

# ESTUDO DE MÉTODO PARA AVALIAÇÃO DA INCERTEZA NA SIMULAÇÃO DE FLUXO EM MEIOS POROSOS

Victor Vanin SEWAYBRICKER <sup>1</sup> & Alexandre Campana VIDAL <sup>2</sup>

(1) GEOKLOCK Consultoria e Engenharia Ambiental. Avenida das Nações Unidas, 13.797, Bloco 2 - 14º andar. CEP 04794-000. São Paulo, SP. Endereço eletrônico: victor.vanin@geoklock.com.br

(2) Departamento de Geologia e Recursos Naturais, Instituto de Geociências, Universidade Estadual de Campinas / UNICAMP. Rua Pandiá Calógeras, 51 – Cidade Universitária. Caixa Postal 6152. CEP 13083-970. Campinas, SP. Endereço eletrônico: vidal@ige.unicamp.br

Introdução  
Área de Estudo  
Materiais e Métodos  
Resultados e Discussão  
Conclusão  
Agradecimentos  
Referências Bibliográficas

**RESUMO** – A área de estudo tem aproximadamente 10.300 m<sup>2</sup> e substrato caracterizado por aterro argilo-arenoso com presença de entulhos sobreposto a sedimentos não litificados, ora mais argilosos, ora predominantemente arenosos. Foi identificado aquífero livre com fluxo de sul para norte, governado por gradiente hidráulico de 1%. O trabalho realizado busca aplicar método geoestatístico para a avaliação do impacto das heterogeneidades de condutividades hidráulicas verificadas na área, por meio da simulação de cenários equiprováveis em simulador numérico de fluxo e de trajetória de partículas. Dados de campo foram obtidos de registros de sondagens de 15 poços de monitoramento e de 15 poços de remediação. Estas informações foram utilizadas para a construção de modelos equiprováveis de distribuição de condutividades hidráulicas. Os modelos geoestatísticos alimentaram o simulador de fluxo com propriedades definidas célula a célula. Após a calibração do fluxo, foram procedidas simulações de trajetórias de partículas e computadas as respostas para tempos mínimo e máximo de trajetória. Os resultados obtidos para as duas categorias avaliadas evidenciaram a influência dos diferentes cenários equiprováveis adotados, demonstrando a significativa incerteza que há na modelagem de fluxo em aquíferos porosos heterogêneos. Os resultados demonstram que o método estudado é ferramenta aplicável para a análise da incerteza na resposta de simuladores, podendo inclusive, ser empregado em modelos mais complexos e considerando-se outras variáveis que não somente a condutividade hidráulica.

**Palavras-chave:** análise de incerteza, simulação de fluxo, trajetória de partículas.

**ABSTRACT** – *V.V. Sewaybricker & A.C. Vidal - Study of method to evaluate uncertainty in the flow simulation in porous media.* The studied area has approximately 10300 m<sup>2</sup> and its underground is characterized by a sandy-clay landfill that overlaps non consolidated sediments composed by portions of clay predominance and by parts with highest sand contents. A free aquifer flowing from south to north ruled by a hydraulic gradient of 1% has been identified. This research seeks to apply a probabilistic statistical method for assessing the impact of hydraulic conductivities heterogeneities, through the simulation of different feasible hydraulic conductivities scenarios in numerical simulation of flow and particles pathways. Hard data comprised field records of boreholes conducted for installation of 15 monitoring wells and 15 remediation wells. This information guided the construction of hydraulic conductivities distribution model. The geostatistical models results provided the data for the flow simulations. After the calibration of flow simulations particles pathways simulations were proceeded. The results for minimum and maximum particle traveling times were recorded and showed the different adopted scenarios influence, demonstrating that there is significant uncertainty regarding the modeling of flow in heterogeneous porous aquifers. Thus, it was verified that the studied method is an applicable tool for the analysis of uncertainty in the response of simulators, and can even be used in more complex models considering other variables than hydraulic conductivity.

**Keywords:** uncertainty assesment, flow simulation, particle tracking.

## INTRODUÇÃO

Até a explosão industrial e tecnológica desencadeada no século XIX, os impactos ambientais eram produtos ou subprodutos de atividades agrícolas, de forma que a água, o solo e a vegetação de localidades rurais eram afetados (Drew, 1983). Atualmente, as fontes e os tipos de poluição se diversificaram e se espalharam geograficamente, concentrando-se em áreas de alta densidade demográfica, tornando maior

a demanda por técnicas capazes de prover o entendimento mais preciso das ocorrências de contaminação (Suthersan & Payne, 2005).

Nesse cenário, as águas subterrâneas, adquirem destaque, com a conseqüente implantação de estudos em várias áreas da ciência, visando à caracterização de fluxos dos aquíferos e a interação com contaminantes.

Os modelos numéricos computacionais, como representações de sistemas reais, embora não possam retratar plenamente todos os detalhes existentes no meio físico, são ferramentas que auxiliam os estudos e as previsões quanto à dinâmica de fluxo de águas e transporte de solutos em subsuperfície (Zheng et al., 2006).

A simulação de fluxo por modelagem numérica, impulsionada pelo desenvolvimento da tecnologia computacional e por ser um método de baixo custo para a previsão de comportamento do reservatório, corrobora para a compreensão mais ampla da dinâmica de sistemas aquíferos naturais, constituindo um poderoso e conveniente meio para se testar hipóteses.

Com o crescente emprego de simuladores de fluxo, diversos aperfeiçoamentos técnicos foram concretizados enquanto, paralelamente, diferentes abordagens geoestatísticas foram adotadas para o desenvolvimento dos modelos geológicos conceituais, que são os dados de entrada aos programas de simulação (Murray, 2003).

No caso em que se empregam simulações numéricas, o modelo conceitual define as premissas das hipóteses a serem testadas (Scheibe & Yabusaki, 1998).

De maneira genérica, existem duas principais vertentes em questão: aquela que defende a aplicação do princípio da parcimônia, ou seja, que sugere o estabelecimento de modelos geológicos determinísticos

como ponto de partida para futuras simulações (Hill, 2006) e outra que argumenta pelo reconhecimento imediato da complexidade inerente às heterogeneidades geológicas, presentes nas mais diversas escalas de estudo, propondo, portanto, a adoção de abordagem probabilística das premissas assumidas dentro das simulações conduzidas (Gómez, 2006).

A pesquisa apresentada neste trabalho aplica a abordagem probabilística para caracterização da incerteza inerente aos modelos numéricos de fluxo de águas subterrâneas, por meio de análise estatística da variabilidade nos resultados alcançados (Gorokhovski & Nute, 1996; Gégo et al., 2002, de Marsily et al., 2005; Lu et al. 2005 e Gómez, 2006).

O principal objetivo consiste na avaliação do impacto gerado por diferentes distribuições espaciais equiprováveis de condutividades hidráulicas ( $K$ ), adotadas como parâmetro de entrada no simulador de fluxo.

O trabalho foi desenvolvido em três etapas principais e interdependentes: a primeira refere-se à geração, por meio de tratamento geoestatístico dos dados disponíveis, do modelo geológico conceitual (representado pelos valores de condutividade) e à definição das informações de entrada no simulador, a segunda é relativa à simulação de fluxo e a terceira consiste na análise estatística dos resultados dos diferentes cenários fornecidos pelo programa de modelagem.

