

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS

**ESTUDO COMPARATIVO ENTRE MODELAGEM DETERMINÍSTICA E
ESTOCÁSTICA NA AVALIAÇÃO DE EFICIÊNCIA DE UMA BARREIRA
HIDRÁULICA**

Fernando Bononi Bergamini

Orientadora: Profa. Dra. Alexandra Vieira Suhogusoff

MONOGRAFIA DE TRABALHO DE FORMATURA
(TF-2017 / 18)

SÃO PAULO

2017

Fernando Bononi Bergamini

De acordo,

Profa. Dra. Alexandra Vieira Suhogusoff

AGRADECIMENTOS

A meus tutores nesse trabalho Alexandra Vieira Suhogusoff e Luiz Ferrari, cujos conhecimentos e paciência me permitiram concluí-lo.

Sumário

ABSTRACT	5
1 INTRODUÇÃO	6
2 OBJETIVOS	6
3 ÁREA DE ESTUDO	7
3.1 Geologia	7
3.2 Relevo	8
3.3 Clima	8
3.4 Hidrogeologia	8
3.5 Uso da água subterrânea no município de Paulínia	9
4 TRABALHOS PRÉVIOS	9
4.1 Importância das águas subterrâneas	9
4.2 Modelo conceitual	11
4.3 Modelo numérico	12
4.3.1 Modflow	15
4.3.2 Contorno	15
4.3.3 Fontes e sumidouros	17
4.3.4 Recarga e evapotranspiração	17
4.4 Modelos de fluxo em meio poroso saturado	17
4.5 Equação de fluxo em meio poroso saturado	18
4.6 Modelagem determinística e estocástica	19
4.7 Análise das incertezas e da variabilidade dos modelos de fluxo	20
4.8 Processo de calibração	21
4.9 Avaliação da calibração	22
4.9.1 Erro de calibração	22
4.9.2 Erro de balanço de massa	23
4.10 Análise de sensibilidade	23
4.11 Verificação do modelo calibrado	24

5	MATERIAIS E MÉTODOS.....	25
6	RESULTADOS	25
6.1	Construção do modelo conceitual	25
6.1.1	Condições de contorno	25
6.1.2	Topografia e potencimetria	26
6.1.3	Unidades hidroestratigráficas e perfis geológicos.....	27
6.1.4	Condutividade hidráulica.....	28
6.1.5	Construção dos perfis dos poços e seções geológicas no GMS	29
6.1.6	Construção da malha do topo e da base do aquífero	29
6.1.7	Geração dos sólidos	29
6.1.8	Geração dos grids e transferência de dados	30
6.1.9	Fontes e sumidouros.....	30
6.2	Construção do modelo numérico determinístico	30
6.2.1	Calibração do modelo determinístico.....	31
6.3	Construção do modelo estocástico	32
6.4	Inserção de uma pluma de contaminação	34
6.5	Construção e eficiência da barreira hidráulica	37
6.5.1	Modelo determinístico	37
6.5.2	Modelo estocástico	37
6.5.2.1	Análise de risco.....	37
7	INTERPRETAÇÃO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	38
7.1	Modelo Conceitual.....	38
7.2	Comparação entre os modelos	38
7.3	Análise de risco	39
8	CONCLUSÕES	39
9	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	40
10	ANEXOS	42

RESUMO

A água subterrânea apresenta grande importância como fonte de consumo humano, industrial e para agricultura, devido a estar menos susceptível a contaminações antrópicas e poder ser explorada longe de rios. Os aquíferos vêm ganhando destaque, também, por causa dos problemas associados às águas superficiais — mais largamente utilizadas no Brasil —, como contaminação e concentração populacional em torno de rios, além do acesso às águas subterrâneas ter barateado nos últimos anos graças ao surgimento de novas tecnologias. Hoje, a grande maioria dos municípios brasileiros é abastecida por água subterrânea, seja de forma mista ou exclusiva, e o Sudeste é a região do País que mais a utiliza. Devido a sua grande relevância regional e nacional, é importante a preservação das águas subterrâneas, evitando-se sua contaminação e superexploração, que podem comprometer o fornecimento e a qualidade do aquífero. Nesse contexto, a modelagem é uma poderosa ferramenta para o entendimento e a previsão de deslocamento das águas subterrâneas e de contaminantes, já que permite simular, computacionalmente, uma situação real, auxiliando na projeção de cenários futuros, além de possibilitar o estudo desses fenômenos frente a alterações climáticas ou intervenções antrópicas, o que faz da modelagem um recurso muito útil na solução de problemas de campo. São utilizados modelos determinísticos e estocásticos. Modelos determinísticos são os mais adotados em trabalhos de consultoria e pesquisa, enquanto modelos estocásticos são preteridos, mesmo apresentando bons resultados pois permitem o conhecimento da incerteza associada ao meio físico. Esse trabalho pretende comparar os dois modelos na avaliação de eficiência de uma barreira hidráulica e demonstrar qual o mais apropriado para o entendimento e estudo do fluxo de águas subterrâneas de uma área a sudoeste do município de Paulínia (SP), e, também, para o planejamento e a gestão dos recursos hídricos sob a perspectiva de um tomador de decisão para uma gerência de recursos hídricos sustentável.

ABSTRACT

Groundwater is of great importance as a source of human, industrial and agricultural consumption, because it is less susceptible to anthropogenic contamination and can be exploited far from rivers. The aquifers are also gaining prominence because of the problems associated with surface water - more widely used in Brazil - such as contamination and population concentration around rivers. Besides, access to groundwater is becoming cheaper in recent years thanks to the emergence of new technologies. Today, the vast majority of Brazilian municipalities are supplied by groundwater, either in a mixed or exclusive way, and the Southeast is the region of the country that uses it the most. Due to its great regional and national relevance, it is important to preserve this good, avoiding its contamination and overexploitation, which can compromise the supply and quality of the aquifer. In this context, modeling is a powerful tool for understanding and prediction of the displacement of groundwater and contaminants, since it allows to simulate, in a computational way, a real situation, besides allowing the study of these phenomena in face of climatic changes or anthropic interventions, which makes modeling a very useful resource in solving field problems. Currently, computational modeling is the main tool for hydrogeological modeling of flow and transport, helping in representation and understanding of the phenomenon observed in the field and in the projection and prediction of future scenarios. Deterministic and stochastic models are used. Deterministic models are the most used in consulting and research, while stochastic models are deprecated, even presenting good results since they allow the knowledge of the uncertainty associated with the physical environment. This work intends to compare the two types of models in the evaluation of efficiency of a hydraulic barrier and to demonstrate which is most appropriate for understanding and studying groundwater flow of an area southwest of the city of Paulínia (SP) for planning and management of water resources from the perspective of a decision maker for a sustainable water resources management.

1 INTRODUÇÃO

As águas subterrâneas ganham cada vez mais relevância com relação às águas superficiais devido à grande abundância desse bem no território nacional e à menor ocorrência de contaminação antrópica no meio subterrâneo, fatores que favorecem seu aproveitamento. Além disso, novas tecnologias estão permitindo acesso de modo mais fácil e barato ao ambiente abaixo da superfície. Também pesa o fato das águas superficiais apresentarem cada vez mais limitações de uso por causa de fatores como concentração populacional no entorno de rios, lagos e represas e à contaminação dos cursos d'água, o que tem levado muitos municípios brasileiros a adotarem a água subterrânea como parcela significativa de abastecimento (Carvalho, 2013).

Apesar de sua crescente importância, os aquíferos apresentam grande fragilidade, já que, quando contaminados, o processo de descontaminação é de grande complexidade técnica e envolve altos custos. Também é problemática a superexploração, quando a extração em demasia compromete a disponibilidade de água. Nesse contexto, a modelagem computacional, objeto desse trabalho, tem grande relevância no estudo, no entendimento, na quantificação e na previsão do deslocamento das águas subterrâneas e das plumas de contaminação, sendo de grande valia para a resolução de problemas de campo e, portanto, para a gestão dos recursos hídricos.

A modelagem hidrogeológica de fluxo e transporte é de grande relevância no entendimento da dinâmica de aquíferos, auxiliando na previsão de cenários futuros. São utilizados modelos determinísticos, largamente empregados por consultorias, e, mais raramente, estocásticos, que permitem o conhecimento da incerteza associada ao meio físico.

Pretende-se comparar as abordagens determinística e estocástica a partir da avaliação da eficiência de uma barreira hidráulica na captura de partículas geradas por uma pluma de contaminação fictícia, de modo a demonstrar qual modelo é mais apropriado do ponto de vista de um gestor de recursos hídricos. A área de estudo escolhida se situa a sudoeste do município de Paulínia (SP).

2 OBJETIVOS

Esse Trabalho de Formatura tem como objetivo comparar modelos numéricos de fluxo de águas subterrâneas com abordagem determinística e estocástica, para um aquífero livre de porosidade intergranular, situado no município de Paulínia (SP), a partir da simulação de captura de partículas por uma barreira hidráulica. Pretende-se determinar qual o modelo mais apropriado para embasar tomadas de decisão referentes à gestão de recursos hídricos.

3 ÁREA DE ESTUDO

O município de Paulínia se encontra na porção centro-sudeste do estado de São Paulo, 130.000 metros a noroeste da cidade de São Paulo, vizinha da cidade de Campinas (Figura 3.1). A região faz parte da unidade geomorfológica da Depressão Periférica Paulista, situando-se na borda leste da Bacia do Paraná. Esta unidade apresenta altitudes entre 600 e 750 metros (Ross, 1990), com declividade suave.

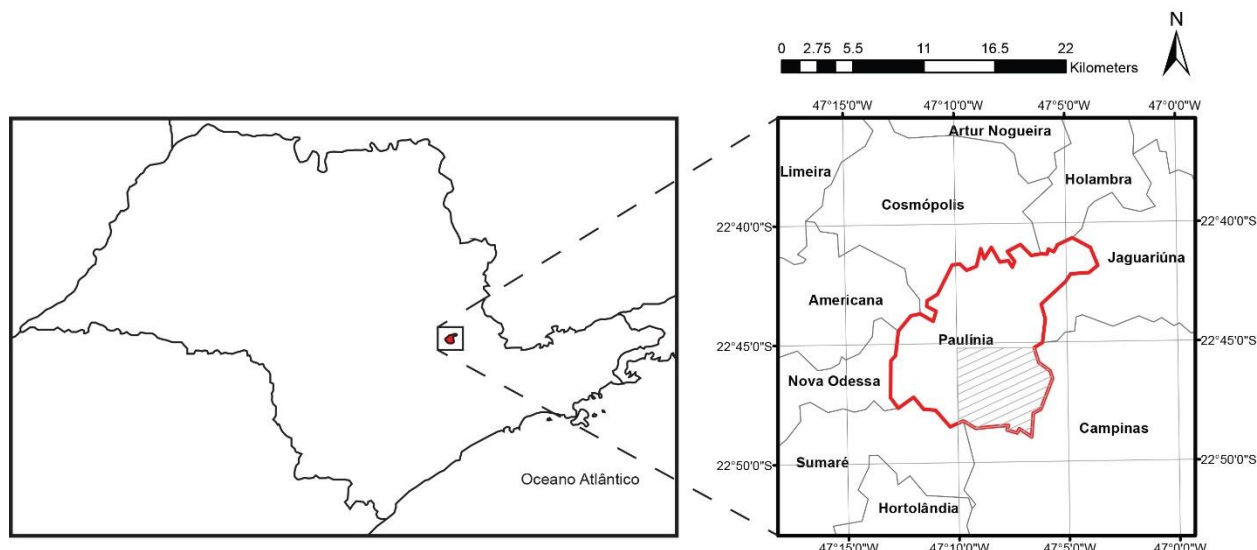


Figura 3.1 – Localização da área de estudo (área hachurada).

3.1 Geologia

O município de Paulínia está sobre sedimentos paleozoicos da Bacia do Paraná. Localmente, predominam sedimentos da Formação Itararé, do Grupo Tubarão, e, regionalmente, sedimentos da Formação Rio Claro, rochas da Formação Serra Geral e depósitos aluvionares, conforme a descrição a seguir:

- Formação Itararé: composta por diamictitos, arenitos, folhelhos e ritinitos, de origem glacial, caracterizados por estruturas sedimentares como marcas de onda, laminação cruzada e estratificação plano-paralela (Fulfaro *et al.*, 1980), sendo interpretada como de ambientes de sedimentação variados;
- Formação Serra Geral: rochas intrusivas básicas (basaltos predominantemente toleíticos), de idade cretácea, aparecem como soleiras e diques, alojadas nas rochas do Subgrupo Itararé, com espessuras variando de poucos metros a mais de 200 metros (Teramoto e Chang, 2008);
- Formação Rio Claro: apresenta cobertura sedimentar neoceno-zóica, composta por arenitos arcoseanos pouco consolidados, conglomeráticos e argilitos vermelhos (Björnberg e Landim, 1966), com estruturas sedimentares como estratificação cruzada, corte e preenchimento, e dissecação, com conteúdo fóssilífero de restos de vegetais (Schneider *et al.*, 1974);

- Depósitos aluvionares: apresentam granulação variada, argilas e cascalhos inconsolidados, de idade holocênica, sendo depósitos de calha e/ou terraços associados aos rios principais da área estudada.

3.2 Relevo

O município de Paulínia apresenta relevo suave e ondulado, sem grandes variações de altitude, com valor médio de 585 metros (Brollo, 2001). A forma de relevo que se destaca são planícies fluviais com declividades menores que 2%, colinas amplas com declividades entre 2% e 12%, amplitudes de 15 a 130 metros, com relevo pouco dissecado. Também é composto por pequenas colinas localizadas próximas à área do Minipantanal, com declividades entre 4% e 17% e amplitudes de 25 a 105 metros, com relevo muito dissecado (Brollo, 2001).

3.3 Clima

Segundo a classificação de Koeppen, baseada em dados mensais pluviométricos e termométricos, a área de estudo apresenta clima do tipo Cwa, que abrange toda a porção central do estado de São Paulo, definido como tropical de altitude, com chuvas no verão e seca no inverno, com temperaturas médias mensais acima dos 22°C (Cepagri, 2017).

3.4 Hidrogeologia

Existem quatro grandes sistemas aquíferos na região (Teramoto, 2007): Sistema Aquífero Cristalino, Sistema Aquífero Tubarão, Sistema Aquífero Diabásio e Sistema Aquífero Cenozóico, com dinâmicas de fluxo, distribuição e características hidráulicas distintas. Essas unidades são descritas a seguir:

- Sistema Aquífero Cristalino – composto por rochas graníticas e metassedimentares, apresenta porosidade secundária, com fraturas e falhas (fator responsável pela forte anisotropia e heterogeneidade dessa unidade), e vazão específica de 0,28 m³/h.m (Teramoto, 2007; Pereira *et al.*, 2004).

- Sistema Aquífero Tubarão – representado por litotipos do Subgrupo Itararé, possui características hidráulicas bastante variáveis, conforme a variação litológica (Teramoto, 2007). De maneira geral, apresenta baixa explotabilidade, com valores médios de capacidade específica da ordem de 0,11 m³/h.m, o que reflete o predomínio de rochas pouco permeáveis, como ritmitos e siltitos, com lentes e camadas arenosas com espessuras inferiores a 10 metros (Pereira *et al.*, 2004; Teramoto, 2007). O aquífero tem espessura média em torno de 100 metros e se apresenta tanto na forma livre como confinado, sendo essa última a que predomina devido a condições impostas por litologias pouco permeáveis e *sills* de diabásio sobrepostos a lentes de arenitos (Teramoto, 2007).

- Sistema Aquífero Diabásio – as rochas que compõem esse aquífero possuem espessuras que variam desde poucos metros a mais de 200 metros (Teramoto, 2007). Com reologia estritamente rúptil, o aquífero é do tipo fissural, com circulação de água através de juntas e fraturas e apresenta capacidade específica de 0,6 m³/h.m (Teramoto, 2007; Pereira *et al.*, 2004).

- Sistema Aquífero Cenozoico – esse sistema é representado por depósitos correlatos à Formação Rio Claro, somados a extensos depósitos terciário-quaternários e depósitos aluvionares quaternários, em vales dos principais rios da região, com espessuras pouco expressivas de até algumas dezenas de metros, situando-se acima dos demais sistemas aquíferos (Teramoto, 2007).

3.5 Uso da água subterrânea no município de Paulínia

O município de Paulínia apresenta uma população de 40.068 habitantes, com 81 poços registrados, 87 poços estimados (2,17 poços para cada 1000 habitantes), dos quais 4 (4,6%) são usados para agricultura, 2 (2,3%) para mineração, 46 (52,9%) para uso industrial, 26 (29,9%) para uso comercial, 6 (6,9%) são privados e 3 (3,4%) são para abastecimento público (Pereira e Silva, 2004). Como comparação, a cidade de Campinas apresenta 873.612 habitantes, 672 poços registrados, 806 poços estimados (0,92 poços para cada 1000 habitantes), dos quais 137 (17,0%) são destinados à agricultura e criação de gado, 8 (1,0%) à mineração, 209 (25,9%) à indústria, 137 (17,0%) ao comércio, 217 (26,9%) ao abastecimento privado e 98 (12,6%) ao abastecimento público (Pereira e Silva, 2004). Nota-se que Paulínia apresenta uma maior quantidade de poços de água subterrânea por habitante do que Campinas (2,17 poços/1000 habitantes e 0,92 poços/1000 habitantes, respectivamente), assim como uma maior destinação desses poços à indústria do que a cidade vizinha (52,9% e 25,9%, respectivamente).

4 TRABALHOS PRÉVIOS

4.1 Importância das águas subterrâneas

Estima-se que 30% da água doce do planeta e 96% da água disponível para consumo sejam subterrâneas (MMA, 2007). Além do grande manancial, as águas de aquíferos apresentam vantagens sobre as superficiais, dentre elas (Carvalho, 2013; MMA, 2007): têm menor custo de captação para pequenas e médias produções; estão menos susceptíveis às variações sazonais; são mais acessíveis, podendo ser aproveitadas distante de rios; apresentam menor impacto ambiental e boa qualidade para consumo, além de estarem mais protegidas de agentes poluidores antrópicos.

As Regiões Hidrográficas do Atlântico Sudeste e do Paraná abrangem a quase totalidade da região Sudeste do Brasil. A primeira tem uma população total de 28,2 milhões, disponibilidade

hídrica de águas superficiais de 1.145 m³/s e 146 m³/s de águas subterrâneas (11,31% do total), enquanto a segunda tem uma população total de 61,3 milhões, disponibilidade hídrica de águas superficiais de 5.956 m³/s e 1.437 m³/s de águas subterrâneas (19,44% do total) (ANA, 2013).

O Brasil conta com uma capacidade total instalada de produção de água (superficial e subterrânea) em operação de 587 m³/s, com a região Sudeste correspondendo a 51% do total, devido à alta concentração populacional (ANA, 2013). A grande maioria dos municípios brasileiros (4770 sedes municipais, ou 86% do total) apresentam abastecimento por sistemas isolados (não conectados à rede pública), servindo 83 milhões de habitantes (ANA, 2013). Dentre os sistemas isolados, 44% são abastecidos exclusivamente por águas subterrâneas e 56% são abastecidos por águas superficiais ou poços, complementarmente (ANA, 2013).

