterrânea a uma vazão suficientemente rápida para abastecer razoáveis quantidades de água aos poços.
- Camada confinante – Unidade hidrogeológica que atua como uma barreira para fluxo ou como selo para um aquífero.

- Aquífero confinado – Também conhecido como aquífero sob pressão ou aquífero artesianos. É um aquífero que está contornado e sustentado pela parte superior e inferior por formações impermeáveis. A sua recarga pode ocorrer por infiltração em zonas de afloramento deste aquífero ou, se as camadas confinantes não forem totalmente impermeáveis ou, quando tiver contato com um aquífero não confinado.
- Aquífero não confinado – Também chamado de aquífero freático, delimitado no topo pela superfície freática e na base por uma camada impermeável. Geralmente, este tipo de aquífero é diretamente recarregado desde a superfície do solo acima deste, a não ser que a camada superior seja impermeável. Um aquífero livre é chamado de aquífero livre gotejante se a formação inferior limitante é semi impermeável.
- Rendimento específico – O rendimento específico de um solo (ou rocha) pode ser definido como a proporção do volume de água que, depois de saturado, é drenado por gravidade em relação a seu volume total. No caso de um aquífero freático, a água é realmente drenada dos vazios quando o nível freático tem um rebaixamento. Porém, nem toda água contida nos poros é removida pela drenagem gravitacional. Certa quantidade de água é aprisionada nos interstícios entre os grãos por forças moleculares e tensões superficiais. Por isso, o armazenamento de um aquífero freático é menor do que a porosidade, devido a um fator denominado de retenção específica.

$$S_y = n - S_r \quad (1.1)$$

onde  $S_y$  é o rendimento específico,  $n$  é a porosidade (todos os poros estão interconectados) e  $S_r$  é a retenção específica.

- Armazenamento específico de um aquífero é a quantidade de água armazenada ou liberada por unidade de volume da formação devido à compressibilidade do arranjo mineral e dos poros com água por variação unitária na componente de carga normal àquela superfície.
- Coeficiente de armazenamento – pode ser definido como o volume de água que um aquífero desprende ou armazena pelos mesmos efeitos por unidade de área superficial (*i.e.*, considerando toda espessura do aquífero em vez de uma espessura unitária como no caso do  $S_y$ ).

Para um aquífero não confinado o armazenamento é calculado pela seguinte expressão:

$$S = S_y + h \cdot S_s \quad (1.2)$$

onde  $S$  é o coeficiente de armazenamento,  $S_y$  é o rendimento específico,  $h$  é a espessura saturada e  $S_s$  é o armazenamento específico. Geralmente o  $S_y$  é muito maior do que o valor de  $S_s$ .

Para o caso de aquífero confinado o termo de Armazenamento é igual a

$$S = BS_s \quad (1.3)$$

onde  $B$  é a espessura do aquífero confinado.

### 2.1.3. Fluxo em meio poroso e saturado

#### 2.1.3.1. Equação governante

O desenvolvimento da equação governante para fluxo em meios porosos é determinado ao considerar os fluxos de entrada e saída através de um volume representativo do domínio (REV – *Representative Elementary Volume*), *i.e.*, a equação de balanço de massas em combinação com a lei de Darcy resultando na seguinte expressão

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot q = Q \quad (1.4)$$

$$q = -K \cdot \nabla h$$

que ao ser resolvida calcula a carga hidráulica  $h$  (variável primária) para posteriormente calcular a velocidade de Darcy  $q$ , onde  $S_s$  é o coeficiente de armazenamento específico,  $K$  é o tensor de condutividade hidráulica e  $Q$  é uma função geral de fonte/dreno. Usualmente,  $q$  é substituído pela equação de Darcy para obter a equação governante do tipo Richards (Diersch, 2013) na forma

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (K \cdot \nabla h) = Q_h + Q_{hw} \quad (1.5)$$

onde o termo fonte/dreno  $Q = Q_h + Q_{hw}$  é dividido em duas parcelas,  $Q_h$  como fonte de recarga (*e.g.* precipitação) e  $Q_{hw}$  como fonte poço (extração ou injeção). A equação diferencial parcial, Eq. (1.5), tem de ser resolvida para a variável

primária  $h$  submetida às condições de contorno do tipo *Dirichlet*, *Neumann*, *Cauchy*, e do tipo poço.

$$\begin{aligned}
 h &= h_D && \text{em } \Gamma_D \times t[t_0, \infty) \\
 -(K \cdot \nabla h) \cdot n &= q_h && \text{em } \Gamma_N \times t[t_0, \infty) \\
 -(K \cdot \nabla h) \cdot n &= -\phi_h(h_c - h) && \text{em } \Gamma_C \times t[t_0, \infty) \\
 Q_{hw} &= -\sum_w Q_w(t) \delta(x - x_w) && \text{em } x_w \in \Omega \times t[t_0, \infty)
 \end{aligned} \tag{1.6}$$

onde  $h_D$  é a carga hidráulica conhecida imposta no contorno *Dirichlet*  $\Gamma_D$ ,  $q_h$  é o fluxo conhecido imposto no contorno *Neumann*  $\Gamma_N$  e  $-\Phi_h \cdot (h_c - h)$  como condição de transferência de fluxo, a qual depende da carga hidráulica calculada,  $h_c$ , e de referência no contorno *Cauchy*,  $\Gamma_C$ . Para análises em regime transiente é necessário partir de uma condição inicial,  $h_0$ .

$$h(x, t_0) = h_0(x) \quad \text{em } \bar{\Omega}_0 \tag{1.7}$$

O contorno total do domínio seria dado por  $\Gamma = \Gamma_D + \Gamma_C + \Gamma_N$ . Uma vez que a carga hidráulica tenha sido resolvida, a variável secundária (velocidade de Darcy),  $q = -K \cdot \nabla h$ , pode ser avaliada como uma quantidade derivada da carga hidráulica  $h$ , onde os principais parâmetros para resolver a Eq.(1.5) são: condutividades  $[K_{xx}]$ ,  $[K_{yy}]$  e  $[K_{zz}]$ , precipitação, rendimento específico, coeficiente de armazenamento, fontes ou drenos, coeficiente de transferência – infiltração/exfiltração, e propriedades não saturadas.