## ÁREA DE ESTUDO

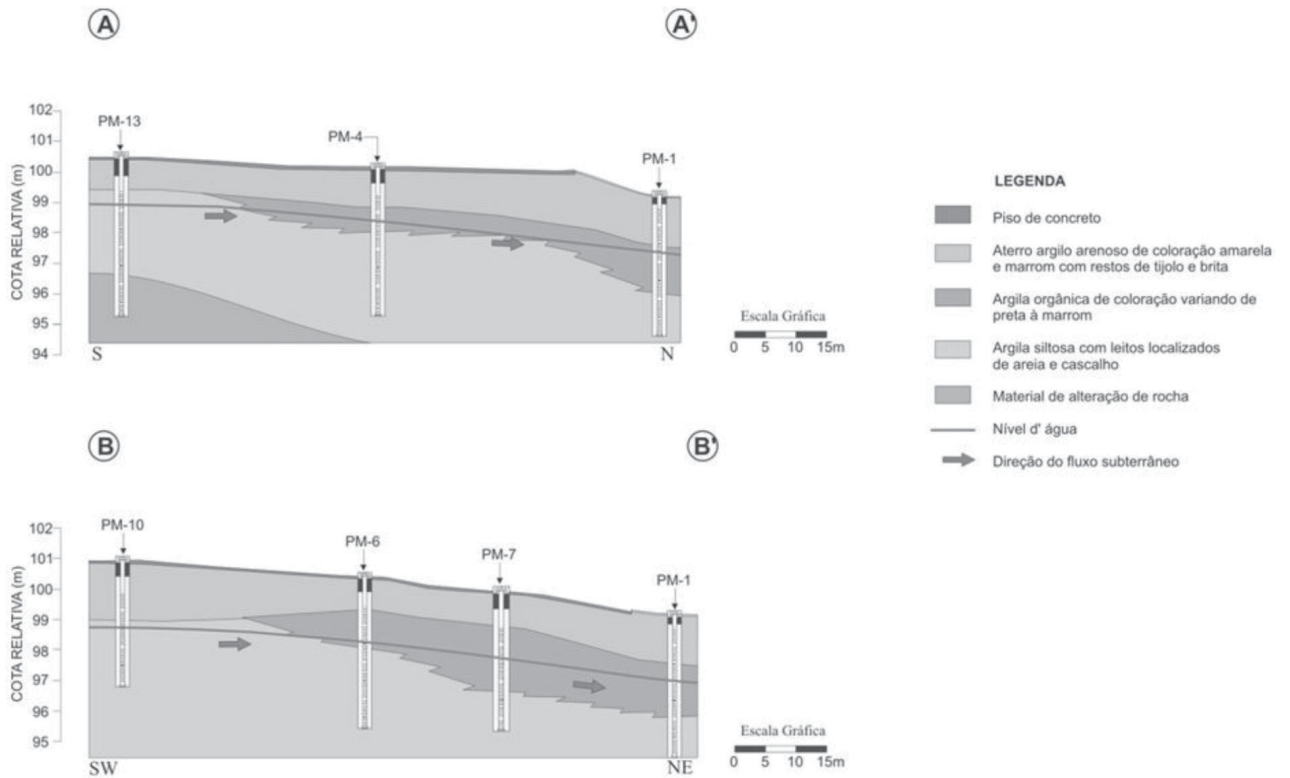
Todos os dados de campo utilizados neste trabalho foram gentilmente cedidos pela empresa GEOKLOCK Consultoria e Engenharia Ambiental, sendo constituídos por perfis litológicos e construtivos de poços de monitoramento e de extração, instalados em área na qual foram realizados serviços de investigação e de remediação ambiental. Também foram fornecidos resultados de nivelamento topográfico relativo, de ensaios de permeabilidade conduzidos *in situ* e de medições de profundidade de níveis d'água.

A área de estudo tem aproximadamente 10.260 m<sup>2</sup> e, de acordo com as descrições das perfurações realizadas, seu substrato seria caracterizado, de forma genérica, por quatro compartimentos diferenciados: em porção mais rasa ocorre aterro argilo-arenoso de cores predominantes amarelo e marrom, com presença de entulho oriundo de construções civis e espessura variando entre 0,7 e 2,1 m. Logo abaixo, são encontradas ocorrências argilosas de cores preto e marrom, com presença de matéria orgânica e espessuras variando de 0,3 a 2,2 m. A sequência prossegue com estrato argilo-siltoso de espessura média 3 m e no qual ocorrem lentes de areia e cascalhos. No extremo sul da área estudada, sotoposto à camada supracitada, foi

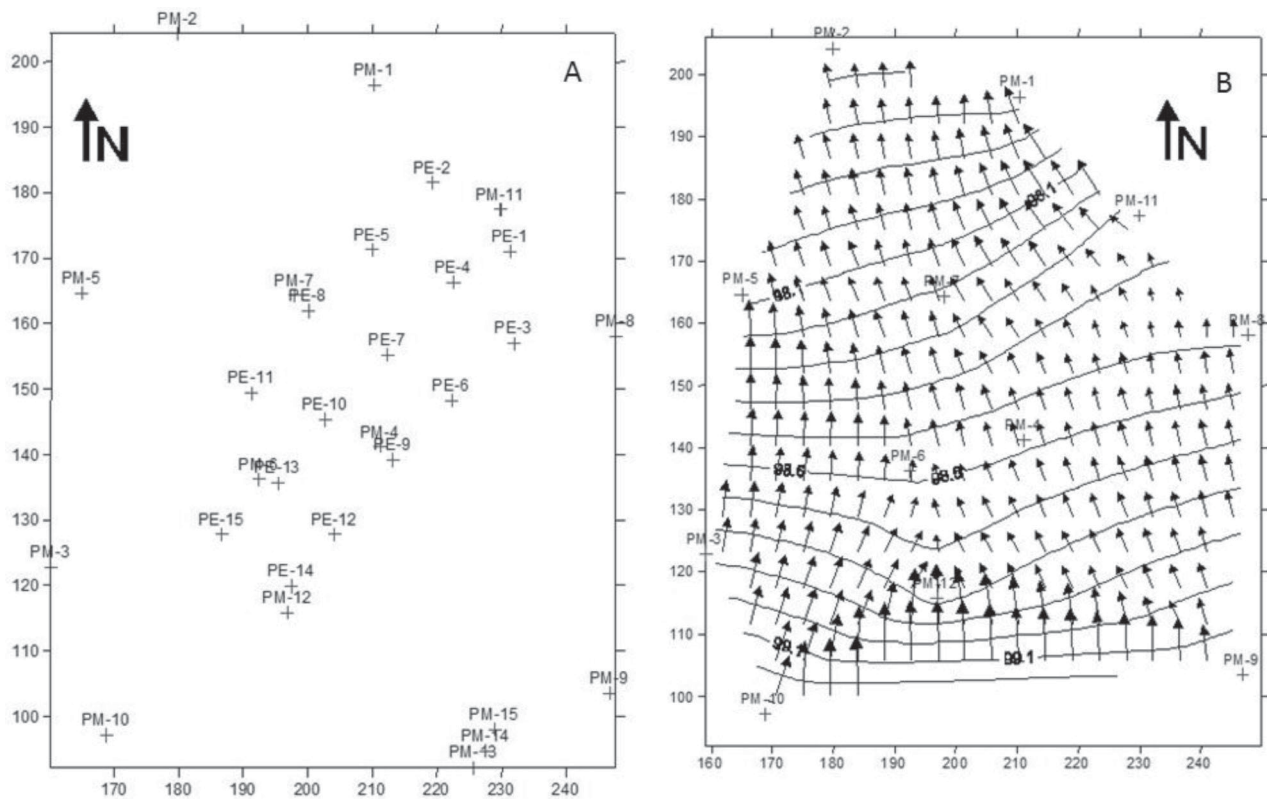
detectado solo de alteração de rocha granítica, o que não ocorreu nas demais sondagens realizadas.

A Figura 1 mostra seções geológicas construídas para a área, a partir das descrições das sondagens realizadas para instalação de poços de monitoramento. A Figura 2A ilustra, em planta, a posição dos referidos poços. Na área foi identificado aquífero livre com lençol freático ocorrendo aproximadamente entre 1,5 m e 2,5 m de profundidade abaixo da superfície do terreno, o que determinou direção predominante de fluxo de sul para norte, com gradiente hidráulico aproximado de 1% (Figura 2B).