De acordo com dados do estudo *Atlas Brasil - Abastecimento Urbano de Água* (ANA, 2013), 47% dos municípios brasileiros são abastecidos exclusivamente por mananciais superficiais, 39% exclusivamente por águas subterrâneas e 14% pelos dois tipos de mananciais (abastecimento misto). Nos Estados do Piauí, Maranhão, Mato Grosso do Sul, Pará, Amazonas, Roraima e Tocantins, os municípios são predominantemente abastecidos por mananciais subterrâneos, pois apresentam aquíferos com elevado potencial hídrico e simplicidade operacional de abastecimento por poços para pequenos municípios (ANA, 2013). O Estado de São Paulo é o maior consumidor, com aproximadamente 80% dos municípios abastecidos, total ou parcialmente, por água subterrânea (CETESB, 2010). As capitais Boa Vista (RR), Maceió (AL), Natal (RN) e São Luís (MA) são abastecidas predominantemente por poços (ANA, 2013). Também se destacam as cidades Ribeirão Preto (SP), Maceió (AL), Mossoró (RN) e Manaus (AM) como completamente dependentes de águas subterrâneas (MMA, 2007).

Conforme visto, a preservação e o bom uso desse recurso são de extrema relevância, devendo-se evitar sua superexploração e contaminação. A superexploração, segundo Hirata *et al.* (2012), é o conjunto de extrações a que o aquífero está submetido além da capacidade de demanda, o que pode acarretar em exaustão do aquífero, subsidência do terreno, elevação da extração do custo da água, degradação da qualidade da água (pela indução de águas salinas ou contaminadas) e redução dos níveis de base de rios e outros corpos d'água. Já a contaminação pode comprometer a qualidade do aquífero e tornar sua utilização dispendiosa, devido aos altos custos envolvidos na remediação e recuperação, podendo, inclusive, inviabilizar seu aproveitamento (Wottrich, 2012).

Para os dois problemas apresentados (superexploração e contaminação), a construção de modelos hidrogeológicos de fluxo e transporte apresenta-se como ferramenta muito útil para a resolução de problemas de campo, possibilitando a representação e o entendimento desses

fenômenos (Wottrich, 2012), além de permitir o entendimento do comportamento de aquíferos frente a mudanças climáticas ou intervenções antrópicas.

Devido a sua grande importância, o manancial subterrâneo é uma boa alternativa para suprir a crescente demanda por água em regiões que apresentem condições favoráveis, principalmente nos centros urbanos, devido às dificuldades espaciais de se aumentar a oferta de águas superficiais.

4.2 Modelo conceitual

A primeira etapa do protocolo de modelagem consiste em estabelecer o propósito do modelo conceitual a partir do seu uso (predição, interpretação ou apenas como exercício de modelagem), levando-se em conta quais questões o modelo deve responder e se modelagem é a melhor abordagem (Anderson e Woessner, 1992).

O modelo conceitual é uma representação do sistema de fluxo da água subterrânea. Serve para melhorar o entendimento sobre o comportamento do aquífero e para organizar as informações de campo para que o sistema possa ser melhor compreendido (Anderson e Woessner, 1992). As fontes de informação para a construção do modelo conceitual são relatórios locais sobre geologia, hidrologia, *logs* de sondagens, dados de pesquisa geofísica e testemunhos de sondagens (Zheng e Bennett, 2002). É necessária uma simplificação, já que a completa reconstrução do sistema não é possível (Zheng e Bennett, 2002).

São utilizados os seguintes itens para a elaboração do modelo conceitual (Moore, 1979):

1. Da estrutura física
 - a. Seções geológicas;
 - b. Mapa topográfico com representação dos corpos d'água e seus divisores;
 - c. Mapas de contorno com a topografia da base do aquífero;
2. Da estrutura hidrogeológica
 - a. Mapas potenciométricos do aquífero;
 - b. Mapa e seção geológica mostrando as cargas hidráulicas e taxas de descarga;
 - c. Mapa e seção geológica mostrando os valores de condutividade hidráulica;
 - d. Distribuição espacial das taxas de evapotranspiração e recarga do aquífero.

Para desenvolver o modelo conceitual é preciso explorar e resumir os principais mecanismos que governam o fluxo do local, encontrar as premissas para representar a situação real e estabelecer a estrutura do modelo (quantidade de dimensões, tipo de modelo etc) (Spitz e Moreno, 1996).

Teoricamente, quanto mais próximo da situação de campo o modelo estiver, melhor o resultado do modelo numérico, sabendo-se que são necessárias simplificações, porém, mantendo um grau de complexidade suficiente para reproduzir a situação de campo (Anderson e Woessner, 1992). É fundamental uma correta representação das condições hidrogeológicas e ter em vista que erros no modelo conceitual são os principais responsáveis por falhas dos modelos numéricos (Anderson e Woessner, 1992).

O primeiro passo na construção do modelo conceitual é a delimitação dos limites da área de estudo, também conhecidos como condições de contorno (Anderson e Woessner, 1992). Nessa etapa, são determinados os valores dos parâmetros relevantes para o modelo, como cargas hidráulicas e condições de fluxo, ao longo desses limites (Anderson e Woessner, 1992).

Na modelagem regional de sistemas de fluxo, aquíferos e camadas confinantes são definidos através do conceito de unidades hidroestratigráficas (Maxey, 1964), que, de maneira simplificada, compreende unidades geológicas com características físicas (como porosidade, condutividade hidráulica, dentre outras) semelhantes. Essas unidades podem compreender diversas formações geológicas, da mesma forma que uma unidade geológica pode compreender mais de um aquífero (Anderson e Woessner, 1992).

Fazem parte do modelo conceitual as fontes de entrada de água (recarga de água subterrânea através da chuva, escoamento superficial ou recarga através de corpos superficiais), direções de fluxo e pontos de saída (escoamento superficial e fluxos subterrâneos para cursos ou corpos d'água, evapotranspiração e bombeamento de poços – caso exista esse tipo de poço na área) (Anderson e Woessner, 1992).

O balanço de massa é realizado com os dados de campo de modo a dimensionar os fluxos de entrada e saída, assim como o armazenamento ou a perda d'água, e, a partir dessas informações, é feita a calibração (Anderson e Woessner, 1992).

Modelos de fluxo de água subterrânea podem ser classificados como: estáticos ou transientes, confinados ou livres, e podem apresentar uma, duas ou três dimensões, de modo que as dimensões espaciais são a característica mais relevante na elaboração do *grid* do modelo numérico (Anderson e Woessner, 1992).

4.3 Modelo numérico

Em modelagem numérica, a questão da continuidade do domínio é resolvida ao se discretizar o domínio (dividir em unidades menores), transformando-o em uma matriz de nós e diferenças finitas entre cada nó (Anderson e Woessner, 1992). São utilizados triângulos e

quadriláteros para *grids* bidimensionais, e tetraedros, hexaedros e prismas para *grids* tridimensionais, tendo como base de interpolação a determinação da natureza do tipo de *grid* utilizado pelo modelo (linear, quadrático ou cúbico) (Anderson e Woessner, 1992). O tamanho do *grid* é determinado pelo modelo conceitual e pelo tipo de modelo utilizado e existem dois tipos de *grids*, os centrados nos blocos e os centrados na malha (Figura 4.3.1) (Anderson e Woessner, 1992). Os *grids* apresentam como principal diferença a forma como os limites de fluxo são determinados: para o centrado no bloco, os limites se encontram na extremidade do bloco, enquanto, para o centrado na malha, os limites coincidem com os nós (Anderson e Woessner, 1992). O GMS e o MODFLOW (programa executado dentro do GMS), utilizados nesse trabalho, se baseiam no *grid* centrado no bloco.

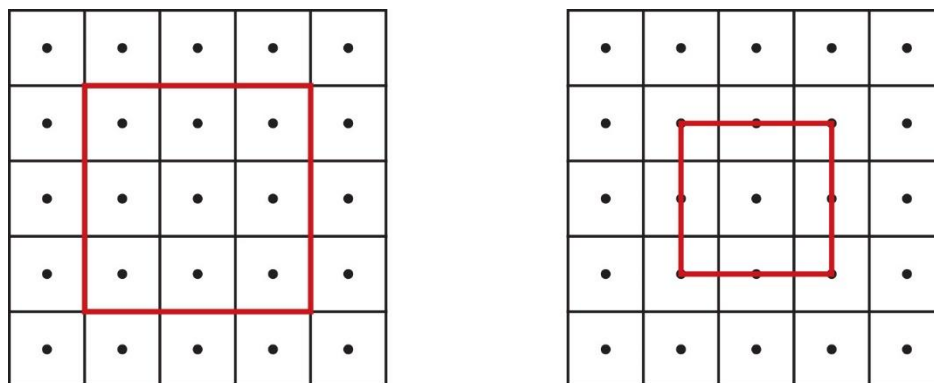


Figura 4.3.1 - Tipos de *grids*: centrado no bloco (à esquerda) e centrado na malha (à direita) (adaptado de Anderson e Woessner, 1992).

A quantidade de camadas necessárias para o *grid* está relacionada à quantidade de unidades hidroestratigráficas existente: para cada unidade associa-se, geralmente, uma camada e o modelo conceitual ajuda na determinação da quantidade de unidades existentes (Anderson e Woessner, 1992). Apesar disso, em termos práticos, é usual ter um número maior de camadas numéricas do que o número de unidades, pois isso facilita o processamento numérico pelo software MODFLOW (ver item 4.3.1).

O *grid* deve ser orientado como uma sobreposição da área a ser modelada, orientando os eixos X e Y das coordenadas colinearmente aos eixos Kx e Ky do *grid* (Figura 4.3.2), enquanto o eixo vertical deve ficar alinhado com o eixo Kz do *grid*, embora isso implique em desprezar eventuais leves mergulhos das camadas litológicas e assumir que o ângulo entre o mergulho e o plano horizontal seja muito pequeno (Anderson e Woessner, 1992). Para aquíferos isotrópicos, a

orientação do *grid* não é crítica, apenas recomendável para minimizar o número de células vazias (Kresic, 2007).

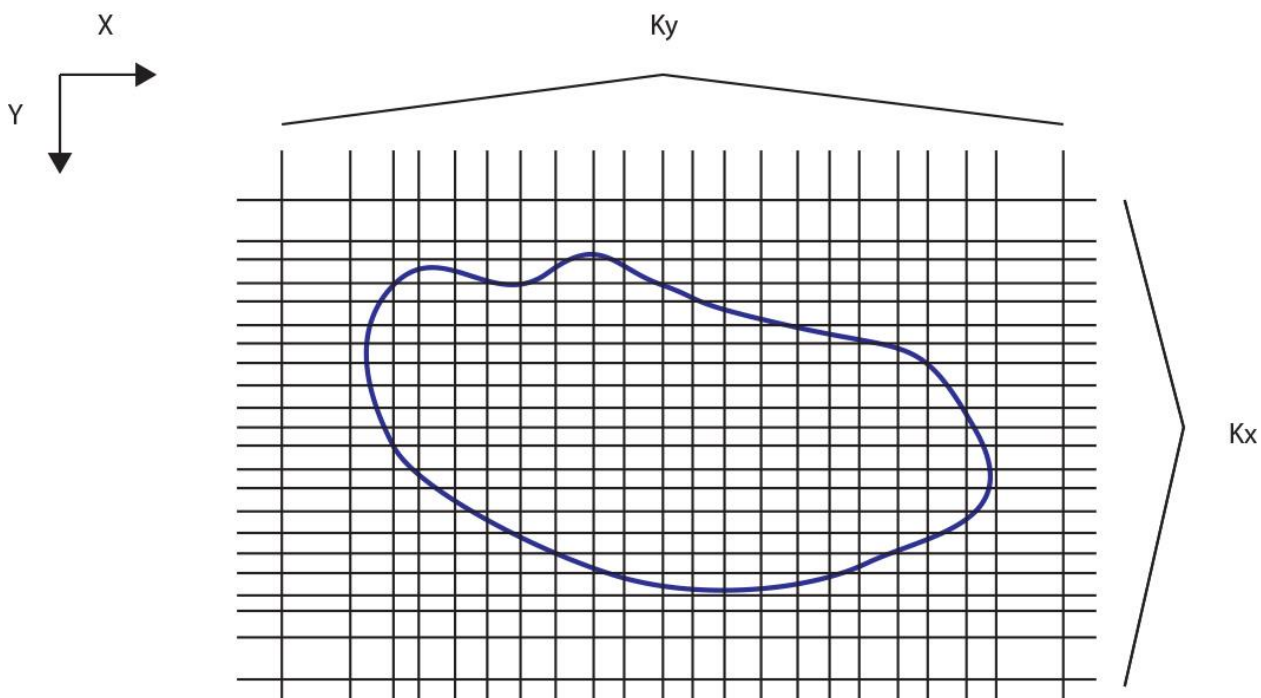


Figura 4.3.2: Representação bidimensional (em planta) de condições de contorno de uma área hipotética, com coordenadas geográficas (X e Y) colineares com as coordenadas do *grid* (Kx e Ky)

O espaçamento é um fator muito importante no desenho do *grid*, já que a distância entre os nós horizontais é uma função da curvatura esperada da superfície potenciométrica, de modo que menores espaçamentos nodais serão necessários para definir superfícies muito curvadas e mudanças das cargas hidráulicas na direção vertical influenciarão a seleção do espaçamento nodal vertical (Anderson e Woessner, 1992). Da mesma forma, a variabilidade do aquífero tem relação com o espaçamento, já que quanto mais heterogêneo menor o espaçamento entre nós, principalmente com relação a variações verticais de cargas hidráulicas, cujos gradientes são mais perceptíveis em uma área do que as variações horizontais, que ocorrem em uma extensão maior de terreno (Anderson e Woessner, 1992). O tamanho da área modelada também deve ser levado em conta, através da utilização de espaçamentos maiores para grandes áreas (de modo a reduzir o tempo de processamento do computador) e menores para representar nós de rios e de poços de bombeamento, e deve-se considerar que a recarga pode mudar significativamente de uma célula ou elemento para outro (Anderson e Woessner, 1992).

Os dados necessários para modelagem de fluxo de águas subterrâneas podem ser divididos em duas categorias: (1) dados do meio físico, responsáveis por definir a geometria do sistema, incluindo a espessura e extensão das unidades hidroestratigráficas, medidas de carga hidráulicas e fluxos, necessários para construir o modelo conceitual e realizar a calibração do modelo, e; (2) informações hidrogeológicas, úteis para definir as propriedades do aquífero (Anderson e Woessner, 1992).

Para a transferência dos dados de campo para o *grid*, é necessário que os valores dos parâmetros estejam de acordo com a escala do modelo e que eles sejam compatíveis (Anderson e Woessner, 1992). Atribuir valores de parâmetros ao *grid* exige interpolação de dados (krigagem é o método mais empregado), já que cada nó, célula ou elemento deve conter um conjunto de dados, e, sabe-se, dados de campo são geralmente escassos (Anderson e Woessner, 1992).

4.3.1 Modflow

O MODFLOW é um código de diferença finita centrado no bloco que vem embutido no programa GMS e considera um sistema tridimensional como uma sequência de camadas de material poroso que pode simular aquíferos bidimensionais ou tridimensionais, confinados, semiconfinados, livres e mistos (Anderson e Woessner, 1992). O *grid* horizontal é criado através da determinação das dimensões X e Y, para o qual não é necessário determinar a matriz vertical (Δz), especificada indiretamente através da inserção de camadas com valores de condutividade hidráulica (Anderson e Woessner, 1992). O MODFLOW é o código usado para resolver as equações de fluxo desse trabalho.

4.3.2 Contorno

Condições de contorno são condições matemáticas que especificam a carga hidráulica ou o fluxo nos limites do domínio e sua correta determinação é de grande importância no desenho do modelo (Anderson e Woessner, 1992). A especificação dessas condições é a etapa mais susceptível a erros e pode comprometer seriamente a qualidade do modelo (Franke e Reilly, 1987).

Existem limites físicos de fluxo de água subterrânea, como a presença de uma rocha impermeável, um contato geológico, um lago ou uma falha geológica, que podem influenciar, de maneira permanente, o padrão do fluxo d'água do aquífero (Kresic, 2007). Também existem barreiras cuja delimitação implica em certa subjetividade. Essas barreiras podem surgir em decorrência de condições hidrológicas, como divisores de águas subterrâneas e linhas de fluxo ou linhas de *no-flow* (zonas sem fluxo) (Kresic, 2007). A Figura 4.3.2.1 mostra divisores hidráulicos de água subterrânea cujas localizações são influenciadas pela presença de feições

físicas, como baixos topográficos, rios, e altos topográficos (zona de recarga). Pode-se observar um sistema de fluxo próximo à superfície (local) e outro mais profundo (regional), separados por divisores que podem ser deslocados ou simplesmente deixarem de existir em função de alterações nas condições geológicas ou hidrológicas.

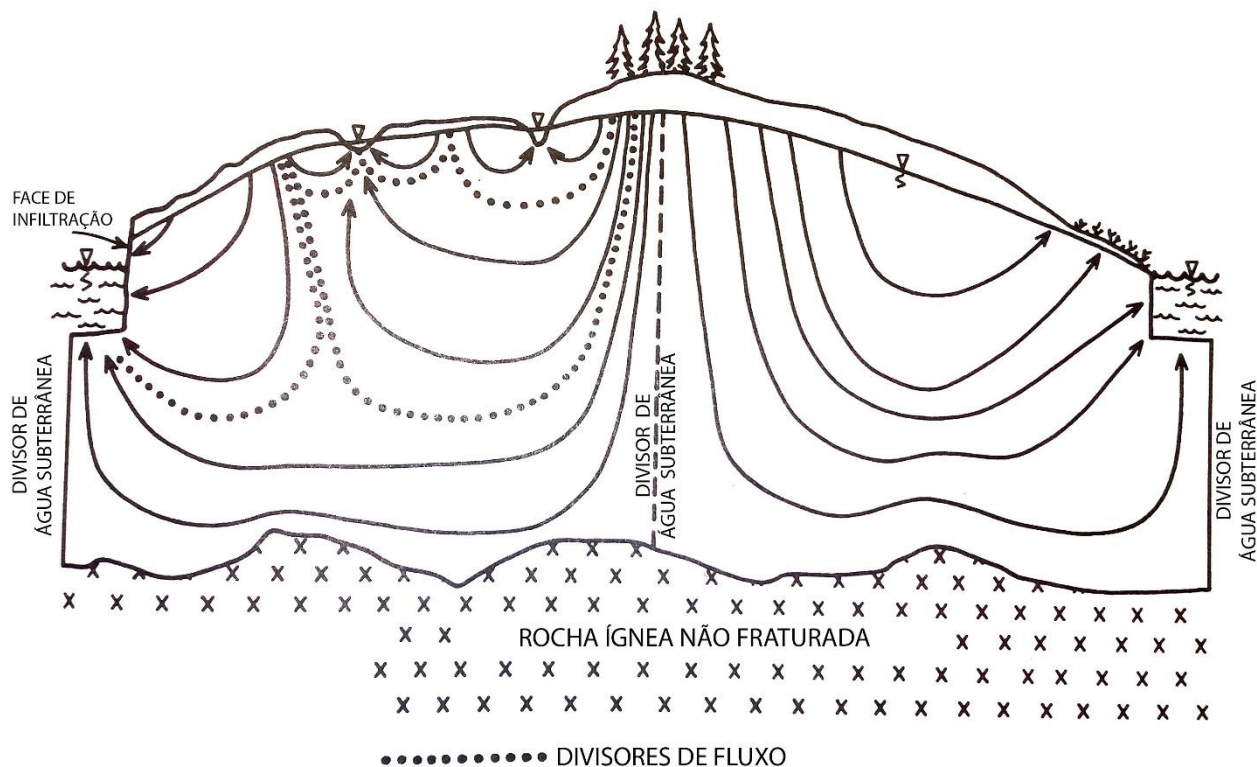


Figura 4.3.2.1: Barreiras físicas (rochas do embasamento) e hidráulicas (divisores de águas subterrâneas e linhas de fluxo) (extraído de Anderson e Woessner, 1992).

