

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS

**OTIMIZAÇÃO DE BARREIRA HIDRÁULICA PARA CONTENÇÃO DE
PLUMA CONTAMINANTE EM AQUÍFERO POR MEIO DE MODELAGEM
NUMÉRICA**

Anderson Pires Rodrigues

Orientadora: Profa. Dra. Alexandra Vieira Suhogusoff
Co-orientador: Dr. Luiz Carlos Kauffman Marasco Ferrari

MONOGRAFIA DE TRABALHO DE FORMATURA
(TF-16/03)

São Paulo
2016

Anderson Pires Rodrigues

Anderson Pires Rodrigues

Aluno

Alexandra V. Suhogusoff

Alexandra V. Suhogusoff

Orientadora

À Maria do Socorro e Josias, meus pais.

AGRADECIMENTOS

Dedico os mais sinceros agradecimentos à todos aqueles que fizeram parte deste resultado, professores, amigos, familiares e em especial os meus pais, pelo apoio incondicional e por todo incentivo que vocês me ofereceram para que este resultado fosse alcançado, dedico a vocês este trabalho.

Agradeço à professora Dra. Alexandra Suhogusoff e ao Dr. Luiz Ferrari pela atenção e companheirismo dedicados ao longo deste projeto, pela disponibilidade oferecida nos momentos de dificuldade e por me apoiarem em minhas escolhas, como quando decidi estagiar e dividir a minha atenção entre TF e estágio.

Agradeço à turma 55 pelas histórias inesquecíveis escritas ao longo destes 5 anos de graduação; à família Astenosfera por toda experiência compartilhada, por todas discussões propiciadas, sejam elas geológicas, humanas ou mesmo pela louça suja, algumas de alto nível e outras um pouco menos, mas todas muito importantes. Agradeço ao rebanho, meus irmãos por opção, pela parceria e pelos momentos de descontração. Foi um prazer compartilhar esses momentos com todos vocês, essas experiências moldaram o meu caráter e as histórias que vivemos juntos estão tatuadas em minha memória.

Resumo

O presente trabalho de formatura emprega e testa a funcionalidade da ferramenta *Modular Groundwater Optimizer* (MGO) (Zheng & Wang, 2001), que tem aplicação em projetos hidrogeológicos de otimização e simulação numérica para poços de bombeamento. Neste estudo, a aplicação do MGO propõe a modelagem de barreiras de contenção de contaminantes do tipo *Pump and Treat* (Bombeamento e Tratamento) para dois cenários diferentes, cada um com seu critério de otimização: (i) otimização dos custos de instalação e operação; (ii) otimização dos custos de operação.

Esta ferramenta ainda é pouco utilizada no setor de consultoria ambiental, apesar da aplicação em larga escala do método de remediação *Pump and Treat*, que o MGO se propõe otimizar. O módulo MGO está vinculado ao ambiente do Software Visual MODFLOW® v2011.1, desenvolvido por Schlumberger Water Services.

O uso da ferramenta MGO oferece uma avaliação mais eficiente que o tradicional método busca por tentativa e erro (feito manualmente), pois é capaz de realizar as buscas pelos valores otimizados através de estratégias eficazes, e sendo também automático é capaz de verificar um número muito maior de combinações de resultados (números de poços, vazões e localização de cada um). Essas vantagens representam ganhos expressivos de tempo e de redução de custos, auxiliando significativamente na tomada de decisão quanto à proposta de remediação a ser adotada.

A flexibilidade da ferramenta em gerar soluções diferentes para cada cenário de otimização, proporcionou uma vantagem por conta opções disponíveis. A avaliação comparativa entre os resultados indicou que até mesmo entre os resultados otimizados podemos ter soluções mais ou menos eficientes. No caso em estudo por exemplo, para o cenário 1, a proposta mais otimizada representou uma redução de custos e de tempo de tratamento de 50% em relação à proposta menos otimizada.

1. ABSTRACT

The present project applies and tests the function in features of a tool called *Modular Groundwater Optimizer* (MGO) (Zheng & Wang, 2001), that is applied on hydrogeological projects and numerical simulation in pumping wells. In this study case, the application of MGO proposes the simulation of contaminants in contention barriers using methods as Pump and Treat in two different scenarios, each own with its own optimization criteria, defined by: i) expenditure and costs optimization (ii) expenditure and operation optimization.

This tool has not been used promptly on the environmental consulting sector, even though, the adoption of remediation methods like Pump and Treat in which MGO aims to optimize. The MGO module is related to the environmental software called Software Visual MODFLOW ® v2011.1, developed by *Schlumberger Water Services*.

The application of the MGO tool enables a more efficient evaluation than the conventional method that aims through attempting and failure (manually operated), whereas it is able to execute a searching on optimized values in cases of efficient strategies, besides being automatic, and a capable on verifying numbers in a different arrangement of combined results (quantity of wells, location and flow rates). These advantages represent an expressive time savings and cost reduction. Also, it is significantly important on decisions related to the remediation plan that will be adopted.

This tool flexibility in generating different solutions in each optimized scenario allowed some advantages based on available options. The comparative evaluation between different results indicated that even in optimized results, it is possible generate solutions more or less efficient. In this study case, for the 1st scenario, the most optimized proposal represented a reduction in treatment time by 50 % in comparison to the less optimized alternatives.

Sumário

1. ABSTRACT	5
2. INTRODUÇÃO	8
3. Metas e Objetivos	9
4. Levantamento bibliográfico:	9
4.1. Características da área em estudo: Geológicas, Hidrogeológicas, Hidrográficas e Climáticas.....	9
4.3. Modelagem geológica	10
4.3.1. Análise geoestatística	11
4.3.2. A Krigagem Ordinária	11
4.4. Modelagem matemática do aquífero	13
4.5. Otimização.....	14
4.6.1. Algorítmico Genético (Tucci, 2005)	16
4.6.2. Simulated Annealing (Arrefecimento Simulado)	17
4.5.3 Tabu Search	18
5. Materiais e Métodos.....	18
5.2. Softwares.....	19
5.3. Modelagem numérica de fluxo e transporte.....	19
5.4. Modelagem numérica da Barreira Hidráulica Otimizada (MGO)	21
6. RESULTADOS	22
7. CONCLUSÃO e DISCUSSÕES.....	32
8. BIBLIOGRAFIA	33

Índice de Figuras

Figura 1. Modelo em planta com poços ainda não otimizados, apresentando os poços candidatos ao sistema de extração. Após a otimização, os poços com vazão 0 foram excluídos do projeto.....	20
Figura 2. Simulação do comportamento da pluma de contaminante. Observa-se que em 4 anos a pluma atinge o rio localizado no limite norte da área onde é descarregada nas águas superficiais do rio.....	22
Figura 4. Simulação do comportamento da pluma de contaminante. Observa-se que em 4 anos a pluma atinge o rio localizado no limite Norte da área e é descarregada nas águas superficiais do rio.....	23

Figura 5. Modelo hidrogeológico em perfil paralelo ao eixo x, com exagero vertical de 10x. O contraste de cores destaca as hidrofacies com características diferentes, como apresentado na tabela 1	23
Figura 6. Modelo hidrogeológico em perfil paralelo ao eixo Y. Com exagero vertical de 10x. O contraste de cores destaca as hidrofacies com características diferentes, como apresentado na tabela 1	24
Figura 7. Evolução da pluma de benzeno no período de tratamento pela barreira otimizada pelo Simulated Anneling.	29

2. INTRODUÇÃO

Um dos procedimentos mais disseminados na remediação e/ou contenção de plumas de contaminantes dissolvidos em águas subterrâneas, corresponde ao método amplamente conhecido como Bombeamento e Tratamento (*Pump and Treat*). Este método compreende a instalação de um conjunto de poços de extração que operam em conjunto e são dimensionados em número, localização e em vazão, de acordo com cada caso em estudo. O volume de água bombeado por esses poços é tratado em superfície, e em seguida são bombeados para o aquífero ou utilizado para o consumo, comumente industrial.

Modelos matemáticos para simular o fluxo de águas subterrâneas e o transporte de contaminantes são amplamente utilizados para auxiliar o estudo das estratégias de remediação. Neste contexto, o emprego de ferramentas que possam não só simular situações futuras, como também otimizar os recursos necessários, apresentam grande importância. O projeto atual propõe aplicar e avaliar os resultados da ferramenta de otimização e simulação de poços de bombeamento MGO (*Modular Groundwater Optimizer*) (Zheng & Wang, 2002). Esta ferramenta foi aplicada para otimizar e simular modelos de barreiras hidráulicas do tipo bombeamento e tratamento, com o objetivo de conter o avanço de uma pluma de contaminação do composto benzeno dissolvia em água subterrânea.

A otimização do sistema refere-se à maximização ou minimização de alguma característica de interesse, seja ela, o custo, o tempo de operação do sistema, o volume de contaminante capturado e tratado, etc. Os custos totais da barreira incluem sua instalação, a operação e manutenção, e o monitoramento para acompanhamento da eficiência do sistema.

Nas duas últimas décadas, foram desenvolvidos algoritmos computacionais responsáveis pela otimização de sistemas de poços de bombeamento, aplicados para a contenção de plumas de contaminantes, entre eles, são encontrados no mercado o Groundwater Management Process - GWM (Ahlfeld, et al., 2005); Modular Groundwater Optimizer – MGO (Zheng & Wang, 2003); Simulation/Optimization Modeling system - SOMOS (Peralta, 2004); Successive Equimarginal Approach – SEA (Guo, et al., 2007); Physics-Based Management Optimization – PBMO (Deschaine, et al. 2013); e o Subject Matter Expertise – SME (Deschaine, et al. 2013).

