

III SIMPÓSIO LUSO-BRASILEIRO DE ENGENHARIA SANITÁRIA E AMBIENTAL
(SILUBESA)

TEMA 5

QUALIDADE DA ÁGUA

MODELAÇÃO MATEMÁTICA DA QUALIDADE DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS.
A EXPERIÊNCIA DO LNEC

J. P. LOBO FERREIRA

(Doktor-Ingenieur (T.U.Berlin), Eng. Civil (IST), Investigador Auxiliar do Laboratório
Nacional de Engenharia Civil, Lisboa, Portugal)

RESUMO

Apresentam-se os vários tipos de modelos matemáticos empregados em hidrogeologia, dando-se especial ênfase à modelação do escoamento subterrâneo e da qualidade das águas subterrâneas. Apresenta-se em seguida a experiência do Laboratório Nacional de Engenharia Civil (LNEC) neste domínio.

1 - Breve introdução à modelação matemática das águas subterrâneas.

1.1 - Classificação dos modelos empregados em hidrogeologia

Os modelos matemáticos de águas subterrâneas podem ser divididos em quatro grandes grupos: os de *previsão*, os de *gestão*, os de *identificação de parâmetros* e os de *manipulação de dados*. O primeiro grupo é constituído pelos modelos que simulam o comportamento do sistema hídrico subterrâneo quando sujeito a solicitações exteriores. O segundo grupo engloba os modelos de *previsão hidrogeológica*, que contêm explicitamente processos de *gestão*. O terceiro grupo é composto por modelos que determinam os parâmetros de entrada necessários aos dois grupos anteriores. Finalmente o quarto grupo é constituído por processos de *manipulação dos dados* necessários aos modelos anteriormente referidos ou ao tratamento dos resultados desses modelos.

Os modelos de *previsão* podem ser divididos em dois sub-grupos: os de *escoamento* e os de *transporte de massa* (qualidade da água).

Os modelos de *escoamento* utilizam informações relacionadas com os parâmetros do aquífero, com as condições de fronteira e com as influências exteriores. Resolvem as equações matemáticas necessárias à determinação dos aspectos quantitativos do movimento das águas subterrâneas. Como exemplo citam-se os casos de rebaixamentos piezométricos motivados por captações.

Os modelos de *transporte de massa*, fundamentais para o estudo da poluição, tratam dos problemas da qualidade das águas subterrâneas. São usados para prever a concentração de poluentes em aquíferos. Nos poluentes incluem-se entre outros os radioactivos, os efluentes industriais e biológicos, os lixiviados de depósitos de resíduos sólidos e os provenientes de áreas agrícolas. Podem simular ainda problemas de intrusão de água marinha em regiões costeiras.

Os modelos de *gestão* são desenvolvidos para permitir tomadas de decisão de acordo com os objectivos e as restrições de um projecto em estudo. Os objectivos podem ser, por exemplo, a maximização de benefícios económicos ou o assegurar de parâmetros de qualidade da água. Os modelos de *gestão* englobam técnicas de *simulação do escoamento* e do *transporte* e técnicas de *optimização*. Em oposição aos modelos simples de *simulação*, os de *simulação-gestão* incluem também os aspectos económicos, tecnológicos, políticos e institucionais. Uma das maiores dificuldades de aplicação desses modelos reside na quantificação de alguns dos factores indicados.

Finalmente os modelos referentes à *identificação de parâmetros* e à *manipulação de dados* permitem calcular respectivamente alguns parâmetros de aquíferos, usando dados de ensaios de bombagem, e ajuizar as necessidades e volumes de dados a recolher para a fase de *simulação do escoamento* e do *transporte de massa*.

1.2 - Modelação do escoamento subterrâneo

A modelação matemática de águas subterrâneas começou por se dedicar exclusivamente aos seus aspectos quantitativos, nomeadamente para a determinação de alturas piezométricas e velocidades de escoamentos subterrâneos, dados de entrada para os problemas do transporte de massa. Existem actualmente numerosas publicações sobre este assunto.