Contornos hidrogeológicos são representados por três tipos de condições matemáticas (Anderson e Woessner, 1992):

- 1) Contorno tipo 1: com cargas hidráulicas conhecidas, para o qual as cargas são fornecidas;
- 2) Contorno tipo 2: com fluxo conhecido, para o qual o fluxo que atravessa o contorno é fornecido. Também existe a condição de contorno sem fluxo, se o fluxo for igual a zero;
- 3) Contorno tipo 3: com fluxo dependente da carga hidráulica, para o qual o fluxo que atravessa o contorno é calculado a partir de um valor da carga hidráulica do contorno (também chamado de condição de contorno mista, pois relaciona contorno de carga hidráulica a contorno de fluxo).

Ao determinar as condições de contorno, o modelador deve tentar visualizar a direção do fluxo, se o fluxo simulado está de acordo com o verificado no modelo conceitual de modo que seja levado em conta, quando possível, contornos físicos, como o embasamento, por não se alterarem com o tempo (Anderson e Woessner, 1992).

4.3.3 Fontes e sumidouros

Fontes e sumidouros são mecanismos pelos quais a água entra e sai do sistema, podendo ser externas (representando condições de contorno) e internas (Zheng e Bennett, 2002). As fontes externas incluem cargas hidráulicas, fluxo e células de fluxo dependentes da carga hidráulica que se encontram no contorno da área, e distinguem-se de condições de contorno apenas por terminologia ou interpretação (Zheng e Bennett, 2002).

As fontes e sumidouros internos são aquelas localizadas no interior do domínio, como poços, drenagens subterrâneas, recarga, evapotranspiração e feições superficiais (como rios e lagos), embora em modelos tridimensionais as feições superficiais sejam consideradas como condições de contorno, sendo essa, também, uma questão de terminologia (Zheng e Bennett, 2002).

4.3.4 Recarga e evapotranspiração

Recarga é o volume de água infiltrada que chega ao aquífero e se torna parte do sistema de fluxo de água subterrânea, enquanto descarga diz respeito à água subterrânea que se move em direção à superfície, saindo do lençol freático e chegando à zona não saturada ou à superfície na forma de evapotranspiração (Anderson e Woessner, 1992). A estimativa da distribuição espacial desses valores é difícil, o que faz com que os modeladores optem por usar uma fração da média anual de precipitação e evapotranspiração (Anderson e Woessner, 1992).

4.4 Modelos de fluxo em meio poroso saturado

Os modelos matemáticos são amplamente usados como ferramenta de previsão no gerenciamento de águas subterrâneas devido ao seu potencial de simular condições reais de um sistema (Wottrich, 2012).

Para construir um modelo é preciso conceber um modelo conceitual, no qual são assumidas hipóteses que, posteriormente, serão representadas da maneira mais aproximada possível por um modelo matemático através de ferramentas computacionais (Wottrich, 2012).

Os passos para a construção de um modelo matemático envolvem (Wottrich, 2012):

- Definição da geometria de todas as camadas do modelo e seus contornos;
- Discretização do volume modelado em blocos (*grids*);
- Uso de equações diferenciais que expressem a continuidade do meio físico;

- Condições iniciais e condições de contorno;
- Escolha de um algoritmo que resolva as equações diferenciais que regem o problema para cada nó de *grid* e suas condições iniciais e de contorno.

4.5 Equação de fluxo em meio poroso saturado

Para aplicação do modelo de fluxo é necessária a formulação matemática do fluxo em meios porosos saturados (Carvalho, 2013). Uma das equações que governam o fluxo das águas subterrâneas considera um meio homogêneo, isotrópico e em estado estacionário, sendo derivada por meio da combinação matemática da equação de balanço de água e da Lei de Darcy (Anderson e Woessner, 1992; Cleary, 1989).

As equações fundamentais do fluxo da água subterrânea para aquíferos confinados (Equação 4.6.1) e para aquíferos livres (Equação 4.6.2) pressupõem que a diferença entre a quantidade de água que entra e sai em um ponto (x,y,z) em um aquífero, em função do tempo, considerando o que é produzido e consumido, é igual à mudança de armazenamento em função do tempo, e as variáveis independentes são posição e tempo (Wottrich, 2012).

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) + W = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (\text{Equação 4.5.1})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x h \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y h \frac{\partial h}{\partial y} \right) + Wh = S_y \frac{\partial h}{\partial t} \quad (\text{Equação 4.5.2})$$

Onde:

- K_x , K_y e K_z = valores de condutividade hidráulica nos eixos x, y e z;
- h = carga hidráulica;
- W é a vazão injetada ($W > 0$) ou extraída ($W < 0$) por unidade de volume do aquífero;
- S_s = armazenamento específico, definido como o volume de água subtraído ou adicionado em um volume de controle por unidade de volume, por unidade de variação de carga hidráulica (h). S_s está relacionado com o mecanismo de liberação de água de um aquífero. Para aquíferos livres, a variação no armazenamento ocorre devido à alteração na posição do nível freático e a entrega de água ocorre através da porosidade efetiva do solo;
- S_y = rendimento específico, equivale à porcentagem de água que está livre para escoar sob influência da gravidade;

- $S_s \cdot \partial h / \partial t$ = taxa de variação do volume de água armazenado em um determinado volume de controle em relação ao tempo.

4.6 Modelagem determinística e estocástica

Modelos hidrogeológicos são bastante usados para representar a situação real de um aquífero e apresentam grande utilidade como ferramenta auxiliar na tomada de decisão da remediação de uma área contaminada ou na determinação dos limites de exploração de um aquífero. Podem ser divididos em modelos de fluxo, que determinam a distribuição de cargas hidráulicas ao longo do aquífero, e de transporte de solutos (Wottrich, 2012), dos quais apenas o primeiro será abordado nesse estudo.

Além de descrever a situação atual de um aquífero, modelos também são essenciais na previsão de cenários futuros para exploração de água subterrânea, para determinar a evolução de uma pluma de contaminação e a influência de um poço em uma região, ou a vulnerabilidade de um poço em uma região contaminada. Essa previsão é feita com base nos parâmetros (condutividade hidráulica, recarga, evapotranspiração, condições de contorno etc) adotados intencionalmente (para modelo determinístico) ou aleatoriamente (para modelo estocástico), permitindo estimar o deslocamento de água subterrânea e de plumas de contaminação para diferentes intervalos de tempo, de forma a auxiliar no planejamento de uso do aquífero.

O modelo determinístico é utilizado quando existe conhecimento suficiente do fenômeno tal que ele possa ser determinado por uma equação que o represente de maneira a produzir uma única solução para o problema, de modo que a incerteza sobre os parâmetros das equações possa ser determinada através da análise de sensibilidade que analisa a variação do resultado em função das variações dos parâmetros do modelo (Wottrich, 2012). No modelo estocástico, os dados de campo são compreendidos como um processo aleatório, considerados por meio do estudo de sua função de densidade de probabilidade através de um mecanismo probabilístico, fazendo uso de técnicas de simulação e permitindo a obtenção de várias soluções equiprováveis para o problema (Wottrich, 2012).

A relevância dos métodos estocástico e determinístico é evidenciada por Wottrich (2012), que comparou os dois modelos em função da condutividade hidráulica (k), obtendo diferenças significativas, principalmente em nível de detalhe, alterando até mesmo o sentido do fluxo em algumas porções da área, enquanto que, para análises mais grosseiras, modelos estocásticos e determinísticos apresentaram resultados próximos. No trabalho de Wottrich (2012), simulações com diferentes valores de condutividade hidráulicas (obtidos aleatoriamente) deram origem a modelos completamente distintos devido ao uso de diferentes valores de condutividade hidráulica. Isso evidencia que no modelo determinístico existe um conjunto de valores diversos que calibram o modelo e que podem fornecer previsões extremamente distintas, e as decisões

são tomadas com base em uma única possibilidade, que pode não ser a mais adequada. Assim, ressalta-se a confiabilidade do modelo estocástico já que são gerados diversos modelos determinísticos equiprováveis, utilizando diferentes valores de parâmetros (dentro de intervalos determinados previamente), os quais podem ocorrer na natureza, já que existe incerteza com relação a esses parâmetros e suas distribuições espaciais.

4.7 Análise das incertezas e da variabilidade dos modelos de fluxo

Incerteza é o grau de confiança que se tem sobre um dado, quanto maior a incerteza menor a confiabilidade. Apresenta um valor exato, porém, desconhecido, e pode ser oriunda da falta de informações, de simplificações, de suposições adotadas ou desconhecimento real do fenômeno (Wottrich, 2012).

Existem basicamente dois grupos de incertezas em modelos (Wottrich, 2012; Freeze *et al.*, 1990):

- Incertezas dos parâmetros: quando se desconhece o valor real do parâmetro;
- Incertezas do modelo: originada de suposições ou simplificações do processo real.

A variabilidade é uma característica intrínseca da área estudada, podendo-se citar como exemplo os diferentes valores da condutividade hidráulica em diferentes porções de uma mesma área, enquanto a incerteza pode ser diminuída aumentando-se a quantidade de dados sobre a área (Wottrich, 2012).

A maioria das incertezas geológicas diz respeito a condições de contorno adotadas no modelo (Wottrich, 2012). Nas incertezas hidrogeológicas (que são parte das incertezas geológicas), os parâmetros mais sensíveis são aqueles que regem as condições de fluxo, como a variabilidade espacial da condutividade hidráulica (k), além de parâmetros relacionados ao transporte de contaminantes: coeficiente de difusão, dispersividade, fator de retardação e taxa de decaimento (meia vida) (Wottrich, 2012).

Na abordagem determinística tem-se uma ideia da incerteza a partir da análise de sensibilidade dos parâmetros, feita através da escolha de valores dentro de um intervalo preestabelecido em relação ao valor inicial adotado e da observação de quanto a calibração variou em função dessa escolha (Wottrich, 2012). Esse método permite apenas determinar quais parâmetros são mais sensíveis, sem determinar qual a distribuição de probabilidade de ocorrência do resultado (Wottrich, 2012).

Na abordagem estocástica, a incerteza dos dados ou parâmetros é determinada por uma função densidade de probabilidade, ou pela média e variância de uma dada distribuição de probabilidade (Wottrich, 2012).

4.8 Processo de calibração

Após a construção de modelo numérico, é necessário fazer a calibração, processo pelo qual os valores dos parâmetros usados (cargas hidráulicas, taxas de fluxo etc) são ajustados até que as variáveis de saída estejam condizentes com as observadas em campo, de modo a demonstrar que o modelo é capaz de reproduzir cargas hidráulicas e fluxos medidos em campo dentro de uma margem de erro aceitável (Zheng e Bennet, 2002). Deve-se considerar o sistema como estático (o mais largamente utilizado, ocorre quando as cargas hidráulicas não variam durante o período considerado) ou transiente (quando as cargas variam), dependendo do objetivo da simulação e da disponibilidade de dados, já que para o modelo transiente são necessárias informações de diferentes períodos, (Anderson e Woessner, 1992).

Existem duas maneiras de encontrar os parâmetros do modelo para calibração (Anderson e Woessner, 1992): 1) por tentativa e erro; e 2) por estimativa automatizada. O método automatizado é adotado em larga escala nos dias de hoje.

Uma dificuldade da calibração é o fato de existirem informações para apenas alguns nós e, se os parâmetros usados no modelo não forem consistentes com os dados de campo, ocorrerá uma incorreta descrição do sistema (Anderson e Woessner, 1992). As condições de contorno também são incertas, principalmente se o contorno não corresponder aos limites físicos naturais do aquífero, embora o uso de condições de limites de cargas hidráulicas medidas auxilie no processo de calibração já que esse tipo de limite fornece ao modelo um grande número de pontos calibrados (Anderson e Woessner, 1992).

Informações sobre condutividade hidráulica e/ou transmissividade e parâmetros de armazenamento geralmente são obtidas a partir de testes no aquífero (*slug* e *bail tests*); informações sobre descarga do aquífero podem ser obtidas a partir de medidas de campo de fluxos dos rios ou de fluxo de base; medidas diretas de campo de recarga normalmente não estão disponíveis, mas é possível verificar valores máximos e mínimos plausíveis (Anderson e Woessner, 1992) em bancos de dados governamentais ou privados que fornecem os dados de evapotranspiração e pluviosidade.

Encontrar um conjunto de parâmetros (condições de contorno, cargas hidráulicas e fluxos) que coincidam, dentro de uma margem de erro, com os valores verificados em campo a partir do método de tentativa e erro não permite conhecer a incerteza dos parâmetros utilizados nem garante a melhor solução em termos estatísticos, enquanto o método automatizado permite (Anderson e Woessner, 1992). Vale ressaltar que, segundo Zheng e Bennet (2002), o método automatizado não consiste em automatizar todo o processo de calibração, mas, apenas, a

estimação dos valores dos parâmetros, sendo chamado por esse autor de método de “identificação automatizada de parâmetros”.

4.9 Avaliação da calibração

Os resultados da calibração devem ser avaliados quantitativamente e qualitativamente, embora mesmo uma avaliação quantitativa entre modelo e realidade envolva subjetividade (Anderson e Woessner, 1992).

4.9.1 Erro de calibração

A comparação entre o mapa de cargas hidráulicas medidas e estimadas fornece uma medida visual e qualitativa da similaridade entre os padrões, dando uma ideia da distribuição espacial do erro da calibração (Anderson e Woessner, 1992). Também é usual a comparação entre listas dos valores numéricos medidos e simulados, através de algum tipo de média das diferenças usada para quantificar o erro médio da calibração, de modo que o objetivo da calibração acaba por ser minimizar esse erro (Anderson e Woessner, 1992). Existem quatro maneiras de demonstrar as diferenças médias entre simulado e real:

- 1) Erro médio – média das diferenças entre as cargas medidas e simuladas, é simples de ser calculada, porém pode ter valores anulados por admitir diferenças positivas e negativas, não sendo uma boa escolha (Equação 4.9.1):

$$\frac{\Sigma((CM_1-CE_1)+(CM_2-CE_2)+(CM_3-CE_3)+\dots+(CM_n-CE_n))}{n} \quad (\text{Equação 4.9.1})$$

- 2) Erro absoluto médio – média do valor absoluto das diferenças das cargas medidas e estimadas (Equação 4.9.2):

$$\frac{\Sigma(|CM_1-CE_1|)+(|CM_2-CE_2|)+(|CM_3-CE_3|)+\dots+(|CM_n-CE_n|))}{n} \quad (\text{Equação 4.9.2})$$

- 3) Erro quadrático médio da raiz ou desvio padrão – média das diferenças quadradas das cargas medidas e simuladas (Equação 4.9.3):

$$\sqrt{\frac{\Sigma((CM_1-CE_1)^2+(CM_2-CE_2)^2+(CM_3-CE_3)^2+\dots+(CM_n-CE_n)^2)}{n}} \quad (\text{Equação 4.9.3})$$

- 4) Erro médio quadrático normalizado (EMQN) – erro quadrático médio dividido pela diferença entre a carga máxima medida (em metros) e a carga mínima medida (Equação 4.9.4):

$$100 \cdot \text{erro quadrático médio} / (\text{carga máxima} - \text{carga mínima}) \quad (\text{Equação 4.9.4})$$

onde $CM_1, CM_2, CM_3, \dots, CM_n$ são as cargas medidas dos n poços; $CE_1, CE_2, CE_3, \dots, CE_n$ são as cargas estimadas dos n poços; e n é o número de poços existentes.

Essas quatro medidas quantificam a média do erro de calibração mas não informam sobre as distribuições dos erros e não apontam regiões mal calibradas do modelo (Anderson e Woessner, 1992). O erro quadrático médio normalizado (EMQN) é usado como medida de calibração nesse trabalho, devendo ficar abaixo de 10% para que o modelo seja considerado calibrado.

4.9.2 Erro de balanço de massa

Outra maneira de verificar o erro residual dos modelos é comparar quanto entra e quanto sai de água do sistema gerado pelo MODFLOW, processo chamado de balanço de massa (Anderson e Woessner, 1992). O balanço de massas também serve para identificar erros no momento de atribuir os valores dos parâmetros usados no modelo, como condutividade hidráulica, recarga etc (Anderson e Woessner, 1992). Vale ressaltar que esse erro não apresenta relação com a qualidade dos dados usados, ele diz apenas se o MODFLOW conseguiu fazer os cálculos corretamente. O usual é que o erro do balanço de massas fique abaixo de 1%.

4.10 Análise de sensibilidade

Análise de sensibilidade é uma etapa essencial do processo de modelagem. Consiste na medida do efeito de uma mudança de um parâmetro na calibração (Zheng e Bennet, 2002) e tem como objetivo quantificar a incerteza do modelo calibrado causada pelas incertezas das estimativas dos parâmetros do aquífero, estresses e condições de contorno (Anderson e Woessner, 1992). Segundo Freeze *et al.* (1990), existe a incerteza dos valores dos parâmetros necessários para os cálculos, assim como da geometria do sistema analisado, as incertezas litológicas, estratigráficas e estruturais, o que torna esse sistema muito complexo.

A análise de sensibilidade consiste em alterar sistematicamente valores calibrados de condutividade hidráulica, parâmetros de armazenagem, recarga e condições de contorno (geralmente um parâmetro por vez, podendo-se analisar mais de um para entender as interações entre eles), dentro de intervalos plausíveis, levando à alteração da carga hidráulica cuja magnitude no modelo calibrado informa sobre a sensibilidade do modelo àquele parâmetro (Anderson e Woessner, 1992). Isso faz com que o resultado da análise de sensibilidade seja o efeito da mudança do parâmetro no valor médio do erro escolhido como critério de calibração (Anderson e Woessner, 1992). Os resultados de uma análise de sensibilidade podem ser vistos na Figura 4.10.1.

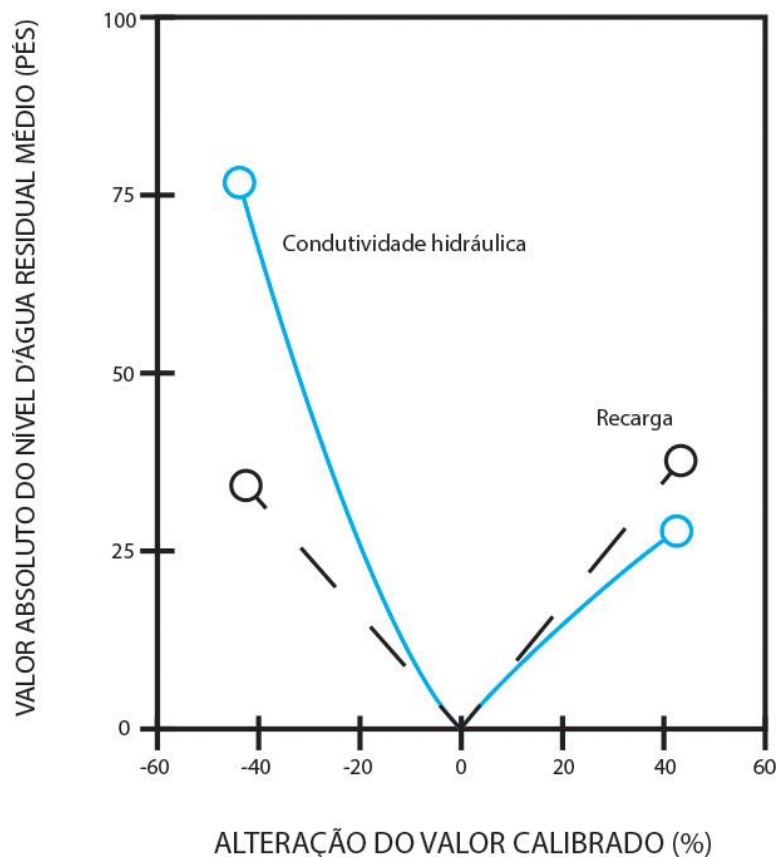


Figura 4.10.1: Resultado de análise de sensibilidade do efeito do valor a condutividade hidráulica e da recarga no valor absoluto do nível d'água residual médio (Fonte: Andreson e Woessner, 1992).