Deschaine et al. (2013), por exemplo, apresentam o desempenho comparativo entre os algoritmos PBMO, MGO, SME e um modelo de barreira não-otimizado, aplicados em um estudo de caso de contaminação ocorrido na cidade de Umatilla, Oregon – EUA. O estudo apresenta um caso de alteração da qualidade de águas subterrâneas provocadas por TNT (2,4,6 Trinitrotolueno)

e o RDX (Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine). A definição de uma barreira dimensionada por meio dos algoritmos de otimização representou uma redução de 42% sobre os custos de remediação em relação ao método implantado inicialmente, não-otimizado, o que indica a importância da aplicação de ferramentas de otimização como procedimento fundamental nos estudos de viabilidade de implantação de barreiras hidráulicas.

No estado de São Paulo, dos métodos de remediação em uso para recuperação de águas subterrâneas, o Bombeamento e Tratamento ao lado da Extração Multifásica figuram entre os métodos mais utilizados, ambos empregados em 33% das áreas que se encontram em recuperação ou que já foram recuperadas, combinado com outros métodos ou aplicados isoladamente (CETESB, 2015).

3. Metas e Objetivos

O objetivo central deste projeto é realizar um estudo sobre o modo de operação e avaliar os resultados oferecidos pela ferramenta de otimização e simulação de poços de bombeamento “*Modular Groundwater Optimizer*” – MGO (Zheng & Wang, 2002). Como exemplo, foi construído um modelo matemático baseado no contexto hidrogeológico de uma área não discriminada, localizada no município de Paulínia-SP, e aplicada a ferramenta MGO, para otimizar os parâmetros de instalação e operação de uma barreira hidráulica para a extração e tratamento das águas de um aquífero contaminadas pelo solvente orgânico benzeno.

Este estudo se concentrou em três etapas principais, sendo elas, (i) a elaboração do modelo conceitual da área estudada, (ii) a modelagem hidrogeológica representativa do domínio estudado e, (iii) a modelagem matemática da barreira hidráulica otimizada.

4. Levantamento bibliográfico:

4.1. Características da área em estudo: Geológicas, Hidrogeológicas, Hidrográficas e Climáticas.

Os dados coletados utilizados como base para esse trabalho, pertencem a uma área indiscriminada situada no município de Paulínia, São Paulo, localizada entre a Depressão Periférica Paulista e o Planalto Ocidental, onde o relevo local é predominantemente suave. A geologia local é formada estratigraficamente, da base para o topo, por rochas do embasamento cristalino pré-cambrianas do Grupo Amparo-Socorro, rochas sedimentares do Subgrupo Itararé

de idade permo-carbonífera, rochas intrusivas básicas do cretáceo, relacionadas à Formação Serra Geral, depósitos cenozóicos correlatos à Formação Rio Claro e ainda por sedimentos aluvionares, cobrindo toda sequência estratigráfica (Fernandes, 1997).

A região onde Paulínia situa-se é abastecida principalmente pelo Sistema Aquífero Serra Geral e pelo Sistema Aquífero Tubarão, mais precisamente pelo Aquífero Itararé. As frequentes fraturas conferem caráter fissural ao Sistema Aquífero Cristalino. Também se caracteriza como aquífero livre a semi-confinado, heterogêneo e anisotrópico. Já o Sistema Aquífero Tubarão, representado pelo aquífero Itararé na região de estudo, é caracterizado como aquífero do tipo granular, livre a semi-confinado, e localmente heterogêneo e isotrópico (CETESB, 2014). A bacia hidrográfica da região de Paulínia é composta pela Bacia do rio Jaguari, Bacia do Rio Atibaia e Bacia do Ribeirão Quilombo.

O clima da região é caracterizado como subtropical úmido Cwa conforme a classificação de Köppen, com inverno notadamente seco e verão quente e chuvoso. A precipitação anual atinge a marca de 1360 mm.

4.2. Modelo conceitual

A construção de um modelo matemático que faça analogia ao fluxo de água subterrânea de um sistema real, envolve diversas etapas, das quais a modelagem numérica é apenas um dos passos. O passo inicial se dá com a definição do objetivo para o qual o modelo está sendo criado, em seguida, elabora-se o modelo conceitual que resulta da interpretação dos dados de campo, visando assimilar as informações e usá-las para responder perguntas inerentes ao problema a ser resolvido. Comumente os modelos são usados para se realizar simulações futuras do comportamento do sistema a partir de mudanças ou não do cenário inicial (Fitts, 2015). Na elaboração do modelo conceitual, procura-se estabelecer a geometria do sistema com suas camadas geológicas, seus contornos, suas interconexões hidráulicas, suas recargas e bombeamento (Fitts, 2015).

O objetivo do modelo conceitual é simplificar as informações de campo para permitir a implementação do modelo numérico. No modelo conceitual procura-se conciliar a representação do contexto hidrogeológico da forma mais fiel possível, com algumas simplificações que facilitam a aplicação do modelo numérico.

4.3. Modelagem geológica

Na etapa precedente à construção do modelo hidrogeológico, foi elaborado o modelo geológico da área. Para a interpolação das interfaces das camadas sedimentares a partir dos dados de sondagem, recorreu-se à aplicação de ferramentas geoestatísticas, precisamente ao método de Krigagem Ordinária.

4.3.1. Análise geoestatística

A geoestatística tem por objetivo a modelagem do fenômeno espacial em estudo, ou seja, determinar a distribuição e variabilidade espaciais da variável de interesse (Yamamoto & Landim, 2013). Essa modelagem é feita por meio de um conjunto de ferramentas estatísticas que incorporam em seu processamento as coordenadas espaciais de cada ponto observado (Goovaerts, 1997).

Considerando a relação espacial que cada ponto guarda com sua vizinhança, foi utilizada como ferramenta descritiva deste fenômeno, a função semivariograma, ou simplesmente função variograma. A função variograma é obtida a partir da comparação entre pares de pontos vizinhos, separados por uma distância h , em uma direção analisada (vetor de módulo h) (Olea, 1999). Esse comportamento é descrito pela Hipótese intrínseca que estabelece que a variância entre duas amostras é a mesma para todo o domínio e só varia em função do módulo e da direção do vetor h que as separam (Yamamoto, 2001). Ela descreve e quantifica o comportamento de dependência espacial das amostras. Segundo Goovaerts (1997), função variograma é descrita como apresentado pela equação (i):

$$\gamma(h) = 1/2n \sum_{i=0}^n [(x + h) - z(x)]^2 \quad (i)$$

4.3.2. A Krigagem Ordinária

A krigagem ordinária é um método de estimativa local, que permite estimar valores de variáveis distribuídas no espaço e/ou no tempo. Desta forma, o valor de um ponto não amostrado resulta da combinação linear dos valores de amostra encontrados na vizinhança próxima (Yamamoto & Landim, 2013).

O estimador da krigagem ordinária calcula o valor de um ponto não amostrado, permitindo estimar o valor desconhecido associado a um ponto, área ou volume a partir de um conjunto de n dados $\{Z(x_i), i=1, n\}$ disponíveis (Yamamoto, 2001):

$$Z_{KO}^*(x_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i)$$

A krigagem ordinária admite a condição de não viés da estimativa, que é obtido quando a diferença entre o valor real e o estimado é igual à Zero. Desta forma, a soma dos ponderadores associados aos valores vizinhos deve ser igual a 1 (Yamamoto & Landim, 2013):

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$$

Os ponderadores do estimador incorporam dois fatores fundamentais, o primeiro – fator distância – indica que quanto mais próximo estiver a amostra do ponto a que se quer estimar, maior será o seu peso; E o segundo – Fator *declustering* – indica que quanto mais agrupadas estiverem as amostras, maior será a redundância dos dados e menor será o seu peso individual na composição do estimador (Soares, 2000).

Os ponderadores são obtidos pela resolução de um sistema de equações lineares denominado sistema de krigagem, conforme o apresentado por Journel & Huijbregts (1978):

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n \lambda_i \cdot \gamma(x_i - x_j) + \mu = \gamma(x_0 - x_i) & \text{para } i = 1, n \\ \sum_{i=1}^n \lambda_i = 1 \end{cases}$$

Onde:

- x_0 é a posição do ponto amostrado, para o qual deseja-se fazer a estimativa;

- x_i e x_j são classificações genéricas para os pontos vizinhos amostrados, utilizados na estimativa de x_0 ;
- $\gamma(x_i - x_j)$ refere-se à variação espacial correspondente a dada distância, com origem em x_i e extremidade em x_j ;
- $\gamma(x_0 - x_i)$, refere-se à variância espacial correspondente a distância com origem em x_i e extremidade em x_0 ;
- μ é o multiplicador de Lagrange necessário para a minimização da variância do erro.

O sistema pode ser representado em termos matriciais, conforme:

$$\begin{bmatrix} \gamma(x_1 - x_1) & \gamma(x_1 - x_2) & \dots & \gamma(x_1 - x_n) & 1 \\ \gamma(x_2 - x_1) & \gamma(x_2 - x_2) & \dots & \gamma(x_2 - x_n) & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \gamma(x_n - x_1) & \gamma(x_n - x_2) & \dots & \gamma(x_n - x_n) & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma(x_0 - x_1) \\ \gamma(x_0 - x_2) \\ \vdots \\ \gamma(x_0 - x_n) \\ 1 \end{bmatrix}$$

4.4. Modelagem matemática do aquífero

A primeira etapa no desenvolvimento do modelo matemático compreende a formulação das equações que descrevem os princípios físicos controladores dos processos em estudo. Essas equações são conhecidas por **Equações Gerais** e os princípios físicos fundamentais que controlam os processos em modelagem de fluxos subterrâneos em meios porosos são: a lei de Darcy e o equilíbrio de massas (Fitts, 2015). Os métodos numéricos comumente empregados para modelagem algébrica de fluxos subterrâneos são os de diferenças finitas e elementos finitos. Neste estudo, recorreu-se ao solucionador que emprega o método de diferenças finitas. Neste caso, o domínio contínuo a ser modelado é subdividido em blocos, as equações são então resolvidas para o domínio levando-se em conta que no interior de cada bloco os parâmetros são homogêneos (Fetter, 1994). A Equação 1 é a expressão algébrica da equação geral, que modela o fluxo de águas subterrâneas em meios porosos.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) + q_s = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad \text{Equação 1}$$

Na qual:

- h é a carga hidráulica
- K_x , K_y e K_z principais direções de condutividade hidráulica, ao longo dos eixos x, y e z, respectivamente;
- Q_s é a taxa de fluxo de entrada e saída, de cada célula do grid;

4.5. Otimização

As técnicas de otimização de poços podem ser aplicadas em diferentes casos de gerenciamento de águas subterrâneas a fim de determinar a vazão ótima de cada um dos n poços envolvidos em um determinado estudo, como em projetos de rebaixamento de nível freático, em sistemas de bombeamento de água para consumo e também para o tratamento de águas contaminadas. Como critério de otimização para o bombeamento temos restrições como: os limites de potabilidade das águas subterrâneas determinada pelo órgão regulador, volume máximo de bombeamento determinado pelos tipos de bombas utilizada em cada poço, a capacidade do sistema de tratamento da água bombeada, entre outros (Zheng & Wang, 2001).