A equação diferencial que descreve o escoamento subterrâneo, a três dimensões e em regime variável, é a seguinte:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + R = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (1)$$

onde

- x_i - coordenadas cartesianas
- h - altura piezométrica
- K_{ij} - componente do tensor da condutividade hidráulica
- R - volume hídrico extraído ou injectado no aquífero, por unidade de volume e de tempo
- S_s - coeficiente de armazenamento específico
- t - tempo

As dimensões da espessura dos aquíferos, normalmente diminutas em relação às outras duas dimensões, permitem, em geral, a integração da equação (1) na dimensão vertical, utilizando as aproximações de Dupuit - Forchheimer. Resulta a seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(T_{ij} \frac{\partial \bar{h}}{\partial x_j} \right) + Q = S \frac{\partial \bar{h}}{\partial t} \quad i = 1, 2 \quad (2)$$

onde

- \bar{h} - altura piezométrica média
- T_{ij} - componente do tensor transmissividade;
 $T_{ij} = K_{ij} \times b$ onde b é a espessura saturada do aquífero
- Q - volume hídrico extraído ou injectado no aquífero por unidade de área e de tempo
- S - coeficiente de armazenamento; $S = S_s \times b$

A resolução destas equações diferenciais pode ser efectuada por vários métodos numéricos. Os mais conhecidos são o das diferenças finitas (MDF) e o dos elementos finitos (MEF).

A aplicação do MDF e MEF a problemas de escoamentos subterrâneos destina-se à simulação de aquíferos porosos, livres, confinados e mistos. Admitem praticamente todas as condições de fronteiras reais, incluindo a evapotranspiração de plantas e solo e a recarga pluvial de aquíferos. Há modelos tridimensionais que admitem recargas provenientes de aquíferos adjacentes, bombagem e recarga por poços, entradas e saídas hídricas laterais, infiltração induzida e várias outras condições de fronteira. Os modelos admitem os regimes de escoamento permanente e variável.

Mais recentemente foi desenvolvido um novo método para a resolução de equações diferenciais, que foi denominado método integral dos elementos de fronteira (MIF) ou mais simplesmente método dos elementos de fronteira. O MIF é caracterizado por aplicar equações integrais que descrevem nas fronteiras do domínio exactamente o que ocorre no seu interior. Em vez de se discretizar o domínio divide-se a fronteira em elementos, os elementos de fronteira.

1.3 - Modelação da qualidade das águas subterrâneas

A modelação da qualidade das águas subterrâneas encontra-se numa fase de desenvolvimento menos avançada que a dos modelos de escoamento. Vários estudos aprofundam no entanto este assunto de modo a tornar possível a sua aplicação a casos reais. As situações estudadas incluem

entre outras, problemas de intrusão marinha em aquíferos costeiros, problemas do transporte de resíduos químicos e biológicos depositados no sub-solo ou à superfície, provenientes da indústria, de aglomerados urbanos e ainda de resíduos agrícolas (fertilizantes).

A equação diferencial (bidimensional) da convecção-dispersão que traduz o transporte de massa, para uma dada espécie química, pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (C V_i) - \frac{C' w}{nb} + \sum_{k=1}^s R_k \quad i, j = 1, 2 \quad (3)$$

onde

C	- concentração da espécie dissolvida
D_{ij}	- tensor dispersão
b	- espessura saturada do aquífero
$C' w/nb$	- função de concentração do poluente numa fonte ou sumidouro
R_k	- taxa de produção do poluente na reacção k
V_i	- velocidade intersticial
n	- porosidade

O primeiro termo do segundo membro da equação (3) representa a variação da concentração devido à dispersão. O segundo termo descreve os efeitos do transporte convectivo. O terceiro termo representa o efeito de fontes ou sumidouros. O quarto termo descreve reacções químicas várias. Deve ser escrito explicitamente para todas as reacções que afectam o poluente ou a espécie química em estudo. Este termo pode ser analisado por modelos de equilíbrio químico de águas subterrâneas.

A equação (3) pode ser resolvida pelos diferentes métodos matemáticos referidos anteriormente. A sua resolução é, no entanto, bastante mais problemática do que a da equação do escoamento. De facto a parcela convectiva (contendo os termos com a variável velocidade) é do tipo hiperbólico (linear) enquanto que a parcela dispersiva (contendo os termos com a variável dispersão) é do tipo parabólico (quadrático). Os métodos anteriormente referidos apresentam dificuldades numéricas (oscilações e dispersões numéricas) quando a parcela convectiva se torna predominante em relação à parcela dispersiva. Desenvolveram-se outros métodos, como o método das características e o método do percurso aleatório, com a finalidade de ultrapassar estes problemas. Estes métodos, contudo, revelaram deficiências quando a parcela dispersiva se torna predominante. O estudo FERREIRA 1986, que se apresenta no ponto seguinte, desenvolve uma análise comparativa dos vários métodos referidos.