4.11 Verificação do modelo calibrado

O conjunto de parâmetros usado no modelo de calibração pode não representar corretamente valores medidos em campo devido às incertezas na calibração, da mesma forma que parâmetros calibrados podem não representar corretamente o sistema sob um conjunto diferente de condições de contorno ou estresses hidrológicos (Anderson e Woessner, 1992). De acordo com Konikow e Bredehoeft (1978), a verificação de um modelo ocorre “se sua acurácia e capacidade de previsão provarem estar dentro de limites aceitáveis de erros através de testes, independentemente dos dados de calibração”.

Na verificação são usados valores de parâmetros e estresses hidrológicos determinados durante a calibração para simular uma resposta transiente para um determinado conjunto de dados (dados transientes podem ser dados de poços de bombeamento e mudanças nos níveis d'água em períodos de seca ou longos períodos de bombeamento, ou, na ausência de dados transientes, pode-se usar um outro conjunto de dados estáticos) (Anderson e Woessner, 1992).

É comum não ser possível fazer a verificação do modelo devido à inexistência de um outro conjunto de dados de campo, o qual é necessário para a calibração, embora isso não impeça a utilização do modelo, que pode ser usado para fazer previsões desde que seja feita uma análise cuidadosa de sensibilidade tanto do modelo calibrado quanto do modelo de previsão - os modelos calibrados e não verificados têm uma maior incerteza (Anderson e Woessner, 1992).

5 MATERIAIS E MÉTODOS

Essa pesquisa consiste na realização da modelagem numérica determinística e estocástica de fluxo de águas subterrâneas de uma área situada na porção sudoeste do município de Paulínia (SP), e, também, na comparação entre esses modelos, tendo em vista cenários de captura de partículas por uma barreira hidráulica. O projeto abrange uma revisão bibliográfica sobre o tema, a definição do domínio a ser modelado e do modelo conceitual, assim como a modelagem numérica de fluxo e comparação entre os modelos determinístico e estocástico a partir da simulação da eficiência na captura de partículas por uma barreira hidráulica.

Os programas usados nessa pesquisa são:

- GMS (*Groundwater Monitoring System*), versão 10.0.14, da *Aquaveo*, para confecção do modelo numérico e geração dos modelos determinístico e estocástico, da barreira hidráulica e do modelo de captação de partículas (é importante ressaltar que o aplicativo MODFLOW, usado para resolver as equações de fluxo e gerar os modelos de fluxo de diferenças finitas, vem embutido no GMS);
- *Surfer*, versão 14, da *Golden Software*, como interpolador de dados;
- QGIS, versão 2.12, para georreferenciamento dos dados;
- *Inkscape*, versão 0,46, da *The Inkscape Team*, usado como ferramenta de desenho vetorial.

6 RESULTADOS

6.1 Construção do modelo conceitual

6.1.1 Condições de contorno

O primeiro passo na construção do modelo conceitual foi a definição das condições de contorno. Construiu-se um modelo litologicamente real, porém com condições de contorno hipotéticas, de modo a abranger a área de interesse sobre a qual existiam dados (cargas hidráulicas dos poços, informações litológicas etc). Assim, optou-se por um contorno que aproveitou características naturais (um pequeno rio com fluxo de leste para oeste, que atravessa o norte da área), além dos limites, a oeste, sul e leste, da área de interesse (Anexo 1) próximos

à indústria contratante da consultoria, escolhidos em função da disponibilidade de dados (embora existam 71 poços de monitoramento, existem apenas 19 poços multiníveis, sendo esse, portanto, um fator importante na escolha da área de estudo, já que os poços multiníveis, mais profundos, eram de grande relevância no conhecimento da geologia do local).

Nas laterais, foi usada a condição de contorno tipo 3 (ver item 4.3.2), com fluxo dependente da carga hidráulica, para o qual o fluxo que atravessa o contorno foi calculado a partir de um valor da carga hidráulica do contorno, utilizando-se os valores de cargas do mapa potenciométrico que coincidiram com os limites da área (processo feito automaticamente pelo GMS a partir do mapa potenciométrico). Sob o rio, estipulou-se que o fluxo era nulo, supondo-se que toda água que passa sob ele era capturada. O limite inferior foi definido pelo contato com o basalto (como não havia informação suficiente sobre a topografia da base, projetou-se a mesma topografia da superfície para a base, assumindo-se uma profundidade de 18 metros). O limite superior foi determinado como o topo do aquífero, a partir do mapa potenciométrico.

Com os limites definidos, passou-se à localização dos poços de monitoramento e dos poços multiníveis (Anexos 1 e 2, respectivamente), processo realizado através da importação de uma tabela com as coordenadas dos poços (Anexo 9) para o programa de georreferenciamento QGIS, versão 2.12, dentro do qual foi gerado um *shapefile* com os pontos e suas coordenadas. Como pode ser visto, há bem mais poços de monitoramento (PMs) do que multiníveis (PMNs).

6.1.2 Topografia e potencimetria

O mapa topográfico (Anexo 3) foi gerado a partir da importação da tabela com as localizações dos poços e suas respectivas cotas topográficas para o programa *Surfer*, versão 14, da *Golden Software*. Com esses dados foi feita a interpolação de modo a gerar o mapa topográfico. Como havia incerteza sobre a altimetria dos poços multiníveis, optou-se por determinar suas cotas através da interpolação das cotas dos poços de monitoramento. Feito isso, foi criado um *grid* e um mapa de curvas de nível, que foi exportado como *shapefile*. Esse *shapefile* foi importado para o QGIS, onde foram acrescentadas legendas e o PDF foi gerado. O mesmo procedimento foi feito para o mapa potenciométrico (Anexo 4), com a diferença que, ao invés das cotas topográficas, a tabela trazia as cargas hidráulicas na coluna (eixo) Z. Nesses dois mapas é possível perceber que topografia e potencimetria apresentam comportamentos semelhantes, com valores mais altos no Sul da área e mais baixos no Norte, e que, portanto, o fluxo se dá, preferencialmente, nesse sentido (S-N). Vale ressaltar que na porção extremo Norte da área os valores de cota e potencimetria voltam a subir, o que revela que nessa localidade o fluxo se dá de Norte para Sul, e que há um vale, com orientação Leste-Oeste, na porção Norte da área.

6.1.3 Unidades hidroestratigráficas e perfis geológicos

Em seguida, passou-se à construção dos perfis geológicos, de modo a visualizar as camadas existentes e conhecer o comportamento geológico delas. Os perfis foram contruídos com o programa de desenho vetorial *Inkscape*, versão 0,46, da *The Inkscape Team*. Essa etapa foi feita através da definição de perfis que contemplassem uma porção significativa da área. Foram estipuladas as seções A-A', B-B' e C-C' (Anexo 5). É importante ressaltar que as seções foram determinadas, também, em função da disponibilidade de informações sobre os poços, já que não existiam perfis construtivos de todos.

O aquífero estudado foi classificado como estático, livre e tridimensional e as unidades hidroestratigráficas podem ser vistas nas seções geológicas dos perfis A-A' (NE-SW), B-B' (NW-SE) e C-C' (NW-SE), confeccionados a partir dos perfis construtivos dos poços de monitoramento (PMs) e dos poços multiníveis (PMNs). Apesar da existência de poços rasos (PMs) e profundos (PMNs), não foram encontradas diferenças significativas (de cargas hidráulicas, de fluxo, de condutividade hidráulica ou aquíferos que fossem divididos por um aquitarde) que justificassem a divisão do aquífero em raso e profundo, tendo-se adotado um único corpo aquoso. De acordo com os *logs* descritivos das sondagens, fornecidos pela consultoria ambiental que trabalhou na área, foram identificadas seis unidades hidroestratigráficas (Tabela 6.1.3.1):

Tabela 6.1.3.1: Unidades hidroestratigráficas (ordenadas da mais superficial para a mais profunda); IDs atribuídos a cada material no GMS; valores de condutividade hidráulica horizontais e verticais (considerando água como fluido), adotados para cálculo do MODFLOW.

Unidade hidroestratigráfica	ID atribuído ao material	Condutividade hidráulica horizontal adotada (m/dia)	Condutividade hidráulica vertical adotada (m/dia)
Pavimento ou concreto	5	0,000864	0,0000864
Aterro de argila, de cor vermelha escura, com fragmentos de brita e areia	4	0,0432	0,00432
Argila orgânica, de cor preta, plástica	3	0,02	0,002
Solo argiloso ou argilo-arenoso ou areno-argiloso, de cor marrom avermelhado, pouco coeso, plástico a moderadamente plástico	2	0,06	0,006

Solo argilo-siltoso a argiloso, variegado, podendo conter um pouco de areia (de granulação fina) nas porções mais profundas, duro, moderadamente plástico (alteração de rocha)	1	0,0432	0,00432
--	---	--------	---------

Na seção A-A' foi constatado um fluxo de A' para A (SW para NE), devido à presença de maiores cargas hidráulicas na porção SW do perfil, estando de acordo com a topografia (cotas mais altas em A' e mais baixas em A).

Na seção B-B' verificou-se um leve fluxo de B' para B (de SE para NW) na porção SE da seção e inexistência de fluxo na porção central e NW, o que está de acordo com a topografia do perfil.

Na seção C-C' existe fluxo de C' para C (de SE para NW) na porção SE da seção e fluxo de C para C' (de NW para SE) na porção NW, com ausência de fluxo na porção central, o que está de acordo com os valores das cotas topográficas e revela a existência de um vale no meio do perfil. Essas seções estão de acordo com o mapa topográfico e potenciométrico.

6.1.4 Condutividade hidráulica

No que diz respeito às condutividades hidráulicas das unidades encontradas, os materiais com ID 1, 2, 3 e 4 (descritos na Tabela 6.1.3.1) são predominantemente argilosos, ocorrendo areia e silte em diferentes proporções em 1, 2 e 4. Segundo Feitosa *et al.* (2008), os valores de condutividade hidráulica para materiais não consolidados são mostrados na Tabela 6.1.4.1:

Tabela 6.1.4.1: Faixa de valores de condutividade hidráulica (considerando água como fluido) de vários materiais não consolidados (Fonte: Feitosa *et al.*, 2008).

Material	Condutividade hidráulica (m/dia)
Argila	$8,64 \times 10^{-7} - 8,64 \times 10^{-4}$
Silte; silte arenoso	$8,64 \times 10^{-4} - 8,64 \times 10^{-2}$
Areia argilosa	$8,64 \times 10^{-4} - 8,64 \times 10^{-2}$
Areia siltosa; areia fina	$8,64 \times 10^{-3} - 8,64 \times 10^{-1}$
Areia bem distribuída	$8,64 \times 10^{-1} - 8,64 \times 10^1$
Cascalho bem distribuído	$8,64 \times 10^0 - 8,64 \times 10^2$

Partindo-se do princípio que as unidades 1, 2, 3 e 4, mais relevantes para esse estudo – pois a 5 fica seca e o basalto é predominantemente impermeável – são essencialmente argilosas, com diferentes proporções de areia e silte, foram adotados valores de condutividades hidráulicas semelhantes para essas camadas. Os valores dos k horizontais foram inferidos com base nos de Feitosa *et al.* (2008). As condutividades verticais equivalem a 10% dos valores horizontais, prática comum entre modeladores. Ambos são mostrados na Tabela 6.1.3.1. O embasamento não faz parte do domínio.

6.1.5 Construção dos perfis dos poços e seções geológicas no GMS

O passo seguinte foi a importação dos dados litológicos para o GMS. Esse processo foi realizado através da confecção de uma tabela com as localizações dos poços e as cotas de cada contato entre as unidades hidroestratigráficas. O resultado pode ser visto em planta no Anexo 6 em perspectiva no Anexo 7. Com os perfis dos poços montados, foi possível construir as seções geológicas no GMS, processo feito através da conexão dos contatos litológicos entre poços vizinhos, próximos aos perfis A-A', B-B' e C-C, definidos anteriormente. O resultado dos perfis gerados pode ser visto no Anexo 8. Nessa etapa foram mantidos poços que se encontravam fora do domínio, com o intuito de deixar o modelo conceitual mais coerente e com mais informações - na construção do modelo numérico esses poços foram desconsiderados.

6.1.6 Construção da malha do topo e da base do aquífero

Para inserir as camadas que correspondem às unidades hidroestratigráficas, os materiais de cada unidade foram identificados, atribuindo-se um ID para cada (Tabela 6.1.3.1). Em seguida, foram criadas as TINs (Triangulated Irregular Network) para o topo e a base do aquífero a partir do mapa topográfico e da base do aquífero. O resultado pode ser visto no Anexo 10. TINs são uma representação digital de uma superfície, formada a partir de triângulos que unem nós gerados pela interpolação de pontos sobre os quais existem informações. Como apenas poucos poços traziam informações sobre a base do aquífero (contato com o basalto), usou-se uma profundidade que contemplasse todos os poços do domínio (18 metros) e espelhou-se a topografia da superfície para a base.

6.1.7 Geração dos sólidos

Após a construção das malhas, foram gerados os sólidos para representar as unidades que ocorrem na área, através da transferência das informações das seções, considerando como limites superior e inferior as TINs da base e do topo geradas anteriormente. O resultado pode ser visto no Anexo 11.

6.1.8 Geração dos grids e transferência de dados

O *grid* utilizado nesse trabalho foi criado a partir da importação de um *shapefile* com a delimitação do contorno para o GMS. Para efeito prático, quando o *grid* é criado, o GMS automaticamente faz um refinamento, de modo a ajustá-lo à posição dos poços, inserindo mais linhas onde são necessárias mais informações. O *grid* gerado, que contempla todo o contorno, apresentou 77 colunas, 82 linhas (ambas criadas automaticamente pelo GMS) e 10 camadas (valor determinado pelo modelador em função da quantidade de unidades hidroestratigráficas encontradas), e pode ser observado no Anexo 12.

6.1.9 Fontes e sumidouros

As fontes existentes na área são a recarga e o rio, enquanto o sumidouro é a evapotranspiração. Não existem outros elementos na área, como poços de bombeamento, lagos etc.

Para esse trabalho, a recarga foi estabelecida como o valor médio da chuva que cai sobre a área, devido à inexistência de outras fontes (como rios influentes, lagos ou áreas específicas de recarga), adotando-se como pluviosidade média 1315 mm de chuva por ano (valor obtido para a região de Campinas) (Blain *et al.*, 2009), ou 0,0036 m/dia. A água sai do sistema através da evapotranspiração, com valor médio regional de 1068 mm por ano (Blain *et al.*, 2009), ou 0,0029 m/dia.

6.2 Construção do modelo numérico determinístico

Com todos os dados inseridos no programa GMS (contorno, cargas hidráulicas, poços, litoestratigrafias, *grids*, sólidos, fontes e sumidouros), passou-se à construção do modelo numérico determinístico, que consiste em gerar uma representação cujas células contêm todas as informações que foram fornecidas através do modelo conceitual.

O modelo determinístico é construído com o MODFLOW, código computacional que resolve a equação de fluxo de água subterrânea criando um modelo de fluxo de diferenças finitas. O GMS traz embutidas as versões 2000, 2005, NWT (*Newton Formulation*), LGR (*Local Grid Refinement*) e USG (*Unstructured Grid Version*) do MODFLOW, cujas características específicas não serão abordadas neste trabalho. Foi utilizada a versão NWT, que ficou com erro no balanço de massa abaixo de 1%. As configurações dos *solvers* usadas foram deixadas nos valores *default*. O balanço de massa completo resultante pode ser visto na Tabela 6.2.1.

Tabela 6.2.1: Balanço de massa computado pelo MODFLOW (sinal positivo indica entrada de água no sistema, enquanto sinal negativo indica saída de água)

Fontes / Sumidouros	Entrada	Saída
Cargas hidráulicas constantes (m³/dia)	12.3510573	-18.35845901
Rio (m³/dia)	0.175633019	-10.51089695
Evapotranspiração (m³/dia)	0	-49.29345284
Recarga (m³/dia)	65.58193756	0
Fontes / sumidouros total (m³/dia)	78.10862788	-78.1628088
Fluxo total (m³/dia)	78.10862788	-78.1628088
Resumo	Entrada - Saída	Diferença
Fontes / Sumidouros (%)	-0.054180914	-0.069342056
Erro total de balanço de massa (%)	-0.054180914	-0.069342056

As principais fontes de entrada são recarga, com 65,58 m³/dia, cargas hidráulicas constantes, com 12,35 m³/dia, e, por último, o rio, com 0,17 m³/dia. As fontes de saída são evapotranspiração, com -49,29 m³/dia, cargas hidráulicas constantes, com -18,36 m³/dia e o rio, com -10,51 m³/dia (o sinal negativo indica que a água foi retirada do sistema). O rio retira -10,51 m³/dia e devolve 0,18 m³/dia. Os valores são considerados normais, não evidenciando nenhuma anomalia de fluxo. O mapa potenciométrico resultante do modelo numérico determinístico pode ser visto no Anexo 13.

6.2.1 Calibração do modelo determinístico

A versão do MODFLOW usada para calibrar o modelo foi a NWT, tendo em vista as cargas hidráulicas da Tabela 6.2.1 geradas pelo próprio modelo determinístico, acrescidas de um erro aleatório gaussiano de média zero e desvio padrão 0,7 m, já que não existiam cargas medidas que se referissem ao modelo hipotético construído.

A calibração ocorreu sem problemas e ficou com um erro de balanço de massa de 0,07% e erro de calibração (EMQN) de 1,33%, resultados considerados satisfatórios. O mapa de interpolação das cargas, gerado a partir das cargas calibradas, pode ser visto no Anexo 14.

Tabela 6.2.1: Cargas usadas na calibração e resultantes da calibração.