As equações básicas para fluxo em aquífero não confinado e confinado em um meio contínuo saturado são estabelecidos como

$$(BS_s + \varepsilon_e) \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (BK \cdot \nabla h) = \bar{Q}_h + \bar{Q}_{hw} \tag{1.8}$$

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (T \cdot \nabla h) = \bar{Q}_h + \bar{Q}_{hw} \tag{1.9}$$

que para o caso de aquífero não confinado, Eq. (1.8), a espessura saturada  $B$  varia em função da carga hidráulica calculada  $B = h - f^B$  (Figura 2.2), e o termo de coeficiente de armazenamento aparece como  $S = \varepsilon_e + BS_s$ , sendo que a porosidade efetiva,  $\varepsilon_e$ , poderia ser aproximada ao rendimento específico  $S_y$ , segundo Bear (1972). Para o caso de aquífero confinado, Eq. (1.9), a espessura saturada  $B = f^r - f^B$  é fixa (Figura 2.2), e o termo de armazenamento é reduzido para  $S = S_s B$ .

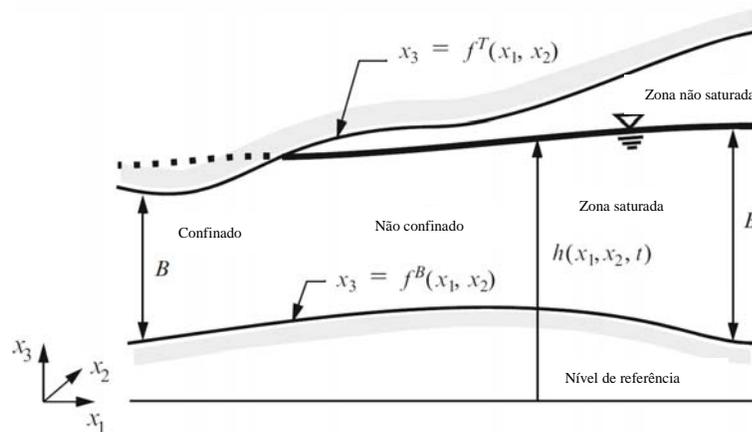


Figura 2.2 - Condição confinada e não confinada em aquífero - seção vertical (Diersch, 2013)

### 2.1.3.2. Formulação de elementos finitos (MEF)

Os conceitos fundamentais do MEF são amplamente conhecidos e estudados por diversos autores<sup>2</sup>. Em geral esta formulação é baseada no método de *Galerkin* para resolver a equação governante de fluxo (Eq.1.5), (Eq.1.8) e (Eq.1.9) associados com as suas respectivas condições de contorno e iniciais, resultando assim na forma variacional:

Da equação (Eq.1.5) tem-se:

$$\int_{\Omega} w S_s \frac{\partial h}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla w \cdot (K \cdot \nabla h) d\Omega - \int_{\Omega} w (Q_h + Q_{wh}) d\Omega - \int_{\Gamma} w (K \cdot \nabla h) \cdot n d\Gamma = 0, \quad \forall w \in H^1(\Omega) \quad (1.10)$$

onde  $w$  é a função de ponderação do método de *Galerkin*.

E a função da carga hidráulica é aproximada da seguinte forma

$$h(x, t) \approx \sum_j N_j(x) h_j(t), \quad j = 1, \dots, N_p \quad (1.11)$$

Portanto, a formulação do método dos elementos finitos baseada no método de *Galerkin* é apresentada da seguinte forma

<sup>2</sup> Para maior informação acerca da notação proposta, revisar Diersch, 2013.

$$\begin{aligned}
& \sum_e \int_{\Omega^e} N_i S_s^e \frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_j N_j h_j \right) d\Omega^e + \sum_e \int_{\Gamma_S^e} N_i \varepsilon_e^e \frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_j N_j h_j \right) d\Gamma_S^e \\
& \quad + \sum_e \int_{\Omega^e} \nabla N_i \cdot \left[ K^e \cdot \nabla \left( \sum_j N_j h_j \right) \right] d\Omega^e - \sum_e \int_{\Omega^e} N_i Q_h^e d\Omega^e \\
& \quad + Q_w(t) \Big|_i + \sum_e \int_{\Gamma_N^e} N_i q_h^e d\Gamma^e - \sum_e \int_{\Gamma_C^e} N_i \phi_h^e \left[ h_C^e - \left( \sum_j N_j h_j \right) \right] d\Gamma^e \\
& \quad - \sum_e \int_{\Gamma_S^e} N_i P^e d\Gamma^e = 0, \quad 1 \leq i, j \leq N_P
\end{aligned} \tag{1.12}$$

Logo, para formar o sistema da matriz de rigidez global é usado o processo de montagem, onde contribuem todos os elementos finitos discretizados espacialmente, resultando assim, em uma forma simplificada, a Eq. (1.13).