Para avaliação de condutividades hidráulicas, foram realizados 8 ensaios de campo em poços de monitoramento. Os resultados mostraram variabilidade de até duas ordens de grandeza, o que pode ser relacionado a heterogeneidades típicas de aterros e de depósitos aluvionares (Cleary, 1989). Em decorrência de questões referentes à confidencialidade de informações, não é possível revelar a localização da área de estudo, por isso, as plantas do local estão descaracterizadas quanto aos limites e coordenadas, de modo que apenas a posição relativa entre os poços instalados foi respeitada.



**FIGURA 1.** Seções Geológicas ilustrando as características litológicas e de fluxo.



**FIGURA 2.** A) Localização dos poços instalados na área. B) Mapa Potenciométrico com as direções de fluxo. Unidades das coordenadas em metros.

## MATERIAIS E MÉTODOS

Em janeiro de 2000, foi procedida a instalação de quinze poços de monitoramento no local, com profundidade média de 4,5 m. Para tanto, foram realizados diferentes tipos de sondagem, de acordo com o diâmetro de instalação adotado. Treze dos poços instalados foram construídos em tubos de PVC Geomecânico DN50, com 0,0508 m de diâmetro. As perfurações foram realizadas com trado manual tipo concha, com cerca de 0,2032 m de diâmetro. Outros dois poços foram construídos em PVC com 0,0254 m de diâmetro, sendo instalados em sondagens realizadas por perfuratriz mecânica modelo GEOPROBE. Esta é uma sonda de tamanho reduzido, que hidraulicamente percute para avançar através do material perfurado.

O desenvolvimento dos poços foi procedida utilizando-se válvulas de pé acopladas a mangueiras de polietileno. Na mesma campanha de campo, foram realizados ensaios de permeabilidade em oito dos poços instalados. Tais ensaios foram do tipo *slug tests* e seguiram método de (Hsorlev, 1951). Posteriormente, com auxílio do software *Aquifer Test* desenvolvido pela empresa *Waterloo Hydrogeologic Inc.*, os dados foram tratados em acordo com a abordagem desenvolvida por Bower & Rice (1976).

Foi realizada campanha de monitoramento de níveis d'água, empregando-se medidor elétrico da marca Solinst, com trena de 30 m. Foi procedido ainda, o nivelamento topográfico relativo dos poços instalados aplicando-se método de correlação geométrica, em que a partir de uma estação fixa, são executadas irradiações para determinação da locação e cota relativas dos pontos de interesse.

Em junho de 2001, com base nas investigações anteriormente conduzidas, foram implantados quinze poços de extração multifásica, integrantes do sistema de remediação proposto para a área. As instalações ocorreram por meio de sondagens com trado manual tipo concha, com perfurações de 0,1524 m de diâmetro, que atingiram profundidade média de 4,5 m.

Com base nos dados de campo disponibilizados, foi construído o modelo conceitual que foi adotado para sequência da pesquisa desenvolvida.

As sondagens realizadas para instalações de poços de monitoramento e extração forneceram as informações mais relevantes para os desdobramentos deste trabalho.

Neste sentido, cabe ressaltar as dificuldades enfrentadas para a padronização e formação de uma única base de dados das descrições litológicas diferenciadas executadas quando foram instalados os dois tipos de poços encontrados.

Observando os perfis litológicos disponibilizados junto aos poços de monitoramento, pode-se notar que

os materiais identificados em campo foram compartimentados em quatro unidades diferenciadas (Figura 1). Por outro lado, quando da instalação dos poços de extração, pode ser percebida uma padronização de unidades diferente daquela adotada para os poços de monitoramento.

Abaixo do aterro, na campanha de instalação de poços de monitoramento, foram individualizados dois estratos argilosos: o mais raso, essencialmente composto por argila orgânica e o imediatamente inferior, que foi genericamente definido como argila siltosa com leitos localizados de areia e cascalho. Nota-se assim, que embora tenha sido feita menção à existência de materiais mais grossos, os mesmos não foram tratados como uma unidade diferenciada, ou seja, na prática, não há como inferir localização, extensão, forma e frequência de ocorrência. Sabe-se que em meio à matriz predominantemente argilosa, materiais mais grossos, como areias e cascalhos, tendem a constituir caminhos preferenciais de passagem para a água subterrânea, pois apresentam condutividades hidráulicas significativamente mais elevadas do que materiais finos (Fetter, 1994). Porém, os dados obtidos não permitem o maior detalhamento além dos quatro litotipos descritos.

Por outro lado, se observadas as descrições realizadas quando da instalação de poços de extração, nota-se que abaixo do aterro, há distinção entre estratos argilosos e arenosos e, diferentemente do que fora identificado em etapa anterior, tais materiais grossos se restringiriam à granulação de areia fina a grossa, não sendo descrita a presença de cascalhos. Tal unidade ocorreu pontualmente, acima ou abaixo do estrato argiloso. Ao avaliar as descrições do material argiloso nota-se diferença de sistematização, pois, se ao instalar os poços de monitoramento o responsável técnico havia individualizado um estrato de argila orgânica e outro de argila siltosa com leitos de granulometria grossa, quando construídos os poços de extração houve a identificação de somente um estrato argiloso composto por camadas argilosas orgânicas e argilo-arenosas intercaladas.

A diferença entre as abordagens é marcante, enquanto a primeira define um extrato de argila orgânica com espessura média de 1,2 m completamente segregado de corpo argilo-arenoso, a segunda descreve camada com porções de argila orgânica e de argila arenosa intercaladas e supostamente com frequência e espaçamento tais, que não permitiram a clara individualização geométrica dessas ocorrências. Cada uma das representações supracitadas pode proporcionar impacto relevante no fluxo de águas subter-



râneas, causando mudanças de velocidade e de direção.

Para definição do modelo geológico conceitual buscou-se integrar as informações existentes por meio de simplificações, com a utilização de descrições mais genéricas existentes em cada uma das etapas discutidas, como base para definição de premissas. Desse modo, evitou-se direcionamentos oriundos de imposições espaciais não fundamentadas, assumindo-se para tanto, a continuidade dos meios estudados (de Marsily et al., 2005).

Sendo assim, optou-se por subdividir a área de estudos em três domínios diferenciados: camada de aterro, sedimentos argilo-arenosos e alteração de rocha.

Vale ressaltar, que o estrato de sedimentos argilo-arenosos engloba as ocorrências argilosas e arenosas citadas nos dados disponibilizados.

Com relação aos ensaios de condutividade hidráulica conduzidos notou-se que os perfis litológicos confeccionados e os construtivos adotados para os poços submetidos aos ensaios apresentaram características que impossibilitam a quantificação estimada da influência dos materiais sobre a condutividade. Não foi possível identificar uma relação linear entre tipo litológico e condutividade hidráulica.

Além dos problemas relacionados à simplificação do modelo litológico adotado nota-se que todos os poços foram instalados com seções filtrantes longas, ou seja, não há isolamento hidráulico entre os diferentes estratos perfurados e, portanto, as condutividades hidráulicas calculadas representam uma combinação das diferentes permeabilidades associadas às hidrofácies seccionadas pelo filtro do poço em avaliação.

Deste modo, para o prosseguimento deste trabalho optou-se pelo emprego da variabilidade dos valores de condutividade baseados em dados de literatura.

O modelo hidrogeológico conceitual adotado engloba duas unidades aquíferas distintas: a superior, constituída por aterro, e a inferior, caracterizada por sedimentos argilo-arenosos, identificadas por unidades A e B, respectivamente.

Vale ressaltar que o solo de alteração de rocha não foi considerado no modelo conceitual final, por ser espacialmente pouco representativo dentro dos limites da investigação conduzida.