Poço	Carga usada	Carga calibrada	Poço	Carga usada	Carga calibrada
PB-01	600.8209229	600.8233643	PM-19AI	597.6703491	597.5001831
PM-07B	599.5516968	599.5516968	PM-20AI	598.0861816	598.0532837

PM-01AI	598.0489502	597.9209595	PM-21AI	597.7932739	597.8117065
PM-02AI	591.8704224	592.0974731	PM-22AI	599.5809937	599.5900879
PM-03AI	591.6564331	591.6842041	PM-23AI	597.3009033	597.2807007
PM-04AI	593.161438	593.0963135	PM-24AI	593.3695068	593.196106
PM-06AI	599.6970825	599.5062256	PM-25AI	594.0946045	594.1056519
PM-07AI	590.6246338	590.6835327	PM-26AI	589.2775269	589.276062
PM-08AI	590.5391846	590.6590576	PM-27AI	596.5183105	596.4334717
PM-09AI	591.7434082	591.7550659	PM-28AI	594.8659058	594.7182617
PM-10	595.9382935	595.8189087	PM-29AI	591.7672729	591.7868042
PM-10AI	596.532959	596.4710083	PM-30AI	596.8914795	596.8047485
PM-11bAI	593.1324463	593.0024414	PM-31AI	596.8067627	596.7503052
PM-12AI	594.6459961	594.4421997	PM-32AI	597.9435425	597.9522095
PM-13AI	590.4197998	590.508606	PM-35AI	596.2868652	596.2211304
PM-14	589.866394	589.8713379	PM-37AI	591.8667603	591.8756104
PM-14AI	588.498291	588.6160278	PM-38bAI	588.6001587	588.6968384
PM-16AI	589.572937	589.5648193	PM-39AI	589.4823608	589.4678345
PM-17AI	588.7445068	588.8217163	PM-41AI	589.7043457	589.7214355
PM-18AI	588.3759766	588.5209961			

6.3 Construção do modelo estocástico

Para a construção do modelo estocástico foi usada a mesma versão do MODFLOW, a NWT. Foram empregados, como limites para a variação dos parâmetros, o valor estipulado para a calibração dividido por três (como limite inferior) e multiplicado por três (como limite superior). A Tabela 6.3.1 mostra os valores de condutividade hidráulica adotados e a Tabela 6.3.2, os valores de recarga.

Tabela 6.3.1: Condutividades hidráulicas usadas na calibração do modelo determinístico e os limites máximos e mínimos usados para gerar o modelo estocástico.

	k horizontal (valor usado na calibração) (m/s)	k horizontal (valor mínimo-valor máximo) (m/s)	k vertical (valor usado na calibração) (m/s)	k vertical (valor mínimo-valor máximo) (m/s)
Pavimento ou concreto	0,000864	0,000288- 0,002592	0,0000864	0,0000288- 0,0002592

Aterro de argila vermelha escura, com fragmentos de brita e areia.	0,0432	0,0144-0,1296	0.00432	0,00144-0,01296
Argila orgânica, preta, plástica	0,02	0,0066-0,06	0,002	0,00066-0,006
Solo argiloso ou argilo-arenoso ou areno-argiloso, de cor marrom avermelhado, pouco coeso, plástico a moderadamente plástico	0,06	0,02-0,18	0,006	0,002-0,018
Solo argilo-siltoso a argiloso, variegado, podendo conter um pouco de areia (de granulação fina) nas porções mais profundas, duro, moderadamente plástico (alteração de rocha)	0,0432	0,0144-0,1296	0,00432	0,00144-0,01296

Tabela 6.3.2: Valor da recarga usada para calibrar o modelo determinístico e os limites máximo e mínimo usados no modelo estocástico.

Recarga usada na calibração (m ³ /dia)	Recarga mínima-recarga máxima (m ³ /dia) usadas na calibração
0,0036	0,0012-0,0108

Para compor o modelo estocástico, foram considerados os parâmetros condutividade hidráulica e recarga e foram gerados 200 modelos. Dentre esses, foram escolhidos os primeiros 100 que apresentaram erro de balanço de massa abaixo de 1% e erro de calibração abaixo de 10%. O histograma com os erros pode ser visto na Figura 6.3.1.

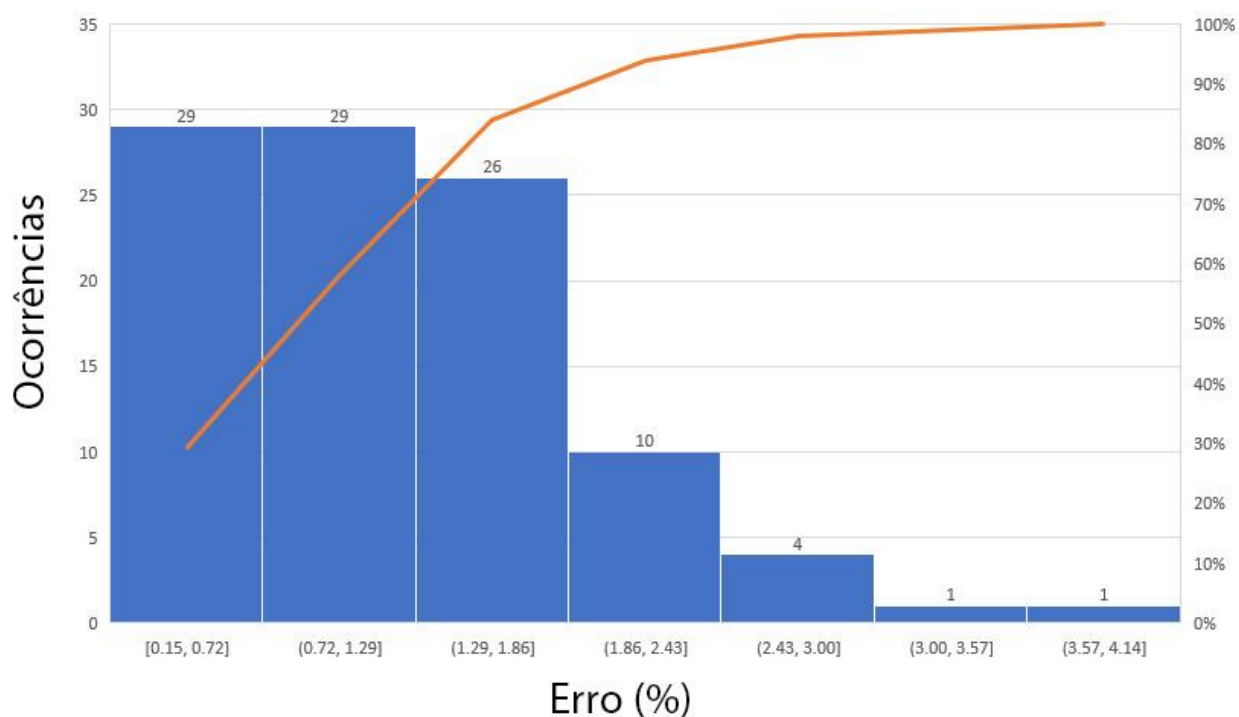


Figura 6.3.1: Distribuição de erros com relação aos parâmetros condutividade hidráulica e recarga. A linha em vermelho é o erro cumulativo.

O erro ficou entre 0,15 e 4,14 % e o desvio padrão foi de 0,752 m.

6.4 Inserção de uma pluma de contaminação

Foi inserida uma pluma fictícia de contaminação na porção centro-sudoeste da área (Figura 6.4.1) a montante do fluxo, de modo que atingisse o rio ao se deslocar. Determinou-se que, simulando uma situação real, a pluma se originaria nas camadas superficiais não secas (*layers* 4, 5, 6 e 7).

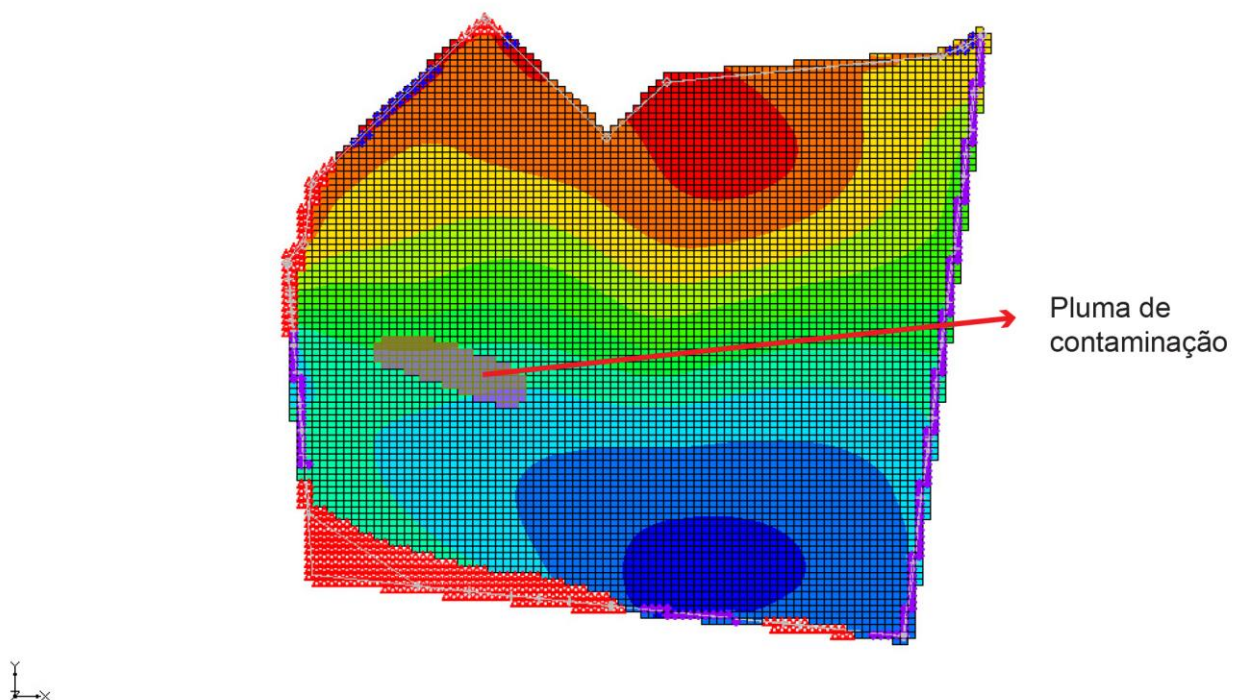


Figura 6.4.1: Visualização em planta da pluma de contaminação, situada a montante do fluxo.

Através do MODPATH, programa de rastreamento de partículas desenhado para rodar junto com o MODFLOW, gerou-se o modelo de fluxo dessas partículas em direção ao rio (Figuras 6.4.2a – vista em planta - e 6.4.2b – vista em perfil).

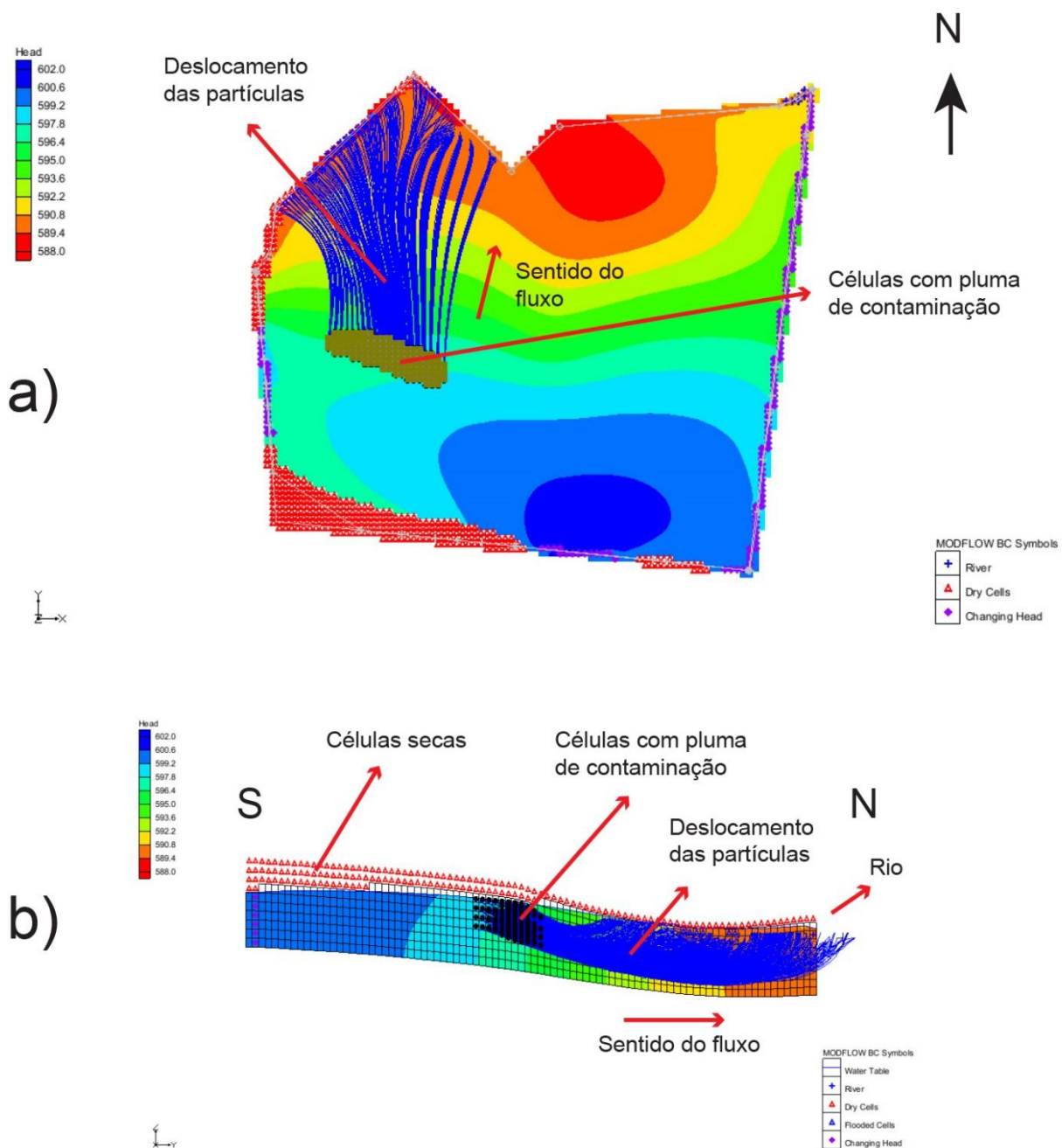


Figura 6.4.2: Deslocamento da pluma de contaminação vista em planta (a) e em seção (b).

Na Figura 6.4.2b é possível notar que há um fluxo ascendente nas camadas mais rasas, a jusante da pluma. Por conta disso, as partículas mais superficiais são deslocadas para a superfície antes de atingirem o rio, enquanto as mais profundas se deslocam por uma distância maior e chegam à drenagem.

6.5 Construção e eficiência da barreira hidráulica

6.5.1 Modelo determinístico

Com a intenção de barrar a pluma de contaminação antes que ela chegasse ao rio, foi criada uma barreira hidráulica fictícia a jusante da pluma, processo feito com o MODPATH. Para o modelo determinístico, foram testadas configurações com um e dois poços, com vazões de 5, 6 e 7 m³/dia. Dentre essas, um poço único, retirando 7 m³/dia, apresentou a melhor relação custo-benefício, impedindo que todas as partículas chegassem ao rio. O Anexo 15 mostra como ficou o aquífero após a instalação do poço. No Anexo 16 é possível ver o funcionamento da barreira para as diferentes vazões adotadas. No Anexo 16a, 16b, 16c e 16d (vazões de 5 e 6 m³/dia) é possível ver que a barreira é ineficaz, não contendo todas as partículas. No Anexo 16e e 16f (vazão de 7 m³/dia) a barreira bloqueia todas as partículas, sendo, portanto, de acordo com o modelo determinístico, a melhor configuração a ser adotada.

6.5.2 Modelo estocástico

Para rodar o modelo estocástico começou-se por testar a vazão de retirada do poço adotada no modelo determinístico, 7 m³/dia. Como no modelo estocástico foram adotados intervalos dos parâmetros k e recarga, dentro dos quais o programa escolheu valores aleatórios para testar diferentes configurações, os modelos gerados apresentam pequenas variações que podem ocorrer na natureza, já que há incerteza com relação aos valores e à disposição dos parâmetros adotados.

Foram gerados 20 modelos para a barreira com 7 m³/dia, de modo a fazer uma análise prévia dos resultados. Nessa etapa já ficou evidente que nem todos eram eficazes, deixando que partículas passassem em 11 realizações. Em virtude disso, optou-se por testar, também, uma vazão maior que não deixasse passar nenhuma partícula para todas as realizações. Foi testada uma vazão de 8 m³/dia, que também apresentou falha em 5 realizações, e de 9 m³/dia, que não falhou nenhuma vez. Assim, foram gerados 100 modelos com vazão de 7 m³/dia e 100 com vazão de 9 m³/dia, passando-se à análise de risco para cada uma dessas situações.

É interessante salientar que a configuração de barreira usada para o modelo determinístico falhou no modelo estocástico, evidenciando a diferença entre os dois modelos, objeto maior desse estudo.

6.5.2.1 Análise de risco

O GMS apresenta uma ferramenta de análise de risco, denominada *Risk Analysis*, que avalia todos os mapas gerados pelo MODFLOW no modelo estocástico e, a partir deles, gera um

novo mapa de zonas de risco com as probabilidades de que uma partícula inserida em um determinado ponto seja capturada pela barreira. Tentou-se rodar a análise para as 100 realizações do modelo estocástico, no entanto o programa apresentou erro. O número foi reduzido gradativamente até 50 iterações (quantidade ainda representativa), não apresentando problema e permitindo que o mapeamento fosse feito. O Anexo 17a mostra o mapa de risco da barreira com vazão de 7 m³/dia. Nas áreas destacadas, que englobam parte da pluma de contaminação, partículas estão susceptíveis a não serem capturadas pela barreira, que apresenta entre 30 e 40% de chance de falha nesses pontos. No Anexo 17b é possível observar o mapa de risco da barreira com vazão de 9 m³/dia. Com o aumento da vazão, toda a pluma se encontra em uma região completamente segura, sendo essa uma vazão recomendada para contê-la de maneira eficaz. É interessante notar que há uma discrepância entre as vazões indicadas pelo modelo determinístico e estocástico.

7 INTERPRETAÇÃO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

7.1 Modelo Conceitual

O contorno da área foi delimitado de modo a abranger a empresa contratante da consultoria e levando-se em conta a disponibilidade de dados, já que, embora os poços de monitoramento (PMs) estejam espalhados por uma área bem maior, os poços multiníveis (PMNs), importantes para o entendimento da geologia local, estão concentrados em um espaço menor, fator considerado para estabelecer os limites a Leste, Sul e Oeste. Como limite a Norte, foi escolhida uma barreira hidráulica natural, um pequeno rio que corta a área.

Em termos de porosidade e condutividade hidráulica, os materiais, compostos principalmente por argila com diferentes quantidades de areia, brita (no caso do aterro) e silte, não mostram grande variabilidade. Não foram verificados fluxos ascendentes ou descendentes entre poços rasos (PMs) e profundos (PMNs). Por esses motivos, optou-se por adotar a ocorrência de apenas um aquífero na área, sendo considerado estático, livre e tridimensional.

7.2 Comparação entre os modelos

As diferenças entre o modelo estocástico e o determinístico se mostraram evidentes, já que cada modelo indicou uma vazão diferente para que a barreira contivesse a pluma de contaminação (o modelo determinístico indicou 7 m³/dia, enquanto o modelo estocástico, 9 m³/dia), o que confirma a importância de se levar em conta a incerteza com relação ao meio físico. É importante ressaltar que essas incertezas existem, já que as informações para construção do modelo conceitual são limitadas.