Um problema de otimização é definido em termos de uma função objetivo e também do conjunto de restrições associadas ao problema que se pretende resolver. A função objetivo pode ser formulada, como no caso em estudo, integrando os custos associados à implantação e manutenção de cada elemento do projeto que se pretende implantar.

A função objetivo:

$$J = a_1 \sum_{i=1}^N y_i + a_2 \sum_{i=1}^N y_i d_i + a_3 \sum_{i=1}^N y_i |Q_i| \Delta t_i + a_4 \sum_{i=1}^N M_i + a_5 F(q, h, C)$$

Na qual:

- J é o objetivo de otimização, em termos dos custos totais, de volume total de bombeamento, ou da remoção de massa de contaminante.
- Q_i representa a taxa de bombeamento ou injeção.
- M_i é a quantidade de massa de soluto removida pelo poço i .
- $F(q,h,c)$ é qualquer função de custo fornecidos pelo utilizador, que pode ser dependente da taxa de fluxo Q , carga hidráulica h , e concentração C
- N é o número total de parâmetros a serem otimizados.
- y_i é uma variável binária, isto é, se seu resultado for 1 o parâmetro estará ativo, e se for 0 estará inativo.
- d_i é a profundidade do poço associado ao parâmetro i .
- Δt_i é a duração do bombeamento ou injeção associada ao parâmetro i .
- a_1 é o valor fixado dado pelo custo de instalação de cada poços.
- a_2 é o custo de perfuração e instalação de cada poço.
- a_3 é o custo de bombeamento e/ou tratamento por volume de água bombeada.
- a_4 é o custo associado à remoção de contaminante, em reais por peso de soluto extraído.
- a_5 é um multiplicador do custo, formado por uma função externa definida pelo usuário.

Os resultados da função objetivo precisam ainda, atender uma sequência de restrições que variam de acordo com o tipo de otimização feita e com a área de aplicação (hidrogeologia, logística, economia, engenharia, etc). Em hidrogeologia, as restrições comumente aplicadas aos problemas de otimização são: volume máximo de bombeamento individual, ou do conjunto de poços (determinado pelo tipo de bomba instalada nos poços e/ou pelo dimensionamento do sistema de tratamento), intervalo de variação vertical da carga hidráulica, concentração final do soluto dissolvido nas águas subterrâneas, etc.

4.6. Algoritmos

Devido à complexidade das funções objetivos resultantes, os mecanismos de busca pelos valores otimizados precisam adotar técnicas eficientes para fazer a busca pelos valores otimizados de mínimo ou de máximo dessas funções – uma otimização sempre busca pontos de mínimo (minimização), a busca por valores de máximo (maximização), é feita a partir da

minimização da função inversa. As estratégias de pesquisa por valores otimizados são definidas por cada algoritmo, que em muitos casos fazem analogia à sistemas naturais. O MGO incorpora três algoritmos de otimização, com funcionamento análogo à sistemas naturais, que são eles: o Algoritmo Genético, o Simulated Annealing (Arrefecimento Simulado) e o Tabu Search (Busca Tabu). Esses métodos de otimização são conhecidos como métodos de otimização global, tendo em vista suas capacidades de convergirem em direção aos valores ótimos globais.

4.6.1. Algoritmo Genético (Tucci, 2005)

O algoritmo genético faz analogia à Teoria da Evolução das Espécies e aos parâmetros: Indivíduo, População, Meio ambiente, Seleção e cruzamento de indivíduos, Mutação, e eliminação de indivíduos. O algoritmo Genético trata cada conjunto de valores que se comporta como resultado satisfatório à função objetivo como um *indivíduo*, que pode sofrer alteração em seu gene por meio de *mutação* genética, e por sua vez, faz parte de uma *população* que é submetida à *seleção* por via das regras de restrição do meio.

Os processos utilizados no método são os seguintes:

- 1) Inicialização da População (comumente aleatória);
- 2) Avaliação de cada indivíduo da população;
- 3) Geração de novos indivíduos baseados na população existente;
- 4) Retirada de indivíduos da população atual para criar espaço para novos indivíduos;
- 5) Avaliação dos novos indivíduos;
- 6) Escolha da parada ou retornar para a etapa 3.

Inicialmente definem-se os seguintes parâmetros: A população inicial é definida por um conjunto de m indivíduos. Cada indivíduo é um conjunto de n valores, representando o vetor do parâmetro modelo.

Inicialização: a inicialização é definida por uma população inicial escolhida pelo usuário ou gerada aleatoriamente (procedimento usual).

Avaliação: cada indivíduo - conjunto j de valores que satisfazem a função objetivo - da população é avaliado e sua aptidão é classificada de acordo com o resultado na função objetivo. Considerando peso 1 para o indivíduo que reproduz o pior resultado para a função objetivo e para

os demais, pesos maiores em ordem crescente, de acordo com o resultado obtido na função objetivo.

Os pesos indicam a aptidão do indivíduo e sua probabilidade de ter melhores cruzamentos.

Seleção e Geração: a seleção pode ser realizada com base na geração de um certo número de valores aleatórios, selecionados somente os valores acima de um determinado nível da função de distribuição (probabilidade).

Reprodução: Etapa de geração de novos indivíduos baseada na população anterior. A reprodução pode ser através do cruzamento de indivíduos existentes ou; através de mutação de um indivíduo existente.

Parada: a otimização chega ao fim quando atinge o critérios de parada pré-estabelecido pelo usuário, seja o número de gerações máximo, ou de o número de máximo de realizações da função objetivo.

4.6.2. *Simulated Annealing* (Arrefecimento Simulado)

O algoritmo de *Simulated Annealing* (S.A.) é mais um algoritmo que possui o seu funcionamento baseado em sistemas naturais, por sua vez, o S.A. faz analogia à termodinâmica, especificamente ao processo térmico utilizado em metalurgia para obtenção de estados de baixa energia em um sólido. Tal processo térmico consiste de duas etapas: na primeira, o material é aquecido à temperatura de fusão, por volta de 1100°C, e na segunda, sua temperatura é reduzida lentamente, de tal forma que a temperatura permaneça próxima do ponto de solidificação por um longo período de tempo até que se comece a formar os primeiros cristais, nesta fase, a temperatura é diminuída lentamente e os cristais são organizados em estruturas estáveis e de energia mínima. Em otimização, o algoritmo Simulated Annealing, faz a busca pelos valores otimizados, substituindo cada solução encontrada por uma solução próxima (na vizinhança do espaço de soluções), a partir da adição de um componente aleatório T (chamado de temperatura por analogia) este valor T é tanto maior quanto for o aumento de temperatura obtido em relação ao resultado anterior. À medida que o algoritmo progride o valor T é reduzido e o algoritmo passa a convergir para uma solução ótima, nessa etapa, necessariamente local (Zheng & Wang, 2002).

4.5.3 Tabu Search

A implementação da busca tabu usa estruturas de memória que descrevem as soluções visitadas ou conjuntos fornecidos pelo usuário de regras. Se uma solução potencial já foi visitada dentro de um prazo curto ou se violou uma regra, ele é marcado como "tabu" (proibido), de modo que o algoritmo não considera essa possibilidade novamente (Zheng & Wang, 2002).

O Tabu Search não é confundido pela ausência de vizinhos otimizados, pois o método é construído de forma a evitar o retorno a um ótimo local previamente visitado. Esta característica faz com que o método seja capaz de superar pontos de mínimo locais e atingir um resultado ótimo ou próximo ao ótimo global (Zheng & Wang, 2002).

5. Materiais e Métodos

5.1. Características da área de estudo

Com vistas à caracterizar o contexto hidrogeológico local, realizar simulações para momentos futuros e simular diferentes cenários de remediação, foi elaborado o modelo hidrogeológico conceitual por meio da integração dos dados provenientes de técnicas tradicionais de investigação (sondagem, medição de nível piezométrico de poços de monitoramento, descrições geológicas e análises geotécnicas), obtendo-se assim, o modelo geológico das hidrofácies e o gradiente hidráulico local. O modelo numérico de fluxo hidráulico foi simulado para um regime estacionário.

Para a construção do modelo hidrogeológico conceitual, foram consideradas quatro hidrofácies diferentes. A primeira delas é o siltito alterado que inclui os depósitos aluviares que encontram-se posicionados predominantemente na zona não saturada; abaixo dele estão as demais hidrofácies, na sequência: Argila siltosa, argila e argila siltosa (Tabela 1).