$$O \cdot \dot{h} + C \cdot h - F = 0 \tag{1.13}$$

sendo

$$h = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_1 \\ \vdots \\ h_{N_P} \end{pmatrix}, \quad \dot{h} = \begin{pmatrix} \frac{dh_1}{dt} \\ \frac{dh_2}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dh_{N_P}}{dt} \end{pmatrix} \tag{1.14}$$

onde  $O$ ,  $C$  e  $F$  representam as matrizes e vetores da Eq. (1.13)

$$\begin{aligned}
O = O_{ij} &= \sum_e \left( \int_{\Omega^e} S_s^e N_i N_j d\Omega^e + \int_{\Gamma_S^e} \varepsilon_e^e N_i N_j d\Gamma^e \right) \\
C = C_{ij} &= \sum_e \left( \int_{\Omega^e} \nabla N_i \cdot (K^e \cdot \nabla N_j) d\Omega^e + \int_{\Gamma_C^e} \phi_h^e N_i N_j d\Gamma^e \right) \\
F = F_i &= \sum_e \left( \int_{\Omega^e} N_i Q_h^e d\Omega^e + \int_{\Gamma_C^e} N_i \phi_h^e h_C^e d\Gamma^e - \int_{\Gamma_N^e} N_i q_h^e d\Gamma^e + \int_{\Gamma_S^e} N_i P^e d\Gamma^e \right) \\
&\quad - Q_w(t) \Big|_i
\end{aligned} \tag{1.15}$$

para  $(i, j = 1, \dots, N_P)$  e  $(e = 1, \dots, N_E)$  sendo  $N_P$  o número de pontos e  $N_E$  o número do elemento finito.

## 2.2.

### Modelo conceitual para fluxo de águas subterrâneas

O modelo conceitual é uma representação simplificada das características essenciais do sistema físico hidrogeológico e do seu comportamento hidráulico, no qual diversas assumções são feitas porque a completa reconstrução do sistema não é possível, além de que raramente existem dados que abrangem todo o

sistema já seja espacial ou temporalmente. O modelo conceitual deve ser desenvolvido usando o princípio de simplicidade, *i.e.*, o modelo deve ser tão simples quanto possível, porém, mantendo uma complexidade o suficiente para: (i) representar adequadamente os elementos físicos do sistema, (ii) reproduzir o comportamento do sistema a ser estudado; e (iii) facilitar as respostas relacionadas aos objetivos da modelagem.

A verificação do modelo conceitual pode ser feita ao converter este em um modelo matemático e calibrando-o com os dados de campos observados, *e.g.*; cargas hidráulicas observadas versus cargas hidráulicas medidas no campo.

O modelo conceitual normalmente envolve um processo iterativo e deve ser continuamente atualizado enquanto novos dados estejam disponíveis ou enquanto o entendimento do sistema seja melhorado.

### **2.2.1. Domínio e contornos do modelo**

Na maioria dos casos, o domínio do modelo conceitual será o mesmo que o domínio usado para o modelo numérico ou poderia ser maior se o projeto usar diferentes sub-modelos para cobrir diferentes aspectos do lugar (*e.g.*, um modelo numérico separado para representar a mina a céu aberto e outro para representar sua barragem de rejeitos).

De acordo com Wels *et al.* (2012), os contornos mais comuns usados na modelagem de águas subterrâneas em projetos de grande envergadura, como na mineração, incluem:

- Linhas divisórias de água da bacia (representando linhas de fluxo divergente)
- Vales (representando linhas de fluxo convergente)
- Corpos de água de grande volume tais como oceanos, lagoas, rios (representando áreas com carga hidráulica conhecida)
- Contornos geológicos tais como contatos de rocha impermeável ou falhas (representando características de grande escala nas quais o comportamento hidráulico é conhecido ou assumido)
- Condição de fluxo nulo perpendicular às linhas de fluxo

### **2.2.2. Unidades hidrogeológicas e propriedades hidráulicas**

As unidades hidrogeológicas são materiais geológicos (ou grupo de materiais) que têm propriedades hidráulicas suficientemente similares, de tal forma que possam ser consideradas como unidades hidráulicas para o propósito de estudo hidrogeológico.

O modelo conceitual considera as propriedades das maiores unidades hidrogeológicas, tais como: condutividade hidráulica ( $k$ ), parâmetros de armazenamento ( $S$ ), armazenamento específico ( $S_s$ ), rendimento específico ( $S_y$ ) ou porosidade específica ( $\epsilon_e$ ).

### **2.2.3. Recarga e descarga das águas subterrâneas**

A recarga das águas subterrâneas é definida como o fluxo de água descendente que atinge o nível freático acrescentando o armazenamento das águas subterrâneas (Healy, 2010). A recarga das águas subterrâneas ocorre de forma difusa (Direta) ou por meio de mecanismos focalizados (Indireta). Recarga difusiva é distribuída ao redor de grandes áreas em resposta da infiltração da precipitação na superfície do solo percolando através da zona não saturada até atingir o nível freático, sendo esta a principal fonte de infiltração ao sistema das águas subterrâneas (Healy, 2010). Recarga focalizada é o movimento a partir de corpos de águas superficiais, tais como, rios, canais, ou lagoas.

Descargas das águas subterrâneas podem ser definidas como o fluxo que abandona a área em estudo ou as que descarregam nas águas superficiais.

Por exemplo, neste mecanismo a Evapotranspiração ( $ET$ ) pode ser considerada um sistema de descarga, sendo esta definida como a água removida por efeitos combinados de evaporação a partir da superfície de terreno e transpiração pelas plantas a partir das suas raízes. Geralmente, a  $ET$  é considerada ativa nas zonas das raízes, *i.e.*, até uma profundidade de 4 a 6 metros abaixo da superfície. Em áreas de recarga das águas subterrâneas (*e.g.* áreas de grandes elevações) o nível das águas subterrâneas está tipicamente abaixo das zonas das raízes e a  $ET$  é tomada em conta implicitamente (*i.e.*, por ajuste da recarga). Em áreas de planície, a descarga de águas subterrâneas (*e.g.* vales, terrenos úmidos) o lençol freático

está próximo da superfície e a influência da *ET* no balanço das águas subterrâneas pode ser significativa e poderia ser tomado em conta explicitamente.