7.3 Análise de risco

A análise de risco foi uma ferramenta muito útil na comparação entre os modelos, pois permitiu visualizar as zonas de captura de partículas para as diferentes vazões indicadas por cada modelo. Como pode ser visto no mapa de risco (Anexo 17), com a vazão de 7 m³/dia, parte da pluma ficou fora da zona em que 100% das partículas seriam capturadas pelo poço, o que representa um risco de 30 a 40% de que a pluma chegasse ao rio. Por outro lado, com a vazão de 9 m³/dia, indicada pelo modelo estocástico, a pluma ficou completamente dentro da área 100% segura, deixando o rio fora de risco.

8 CONCLUSÕES

O trabalho apresentou resultados positivos na comparação entre o modelo estocástico e o determinístico na construção de uma barreira hidráulica para conter uma pluma de contaminação, com cada modelo indicando uma vazão diferente. Isso significa, em termos práticos, a diferença entre tomar uma decisão que pode colocar ou não uma área (e vidas) em risco.

Dessa forma, recomenda-se que os órgãos fiscalizadores e normativos responsáveis tomem as medidas necessárias no sentido de se adotar o modelo estocástico como ferramenta obrigatória de modelagem, já que apresenta maior segurança por levar em consideração as incertezas associadas ao meio físico.

9 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANA - AGÊNCIA NACIONAL DE ÁGUAS (2013). *Conjuntura dos Recursos Hídricos no Brasil*. Brasília. Superintendência de Planejamento de Recursos Hídricos.
- ANDERSON, M.P., WOESSNER, W.W. (1992). *Applied groundwater modeling: simulation of flow and advective transport*. San Diego: Academic Press, Inc.
- BJÖRNBERG, A.E., LANDIM, P. M. B. (1966). *Contribuição ao estudo da Formação Rio Claro (Neocenoico)*. Boletim da Sociedade Brasileira de Geologia, 15 (4): p43-67. São Paulo.
- BLAIN, G. C., KAYANO, M. T., SENTELHAS, P. C., ZULU, J. (2009). *Variabilidade sazonal da evapotranspiração relativa em Campinas (SP): caracterização climática e análise de tendências*. Bragantia, Campinas, v.68, n.2, p.545-553.
- BROLLO, M. J. (2001). *Metodologia automatizada para seleção de áreas para disposição de resíduos sólidos. Aplicação na Região Metropolitana de Campinas (SP)*. Vols. I e II. São Paulo: Faculdade de Saúde Pública/USP. (Tese de Doutorado).
- CARVALHO, A. M. (2013). *Modelagem numérica como ferramenta para a gestão das águas subterrâneas em São José do Rio Preto (SP)*. São Paulo: Dissertação (Tese de Mestrado): IGc/USP.
- CEPAGRI – Centro de Pesquisas Meteorológicas e Climáticas Aplicadas à Agricultura. UNICAMP. Campinas. Acesso em 31 de outubro de 2017. Disponível em: <http://www.cpa.unicamp.br/outras-informacoes/clima-dos-municipios-paulistas.html>.
- CETESB - Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental. (2010). *Relatório de qualidade das águas subterrâneas do estado de São Paulo: 2007-2009*. São Paulo: Cetesb.
- CLEARY, R. W. (1989). *Hidrologia de águas subterrâneas*. In: RAMOS, F. et al. *Engenharia hidrológica*. Rio de Janeiro: ABRH; EDUF RJ.
- FEITOSA, F. A. C., MANOEL FILHO, J., FEITOSA, E. C., DMETRIO, J. G. A. (2008). *Hidrogeologia: Conceitos e aplicações*. CPRM Serviço Geológico Nacional. P. 77
- FRANKE, O. L., REILLY, T. E. (1987). The effects of boundary conditions on the steady state response of three hypothetical ground-water systems – Results and implications of numerical experiments. USGS Water Supply Paper 2315, U.S. Geological Survey, Denver.
- FREEZE, R.A., CHERRY, J.A. (1990). *Hydrogeological decision analysis: 1. framework*. Ground Water, v. 28, n. 5, p. 738-766.
- FREEZE, R.A., CHERRY, J.A. (1990). *Hydrogeological decision analysis: 1. framework*. Ground Water, v. 28, n. 5, p. 738-766.
- FULFARO, V.J., GAMA JR, E.; SOARES, P. C. (1980). *Revisão estratigráfica da Bacia do Paraná*. São Paulo: PAULIPETRO, Consórcio IPT/CESP (Relatório 008/80).

HIRATA, R, BERTOLO, R., CONICELLI, B. P., MALDANER, C. (2012). *Hidrogeologia da Bacia Hidrográfica do Alto Tietê*. In: TWIN CITIES: solos das regiões metropolitanas de São Paulo e Curitiba.

KONIKOW, L.F., BREDEHOEFT, J.D. (1978). Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in ground water: U.S. Geological Survey Techniques of Water-Resources Investigations, Livro 7, Capítulo C2, 90 p.

KRESIC, N. (2007). *Hydrogeology and groundwater modeling*. Danver: Taylor & Francis Group, LLC

MAXEY, G. B (1964). *Hydrostratigraphic Units*. Journal of Hydrology, v. 2, p. 124-129

MMA - MINISTÉRIO DO MEIO AMBIENTE (2007). *Águas subterrâneas: Um recurso a ser conhecido e protegido*. Brasília.

MOORE, J. E., (1979). *Contributions of groundwater modeling to planning*. Journal of Hydrology 43, p. 121-128.

PEREIRA, S. Y., SILVA, A. A. K. (2004). Availability and consumption of groundwater resources in the Campinas Region, SP, Brazil. *TERRÆ*, 1(1):34-43.

PEREIRA, S. Y., NEVES, M. A.; MORALES, N., ALBUQUERQUE FILHO, J. L. (2004). Análise das informações disponíveis sobre poços tubulares profundos e seu uso no diagnóstico da variação temporal do nível d'água e da produtividade dos aquíferos da bacia do rio jundiá (SP). XIII Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas, p. 1-18. Cuiabá: Associação Brasileira de Águas Subterrâneas.

ROSS, J. L. S. (1990). *Geomorfologia: Ambiente e Planejamento*. Sao Paulo: Contexto.

SCHNEIDER, R.L., MUHLMANN, H., TOMMASI, E., MEDEIROS, R.A., DAEMON, R.F., NOGUEIRA, A. A. (1974). *Revisão estratigráfica da Bacia do Paraná*. In: Congresso Brasileiro Geologia, 28., Porto Alegre, 1974. Anais. Porto Alegre, SBG, v.1, p. 41-65.

SPITZ, K., MORENO, J. (1996). *A practical guide to groundwater and solute transport modeling*. New York: John Wiley and Sons Inc.

TERAMOTO, E. H., (2007). Caracterização hidrogeológica e simulação numérica de *fluxo em uma região situada no Distrito Industrial de Paulínia*. Rio Claro: Dissertação de Mestrado: Instituto de Geociências e Ciências Exatas/UNESP

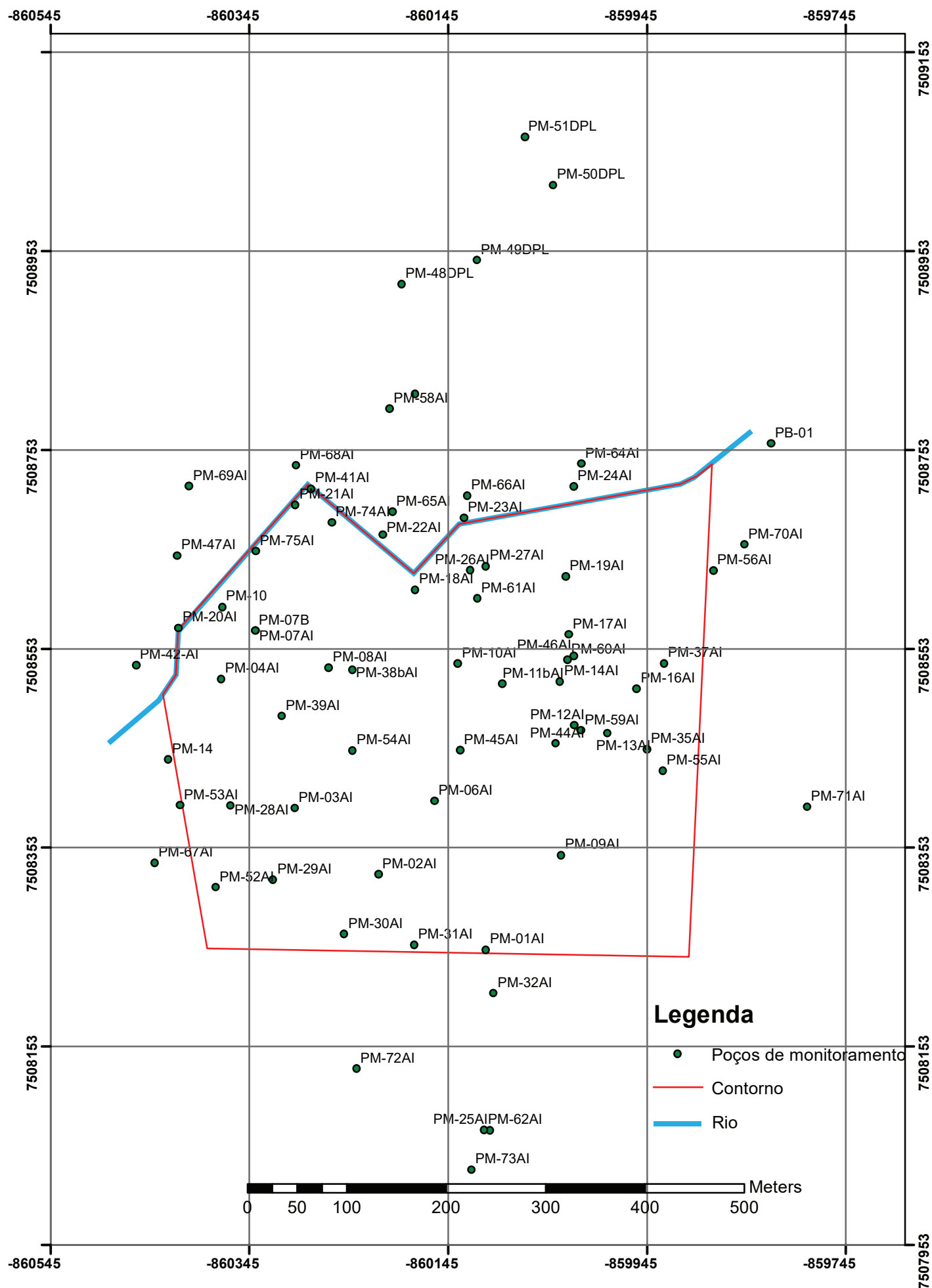
TERAMOTO, E. H., CHANG, K. H. (2008). Caracterização hidrogeológica e simulação numérica em área do distrito industrial de Paulínia (SP). *Águas Subterrâneas*, v.22, n.01, p.129-144.

WOTTRICH, I. (2012). *Uso de ferramentas computacionais na construção de modelos estocásticos de fluxo e delimitação de perímetro de proteção de poços*. Porto Alegre: Dissertação de Mestrado: Instituto de Pesquisas Hidráulicas/UFRGS.

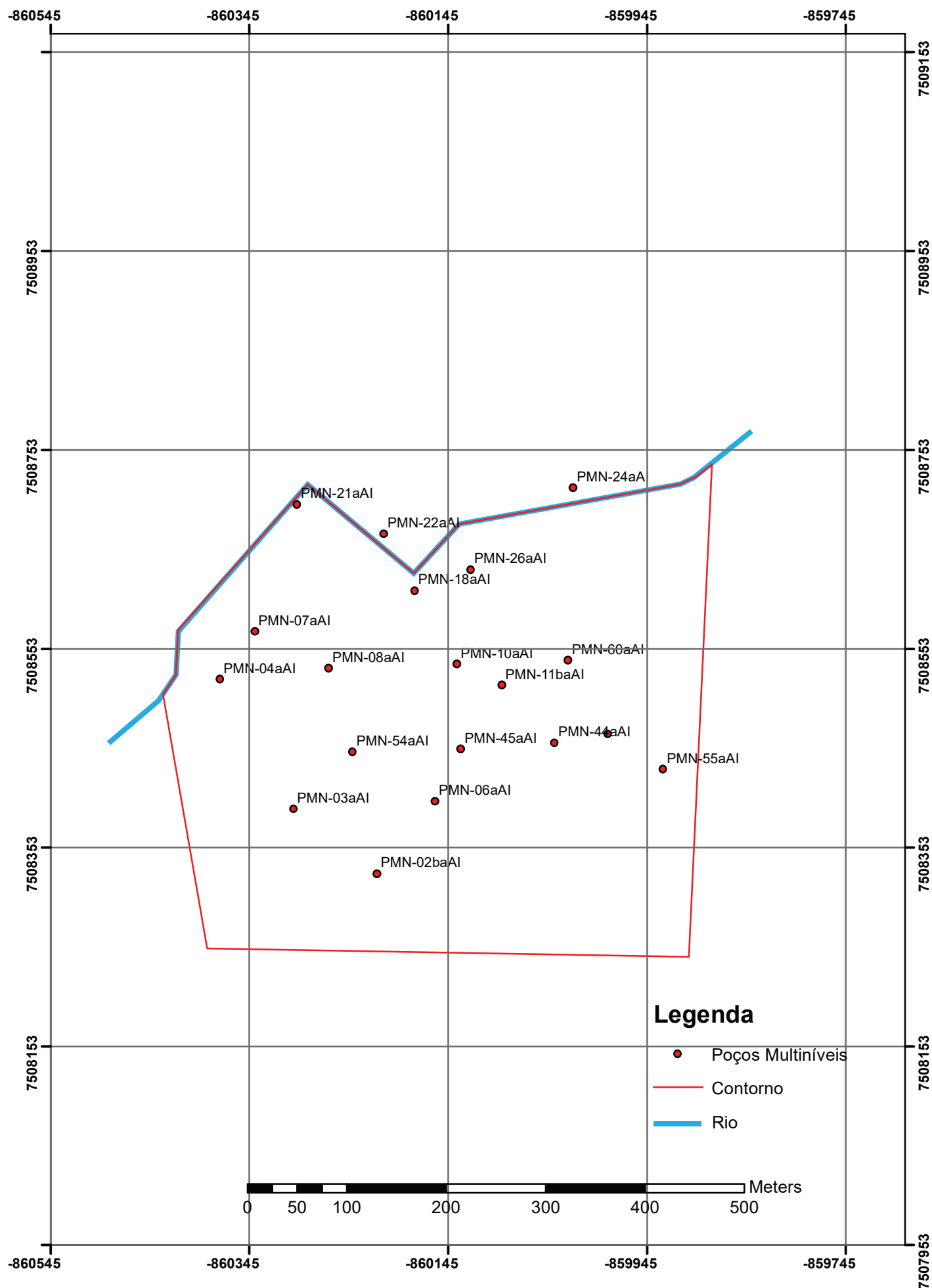
ZHENG, C., Bennett, G. D. (2002) *Applied Contaminant Transport Modeling*. Denver: John Wiley and Sons Inc.

10 ANEXOS

Anexo 1: Mapa de localização dos poços de monitoramento e contorno da área

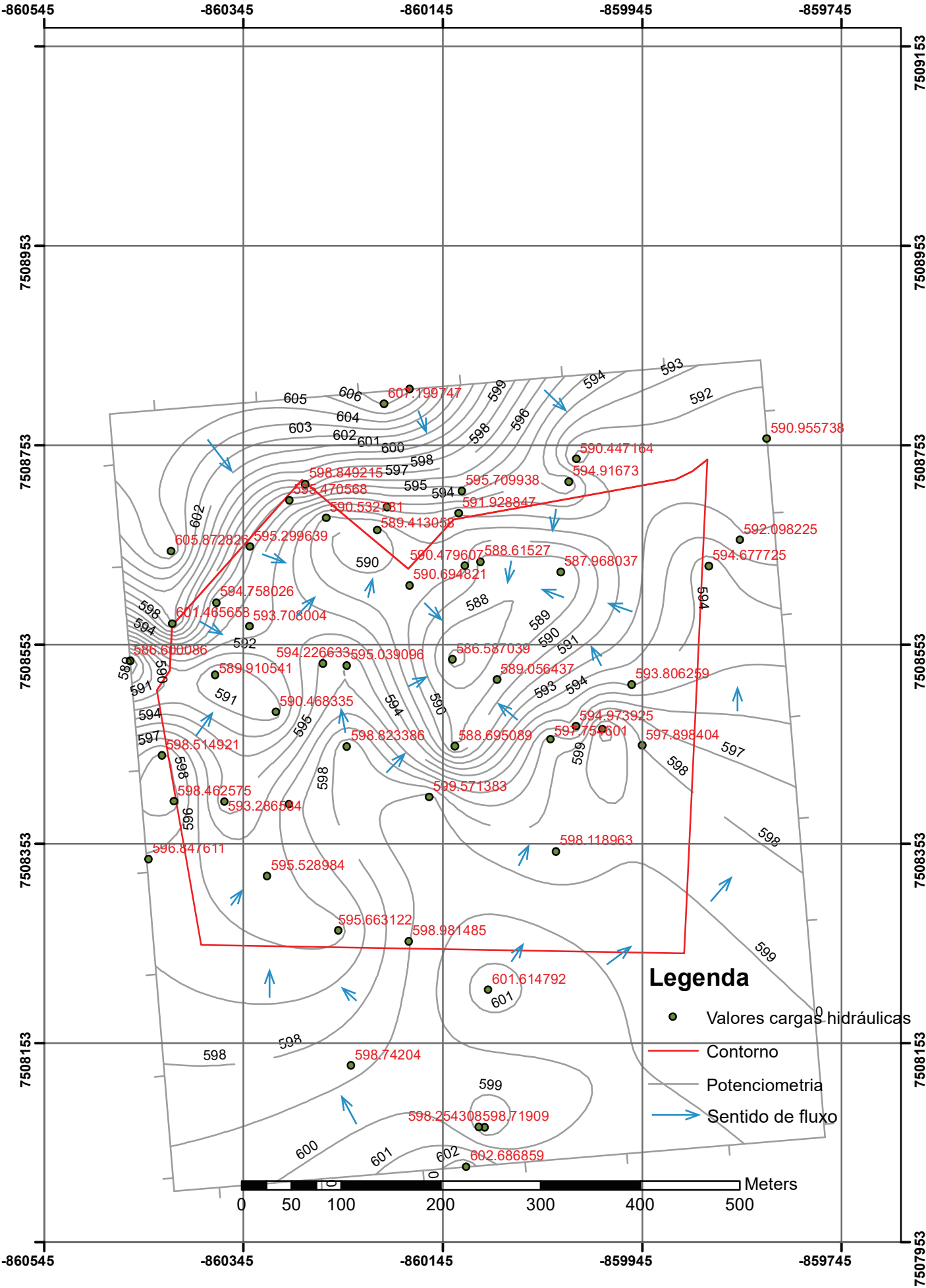


Anexo 2: Mapa de localização dos poços multiníveis e contorno da área



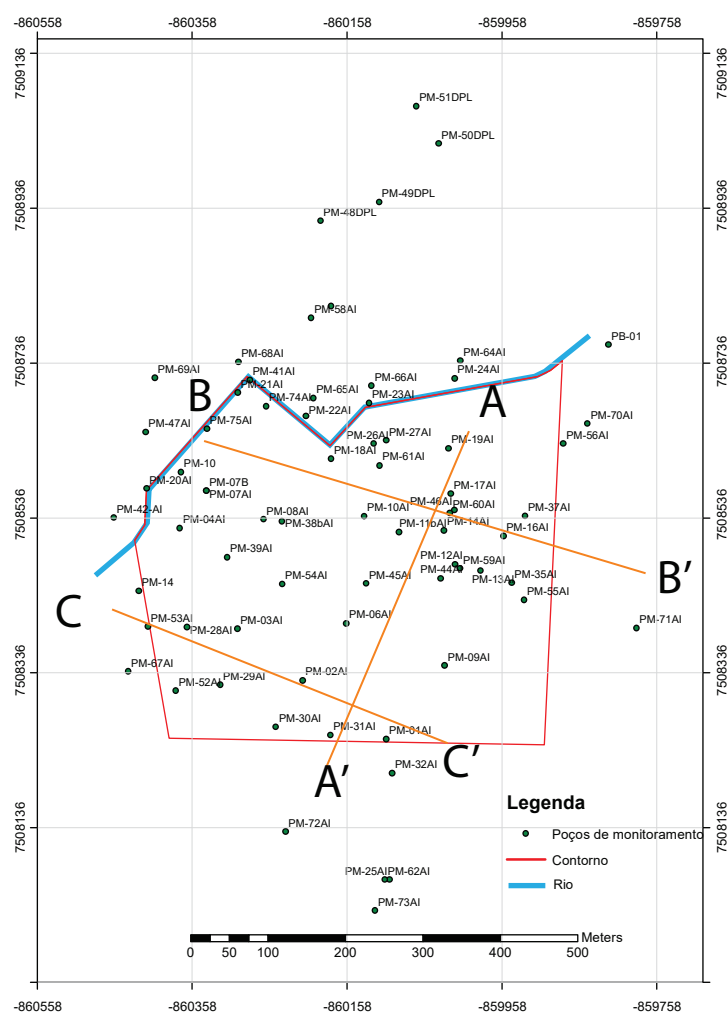
The map displays a topographic representation of a terrain. Contour lines are drawn at intervals of 10 meters, with labels such as 590, 595, 600, 605, 610, and 615. Numerous elevation points are marked with black dots and labeled with their specific values in red text. A red line, representing a boundary or contour, is drawn across the map. The map is framed by a coordinate grid with labels at the top and bottom: -860545, -860345, -860145, -859945, and -859745. The vertical axis on the right side has labels: 7509153, 7508953, 7508753, 7508553, 7508353, 7508153, and 7407953. A legend in the bottom right corner identifies the symbols: a black dot for 'Valores_topografia', a red line for 'Contorno', and a gray line for 'Topografia'. A scale bar at the bottom indicates distances in meters, ranging from 0 to 500.