Como componente estocástico da pesquisa, realizou a geração de cenários randômicos equiprováveis de distribuições de  $K$ . A análise de diferentes hipóteses, igualmente possíveis, pode fornecer uma estimativa da incerteza inerente aos resultados obtidos. Essa é a lógica da abordagem conhecida como probabilística (Gómez, 2006).

Inicialmente foram determinados os valores de  $K$  possivelmente encontrados nas unidades A e B. Para o aterro A, composto por argila-silto arenosa misturada

ao entulho de construções civis, foi empregado intervalo de  $K$  entre  $10E^{-01}$  e  $10E^{-07}$  cm/s, o que cobriria valores esperados de cascalho a argila (Freeze & Cherry, 1979). A escolha desta ampla faixa se justifica pela imprevisibilidade presente em camada de aterro, na qual podem coexistir porções de fino muito compactadas, praticamente impermeáveis, e frações compostas por entulho repletas de vazios e, consequentemente, com alta condutividade associada.

Para os sedimentos areno-argilosos encontrados na unidade B, a faixa de  $K$  adotada se estendeu de  $10E^{-03}$  a  $10E^{-06}$  cm/s, com valores representativos de argilas à areias grossas (Freeze & Cherry, 1979).

Utilizando rotinas computacionais em linguagem Visual Basic, foram geradas distribuições randômicas de  $K$  para A e B, ao longo dos poços. Para este trabalho foi realizado um número total de 60 cenários. A regularização vertical dos dados foi aplicada ao empregar uma rotina capaz de proceder à classificação como sendo do tipo A ou B, em intervalos de 0,1 m perfurados.

A rotina computacional para geração das distribuições randômicas de  $K$  utiliza a função RANDOMIZE do Visual Basic. O algoritmo RANDOMIZE foi desenvolvido por Wichman & Hill (1982, 1987) e aprovado em diferentes testes estatísticos que aferiram sua aleatoriedade.

Os poços com as distribuições de  $K$  foram inseridos no programa geoestatístico S-GEMS (Stanford Geostatistical Earth Modeling Software), desenvolvido pela Universidade de Stanford (Remy, 2004).

A determinação da distribuição dos valores de  $K$  foi realizada por meio da krigagem ordinária. Genericamente, a krigagem é um conjunto de técnicas de regressão linear empregadas para minimizar a variância definida a partir de um modelo de covariância preexistente (Deutsch & Journel, 1992). Por sua vez, a krigagem ordinária é a variante mais comumente aplicada dentre aquelas relacionadas ao método, objetivando sempre a diminuição da variância dos erros associados às estimativas realizadas, por meio de cálculos de ponderadores para uma determinada configuração espacial de dados (Yamamoto, 2001). Para a operação da krigagem ordinária é necessária a determinação das características do variograma adotado, assim como a definição do elipsóide de pesquisa que delimita e direciona a abrangência das estimações procedidas (Remy, 2004).

Avaliação preliminar dos dados de entrada por meio de histogramas e de dados estatísticos básicos revelaram distribuições com forte assimetria positiva em todos os 60 casos abordados. Tal comportamento é característico de distribuições do tipo lognormal que são frequentemente mencionadas como adequa-

das para representação de permeabilidades (de Marsily et al., 2005).

Pela análise dos variogramas, as amostras exibiram baixo grau de correlação espacial em todas as direções e, como esperado, apresentaram forte grau de linearidade quando avaliadas em mergulhos verticais, indicando a existência de tendência ou deriva para os dados assim dispostos (Isaaks & Srivastava, 1989).

A maior continuidade na direção vertical é reflexo direto do processo de geração destas informações, que supôs valores randomicamente distribuídos em corpo contínuo, assumindo lógica homogêneo-heterogêneo (Gégo et al., 2002).

Para cada um dos 60 conjuntos de dados utilizados como entrada, foram realizadas duas krigagens ordinárias: uma na região de maior detalhe e outra buscando prover resultados para regiões com baixa densidade de pontos de controle.

Uma vez obtidas as saídas geradas pelas krigagens ordinárias, o passo seguinte é referente à forma final dos cenários de distribuição de  $K$ . Para isso, foi necessário integrar as informações provenientes das krigagens de detalhe e as de maior vizinhança, realizadas para cada um dos 60 conjuntos de dados tratados. Este procedimento garantiu que toda a malha modelada tivesse resultados atribuídos, assim como assegurou que situações menos suavizadas fossem observadas nos locais onde maior detalhamento foi possível.

Para realização da modelagem de fluxo, foi adotado o programa MODFLOW. Este simulador desenvolvido pelo Serviço Geológico Norte Americano (USGS), aplica tridimensionalmente a equação do fluxo de águas subterrâneas, por meio do método de diferenças finitas (Fetter, 1994).

Também foi empregado o pacote de pós-processamento chamado MODPATH (Versão 4.3), que constitui-se em um traçador de partículas para modelo de fluxo realizado pelo MODFLOW (Harbaugh & McDonald, 1996).

O Visual MODFLOW 3.1. armazena os dados sobre propriedades hidráulicas em arquivo tipo ASCII, de extensão “.VMP”. Observando-se esse arquivo, nota-se que cada valor de determinada propriedade é identificado por um índice individual e, que o conjunto de índices é distribuído em matrizes que representam as camadas do modelo.

Por ser necessário estabelecer o índice para identificar os valores de  $K$  gerados pela geoestatística e desse modo facilitar o manejo dos dados, propõe-se a subdivisão destes valores em 10.000 intervalos. Este procedimento é baseado na determinação da diferença entre máximo e mínimo dentre todos os valores obtidos, seguida da divisão pelo número de classes desejada. Entretanto, ao analisar o arquivo “.VMP”, percebe-se que para cada modelo, a indexação precisa ser retomada do início, ou seja, o primeiro índice terá sempre de ser 1, o segundo 2 e assim por diante, em ordem crescente de  $K$ . Nesta pesquisa, foi desenvolvido algoritmo para conversão dos dados de saída oriundos do S-GEMS no formato de entrada, gerando um arquivo .VMP.

Todos os cenários simulados definem malha de 45 colunas, por 57 linhas e 10 camadas, totalizando 25.650 células para cálculos, todas consideradas inicialmente ativas. O espaçamento nos eixos X e Y é de 2,0 m e regular, de modo que não há refinamento de porção alguma da malha adotada. Em Z, as camadas estão separadas por 0,5 m. Como condições de contorno, foram adotadas cargas constantes nos extremos norte e sul da área e definidas condições de não fluxo nas bordas leste e oeste. Para todas as camadas, em posição de montante, foram adicionadas linhas com 10 partículas.

Os modelos de fluxo foram realizados para condições estacionárias (*steady state*), calculadas através do solucionador de matrizes WHS (Solver for Visual Modflow). A opção para remolhagem de células não foi ativa e todas as camadas foram consideradas do tipo 1 (Não Confinadas), ou seja, com transmissividade variando de forma diretamente proporcional às mudanças de espessura saturada. Para realização das simulações de trajetórias de partículas, como opção de descarga, foi selecionado padrão no qual o deslocamento das partículas seria interrompido sempre que fossem atingidas células nas quais houvesse água sendo removida do domínio modelado.

Inicialmente foi realizada calibração de fluxo para um dos cenários gerados. As estatísticas confirmam a calibração satisfatória do fluxo para o modelo abordado, sobretudo ao serem observados os baixos valores de erro quadrático médio (RMS) e o alto grau do coeficiente de correlação (Figura 3).