#### 2.2.4.

#### Interação águas subterrâneas e águas superficiais

A interação das águas subterrâneas com as superficiais é um aspecto crítico na avaliação dos impactos ambientais. Esta interação ocorre na maioria das bacias e é governada pela diferença entre o nível do lençol freático e a elevação das águas superficiais (Winter *et al.*, 1998). Se o nível do lençol freático é maior que o nível de água da corrente superficial, as águas subterrâneas descarregam nas águas superficiais (Figura 2.3a). Se o nível de água da corrente superficial for maior do que o nível do lençol freático, as águas superficiais servem como fonte de água para as águas subterrâneas (Figura 2.3b). Outro caso identificado é quando o lençol freático está abaixo do fundo da corrente de água, tal caso é identificado como fontes desconectadas (Figura 2.3c).

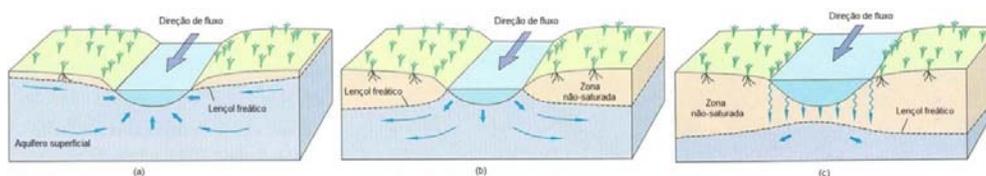


Figura 2.3 - Representação esquemática (a) lençol freático maior que o nível do rio (b) lençol freático menor que o nível no rio (c) corrente do rio desconectada do aquífero (Reproduzido de Winter *et al.*, 1998)

#### 2.2.5.

#### Balanço de massa das águas subterrâneas

O balanço de massas proporciona uma relação quantitativa entre os diferentes aspectos do modelo de fluxo conceitual, *i.e.*, a recarga das águas subterrâneas (infiltração) e a descarga das águas subterrâneas (exfiltração).

Na maioria dos casos uma análise em estado de fluxo permanente para a avaliação do balanço de massas é adequada para a formulação do modelo conceitual. Um balanço de massas em estado transiente (o qual toma em conta as variações da infiltração/exfiltração em função do tempo, assim como do seu armazenamento) é requerido no modelo conceitual só se o aspecto transiente do fluxo for o foco do estudo.

## **2.3. Configuração da modelagem numérica**

Em essência, a configuração do modelo numérico representa os processos de conversão do modelo conceitual qualitativo em um modelo numérico, *i.e.*, um conjunto complexo de equações matemáticas que podem ser resolvidas numericamente em quanto as seguintes definições sejam bem delineadas.

### **2.3.1. Delimitação do domínio**

A delimitação do domínio é dependente da seleção dos contornos externos adequados, sendo preferível usar características hidrogeológicas físicas conhecidas para controlar o fluxo das águas subterrâneas tais como linhas divisórias nas bacias, lagoas, etc. (item 2.2.1).

### **2.3.2. Discretização horizontal e vertical**

Uma vez definido o domínio do modelo numérico, sua discretização é representada quer seja por uma malha ortogonal (método das diferenças finitas) ou por uma malha de elementos 3D (método dos elementos finitos), onde um grau de resolução espacial maior vai determinar a precisão e convergência da solução, porém, adicionando um esforço computacional.

Como já é sabido o uso de uma malha de elementos finitos fornece maior flexibilidade e maiores vantagens em comparação com a malha das diferenças finitas, em relação a uma discretização adequada do modelo numérico.

Os tamanhos dos elementos devem ser os suficientemente pequenos para representar todas as características de interesse, mantendo um refinamento suavizado em locais de importância. É recomendável começar com uma malha relativamente grosseira e ir posteriormente refinando aos poucos ou até atingir resultados estáveis e a precisão requerida. Uma malha muito refinada não alterará significativamente os resultados, porém, acrescentará em grande medida o esforço computacional.

Uma discretização vertical pode ser requerida em um modelo de águas subterrâneas para representar explicitamente as variações de propriedades

hidráulicas com a profundidade ou simplesmente para fornecer uma melhor resolução dos gradientes verticais.

Dois enfoques são comumente usados para representar a discretização do modelo conceitual na dimensão vertical: (i) camadas numéricas deformadas e (ii) camadas numéricas uniformes. Camadas deformadas têm contornos de capa usualmente seguindo às superfícies das unidades hidrogeológicas, permitindo uma continuidade horizontal. Por outro lado, o enfoque de camadas uniformes tem vantagens de simplicidade e de solução estável, mas podendo requerer uma maior discretização vertical para poder descrever adequadamente a espessura das unidades hidrogeológicas gerando, desta forma, um maior tempo de cálculo computacional (ver Anderson & Woessner, 1992 para maior detalhe).

### **2.3.3.**

#### **Condições e restrições de contorno**

Condições e restrições de contorno são expressões matemáticas que procuram representar o estado de um sistema físico, e a sua vez, restringir as equações do modelo matemático. Estas geralmente representam as entradas e saídas do fluxo de água dentro do sistema com limitantes impostas para ter uma solução mais controlada. A sua representação e entendimento para o uso adequado destas dentro do modelo é muito importante devido a que uma condição de contorno hidrogeológica física poderia ser representada em mais de uma forma.