Anexo 4: Mapa potenciométrico

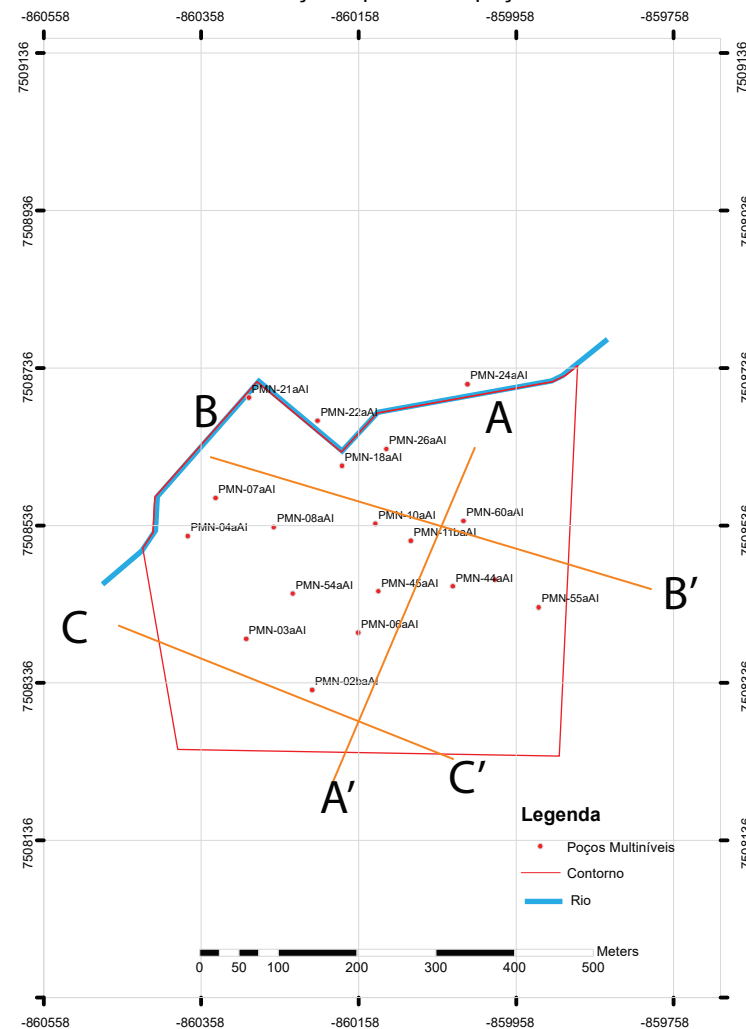


Anexo 5: Mapa dos perfis e localizações dos poços com seções geológicas

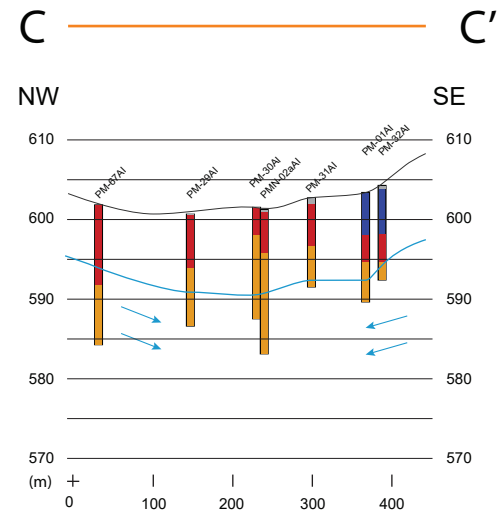
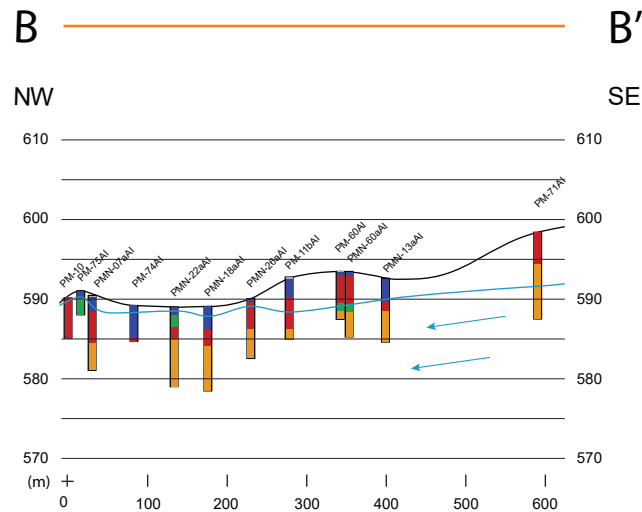
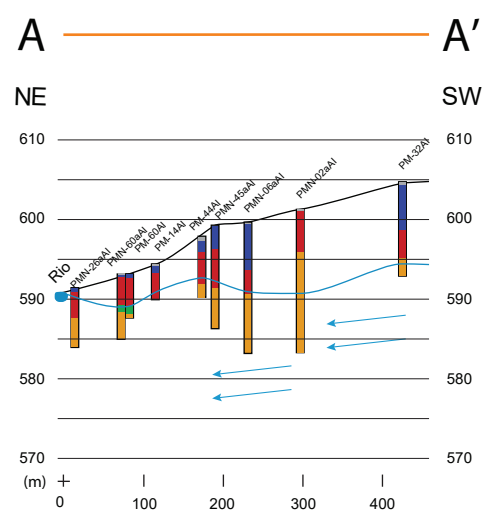
Localização e perfis dos poços de monitoramento



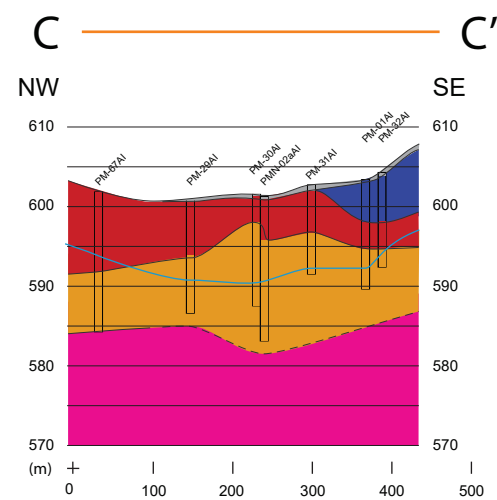
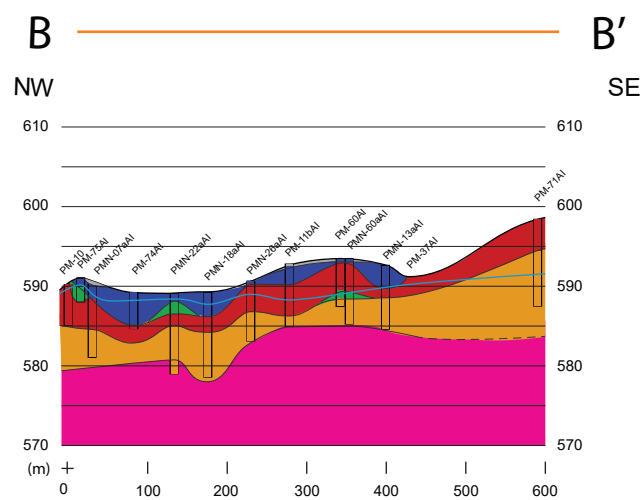
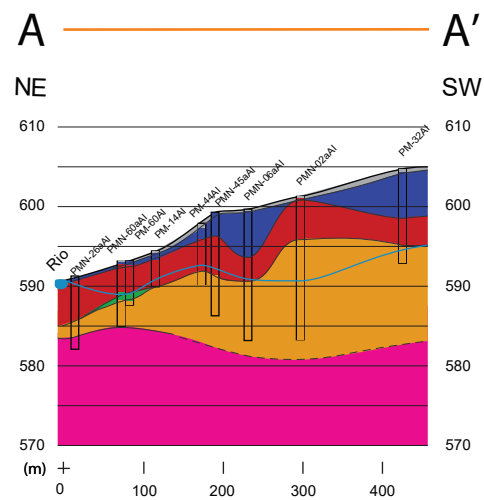
Localização e perfis dos poços multiníveis



Perfis construtivos dos poços

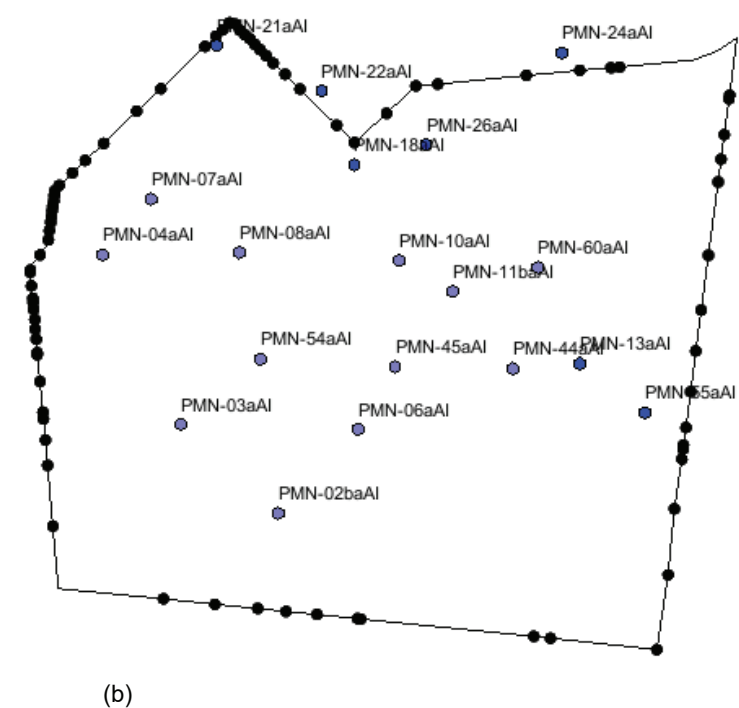
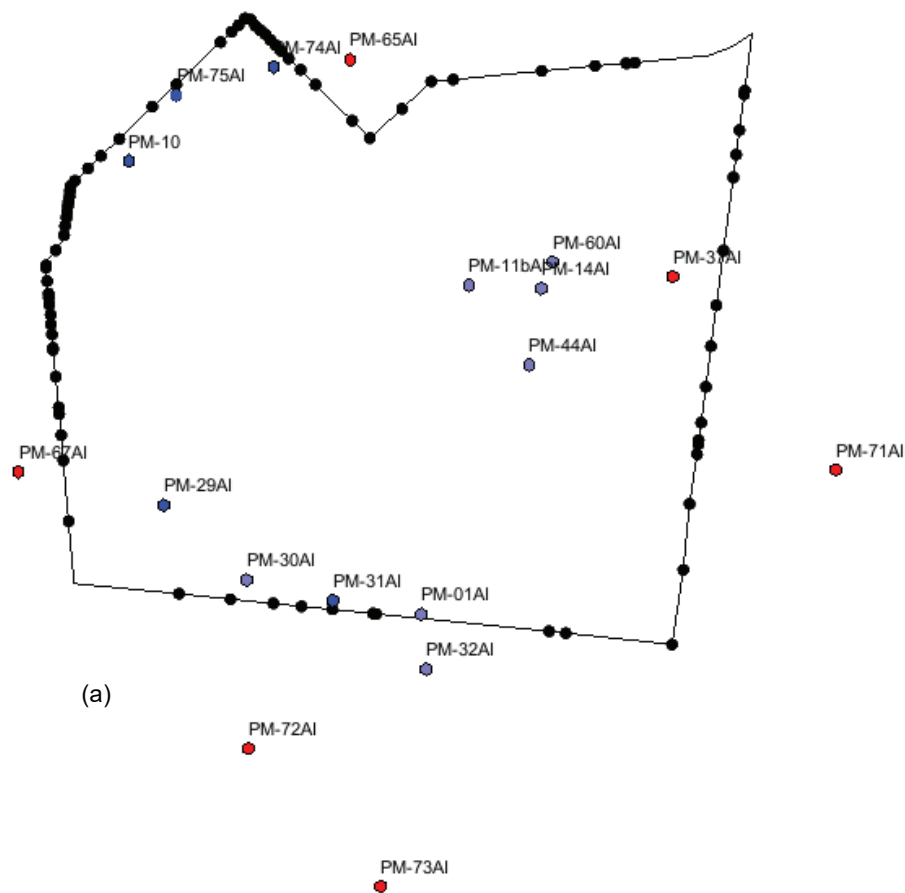


Perfis geológicos

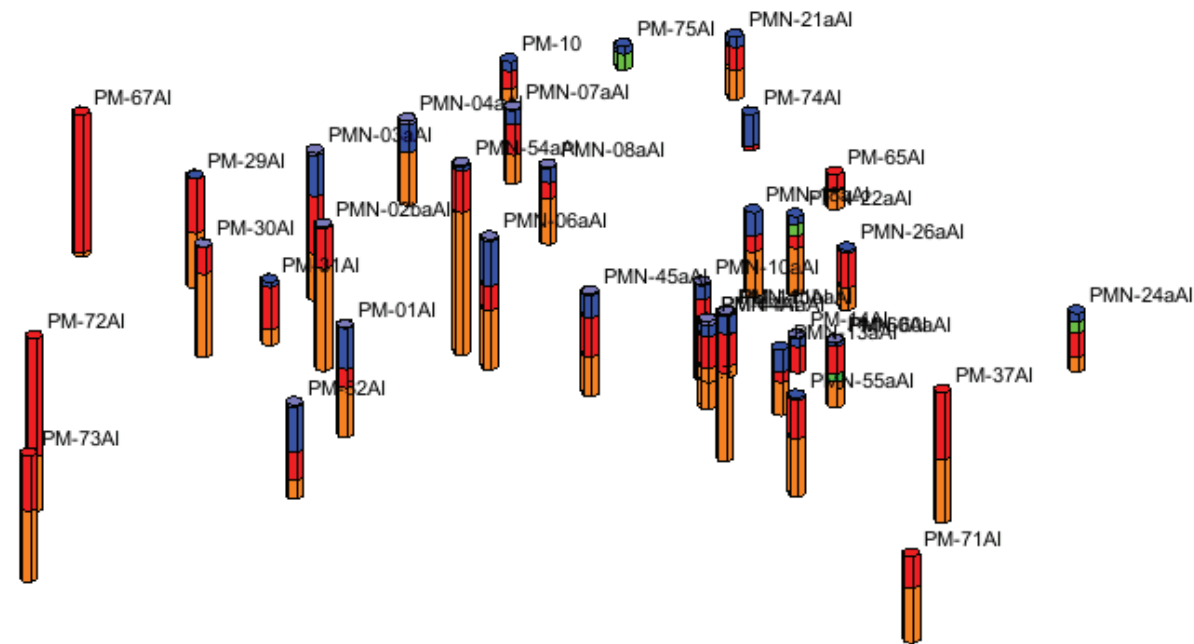


LEGENDAS

-  Pavimento ou concreto
-  Aterro de argila vermelha escura, com fragmentos de brita e areia.
-  Argila orgânica, preta, plástica
-  Solo argiloso ou argilo-arenoso ou areno-argiloso, de cor marrom avermelhado, pouco coeso, plástico a moderadamente plástico.
-  Solo argilo-siltoso a argiloso, variegado, podendo conter um pouco de areia (de granulação fina) nas porções mais profundas, duro, moderadamente plástico (alteração de rocha).
-  Basaltos
-  Contatos litológicos
-  Contatos litológicos inferidos
-  Nível d'água
-  Sentido do fluxo



- Pavimento ou concreto
- Aterro de argila vermelha escura, com fragmentos de brita e areia.
- Argila orgânica, preta, plástica
- Solo argiloso ou argilo-arenoso ou areno-argiloso, de cor marrom avermelhado, pouco coeso, plástico a moderadamente plástico.
- Solo argilo-siltoso a argiloso, variegado, podendo conter um pouco de areia (de granulação fina) nas porções mais profundas, duro, moderadamente plástico (alteração de rocha).