2 - A experiência do LNEC neste domínio

Dos vários tipos de modelos matemáticos apresentados anteriormente desenvolveram-se no LNEC estudos de investigação aplicada (no domínio das águas subterrâneas) sobre os seguintes modelos: previsão (escoamento e transporte de massa) e identificação de parâmetros. Deram-se ainda os primeiros passos para o desenvolvimento de modelos de gestão. Apresentam-se em seguida, sucintamente, os principais estudos desenvolvidos.

A modelação matemática do escoamento subterrâneo foi objecto dos seguintes estudos: CORREIA 1979 e CORREIA 1981. No primeiro estudo propõe-se um modelo matemático de elementos finitos rectangulares quadráticos (modelo ESHO) para o cálculo da piezometria e do campo

de velocidades (fundamental para a resolução do problema do transporte de massa, como se viu na equação 3). Os resultados obtidos com o modelo são francamente satisfatórios. O modelo foi aplicado, no segundo estudo referido, ao cálculo do rebaixamento dos níveis piezométricos dos aquíferos de Rio Maior, de acordo com vários cenários de exploração do futuro empreendimento das minas de lenhites de Rio Maior.

Sobre este tipo de modelos salienta-se ainda a aplicação do modelo matemático de diferenças finitas desenvolvido por TRESKOTT et al. 1976, ao cálculo da piezometria do aquífero de Santo André, Sines, apresentado em HENRIQUES e RODRIGUES 1987.

Além dos modelos referidos encontra-se presentemente operacional no LNEC o modelo SUTRA (descrito em VOSS 1985) que permite não só o estudo da zona saturada do solo, mas também o da zona não-saturada do solo.

No que se refere à avaliação das condições de fronteira regionais necessárias à simulação dos modelos, nomeadamente à recarga de aquíferos, salienta-se o desenvolvimento do modelo de balanço hídrico sequencial diário BALSEQ, apresentado em FERREIRA 1982. Este modelo foi empregado no estudo FERREIRA 1986 que se apresenta mais à frente.

Pode-se dizer assim que o estado da investigação aplicada, no que se refere à modelação do escoamento subterrâneo, não oferece actualmente lacunas significativas para o desenvolvimento de novos estudos em meios porosos.

O mesmo não se pode dizer no que se refere ao estudo do escoamento na zona não-saturada do solo (não se resolveu ainda nenhum caso de estudo), e muito menos no que se refere ao estudo do escoamento em meios fracturados e em meios cárscicos. Nestas áreas serão desenvolvidos a curto e a médio prazos esforços de investigação aplicada, nomeadamente no âmbito de um projecto de caracterização dos recursos hídricos da Região Norte do País.

Em relação ao estudo da qualidade das águas subterrâneas, nomeadamente à modelação do transporte de poluentes em meios porosos, a experiência do LNEC foi recentemente alargada com o desenvolvimento da tese de investigação e de doutoramento apresentadas respectivamente em FERREIRA 1986 e em FERREIRA 1987.

Nesses trabalhos descrevem-se e comparam-se modelos matemáticos apropriados à quantificação do transporte de massa (poluentes) em águas subterrâneas, que se baseiam nos seguintes métodos: soluções analíticas, células de mistura, diferenças finitas, características, percurso aleatório, elementos finitos e elementos de fronteira. Nas conclusões do estudo são apresentadas regras para uma eficiente selecção dos modelos em situações que dependem de diferentes variáveis de decisão como por exemplo a precisão dos resultados, os custos de processamento em computador, o tempo de preparação de dados e a adaptabilidade dos modelos a situações reais. Os temas analisados nos trabalhos são os seguintes:

- - Aspectos básicos da poluição das águas subterrâneas.
- - Estado actual dos conhecimentos na modelação matemática das águas subterrâneas.
- - Análise comparativa dos principais métodos matemáticos para a resolução do problema do transporte de massa.
- - Ensaios de traçadores e sua interpretação para a determinação da dispersão longitudinal de aquíferos (variável fundamental à modelação do transporte de massa, como se viu na equação 3).