Um sistema de fluxo de águas subterrâneas é geralmente um conjunto de condições de contornos de cargas e fluxos, sendo recomendável evitar o uso só de condições de fluxo sem a imposição de contornos de carga, devido a que esta configuração poderia gerar problemas de não singularidade.

As condições de contorno para modelar o fluxo das águas subterrâneas são geralmente agrupadas em dois tipos conceituais: Contornos físicos e Contornos hidráulicos:

- Contornos físicos: são formados pela presença de corpos grandes de águas superficiais, pela presença de uma unidade hidrogeológica de permeabilidade muito baixa ou por uma barreira artificial, etc. Este tipo de contorno praticamente não muda em resposta do fluxo das águas subterrâneas ou tensões aplicadas nestas.

- Contornos hidráulicos: (ou contornos artificiais) incluem divisórias de águas subterrâneas e linhas de fluxo assim como contornos de carga constantes que representam corpos de águas superficiais. Este tipo de contorno não apresenta bons resultados em simulações em estado transiente, em simulações preditivas ou perante a imposição de tensões no sistema. Seu uso deve ser avaliado para determinar se seus erros poderiam ser aceitáveis no modelo.

### 2.3.3.1.

#### Contorno de fluxo nulo (Linha de fluxo ou Fluxo zero)

O contorno de fluxo nulo não permite que o fluxo de águas subterrâneas atravesse este contorno. Na maioria dos programas numéricos todas as superfícies externas e bordas do domínio do modelo são por definição fluxo nulo a menos que outro tipo de condição de contorno seja aplicado. Isto significa que um modelo de fluxo 3D não simulará nenhum efeito de *Seepage* ou *runoff*, enquanto uma condição de contorno especial esteja colocada.

Existem muitas aplicações comuns de fluxo nulo, tais como:

- Divisória de águas subterrânea: seu uso é justificado apenas quando a tensão atuante no sistema tem um efeito desprezível sobre a posição deste contorno.
- Contornos impermeáveis: são unidades hidrogeológicas as quais são consideradas como impermeáveis para propósito de modelagem, *i.e.*, quando as condutividades hidráulicas dessas unidades diferem em várias ordens de grandeza em relação às outras.
- Perfis de modelos: em estruturas de engenharia, tais como barragens de terras, os contornos laterais têm tipicamente linhas de fluxo hidráulicas paralelas, e perpendicularmente a estas o fluxo nulo existe. Nestes casos é recomendável pegar uma seção que corresponda a 3 vezes a profundidade da estrutura. Outros tipos de estruturas que poderiam ser consideradas como fluxo nulo são os paredes *cut-off*, cortinas de *grout*, geomembranas e *liners*.

### 2.3.3.2. Condição de contorno tipo 1 ou de *Dirichlet*

$$h(x, t) = h_D(t) \quad \text{em} \quad \Gamma_1 \times t[t_0, \infty) \quad (1.16)$$

onde  $h_D$  são os valores de carga hidráulica pré – estabelecidas em relação a  $\Gamma_1 \subset \Gamma$

- Contorno de carga constante: representa uma carga hidráulica que não muda com o tempo e não é afetado pelo sistema de águas subterrâneas simuladas. Usualmente é usado para representar grandes corpos de água, os quais não são afetados pelas tensões aplicadas no sistema (*e.g.* grandes lagoas ou rios, mar, etc.) como ilustrado na Figura 2.4. Outro uso é para representar as cargas hidráulicas observadas no campo (*e.g.* a elevação do lençol freático).
- Contorno de carga geral especificada: representa uma carga hidráulica a qual poderia mudar em tempo e espaço. É usualmente empregado para gerar gradientes hidráulicos que representem condições de carga que se encontram muito afastados do modelo (*e.g.* o mar), reduzindo o domínio do modelo para um tamanho menor. Na maioria dos casos esta condição é fixa no espaço, mas poderia mudar em função do tempo para simulações em estado transiente (*e.g.* avanço da escavação de uma mina a céu aberto avançado a lavra para uma mina subterrânea).

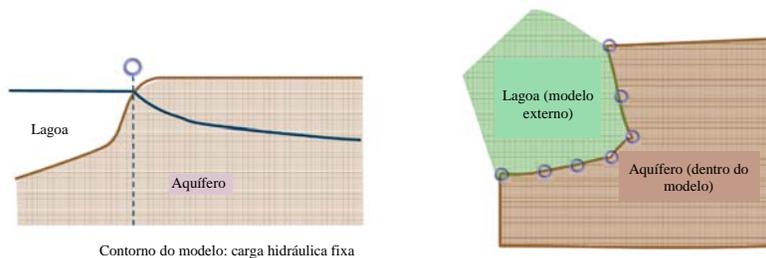


Figura 2.4 - Condição de contorno tipo 1- carga constante (DHI Wasy, 2014)

### 2.3.3.3. Condição de contorno tipo 2 ou de *Neumann*

Neste tipo de condição de contorno o fluxo de águas subterrâneas é especificado através dos contornos (nó, linha, superfície) e pode ser uma função de espaço e de tempo.

→ Contorno de fluxo constante: comumente usados para representar pontos ou linhas fontes de recarga-descarga, constantes em espaço e tempo, como mostrado na Figura 2.5.

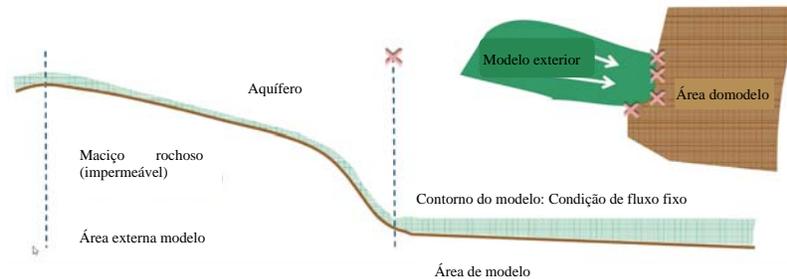


Figura 2.5 - Condição de contorno tipo 2 (DHI Wasy, 2014)

→ Contorno de fluxo especificado: é usualmente empregado para representar recargas que variam com o tempo (*e.g.* a precipitação).