A malha para o cenário do modelo matemático, foi discretizada de modo uniforme, sendo constituída por 154 linhas, 196 colunas e 6 camadas, totalizando 181.104 células. A delimitação das características do terreno, de superfície e do embasamento foi realizada através da criação de mapas de contorno utilizando métodos geoestatísticos, a partir de dados das sondagens/poços executados na área.

Tabela 1. Características das hidrofácies do modelo estudado.

Hidrofácie	Litologia	k_x, k_y, k_z [m/s]	F_{oc}	Porosidade Efetiva	Densidade do solo [g/cm³]
Camada 1	Argila	3,84E-06	2,3%	0,153	1,38
Camada 2	Argila-siltosa	4,22E-06	2,0%	0,02	1,40
Camada 3	Argila	1,65E-05	1,8%	0,02	1,41
Camada 4	Argila	1,2E-08	1,5%	0,02	1,44

5.2. Softwares

As atividades se iniciaram com a tabulação dos dados hidrogeológicos fazendo-se uso do Software *Excel®* do pacote Microsoft Office versão 2013. Em seguida, tomando-se como base as coordenadas geográficas de cada poço, sendo elas, associadas às cotas topográficas e as interfaces geológicas, fez-se uso do Software *Surfer®* versão 10.4 para realizar a interpolação das interfaces geológicas, do mapa potenciométrico e da topografia. Na etapa posterior, fez-se uso do Software *Visual MODFLOW®* versão 2011.1, desenvolvida por Schlumberger Water Services para realizar a modelagem hidrogeológica e modelagem da barreira hidráulica otimizada.

5.3. Modelagem numérica de fluxo e transporte

A sequência de atividades que envolveram o modelamento numérico do aquífero de uma forma geral seguiram o protocolo proposto por Anderson & Woessener (1992), dividido em três grupos: Preparação, Calibração e a Aplicação. As etapas seguidas foram: a definição da proposta de modelagem do aquífero; o desenvolvimento do modelo conceitual do sistema; a seleção da equação geral do algoritmo computacional; a verificação do modelo; a estimativa; análise da sensibilidade da estimativa e, por fim, a obtenção do modelo tridimensional e dos resultados. A etapa de calibração prevista por Anderson & Woessener (1992), não foi realizada, tendo em vista que o caso em estudo se trata de um modelo hipotético, que tem como exemplo somente o contexto hidrogeológico de uma área no município de Paulínia-SP, contudo não há dados de

monitoramento de diferentes campanhas, somente os dados geológicos e de carga hidráulica inicial.

Como ferramenta responsável pelo modelamento numérico do fluxo subterrâneo foi utilizada a MODFLOW (McDonald e Harbaugh, 1988; Harbaugh e McDonald, 1996); e como ferramenta de modelamento numérico da dinâmica da pluma de contaminante, a ferramenta MT3MDS (Zheng & Wang, 1999). Essas ferramentas estão acopladas à plataforma do Software Visual MODFLOW v2011.1 desenvolvida por Schlumberger Water services.

O MT3MDS (Zheng & Wang, 1999) apresenta um conjunto abrangente de opções e capacidades para simular advecção, dispersão/difusão e reações químicas de contaminantes em sistemas de fluxo de águas subterrâneas em condições hidrogeológicas diversas.

O contaminante responsável pela alteração da qualidade das águas subterrâneas escolhido para esse estudo foi o Benzeno, que em seu centro de massa atinge concentrações de até 100 µg/l (Figura 1). Sendo 5 µg/l o limite de potabilidade proposto pela CETESB (2014) para o composto benzeno, o projeto vigente tem o objetivo de reduzir a concentração da pluma de benzeno à 1/20 da concentração inicial.

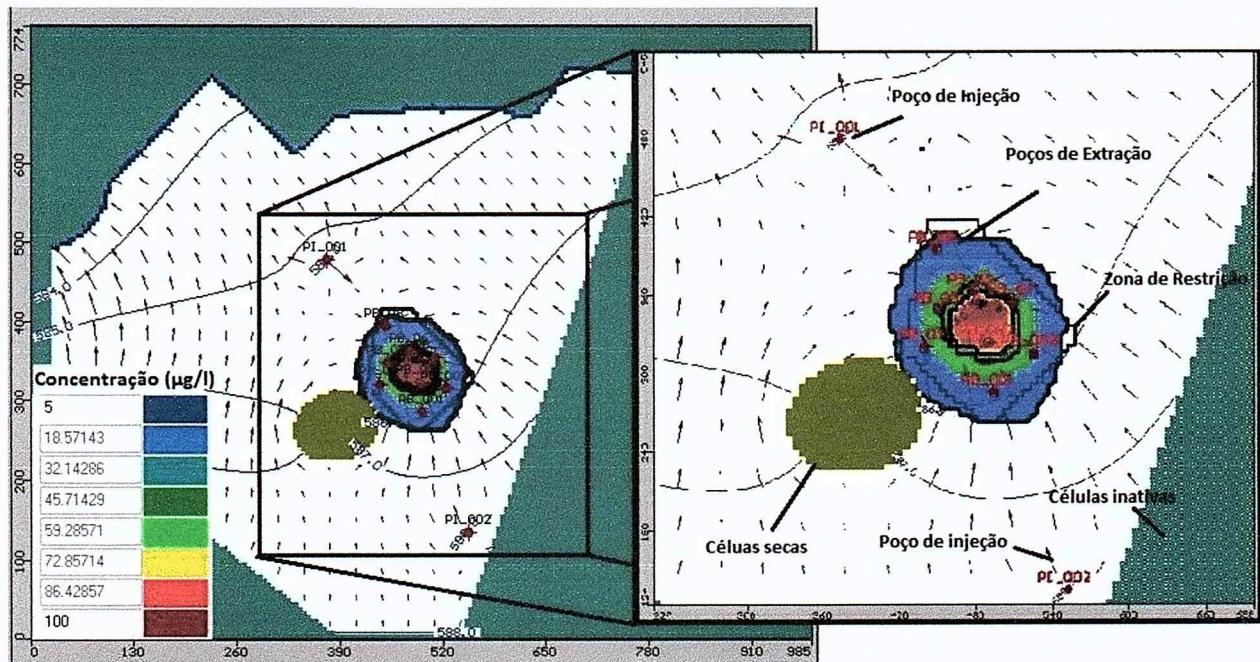


Figura 1. Modelo em planta com poços ainda não otimizados, apresentando os poços candidatos ao sistema de extração. Após a otimização, os poços com vazão 0 foram excluídos do projeto.

5.4. Modelagem numérica da Barreira Hidráulica Otimizada (MGO)

A otimização da barreira se concentrou inicialmente na definição dos parâmetros da Função Objetivo, que é a função que incorpora as variáveis envolvidas (número de poços, localização e vazão de cada um, etc.), os parâmetros de restrição (e.g. concentração máxima de soluto em um zona determinada) e descreve o custo do projeto. Ela é responsável pela contabilidade dos custos envolvidos em todo período de funcionamento do sistema, incluindo a etapa de instalação.

Os primeiros parâmetros definidos da função objetivo foram os poços (extração e injeção), candidatos à compor a barreira hidráulica otimizada. Os poços foram definidos quanto ao número e à localização de cada um. Para isso, foi considerada a localização da pluma de benzeno e o sentido de fluxo subterrâneo (Figura 1).

Como parâmetro de restrição foi considerada a localização da pluma e definida uma zona, na qual, se restringiu a concentração final à concentração máxima de soluto que se pretende alcançar ($5 \mu\text{g/l}$), essa zona é apresentada na figura 1. Além da zona de concentração máxima, outras zonas de restrição também foram definidas, estas relacionadas a cada um dos poço de bombeamento. Para cada poço de bombeamento restringiu-se a variação da carga hidráulica a um intervalo que garantisse que o filtro de cada poço ficasse sempre em zona saturada do aquífero.

Foram posicionados também dois poços de injeção para escoar o volume de água extraído e tratado pelo sistema. O poço PI_001 (Figura 1) foi posicionado à jusante da pluma de benzeno e o poço PI_002 à montante. A taxa de injeção de cada poço foi definida de acordo com sua posição, visando evitar o rebombeamento de água já tratada. Para o PI_001 foi direcionado 75% do volume total tratado e para o PI_002, 25%. Ao injetar a água tratada e que possui concentração mínima de benzeno, espera-se aumentar o gradiente hidrogeoquímico para o composto benzeno e facilitar sua solubilização à fase aquosa.

Para padronizar as configurações de busca dos três algoritmos, foi definido como 15 o número de interações totais que cada um dos 3 algoritmos faria em sentido ao valor ótimo global da função objetivo, e para cada interação foram definidas 20 simulações. Com isso, as variações de resultados finais das otimizações ficaram restritas apenas às estratégias de busca particulares de cada algoritmo.

6. RESULTADOS

6.1. Modelo hidrogeológico e evolução da contaminação de benzeno

Aplicando a técnica geoestatística de interpolação, krigagem ordinária, para interpolar os dados topográficos, geológicas, e hidrogeológicos (carga hidráulica) obteve-se o modelo geológico tridimensional originado do modelo conceitual desenvolvido. Integrando estas informações com as demais informações hidrogeológicas da área, como condições de contorno e recarga, obteve-se o modelo hidrogeológico da área. Realizando os cálculos de fluxo e transporte para a pluma modelada, obteve-se o modelo hidrogeológico da área, com as simulações futuras de propagação da pluma de benzeno, como apresentado nas figuras 1, 2, 3, 4 e 5.