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Tendo sido conduzidas 60 simulações de fluxo e trajetória de partículas, buscou-se demonstrar a influência das diferentes distribuições de  $K$ , sobre as respostas verificadas para cada realização. Para tanto, foram computados os parâmetros tempo mínimo e

máximo de trajetória de partículas e ainda, para controle do desempenho do simulador, os parâmetros de erro quadrático médio (RMS) e discrepância do balanço hídrico. Os tempos mínimo e máximo referem-se ao menor e maior tempo de viagem de partículas no

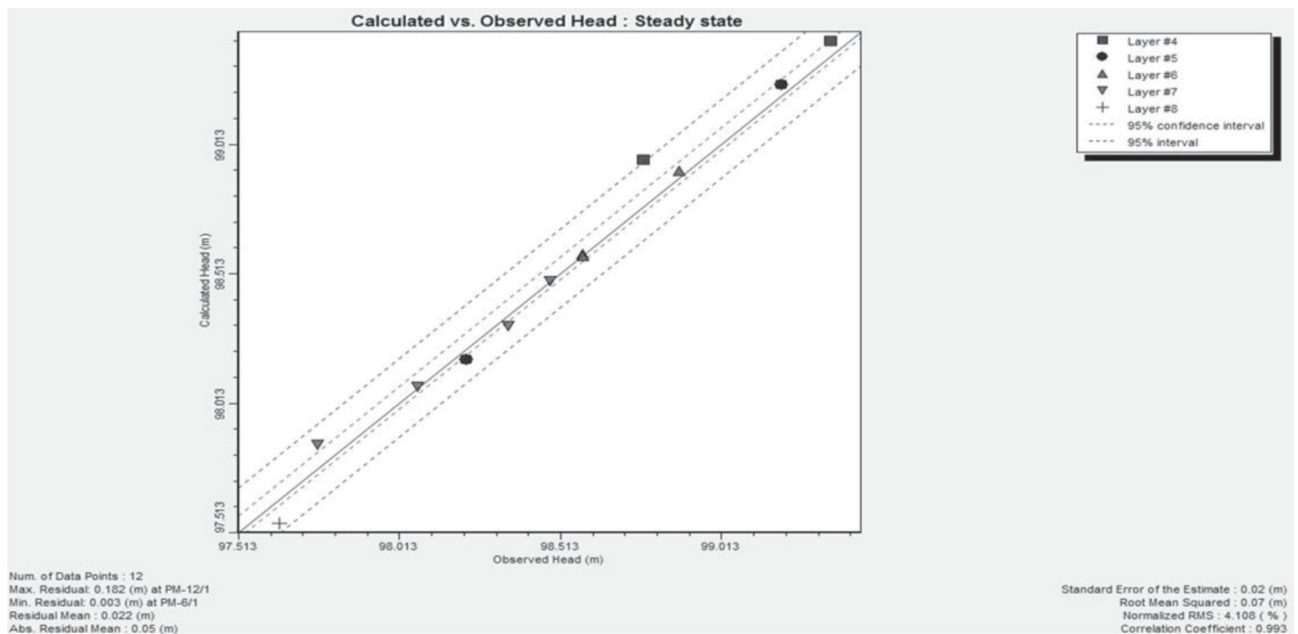


FIGURA 3. Gráfico de calibração do modelo de fluxo.

domínio modelado, o RMS ao valor do erro quadrático médio normalizado para calibração entre cargas observadas e calculadas e a discrepância do balanço hídrico representa a diferença calculada para todo domínio modelado, da entrada e saída de água do sistema.

Analisando os dados de RMS obtidos, observa-se que a metade dos resultados analisados permanece com valores de RMS inferiores a 10% e que cerca de 3/4 ficam abaixo de 20%. Contudo, 1/4 das simulações apresentaram RMS superior a 30%, o que demonstra que algumas realizações obtiveram respostas nas quais não houve boa correlação entre as cargas hidráulicas calculadas e aquelas medidas em campo. Nesses cenários houve, próximo ao limite sul do domínio modelado, elevação da carga hidráulica, que origina a inversão da direção do fluxo esperado, conforme ilustra a Figura 4 (A e B). As discrepâncias para o balanço hídrico atingido em tais simulações são da ordem de -44%, o que denota que o modelo não solucionou corretamente o fluxo para os cenários de condutividades. Para efeito de comparação, nas demais realizações a discrepância de balanço hídrico esteve sempre abaixo de -0,1%.

A maioria (65%) dos resultados obtidos para tempo mínimo de trajetórias de partículas nos 60 cenários avaliados situou-se entre 500 e 900 dias, com 91% das respostas abaixo de 918 dias. A Figura 5 mostra que

após aproximadamente 10 realizações, a média e a mediana dos resultados para tempo mínimo se estabilizam, o que acontece com a amplitude, que é a diferença entre o resultado mínimo e o máximo, somente após 30 modelos. Para o desvio padrão, a estabilização ocorre após aproximadamente 30 simulações.

De acordo com a abordagem proposta por GÉGO (2002), para simulações nas quais existam dados concretos para calibração, considerou-se que o número de simulações seria suficiente quando a partir da trigésima simulação, o acréscimo de grupos de 5 novas realizações não causasse impactos substanciais à média, mediana, desvio padrão e amplitude para o parâmetro estudado. Deste modo, segundo o método proposto, o número de cenários modelados realizados neste estudo é representativo.

Quando observados os resultados disponíveis para tempo máximo de trajetória de partículas, temos valores variando entre 2.859 e 15.575 dias, sendo que 55% dos valores se situaram em intervalo de 300 a 6.500 dias, com 70% dos resultados verificados abaixo de 8.000 dias.

Em relação ao tempo máximo, a Figura 6 mostra que após aproximadamente 10 realizações, a média, a mediana, a amplitude e o desvio padrão dos resultados se estabilizam, portanto, adotando-se a mesma lógica que foi utilizada para tempos mínimos, fica demonstrada a representatividade do número de simulações.

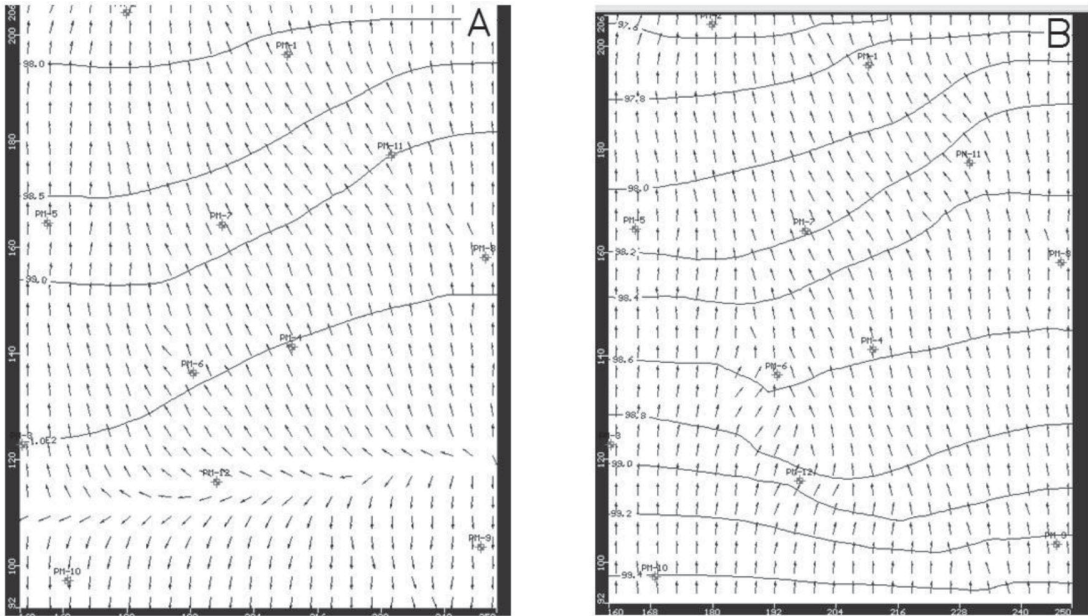


FIGURA 4. Saídas do simulador de fluxo. A) padrão não esperado e B) padrão esperado.