#### 2.3.3.4. Condição de contorno tipo 3 ou de *Cauchy*

$$q_{n_h}(x, t) = [k_r K f_{\mu} \cdot (\nabla h + \chi e)] \cdot n = -\phi_h(h_c - h) \quad \text{em } \Gamma_3 \times t[h_c, \infty) \quad (1.17)$$

A característica principal deste tipo de condição é que o fluxo imposto como condição vai ser dependente da carga hidráulica calculada e da carga hidráulica de referência. Sendo portanto o fluxo uma função especificada que varia na solução do problema enquanto a carga hidráulica variar.

O uso mais comum deste tipo de condição é para representar fluxos de entradas ou saída nos rios, para os quais, certos tipos de condições têm que ser avaliados. A formulação da condição de contorno tipo 3 é baseada na relação de transferência entre o valor da carga hidráulica de referência  $h_c$  no contorno  $\Gamma_3$  e a carga hidráulica a ser calculada,  $h$ , na mesma posição, originando, dessa forma, dois casos:

$$\phi_h = \begin{cases} \phi_h^{in}(x, t) & \text{para } h_c > h \\ \phi_h^{out}(x, t) & \text{para } h_c \leq h \end{cases}$$

→ Infiltração: quando a carga hidráulica de referência é maior do que a carga hidráulica calculada na mesma posição, como mostrado na Figura 2.6.

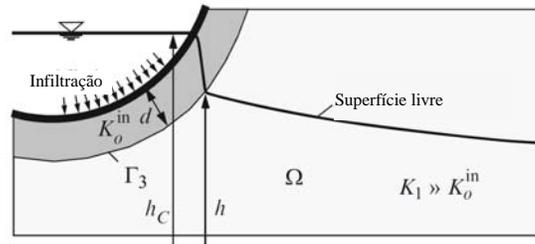


Figura 2.6 - Fluxo de Infiltração ao aquífero (Diersch, 2013)

→ Exfiltração: quando a carga hidráulica de referência é menor do que a carga hidráulica calculada na mesma posição, como mostrado na Figura 2.7.

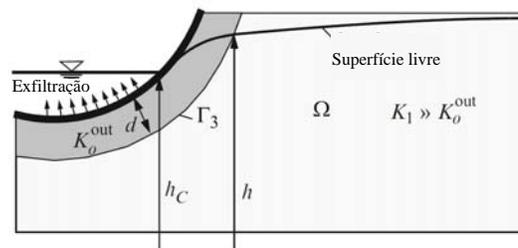


Figura 2.7 - Fluxo de Exfiltração ao rio (Diersch, 2013)

### 2.3.3.5. Condição de contorno tipo poço multicamadas

Este tipo de condição de contorno é muito eficiente quando se trata de injeção ou extração de água através de poços em sistemas de aquíferos 3D, nos quais podem existir diferentes camadas ou formações heterogêneas, onde poços de bombeamento parcialmente penetrantes têm de ser impostos, como esquematizado na Figura 2.8.

Este tipo de condição no programa FEFLOW envolve um método, o qual impõe uma alta condutividade (elemento discreto 1D – tubular) para representar o poço e a superfície deste (*Well Screen*). A alta condutividade do poço garante uma carga uniforme ao longo deste elemento com um ligeiro gradiente em direção ao ponto de descarga.

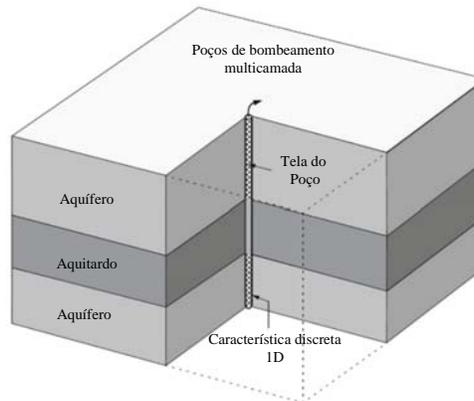


Figura 2.8 - Sistema de aquíferos contendo o poço de bombeamento multicamadas (Diersch, 2013)

#### 2.3.4. Superfície livre

A superfície livre é um contorno móvel onde a carga hidráulica é igual à carga de elevação (pressão = 0 kPa) do contorno. Para o tratamento e solução deste contorno o FEFLOW considera dois enfoques: Malha fixa e Malha móvel (Figura 2.9). Para maiores informações destes dois enfoques, revisar Diersch (2013).

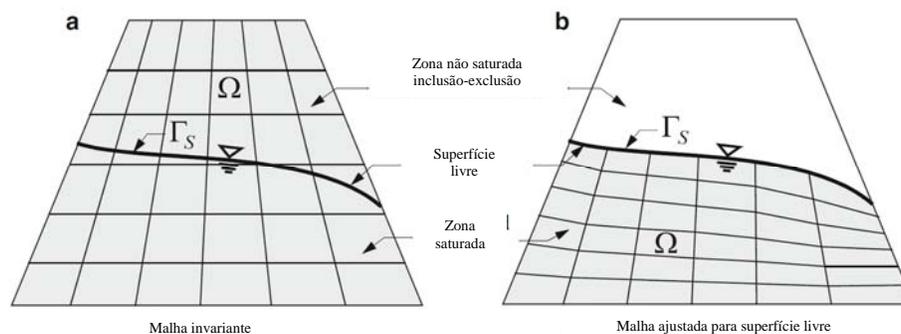


Figura 2.9 - (a) Superfície livre em Malha fixa (b) Superfície livre em Malha móvel, (Diersch, 2013)

##### 2.3.4.1. Superfície livre 3D com malha fixa e condições de pseudo-não saturação

Uma malha fixa tende a imitar, na medida do possível, as condições de fluxo não saturado para controlar os processos de solução dos elementos de malha saturados, parcialmente saturados, ou secos. Neste método a superfície livre

existirá apenas nos elementos parcialmente saturados, onde a superfície freática descansa no interior do volume de elemento.