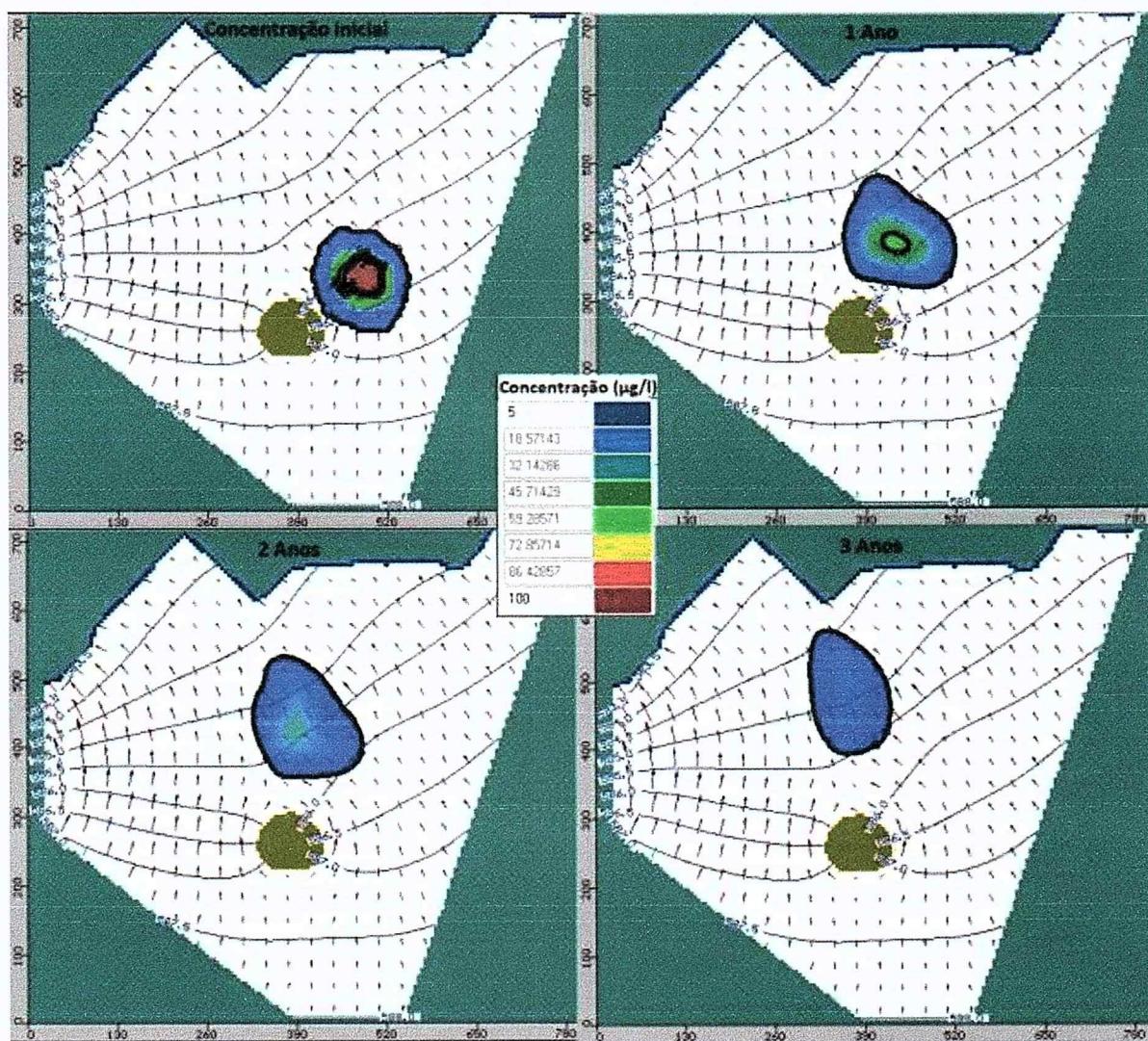


Figura 2. Simulação do comportamento da pluma de contaminante. Observa-se que em 4 anos a pluma atinge o rio localizado no limite norte da área onde é descarregada nas águas superficiais do rio.

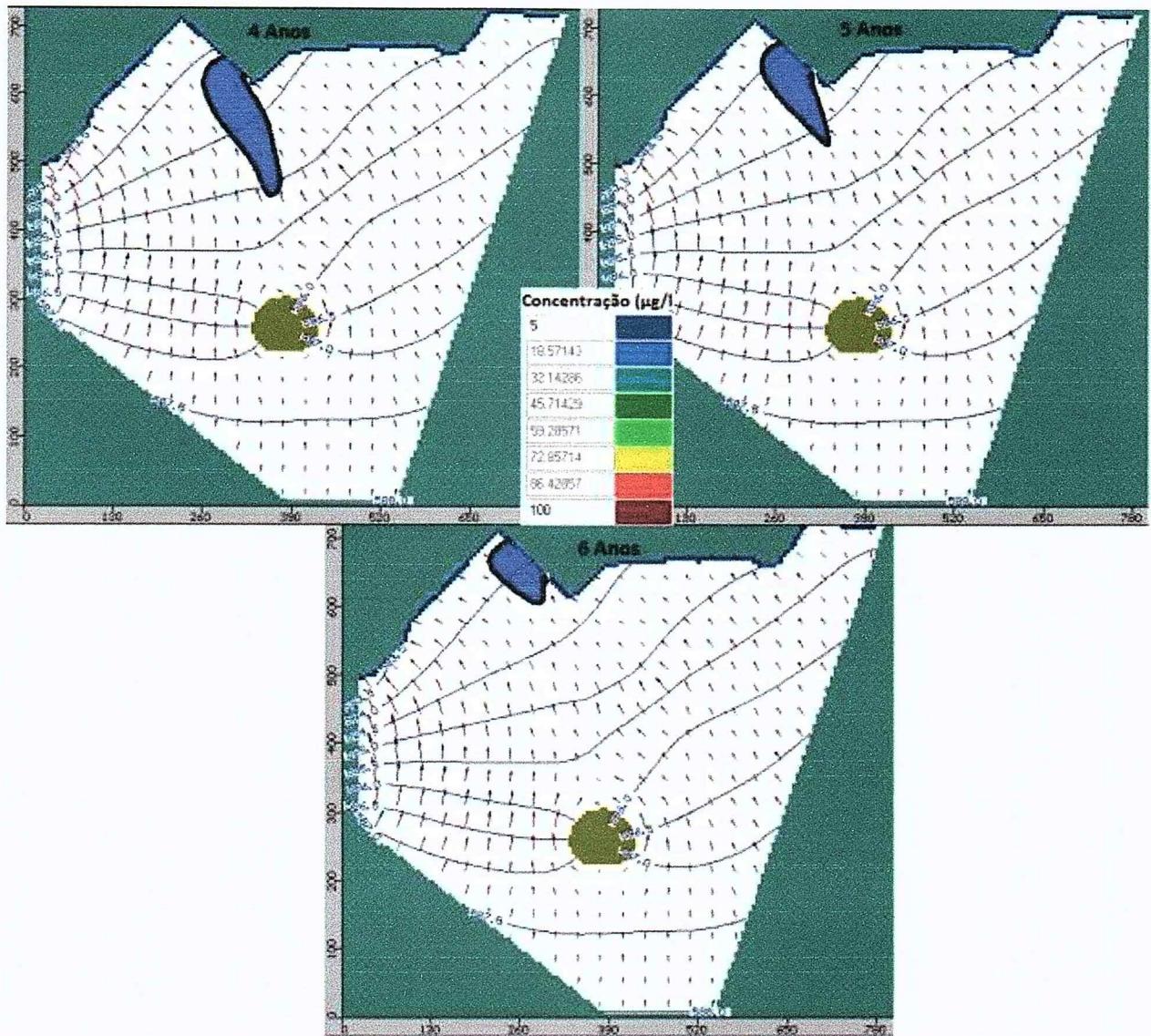


Figura 3. Simulação do comportamento da pluma de contaminante. Observa-se que em 4 anos a pluma atinge o rio localizado no limite Norte da área e é descarregada nas águas superficiais do rio.

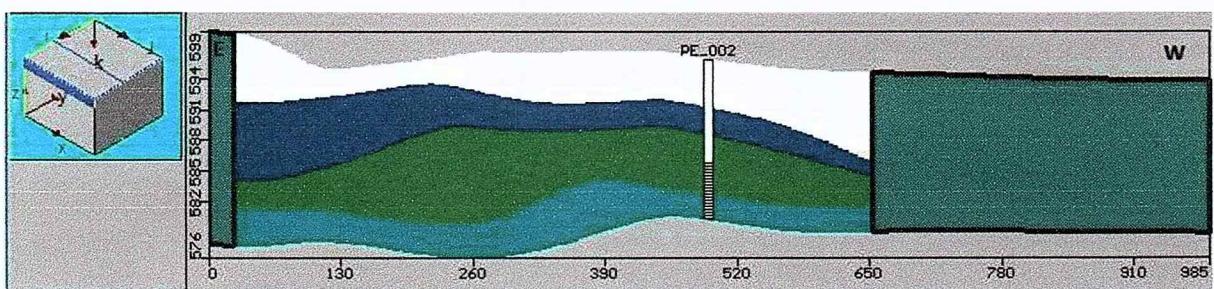


Figura 4. Modelo hidrogeológico em perfil paralelo ao eixo x, com exagero vertical de 10x. O contraste de cores destaca as hidrofacies com características diferentes, como apresentado na tabela 1.