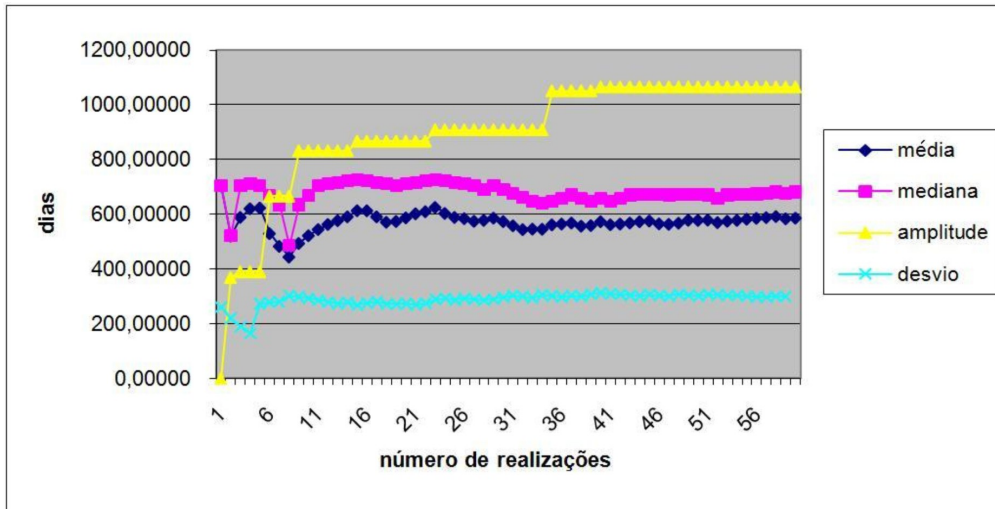


FIGURA 5. Controle de estabilidade dos cenários – tempo mínimo.

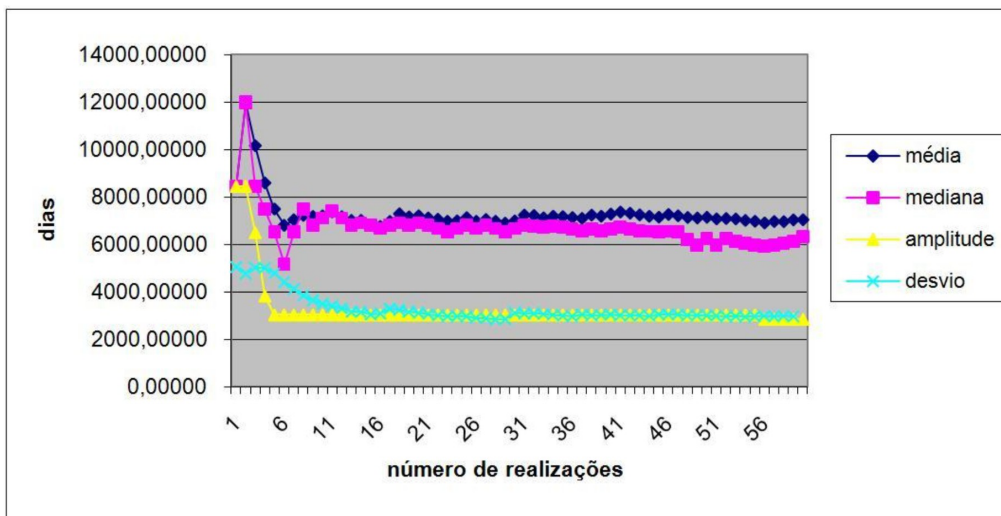


FIGURA 6. Controle de estabilidade dos cenários – tempo máximo.



Para o melhor dimensionamento das respostas geradas por simulações matemáticas em relação aos dados diretos levantados em campo, foi realizada a filtragem com base nos valores de RMS.

Ao observar os 43 modelos com RMS, iguais ou inferiores a 20%, nota-se que os valores de tempo mínimo de trajetória de partícula passam a variar entre 495 e 1.111 dias, com 25% destas ocorrências situando-se entre 700 e 800 dias. Quando esses valores são comparados com aqueles que englobavam todas as 60 simulações, nota-se a diminuição de 40% na amplitude, de 65% no desvio padrão, a maior proximidade da média e mediana e a maior igualdade das distâncias entre os 1º e 3º quartis e a mediana. Essa comparação demonstra que o espalhamento dos dados é menos acentuado quando empregado o filtro sugerido e que sua distribuição fica mais próxima de uma curva normal, especialmente devido à exclusão de valores baixos destoantes e que estavam relacionados aos modelos com alto RMS.

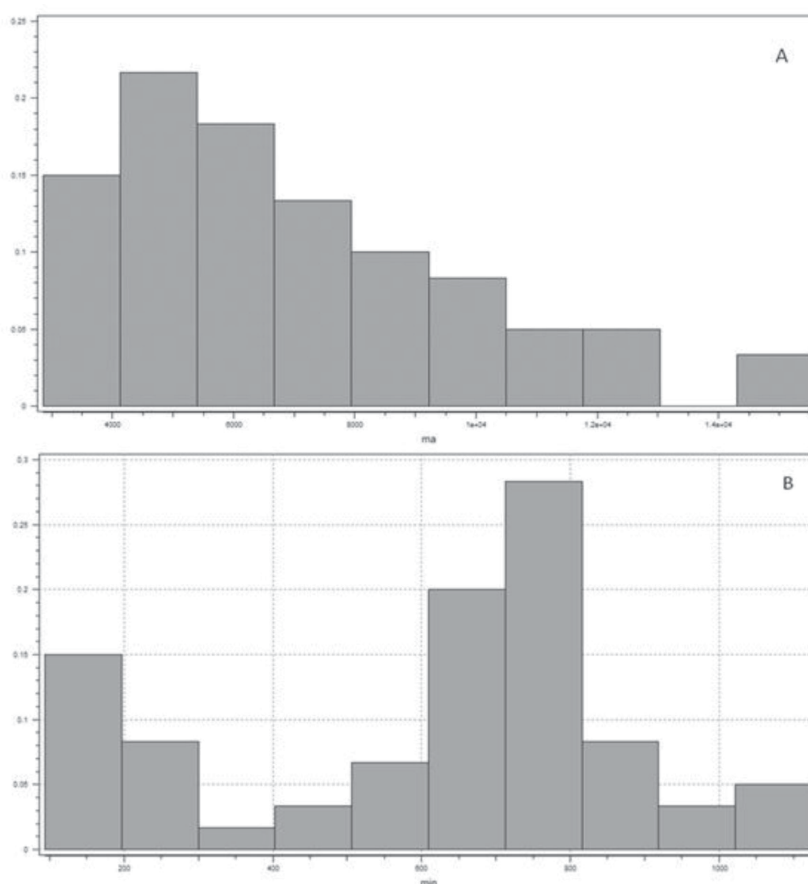
Empregando-se a mesma filtragem são analisados os dados para tempo máximo de trajetória de partículas em 43 modelos. O intervalo de resultados se situa entre 2.859 e 10.443 dias, com 60% dos dados entre 4.375 e 7.410 dias. Quando estes valores são

comparados com aqueles que englobavam todas as 60 simulações, a situação é análoga ao do tempo mínimo, ou seja, nota-se a diminuição de 40% na amplitude, também de 40% no desvio padrão, maior proximidade de média e mediana e distâncias dos 1º e 3º quartis em relação à mediana mais equivalentes. Essa comparação demonstra também que o espalhamento dos dados de tempo máximo é menos acentuado quando empregado o filtro sugerido e que a distribuição dos mesmos fica mais próxima de ser normal.