Deve se enfatizar que uma modelagem com enfoque de pseudo-não saturação é adequado para calcular a posição da superfície livre, porém, não é adequado querer representar um verdadeiro regime de fluxo não saturado, devido a que este método não trabalha em si com parâmetros verdadeiros de uma análise de fluxo de solo não saturado.

A vantagem deste método é a sua simplicidade e robustez, mas a sua eficiência é usualmente inferior ao enfoque de uma malha móvel em relação à precisão atingida.

#### **2.3.4.2. Superfície livre 3D com malha móvel**

Este enfoque é caracterizado por mover o topo do modelo de tal forma que a elevação do primeiro *slice*<sup>3</sup> coincida sempre com a elevação da superfície livre.

Neste enfoque, não é apenas ajustada o primeiro *slice*, senão também todos os *slices* interiores do modelo, de tal forma que nenhum destes se intercepte, e a ao mesmo tempo mantenham uma densidade adequada da discretização.

Malha móvel é um método particularmente bom para casos onde os movimentos do lençol freático são esperados dentro de uma camada numérica. Em sistemas de aquíferos complexos com grandes gradientes este enfoque deixa de ser aceitável.

#### **2.3.5. Convergência do modelo**

Na maioria dos casos, modelagens de águas subterrâneas geram grandes sistemas de equações algébricas, para os quais, métodos de solução direta (e.g. Eliminação de Gauss) podem ser bastante ineficiente devido a que o esforço computacional é proporcional ao tamanho da matriz rigidez. Contudo, existem métodos iterativos que resolvem estes sistemas de equações baseados em uma aproximação da solução, onde o esforço computacional que demandam estes

---

<sup>3</sup> Superfície entre camadas numéricas no FEFLOW.

métodos também depende do tamanho da matriz rigidez, porém, em menor medida.

O princípio do procedimento da solução iterativa é criar uma primeira estimativa inicial da solução  $h^0$  e logo aplicar um esquema de recorrência (e.g. iteração de Richardson) para gerar uma sequência de novas aproximações  $h^1, h^2, \dots$ , até convergir na solução mais aproximada  $h$ . Uma das desvantagens deste método é que a razão de convergência poderia ser lenta ou que inclusive problemas de divergência poderiam ocorrer. Este método requer de um critério de parada, para o qual o processo de iteração é finalizado, e assim poder considerar a solução aproximada como uma solução suficientemente precisa.

O ponto crucial dos métodos de iteração é encontrar uma estratégia para uma razão rápida de convergência. Existe uma ampla variedade de métodos iterativos para resolver sistemas de equações, dentre os mais importantes tem-se:

- Método do gradiente conjugado (CG)
- Método do resíduo mínimo ortogonal (ORTHOMIN)
- Método do resíduo mínimo generalizado (GMRES)
- Método *Lanczos* da raiz do gradiente conjugado (CGS)
- Método *Lanczos* estabilizado do gradiente bi-conjugado (BiCGSTAB)
- Método da multigrelha (MG), em particular o método da multigrelha algébrica (AMG).

Para melhorar o comportamento de convergência destes métodos iterativos, estes são usualmente utilizados em combinação com as técnicas denominadas de pré-condicionamento, as quais transformam o sistema básico de matriz de tal forma que este se torna em um sistema mais adequado de se resolver.

### 2.3.5.1. Pré-condicionamento

Uma importante propriedade da matriz rigidez  $A$  é determinada pelo número de condição  $k(A)$ , definida como:

$$k(A) = \|A\| \|A^{-1}\| \quad (1.18)$$

o qual caracteriza a razão entre o máximo e mínimo dos autovalores  $\lambda_{\max}(A)/\lambda_{\min}(A)$ . Problemas para o qual  $k$  é grande são denominados de mal-

condicionados, e quando  $k$  não é muito grande são denominados de bem-condicionados. Tipicamente um alto contraste entre os parâmetros gera um número de condição muito grande. Devido a que os autovalores influenciam significativamente no comportamento de convergência do método iterativo, este poderia melhorar se o  $k$  diminuísse  $k \rightarrow 1$ . Isto é possível mediante uma adequada transformação da matriz  $A$ , de tal forma que o método iterativo convergia muito mais rápido. Este tipo de modificação é denominado de pré-condicionamento.

## **2.4.**

### **Calibração das águas subterrâneas e análise de sensibilidade**

A calibração é o processo que consiste em encontrar o conjunto de parâmetros, condições de contorno e tensões do sistema, que reproduzem umas cargas hidráulicas e fluxos simulados coincidentes com os valores reais medidos no campo, assumindo uma faixa de erro pré-estabelecido. Encontrar este conjunto de valores equivale a resolver o que se conhece como o problema inverso (Anderson & Woessner, 2002).

Nos estudos de casos apresentados nesta dissertação o parâmetro hidráulico que será modificado em cada processo da calibração será a condutividade hidráulica das unidades hidrogeológicas.