- - Desenvolvimento de um estudo de modelação do transporte de poluentes em águas subterrâneas, baseado em nove cenários de gestão do futuro empreendimento de Rio Maior. Os cenários estudados incluem a extração, em mina a céu aberto, de lenhites para produção de energia eléctrica (em central térmica proposta para a região) com possível deposição das cinzas produzidas na central em zonas esgotadas da mina. O tipo de análise desenvolvida permite a visualização simultânea dos resultados obtidos para vários cenários de gestão. Embora não se trate de um modelo matemático de gestão, a metodologia seguida permitirá facilmente a conceptualização de um modelo deste tipo.

Tal como para os modelos do escoamento também no domínio do transporte de poluentes se pode dizer que o estado dos conhecimentos é actualmente suficientemente vasto para permitir o estudo de novos casos de poluição em meios porosos.

Em relação aos meios fracturados e cárnicos a experiência é ainda muito limitada. Como se referiu encontra-se presentemente em curso no LNEC um projecto de investigação sobre a modelação do escoamento e transporte de massa em meios fracturados, visando diminuir as lacunas de conhecimento nesta área.

No que se refere aos modelos de identificação de parâmetros salienta-se o estudo actualmente em curso no LNEC relacionado com a estimação de parâmetros de aquíferos em situação de incerteza. Os modelos descritos em DAGAN 1985, RUBIN e DAGAN 1987a e RUBIN e DAGAN 1987b foram recentemente aplicados à estimação dos parâmetros do aquífero de Rio Maior (RUBIN, FERREIRA, RODRIGUES e DAGAN, no prelo). Pretendia-se analisar, pela primeira vez, o comportamento dos modelos numa situação onde se contava com um número razoável de observações piezométricas sequenciais mas onde apenas se dispunha de um número muito limitado de valores de transmissividades do aquífero.

Este tipo de modelos permite o cálculo de histogramas e o traçado de isolinhas dos valores médios e das variâncias das transmissividades e alturas piezométricas de aquíferos, com base em métodos de análise do tipo co-kriging. Um pequeno número de dados de transmissividades, obtidos através de ensaios de bombagem, e o conhecimento das alturas piezométricas permitem a obtenção das variáveis acima referidas. O conhecimento da evolução no tempo da superfície piezométrica permite ainda avaliar a recarga profunda do aquífero.

3 -Referências Bibliográficas

CORREIA, R. M. 1979 - *Análise dos Escoamentos Bidimensionais Horizontais em Meios Porosos em Regime Variável pelo Método dos Elementos Finitos*. Relatório, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

CORREIA, R. M. 1981 - *Empreendimento de Rio Maior. Modelos Numéricos de Rebaixamento dos Níveis Piezométricos*. Relatório, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

DAGAN, G. 1985 - *Stochastic modeling of groundwater by unconditional and conditional probabilities: the inverse problem*. Water Resources Research, 21(1),65-72.

FERREIRA, J. P. Lobo 1982 - *Mathematical model for the evaluation of the recharge of aquifers in semiarid regions requiring scarce hydrogeological data*. Memória 582, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

FERREIRA, J. P. Lobo 1986 - *A Dispersão de Poluentes em Águas Subterrâneas. Análise Custo-Eficácia de Modelos Matemáticos e Ensaios de Traçadores para a Realização de Estudos de Impacto Ambiental*. Tese de Especialista, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

FERREIRA, J. P. Lobo 1987 - *A comparative analysis of mathematical models and tracer experiments for groundwater pollution studies*. Doktor-Ingenieur Dissertation, Berlin, Technische Universitaet Berlin. (Memória do Laboratório Nacional de Engenharia Civil, no prelo).

HENRIQUES, R. Gonçalves e RODRIGUES, J. Delgado 1987 - *Estudo e Modelação das Águas Subterrâneas da Bacia de Santo André. 4. Relatório: Modelação Matemática do Aquífero do Jurássico*. Relatório 102/87, NHHF/NP, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

RUBIN, Y. e DAGAN, G. 1987a - *Stochastic identification of transmissivity and effective recharge in steady groundwater flow: 1. Theory*. Water Resources Research, 23(7), 1185-1192.

RUBIN, Y. e DAGAN, G. 1987b - *Stochastic identification of transmissivity and effective recharge in steady groundwater flow: 2. Case study*. Water Resources Research, 23(7), 1193-1200.

RUBIN, Y., FERREIRA, J.P. Lobo, RODRIGUES, J. Delgado e DAGAN, G., no prelo - *Estimation of the hydraulic parameters of the Rio Maior aquifer in Portugal by using stochastic inverse modeling*. Journal of Hydrology.