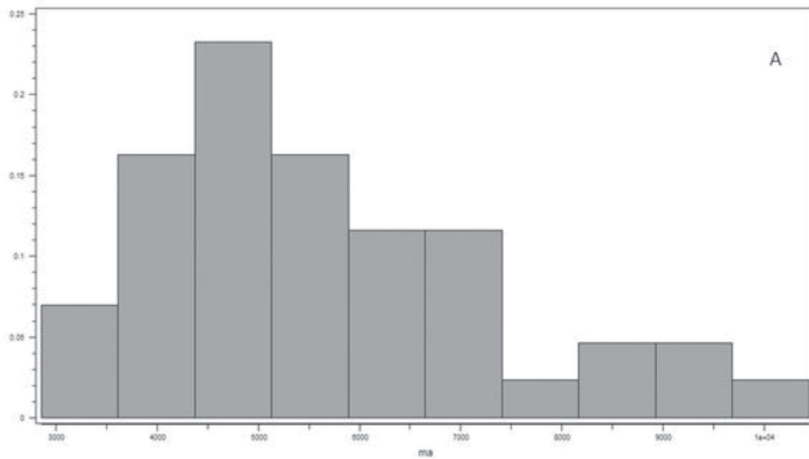
Para a realização de novo filtro na base de dados de 43 modelos foi utilizado valor de RMS igual ou inferior a 10%.

Os resultados obtidos são semelhantes àqueles que foram alcançados com o filtro anterior. Sendo assim, considera-se que os dados oriundos dos 43 modelos com RMS igual ou inferior a 20% seja adequadamente representativo do evento estudado. As Figuras 7 a 9 trazem os histogramas obtidos para os cenários descritos acima e a Tabela 1 o sumário das estatísticas verificadas em cada um deles.

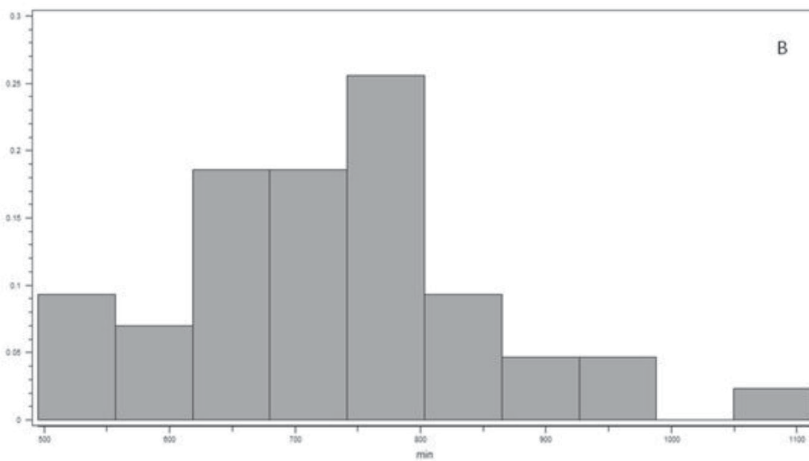
Os resultados demonstram claramente os efeitos causados por diferentes distribuições espaciais de  $K$  equiprováveis, sobre as respostas fornecidas pelo simulador matemático.



**FIGURA 7.** Histogramas obtidos considerando-se todos cenários. **A)** Tempo máximo, **B)** Tempo mínimo.



**FIGURA 8.**  
Histogramas obtidos  
para cenários com filtro de RMS 20%.  
A) Tempo máximo,  
B) Tempo mínimo.



**FIGURA 9.**  
Histogramas obtidos  
para cenários com filtro RMS 10%.  
A) Tempo Máximo,  
B) Tempo Mínimo.

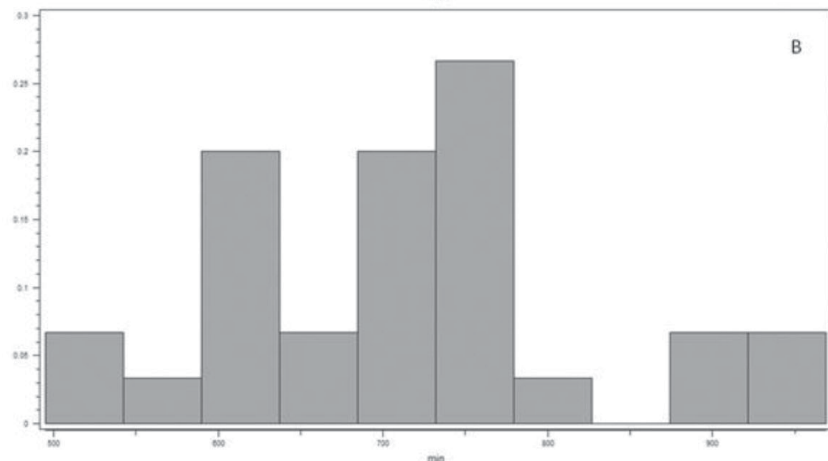
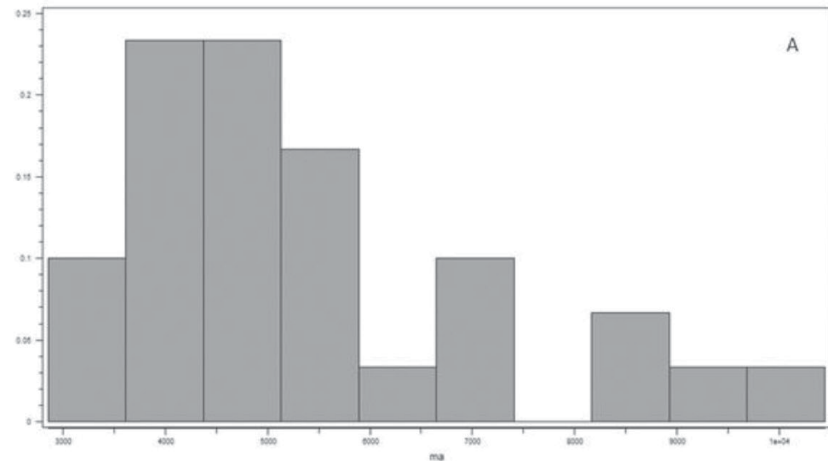


TABELA 1. Sumário dos resultados obtidos.

	Estatística	Tempo Mínimo (dias)	Tempo Máximo (dias)	RMS (%)	Discrepância (* -1) (%)
60 cenários	média	602.31	7028.74	18.26	10.14
	mediana	681.14	6318.20	10.02	0.07
	1º quartil	455.46	4897.49	5.93	0.03
	3º quartil	772.58	8582.45	22.72	25.66
	desvio padrão	283.52	2965.38	17.68	17.11
	máximo	1125.30	15575.20	59.96	46.32
	mínimo	93.54	2859.17	4.11	0.00
43 cenários (RMS < 20%)	média	729.51	5705.47	8.50	0.07
	mediana	726.61	5311.80	7.13	0.05
	1º quartil	644.59	4552.16	5.68	0.03
	3º quartil	776.80	6689.82	10.54	0.07
	desvio padrão	123.31	1813.98	3.79	0.13
	máximo	1111.41	10443.00	19.37	0.90
	mínimo	495.03	2859.17	4.11	0.00
30 cenários (RMS < 10%)	média	714.24	5378.03	6.37	0.07
	mediana	719.30	4855.57	5.91	0.04
	1º quartil	634.52	3899.40	5.00	0.03
	3º quartil	770.66	5900.83	7.20	0.07
	desvio padrão	116.18	1911.92	1.65	0.16
	máximo	968.97	10443.00	10.00	0.90
	mínimo	495.03	2859.17	4.11	0.00

## CONCLUSÃO

Por meio deste trabalho, buscou-se descrever um método capaz de abordar uma questão bastante cotidiana para os modeladores de fluxo de águas subterrâneas: avaliar as incertezas inerentes às simulações conduzidas, tendo em vista as premissas assumidas para definição e representação do modelo conceitual.

Para tanto, foram realizadas simulações matemáticas de fluxo englobando 60 cenários equiprováveis de distribuições de condutividade hidráulica ( $K$ ). Se por um lado, os modelos construídos foram bastante simplificados, com domínio reduzido, fluxo estacionário e condições de contorno definidas por cargas constantes; por outro, foram complexos, pois valores de  $K$  diferentes foram adotados célula a célula, garantindo-se a representação da variabilidade da propriedade estudada.