#### **2.4.1.**

##### **Técnicas de calibração**

A calibração do modelo numérico pode ser feito pelos métodos: tentativa-e-erro, métodos automatizados, ou por uma combinação dos dois.

##### **2.4.1.1.**

###### **Calibração manual Tentativa e Erro**

Este método consiste em trocar os parâmetros de entrada no modelo manualmente até melhorar a relação entre os parâmetros de saída do modelo com os valores de parâmetro obtidos no campo. A principal vantagem deste método é que fornece ao modelador uma maior percepção dos fatores que controlam o sistema.

### **2.4.1.2. Calibração para a estimação de parâmetros automatizada**

Estimação de parâmetros automatizada envolve o uso de um ou mais códigos computacionais especialmente desenvolvidos para realizar a calibração do modelo, os quais já resolvem o problema inverso. Na atualidade existem diversos softwares capazes de resolver este método, sendo os principais os códigos que trabalham com FEFLOW e MODFLOW.

### **2.4.2. Dados necessários para calibração**

Os dados (observados) de calibração devem ter idealmente uma distribuição espacial em todo o modelo, e no caso de uma calibração em regime transiente, uma distribuição espacial e temporal dos dados observados é necessária.

A não singularidade durante a calibração do modelo pode se acrescentar devido a que diferentes conjuntos de parâmetro de entrada no modelo produzem saídas aproximadamente idênticas (Brown, 1996). E para compensar este efeito outro parâmetro de controle deveria ser empregado, o qual poderia corresponder a fluxos de saída ou pressões conhecidas no campo.

### **2.4.3. Avaliação da calibração**

#### **2.4.3.1. Avaliação qualitativa**

De acordo ASTM (D5490-93), esta avaliação deve considerar os seguintes aspectos:

→ Características gerais do fluxo

A avaliação deste tipo consiste em usar distribuições espaciais dos padrões de fluxo de águas subterrâneas baseados em planos potenciométricos e compará-los com o campo de fluxo obtido após do processo de simulação, verificando, desta maneira, a inexistência de incoerências.

→ Condições hidrogeológicas

Identificar as diferentes condições hidrológicas que são representadas pelo conjunto de dados disponíveis. Escolher um conjunto de dados a partir de cada

condição hidrológica a ser usado na calibração, e usar o restante na sua verificação.

De acordo com a ASTM (D5490-93), quando só um conjunto de dados é disponível não é aconselhável separar artificialmente dados para a calibração e para a verificação. É mais importante calibrar os dados de cargas piezométricas que abrangiam na medida do possível todo o domínio modelado.

### 2.4.3.2. Avaliação quantitativa

Existem muitos métodos para avaliar quantitativamente a qualidade do ajuste entre os parâmetros medidos e modelados. A seguir são consideradas as avaliações estatísticas mínimas, recomendadas pela norma ASTM (D5490-93), 2002, que devem ser desenvolvidas em um modelo hidrogeológico.

→ Carga potenciométrica residual

Calcula os residuais (diferenças) entre as cargas medidas e as observadas

$$r_i = h_c - h_m \quad (1.19)$$

onde  $r_i$  é o residual, hidráulica medida ( $h_m$ ) e a carga hidráulica calculada ( $h_c$ ). Se o residual for positivo, então a carga calculada é muito alta, e se negativo, então a carga calculada é muito baixa.

→ Erro Médio (ME)

É a diferença entre a carga hidráulica medida ( $h_m$ ) e a carga hidráulica calculada ( $h_c$ ) pelo programa FEFLOW, sendo (n) o número total de dados comparados,  $W_i$  é o fator de ponderação de confiança baseado no julgamento do modelador.

$$ME = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n W_i (h_m - h_c)_i \quad (1.20)$$

→ Erro Médio Absoluto (MAE)

É a diferença entre a carga hidráulica medida ( $h_m$ ) e a carga hidráulica calculada ( $h_c$ ) pelo programa em valor absoluto, sendo (n) o número total de dados comparados.

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |W_i(h_c - h_m)_i| \quad (1.21)$$

→ Erro da Raiz Média Quadrática (RMS)

É a raiz quadrada da média das diferenças dos valores comparados, cargas hidráulicas medidas ( $h_m$ ) e as cargas hidráulicas calculadas ( $h_c$ ) elevadas ao quadrado, sendo (n) o número total de dados comparados.

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [W_i(h_c - h_m)]_i^2} \quad (1.22)$$

→ Coeficiente de correlação (R)

O coeficiente de correlação R é uma medida da correlação do conjunto de dados, e,  $R^2$  é o coeficiente de determinação. O cálculo de R requer a média e o desvio padrão das cargas hidráulicas calculadas e medidas. Em problemas de modelagem hidrogeológica um modelo é considerado calibrado quando o coeficiente de correlação é no mínimo de 0,95.

#### **2.4.4. Análise de sensibilidade**

Depois do modelo de fluxo de águas subterrâneas ter sido calibrado, uma análise de sensibilidade poderia ser feita dependendo da disponibilidade dos dados, para avaliar quantitativamente a relação entre os resultados do modelo e as propriedades hidráulicas (ou condições de contorno do aquífero).

Para cada valor de cada grupo de entrada de parâmetros o modelo deve ser rodado novamente calculando os residuais correspondentes em resposta dos novos valores usados, os quais podem ser verificados por meio de gráficos para cada tipo de análise de sensibilidade.

De acordo com a ASTM (D5611-94), 2002, existem 4 tipos de análises de sensibilidade dependendo de que tão sensível é o modelo perante as variações dos parâmetros de entrada, que de acordo a sua significância nas mudanças podem ir desde tipo I até tipo IV. Se a análise de sensibilidade não for realizada, deve ser justificada porque esta não foi efetivada.