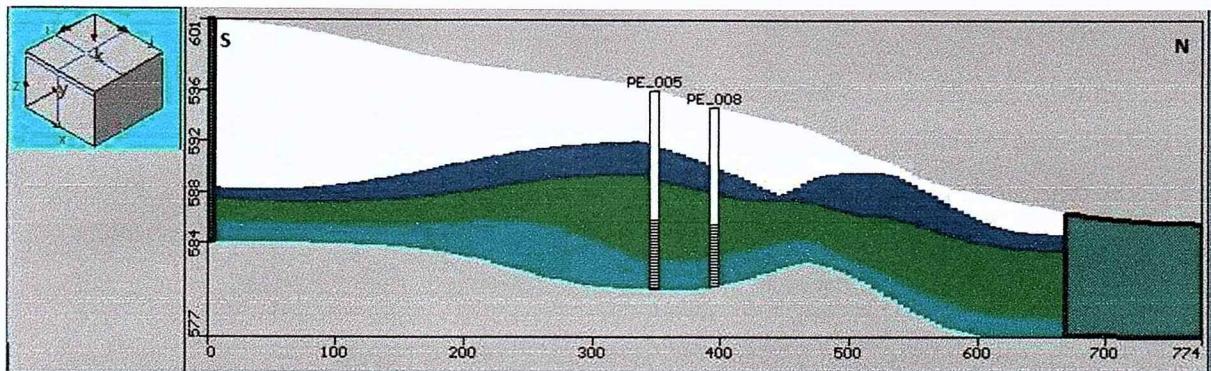


Figura 5. Modelo hidrogeológico em perfil paralelo ao eixo Y. Com exagero vertical de 10x. O contraste de cores destaca as hidrofacies com características diferentes, como apresentado na tabela 1.

6.2. Otimização

6.2.1. Otimização dos custos de instalação e operação da barreira hidráulica

Foi considerado como primeiro cenário para a otimização da barreira hidráulica, a otimização global do sistema, incluindo os custos de instalação e operação do projeto. O Gráfico 1 apresenta a evolução comparativa de cada algoritmo no processo de busca pelo valor de mínimo global em função do número de interações realizadas.

O gráfico 2 apresenta as vazões ótimas calculadas para cada um dos 8 candidatos à poços de extração localizados no domínio da pluma de benzeno. Os poços com vazão nula, foram desprezados pelos algoritmos de otimização, e os poços com taxa de extração maior que zero foram selecionados para compor o sistema de remediação otimizado proposto por cada algoritmo.

A tabela 1 apresenta o resumo dos valores calculados para cada parâmetro do sistema, e os períodos de tratamento proposto por cada algoritmo. Os custos foram convertidos para o custo total do projeto, facilitando a avaliação de cada resultado obtido.

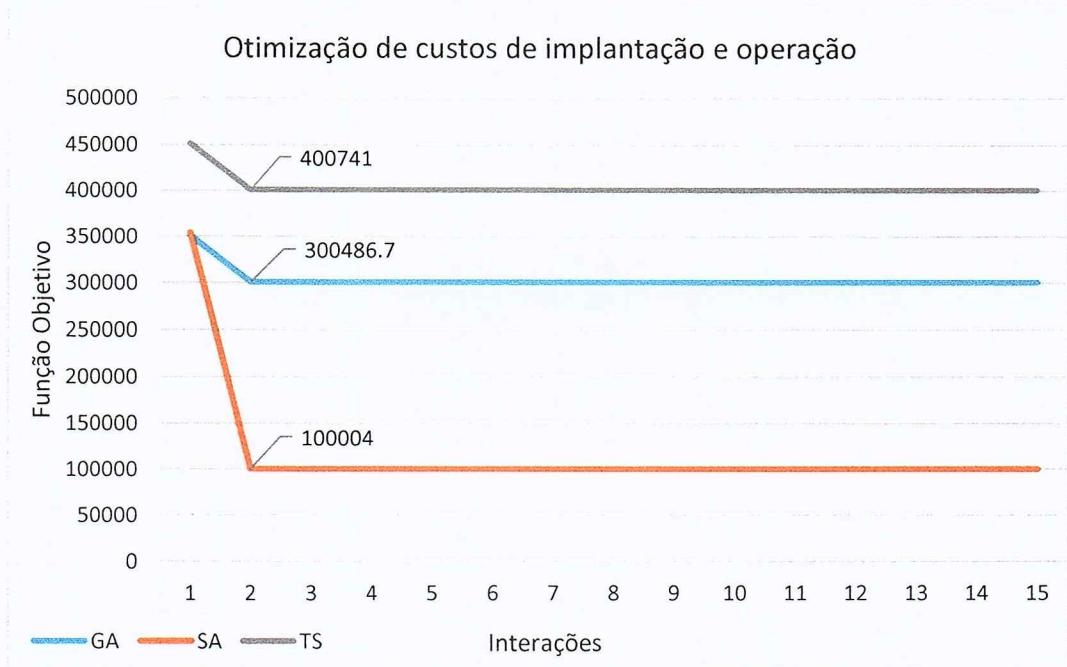


Gráfico 1. Evolução da otimização dos custos de instalação e operação da barreira. Observa-se que em apenas 3 interações os três algoritmos já haviam convergido para mínimos locais, e que continuaram estabilizados neles nas próximas interações, contudo o Algoritmo Genético (AG) e o Tabu search (TS) ficaram presos a pontos de mínimos locais e não conseguiram convergir para valores menores que o Simulated Annealing (SA).

Vazão dos Poços de Extração Otimizados para os Custos de Instalação e Operação da Barreira

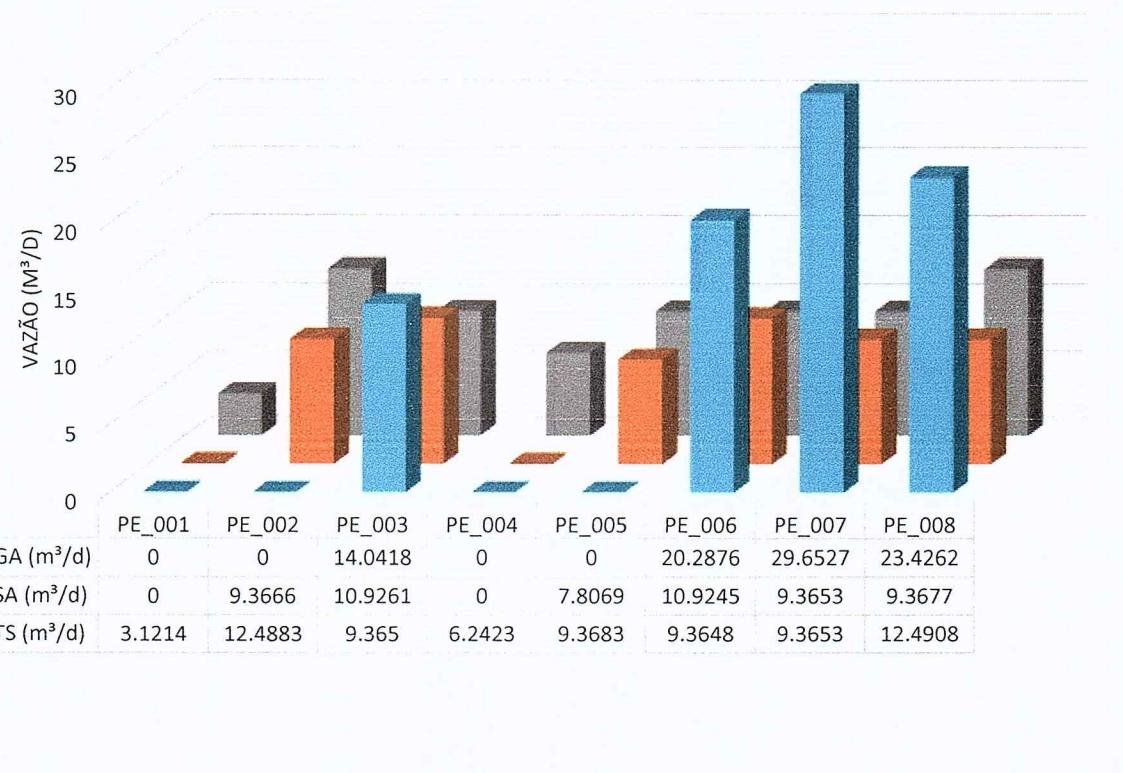
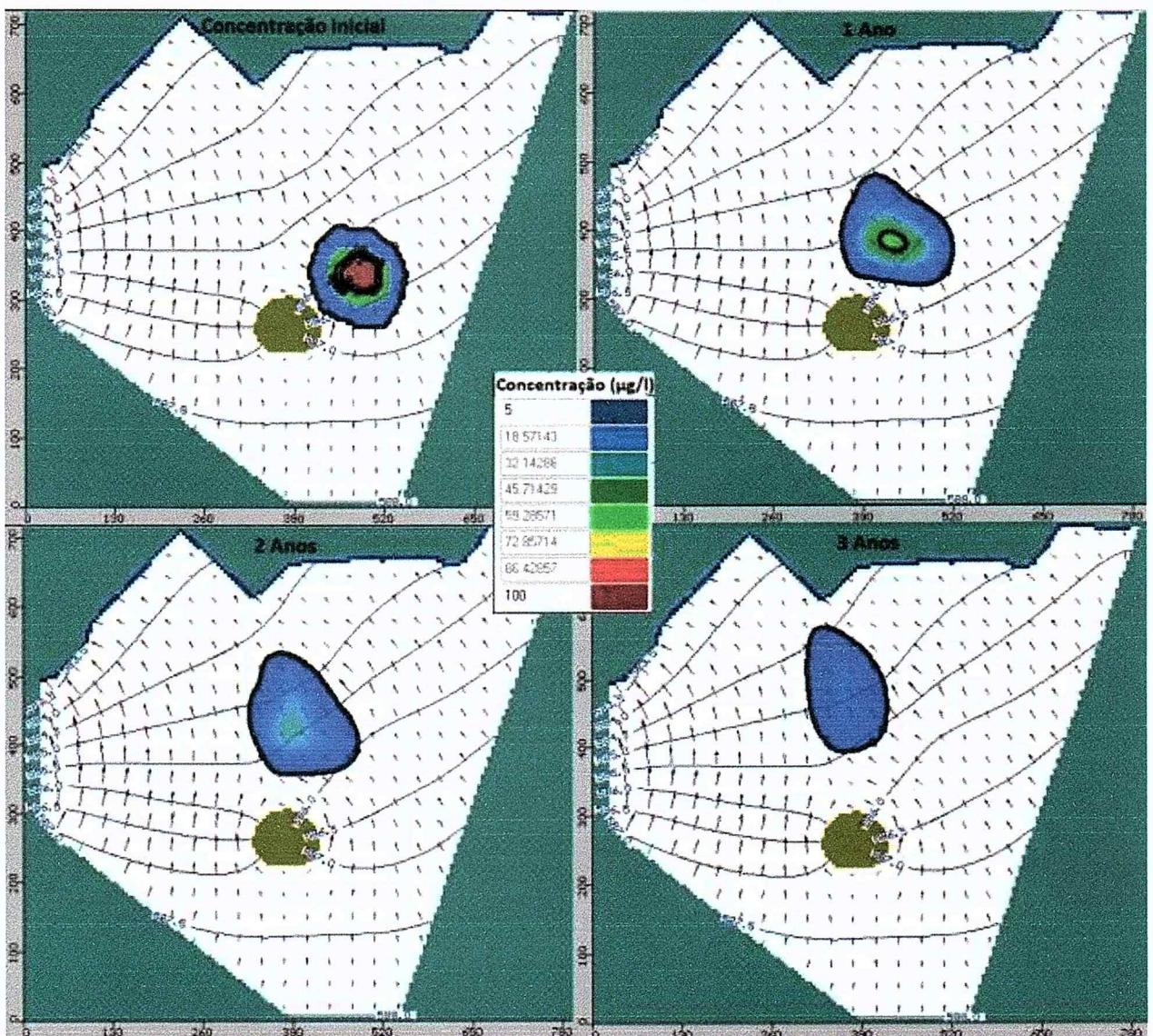