A diferença para os parâmetros medidos a cada realização reflete a impossibilidade de se representar por completo a complexa distribuição de propriedades hidráulicas características de um aquífero heterogêneo, o que se acentua em decorrência das limitações dos dados de campo disponíveis.

Ressalta-se então, a aplicabilidade do método proposto para a avaliação mais ampla das simulações

do fluxo de águas subterrâneas, proporcionando ao modelador os resultados possíveis para o modelo. Com isso, diminuir o efeito de atenuações derivadas de abordagens determinísticas.

Contudo, cabe destacar as limitações da abordagem aqui proposta. A principal delas, refere-se ao fato de que as distribuições espaciais de  $K$  adotadas foram completamente randômicas dentro de cada estrato definido, o que previamente sabe-se não se tratar da situação real encontrada em campo. Provavelmente, para a camada de aterro considerada, tal premissa possa ser considerada, entretanto, para o estrato de sedimentos aluvionares sotoposto, o caráter aleatório da distribuição de  $K$  possa ser descartado uma vez que descrições de sondagens indicaram a existência de alternâncias de camadas argilosas e arenosas.

Sendo assim, processos de simulação geostatísticas para definição de  *fácies*  geológicas (Gégo et al., 2002), não puderam ser realizados neste trabalho em decorrência da limitação de dados de campo.

Outro fator limitante remete à adoção da distribuição de valores de  $K$  oriunda da bibliografia e não daqueles obtidos por meio de ensaios de permeabilidade conduzidos em campo.

Para aplicações práticas em casos de modelagem complexas, preliminarmente deveria ser procedida uma análise de sensibilidade para determinação das variáveis mais relevantes para que então, fossem procedidas análises de incerteza considerando cenários equiprováveis para cada um destes elementos (Gelhar, 1993).

Foram notados problemas do simulador no cálculo de alguns dos cenários equiprováveis propostos, o que ficou evidente por discrepâncias verificadas no balanço hídrico e por valores de RMS elevados. Tal fato pode indicar que para modelos realizados neste mesmo simulador e em domínios maiores, com adoção de diferentes condições de contorno, o método proposto possa ter aplicação mais difícil, provavelmente carecendo de adaptações para redução no número de categorias de K propostas.

De qualquer modo, a despeito das limitações acima mencionadas, ressalta-se que o método estudado nesta pesquisa apresenta aplicações diretas e efetivas para a modelagem matemática de fluxo em zona saturada, constituindo ferramenta para avaliações mais consistentes quanto à variabilidade de respostas provenientes de simuladores.

O estudo conduzido demonstrou que para suprir adequadamente a definição de um modelo conceitual que será base para simulações matemáticas, a obtenção de dados em campo deve ser criteriosa e direcionada, buscando prioritariamente, identificar e delimitar ocorrências de materiais que tenham permeabilidades contrastantes. Entretanto, existem limites práticos relevantes que podem comprometer este processo, o que faz com que as análises das incertezas embutidas nas simulações realizadas se torne ainda mais essencial.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à empresa GEOKLOCK Engenharia e Consultoria Ambiental por gentilmente fornecer os dados de campo e a licença do programa VISUAL MODFLOW 3.1.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. BOWER, H. & RICE, R.C. A Slug Test for Determining Hydraulic Conductivity of Unconfined Aquifers with Completely or Partially Penetrating Wells. **Water Resources Research**, n. 12, p. 423-428, 1976.
2. CLEARY, R. Águas Subterrâneas. In: RAMOS, F. (Coord.), **Engenharia Hidrológica - Coleção ABRH de Recursos Hídricos**, Editora da UFRJ, v. 2, 404 p., 1989.
3. DEUTSCH, C.V. & JOURNAL, A.G. **Geostatistical Software Library and User's Guide**. Oxford University Press, 340 p., 1992.
4. DREW, D. **Man-Environment Processes**. Londres: George Allen & Unwin, 205 p., 1983.
5. FETTER, C.W. **Applied Hydrogeology**. Nova Jersey: Prentice-Hall, 4th ed., 598p., 1994.
6. FREEZE, R.A. & CHERRY, J.A. **Groundwater**. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 604 p., 1979.
7. GÉGO, E.L.; JOHNSON, G.S.; HANKINS, M.R.; WYLIE, A.H.; WELHAN, J.A. Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport in the Snake River Plain Aquifer: A Stochastic Approach. **Geological Society of America Special Paper**, n. 353, p. 249-261, 2002.
8. GELHAR, L.W. **Stochastic Subsurface Hydrology**. Prentice-Hall, Old Tappan, NJ, 390 p., 1993.
9. GÓMEZ, J.J. Complexity. **Ground Water**, v. 44, n. 6, p. 782-785, 2006.
10. GOROKHOVSKI, V. & NUTE, D. Validation of Hydrogeological Models is Impossible: What's Next?. **Calibration and Reliability in Groundwater Modelling**, IAHS Publications, 606 p., 1996.
11. HARBAUGH, A.W. & McDONALD, M.G. User's documentation for MODFLOW-96, an update to the U.S. Geological Survey modular finite-difference ground-water flow model. **Geological Survey**, Open-File Report 96-485. U.S., 56 p., 1996.
12. HILL, M.C. The Practical Use of Simplicity in Developing Ground Water Models. **Ground Water**, v. 44, n. 6, p. 775-781, 2006.
13. HVORSLEV, M.J. Time Lag and Soil Permeability in Groundwater Observations. U.S. Army Corps of Engineers Waterway Experimentation Station, **Bulletin 36**, 50 p., 1951.
14. ISAAKS, E.H. & SRIVASTAVA, R.M. **Applied Geostatistics**. Oxford University Press, 561 p., 1989.
15. LU, G.; ZHENG, C.; WOLFSBERG, A. Effect of Uncertain Hydraulic Conductivity on the Simulated Fate and Transport of BTEX Compounds at Fate Site. **Journal of Environmental Engineering**, v. may, p. 767-776, 2005.
16. De MARSILY, G.H.; DELAY, F.; GONÇALVES, J.; RENARD, P.H.; TELES, V.; VIOLETTE, S. Dealing with spatial heterogeneity. **Hydrogeology Journal**, v. 13, n. 1, p. 161-183, 2005.
17. MURRAY, A.B. Contrasting the Goals, Strategies, and Predictions Associated with Simplified Numerical Models and Detailed Simulation. **Geomorphology**, AGU Geophysical Monograph 135, ed. R. M. Iverson & P. Wilcock, p. 151-165, 2003.
18. REMY, N. Geostatistical Earth Modeling Software: User's Manual, 2004.



19. SCHEIBE, T.D. & YABUSAKI, S. Scaling on Flow and Transport Behavior in Heterogeneous Groundwater Systems. **Advances in Water Resources**, v. 22, n. 3, p. 223-239, 1998.
20. SUTHERSAN, S.S. & PAYNE, F.C. **Situ Remediation Engineering**. CRC Press; Boca Raton, 511 p., 2005.
21. WICHMAN, B.A. & HILL, I.D. Algorithm AS 183: An Efficient and Portable Pseudo-Random Number Generator. **Applied Statistics**, n. 31, p. 188-190, 1982.
22. WICHMAN, B.A. & HILL, I.D. **Building a Random-Number Generator**. BYTE, 127 p., 1987.
23. YAMAMOTO, J.K. **Avaliação e Classificação de Reservas Minerais**. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 226 p., 2001.
24. ZHENG, C.; POETER, E.; HILL, M.; DOHERTY, J. Understand Trough Modeling. **Ground Water**, v. 44, n. 6, p. 769-770, 2006.

*Manuscrito Recebido em: 31 de maio de 2010*

*Revisado e Aceito em: 25 de abril de 2011*