Gráfico 2. Vazão de cada poço calculada por cada um dos algoritmos de otimização. Cenário 1, otimização de instalação e operação da barreira.

Tabela 2. Custos totais para a proposta de otimização do cenário 1. *Santos (2009).

	Valores Unitários	Algoritmo Genético	Simulated Annealing	Tabu Search
volume anual bombeado (m ³)	-	31.9 mil	21.1 mil	26.2 mil
Custo anual de bombeamento e tratamento (R\$/m ³)	46*	1.460 mil	900 mil	1.200 mil
Custo anual de monitoramento da área	200 mil*	200 mil	200 mil	200 mil
Custo anual de energia (R\$/m ³)	2,19*	69 mil	46 mil	57 mil
Número de Poços a serem instalados	-	4	6	8
Custo de instalação dos poços (por unidade)	50 mil*	200 mil	300 mil	400 mil
Tempo de execução	-	1 ano e 2 meses	1 ano e 1 mês	2 anos
Custo Total (valor normalizado para o período de execução)	-	2.210 mil	1.610 mil	3.320 mil

Aplicando a barreira otimizada gerada pelo Algoritmo Simulated Annealing podemos acompanhar as simulações futuras da pluma de benzeno:



(desconheço a origem desta imagem)

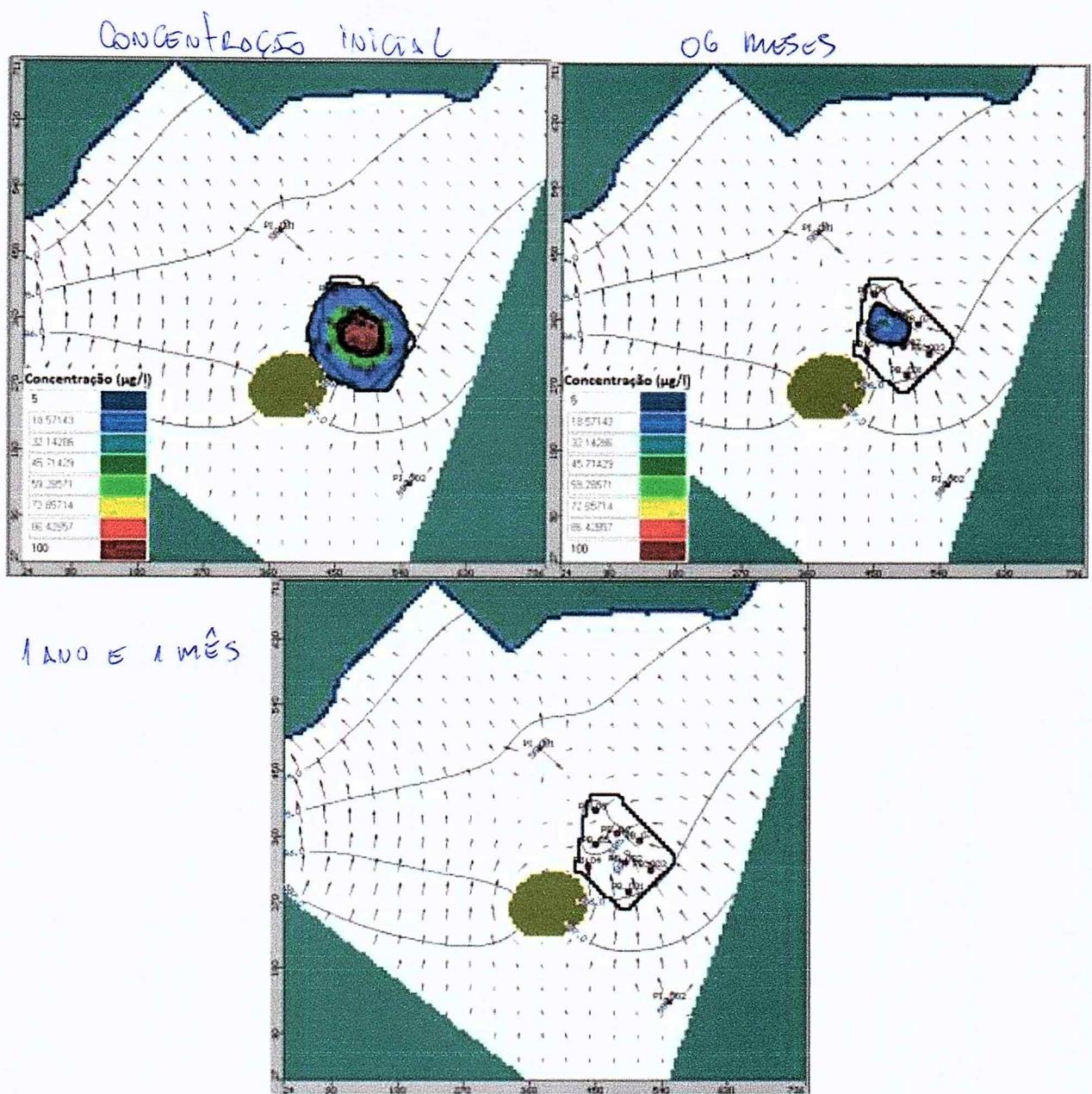


Figura 6. Evolução da pluma de benzeno no período de tratamento pela barreira otimizada pelo Simulated Annealing.

6.2.2. Otimização dos custos de operação da barreira

Foi definido também um segundo cenário, em que o custo de instalação do sistema de remediação foi desprezado em comparação ao custo de operação para realizar o tratamento do aquífero, como feito em outros casos de remediação por bombeamento e tratamento, tendo em vista os altos custos de tratamento (operação) em comparação aos custos de instalação do sistema. Para isso, foi realizada a otimização da remoção do contaminante, maximizando a massa removida, juntamente com a minimização do volume de água bombeada. A convergência dos algoritmos em direção a um ponto de mínimo global ocorreu rapidamente, para todos os algoritmos a partir da terceira interação, e o valor função objetivo se estabilizou no patamar mínimo.

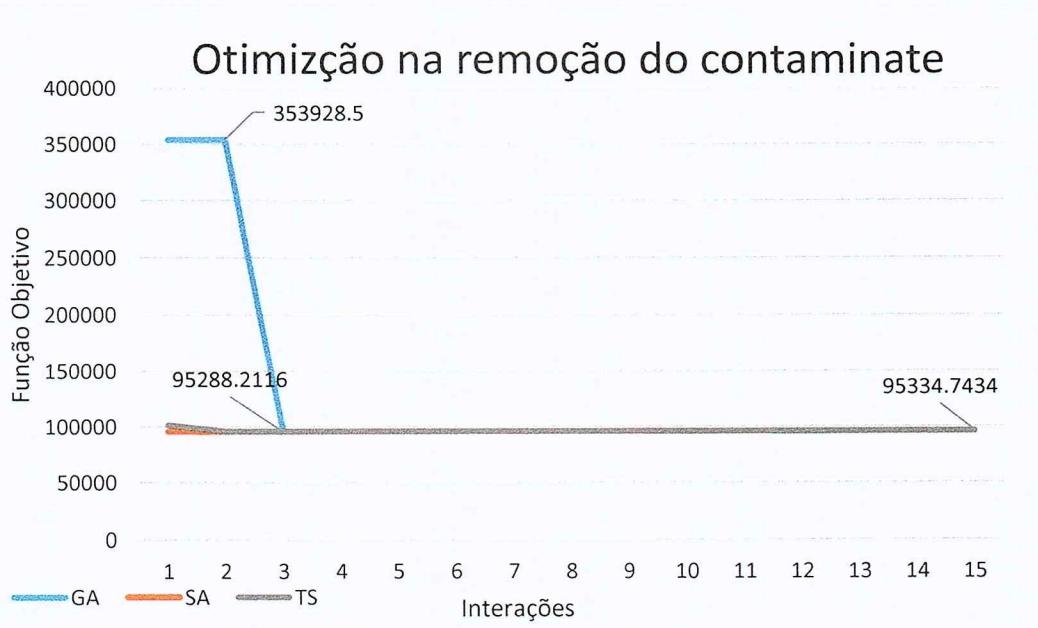


Gráfico 3. Evolução da otimização dos custos operacionais. Observa-se que em apenas 3 interações os algoritmos já haviam convergidos a um ponto de mínimo, e que continuaram estabilizados neles dentro das próximas interações.

Vazão dos poços de extração otimizados para a remoção máxima de contaminante

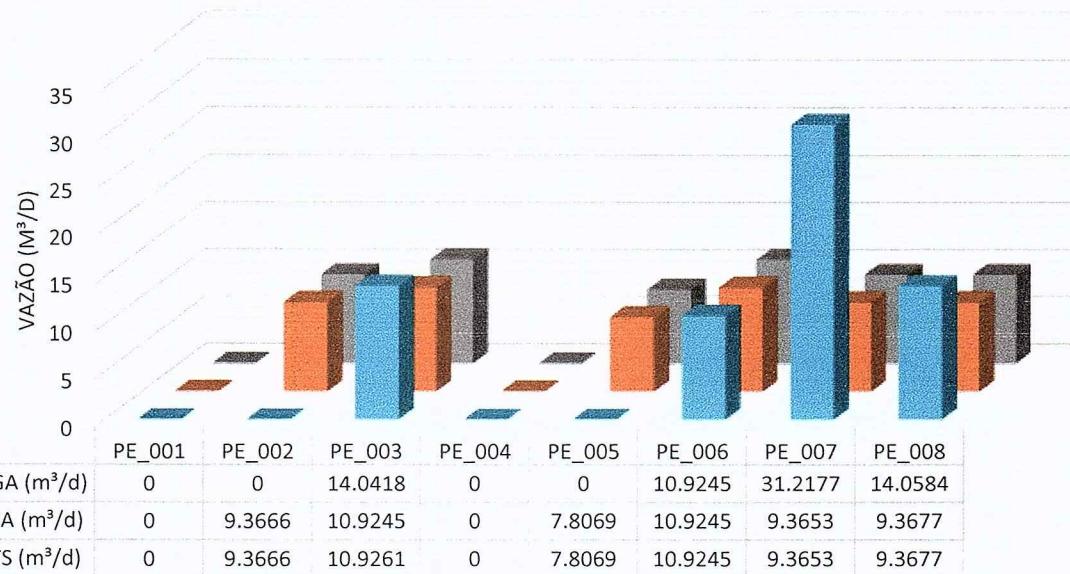


Gráfico 4. Vazão de cada poço calculada por cada um dos algoritmos de otimização. Cenário 2, otimização dos custos operacionais.

Tabela 3. Custos totais para a proposta de otimização do cenário 2. *Santos (2009).

	Valores Unitários	Algoritmo Genético	Simulated Anneling	Tabu Search
volume anual bombeado (m ³)	-	25 mil	21 mil	21 mil
Custo anual de bombeamento e tratamento (R\$/m ³)	46*	1.100 mil	969 mil	1.100 mil
Custo anual de monitoramento	200000*	200 mil	200 mil	200 mil
Custo anual de energia (R\$/m ³)	2.19*	56,1 mil	46,1 mil	46,1 mil
Número de Poços a serem instalados	-	-	-	-
Custo de instalação dos poços (por unidade)	50000*	-	-	-
Tempo de execução	-	1 ano e 2 meses	1 ano e 2 meses	1 ano e 3 meses
Custo Total (valor normalizado para o período de execução)	-	1.660 mil	1.410 mil	1.410 mil

7. CONCLUSÃO e DISCUSSÕES

O objetivo principal deste projeto foi estudar o mecanismo de funcionamento da ferramenta de otimização de poços de bombeamento MGO, e analisar os resultados oferecidos por cada um de seus três algoritmos de otimização (GA, SA e TS), aplicando-os a 2 cenários específicos de otimização para que o desempenho de cada algoritmo na busca pelo valor de ótimo global da função objetivo, fosse o único fator de variação e de influência no resultado final da otimização.

No cenário 1, para um caso de otimização total do sistema (instalação e operação), a estratégia de otimização aplicada pelo algoritmo Simulated Anneling identificou uma solução ideal com duração de 1 ano e 1 mês de tratamento, a um custo total de R\$ 1.6 mi.

Cabe destacar que estamos tratando da remoção de uma pluma de contaminante que possui em seu centro de massa, concentrações superiores a 20 vezes o limite de potabilidade indicados pelo órgão ambiental regulamentador, e dispersa em uma área de forma circular com diâmetro aproximado de 150 metros.

Esta solução proposta pelo algoritmo Simulated Annealing reduz em cerca de 50% os custos totais e o tempo de tratamento, quando comparado ao desempenho apresentado pelo algoritmo Tabu Search que teve o resultado menos otimizado entre os três algoritmos para o cenário 1.

Para o cenário 2, com o objetivo de otimização definido para a maximização da remoção da massa de contaminante, temos um desempenho muito parecido entre os algoritmos utilizados, tanto em tempo de tratamento quanto em custo de operação, indicando uma convergência para um ponto de mínimo comum da função objetivo. Os algoritmos Simulated annealing e o Tabu Search alcançaram resultados de 1 ano e 2 meses de tratamento a um custo de R\$ 1.41 mi e 1 ano e 3 meses a um custo de R\$ 1.41 mi, respectivamente. Com um acréscimo de aproximadamente 8% nos custos de operação, temos o resultado alcançado pelo Algoritmo Genético com índices de R\$ 1.66 mi de custo, e 1 ano e 2 meses de tratamento.

É importante destacar que o entendimento da heterogeneidade e das propriedades hidráulicas que caracterizam o aquífero é fundamental para que se possa definir uma estratégia de otimização e aprimoramento do processo de remediação, tendo em vista que os parâmetros a serem otimizados são ajustados e validados mediante a simulações realizadas no modelo hidrogeológico. Sendo o modelo hidrogeológico responsável pela avaliação das estratégias de otimização, qualquer desvio de representatividade do modelo hidrogeológico será propagado e comprometerá a eficiência da barreira hidráulica otimizada.

O uso da ferramenta MGO oferece uma avaliação de forma mais eficiente e a um número muito maior de combinações de vazões, localização e número de poços, que o método tradicional de busca de solução por tentativa e erro, o que resulta em ganhos significativos de tempo e de redução de custos, e aumento significativo na eficácia do sistema de remediação a ser adotado.

8. BIBLIOGRAFIA

Ahlfeld, D.P., Riefler, G. (2005), Documentation for MODFOFC—A program for solving optimal flow control problems based on MODFLOW simulation, versão 2.3: Amherst, MA, University of Massachusetts Department of Civil and Environmental Engineering, 48 p.

Anderson, M. P., Woessner, W. W. (1992) applied groundwater modeling: Simulation of flow and advective transport. San Diego: Academic Press.

CETESB – Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (2014) Relatório de qualidade de água subterrânea no Estado de São Paulo. São Paulo: CETESB.

CETESB – Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (2015) Relatório de qualidade de água subterrânea no Estado de São Paulo. São Paulo: CETESB.

Deschaine, L. M., Theodore P. L., e János D. P. (2013). *Groundwater remediation design using physics-based flow, transport, and optimization technologies*. Environmental Systems Research 2.1 (2013): 1-21.

Fernandes, A.J. (1997) Tectônica Cenozóica na Porção Média da Bacia do Rio Piracicaba e sua Aplicação à Hidrogeologia. São Paulo. 244 p. + Anexos. Tese (Doutorado em Geociências) - Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo.

Feitosa, F.; Filho, J. (1997). Hidrogeologia: conceitos e aplicações. Fortaleza: CPRM, LABHID-UFPE.

Fetter, C. W. (1994). *Applied Hydrogeology*. 3rd. University of Wisconsin-Oshkosh: Prentice Hall, 44.

Fitts, R. F. (2015). Águas Subterrâneas. 2^a ed. Rio de Janeiro: Elsevier.

Goovaerts, P. (1997). *Geostatistics for natural resources evalution*: Oxford University Press, New, York, 483p

Guo, Xiaoniu, Chuan-M. Z. e John C. B. (2007). "Successive equimarginal approach for optimal design of a pump and treat system." *Water resources research* 43.8.

Journel, A. G., & Huijbregts, C. J. (1978). *Mining geostatistics*. Academic press.

Peralta, R.C. (2004) Simulation/Optimization Modeling System (SOMOS): Logan, UT, Utah State University Department of Biological and Irrigation Engineering, accessed July 28, 2004, at URL <http://www.engineering.usu.edu/bie/>

Santos, P. H. P., Queiroz, A. P. S., de Souza Lima, F., Neto, H. L., Dib, P. P., & Mancuso, M. A. (2009). Avaliação de sistema de remediação do tipo “pump and treat” com o uso de mgo (modular groundwater optimizer)—aplicação no caso do aterro volta grande em volta redonda—rj. Águas Subterrâneas, 1.

Tucci (2005). Modelos Hidrológicos. 2^a ed. Editora URFGS.

Olea, R., (1999), *Geostatistics for engineers and earth scientists*. Kluwer Academic Publishers, Boston, 303p.

Yamamoto, J. K. 2001. Avaliação e classificação de reservas minerais. 1^a ed., São Paulo SP, Ed. Edusp.

Yamamoto, J.K.; Landim, P. M. B. (2013). *Geoestatística: conceitos e aplicações*. 1^a ed., São Paulo, SP. ED. Oficina de Textos.

Zheng, C., & Wang, P. P. (1999). MT3DMS: a modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems; documentation and user's guide. ALABAMA UNIV UNIVERSITY.

Zheng, C.; Wang, P.P. (2001). MGO - A Modular Groundwater Optimizer incorporating MODFLOW and MT3DMS, Documentation and user's guide: Tuscaloosa, AL, The University of Alabama and Groundwater Systems Research Ltd., 118 p.

Zheng, C.; Wang, P. P. (2003). *MGO–A modular groundwater optimizer incorporating modflow/mt3dms, documentation and user's guide*. University of Alabama and Groundwater Systems Research Ltd., Tuscaloosa, AL.