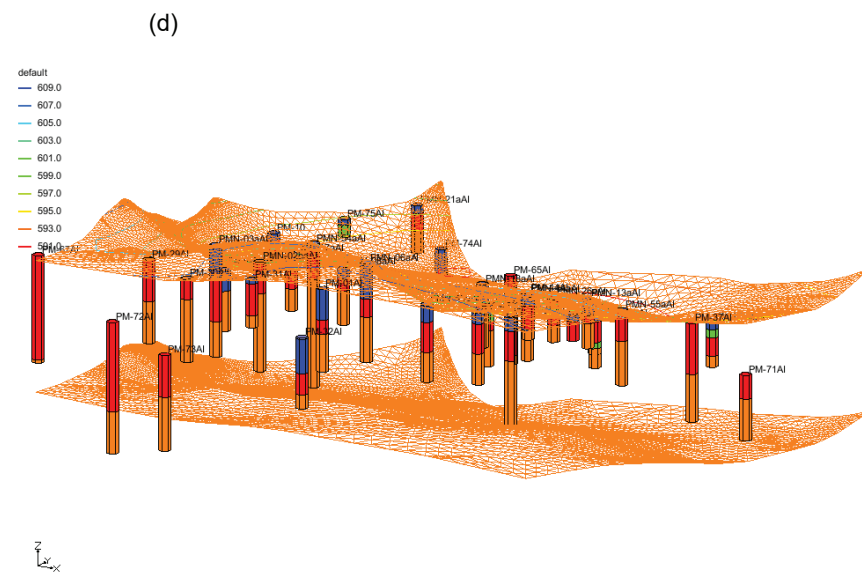
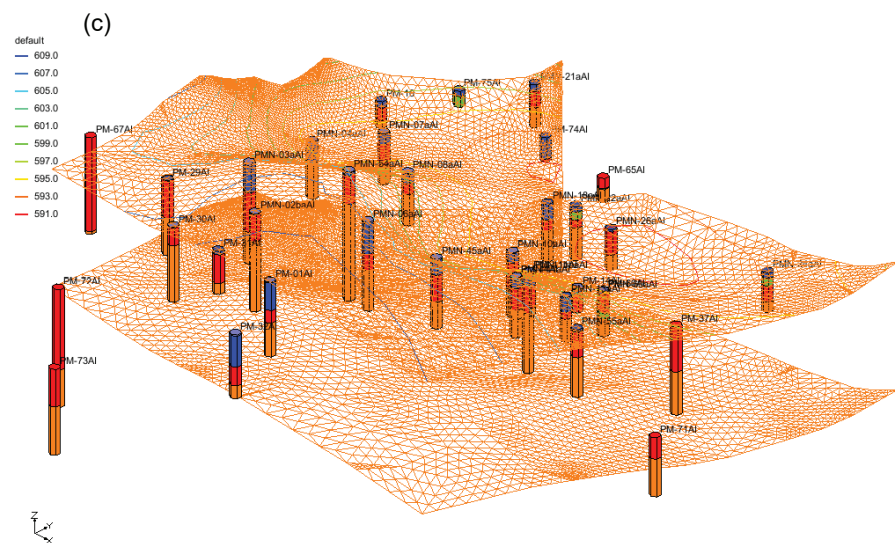
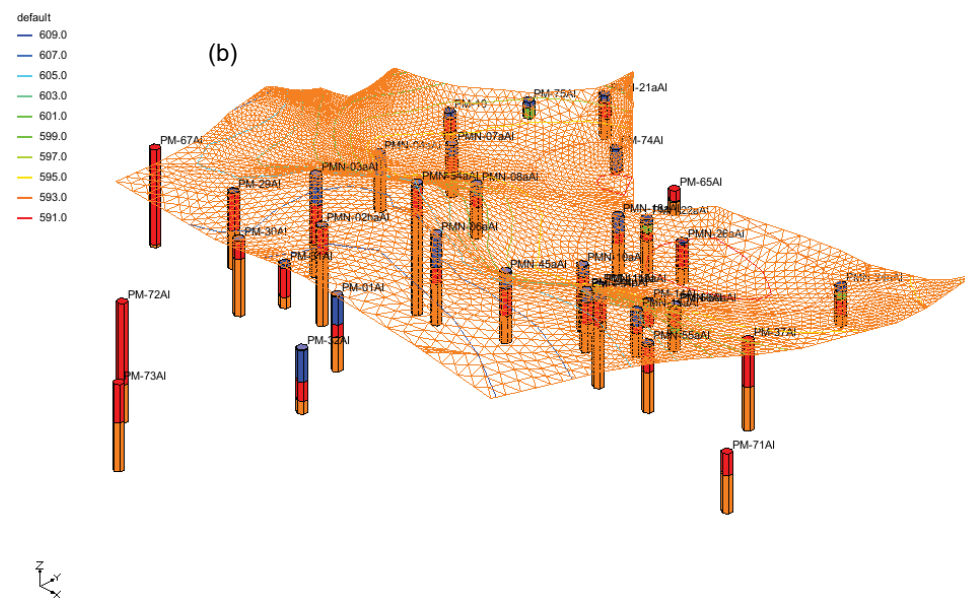
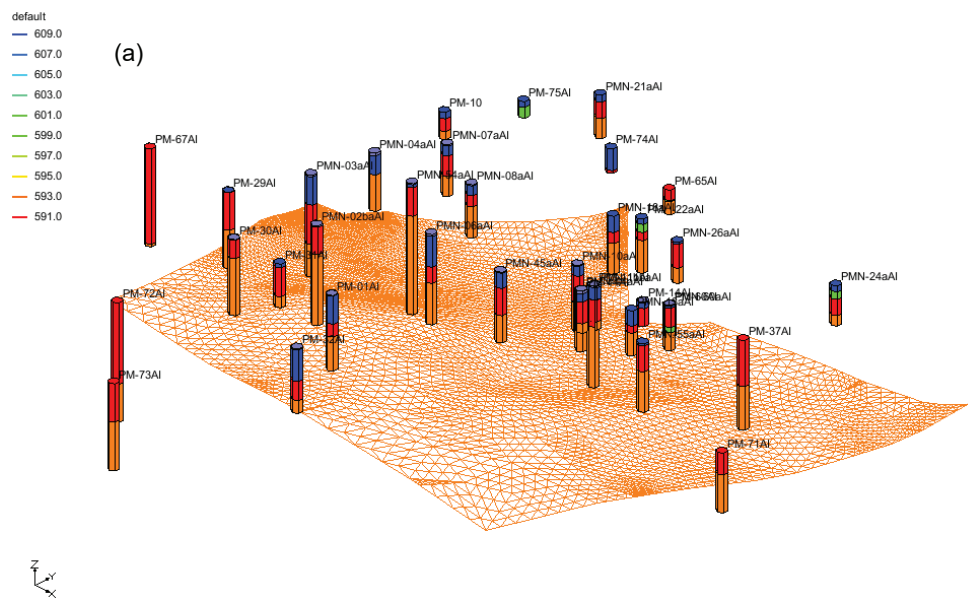


- Pavimento ou concreto
- Aterro de argila vermelha escura, com fragmentos de brita e areia.
- Argila orgânica, preta, plástica
- Solo argiloso ou argilo-arenoso ou areno-argiloso, de cor marrom avermelhado, pouco coeso, plástico a moderadamente plástico.
- Solo argilo-siltoso a argiloso, variegado, podendo conter um pouco de areia (de granulação fina) nas porções mais profundas, duro, moderadamente plástico (alteração de rocha).

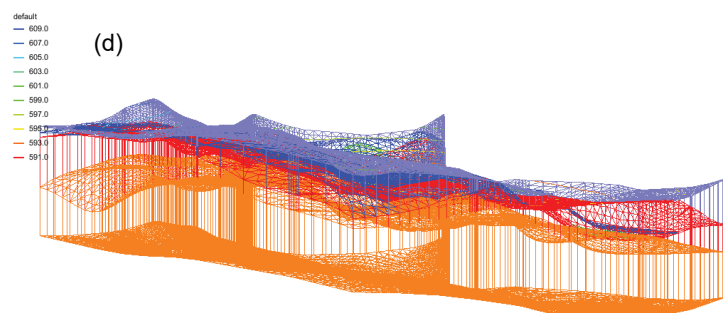
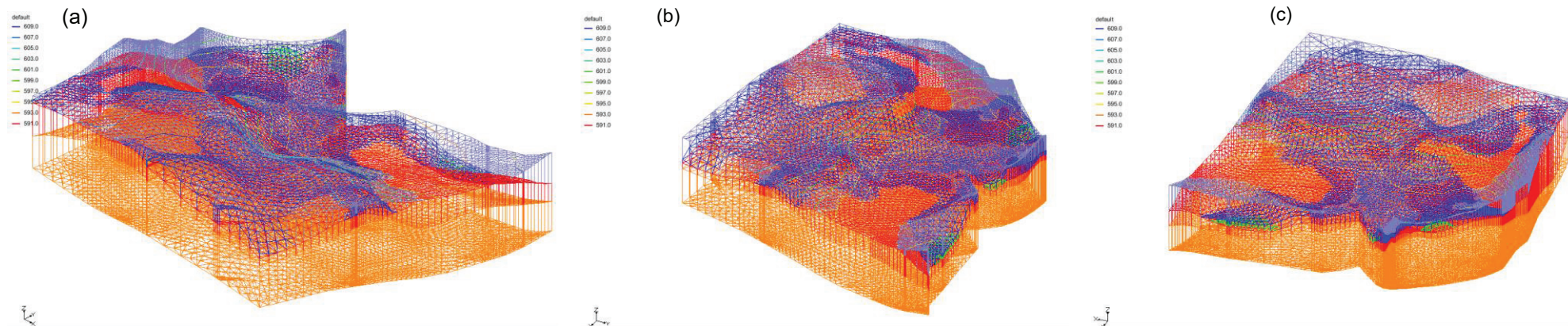
Anexo 9: Localização fictícia, cota dos poços e cargas hidráulicas

ID POÇO	X fictício (m)	Y fictício (m)	Z (m)	Cargas hidráulicas (m)
PB-01	382194.3759	7577872.6601	593.8254	590.956
PM-07B	381674.8878	7577731.5219	590.6519	593.708
PM-01AI	381874.6173	7577400.8393	603.6011	
PM-02AI	381775.6099	7577483.4369	600.9180	
PM-03AI	381699.2464	7577554.9207	600.6115	596.580
PM-04AI	381637.6684	7577687.1527	590.6048	589.911
PM-06AI	381836.4533	7577550.3420	601.1202	599.571
PM-07AI	381674.8746	7577731.5342	590.6515	593.708
PM-08AI	381743.7683	7577689.4494	592.0648	594.227
PM-09AI	381955.5480	7577487.3594	602.1120	598.119
PM-10	381644.8422	7577757.2814	590.2630	594.758
PM-10AI	381870.2956	7577683.0196	591.9795	586.587
PM-11bAI	381912.0828	7577659.5389	592.8112	589.056
PM-12AI	381978.8734	7577613.0418	597.1060	600.738
PM-13AI	382010.6472	7577602.5706	596.7633	
PM-14	381579.6989	7577612.7439	601.5285	598.515
PM-14AI	381968.7777	7577656.9532	594.8318	
PM-16AI	382043.0147	7577643.8131	593.5941	593.806
PM-17AI	381980.9399	7577702.3565	591.8554	
PM-18AI	381834.6045	7577758.6017	589.7219	590.695
PM-19AI	381982.8605	7577759.3588	589.2250	587.968
PM-20AI	381600.1739	7577740.3355	592.8888	601.466
PM-21AI	381724.5041	7577851.3039	592.2158	595.471
PM-22AI	381807.3815	7577814.7215	587.8895	589.413
PM-23AI	381888.0238	7577824.6145	589.4194	591.929
PM-24AI	381997.9515	7577846.7063	590.7684	594.917
PM-25AI	381863.8554	7577224.1597	606.9242	598.254
PM-26AI	381889.9010	7577773.2942	588.7313	590.480
PM-27AI	381905.4698	7577775.9089	588.2241	588.615
PM-28AI	381636.4217	7577562.4962	597.5768	593.287
PM-29AI	381672.2367	7577486.5984	600.4210	595.529
PM-30AI	381737.3848	7577427.8419	601.4356	595.663
PM-31AI	381804.9374	7577411.6568	603.1017	598.981
PM-32AI	381878.4899	7577357.5845	604.4329	601.615
PM-35AI	382048.1661	7577583.8314	597.0982	597.898
PM-37AI	382072.1453	7577666.3585	591.4520	
PM-38bAI	381766.6504	7577685.2313	592.7340	595.039
PM-39AI	381693.9326	7577645.8130	593.2142	590.468
PM-41AI	381741.0169	7577865.6198	593.6671	598.849
PM-42-AI	381555.7422	7577707.3212	600.7740	586.600
PM-44AI	381959.3635	7577596.9284	598.2573	597.755
PM-45AI	381865.5750	7577598.1536	594.7930	588.695
PM-46AI	381984.0474	7577681.1050	593.3601	
PM-47AI	381604.8049	7577811.1698	595.3184	605.873
PM-48DPL	381846.3687	7578058.2732	609.2054	

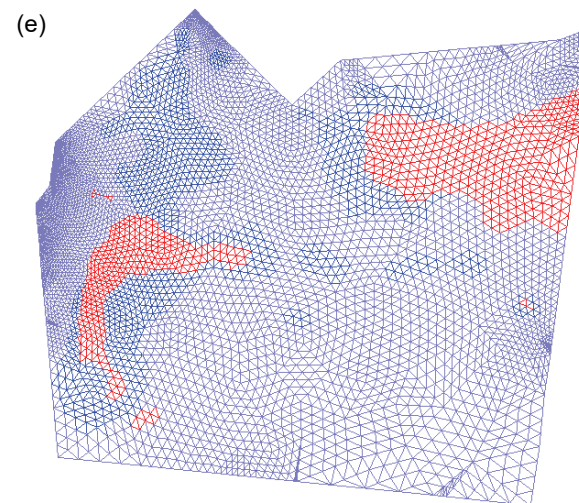
ID POÇO	X fictício (m)	Y fictício (m)	Z (m)	Cargas hidráulicas (m)
PM-49DPL	381921.6581	7578075.7714	607.4806	
PM-50DPL	382002.3971	7578142.8694	605.8942	
PM-51DPL	381978.4614	7578192.3137	609.5543	
PM-52AI	381615.5501	7577483.7509	600.6810	
PM-53AI	381587.1786	7577567.0601	600.5393	598.463
PM-54AI	381760.4380	7577606.3133	598.8917	598.823
PM-55AI	382062.1027	7577561.4764	597.1228	
PM-56AI	382127.4834	7577753.3005	590.4129	594.678
PM-57AI	381850.4396	7577950.1709	602.2855	607.178
PM-58AI	381824.4183	7577937.5600	601.1909	607.200
PM-59AI	381984.9695	7577607.5279	597.1025	594.974
PM-60AI	381977.7880	7577677.8580	593.5711	
PM-61AI	381894.6201	7577745.1293	589.1439	
PM-62AI	381858.0556	7577224.8650	607.0900	598.719
PM-64AI	382007.0649	7577868.2549	590.0126	590.447
PM-65AI	381818.6543	7577836.7100	589.5703	593.515
PM-66AI	381893.0331	7577846.1316	590.6555	595.710
PM-67AI	381557.9810	7577512.7725	602.3163	596.848
PM-68AI	381728.3184	7577889.6331	599.8830	
PM-69AI	381622.0261	7577878.3727	599.0058	
PM-70AI	382160.0286	7577775.9345	589.2161	592.098
PM-71AI	382200.2592	7577514.3558	598.7366	
PM-72AI	381738.5883	7577295.3276	606.5115	598.742
PM-73AI	381842.6850	7577186.9705	609.0029	602.687
PM-74AI	381758.6615	7577831.1268	588.8044	590.533
PM-75AI	381682.0495	7577809.0385	591.1198	595.300
PMN-02baAI	381774.31	7577484.15	601.61	
PMN-03aAI	381697.99	7577553.99	600.50	
PMN-04aAI	381636.52	7577686.99	592.33	
PMN-06aAI	381836.94	7577550.17	599.45	
PMN-07aAI	381674.51	7577730.82	591.18	
PMN-08aAI	381743.74	7577688.89	592.24	
PMN-10aAI	381869.40	7577682.71	596.68	
PMN-11baAI	381911.37	7577658.45	596.85	
PMN-13aAI	382011.16	7577601.67	592.50	
PMN-18aAI	381834.10	7577757.73	589.35	
PMN-21aAI	381726.04	7577851.62	590.88	
PMN-22aAI	381808.46	7577815.80	589.14	
PMN-24aAI	381997.17	7577845.59	590.85	
PMN-26aAI	381890.51	7577773.79	590.30	
PMN-44aAI	381958.41	7577597.59	598.38	
PMN-45aAI	381866.12	7577599.15	598.87	
PMN-54aAI	381760.23	7577605.21	596.95	
PMN-55aAI	382062.29	7577563.06	596.89	
PMN-60aAI	381978.28	7577677.18	593.67	



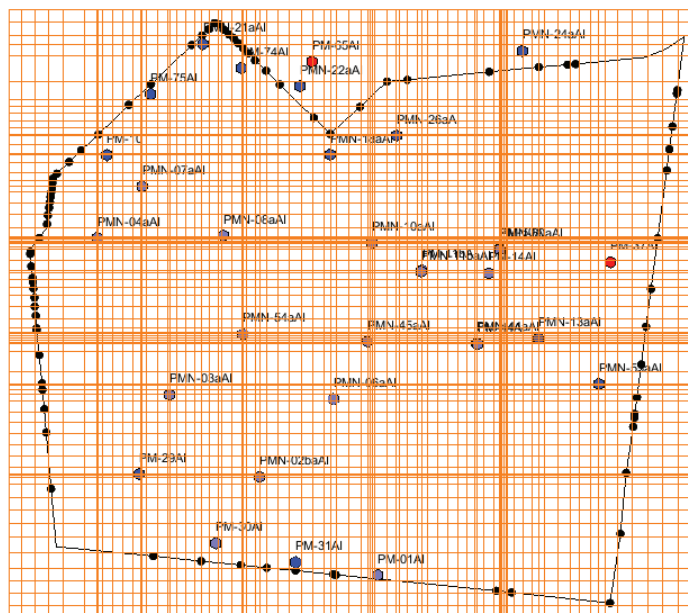
Anexo 10: TINs da base (a), do topo (b) e da base e do topo juntas(c) e da base e do topo juntas, em outra perspectiva (exagero vertical = 5).



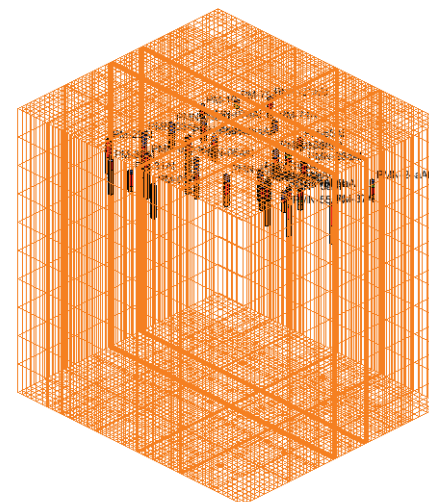
-  Pavimento ou concreto
-  Aterro de argila vermelha escura, com fragmentos de brita e areia.
-  Argila orgânica, preta, plástica
-  Solo argiloso ou argilo-arenoso ou areno-argiloso, de cor marrom avermelhado, pouco coeso, plástico a moderadamente plástico.
-  Solo argilo-siltoso a argiloso, variegado, podendo conter um pouco de areia (de granulação fina) nas porções mais profundas, duro, moderadamente plástico (alteração de rocha).



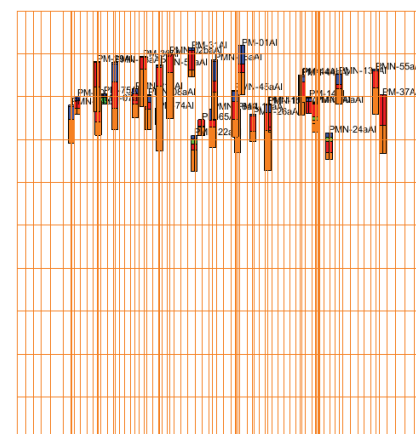
Anexo 11: Sólidos gerados em diferentes perspectivas (a a d) e visto em planta (e) (exagero vertical = 5).



(b)

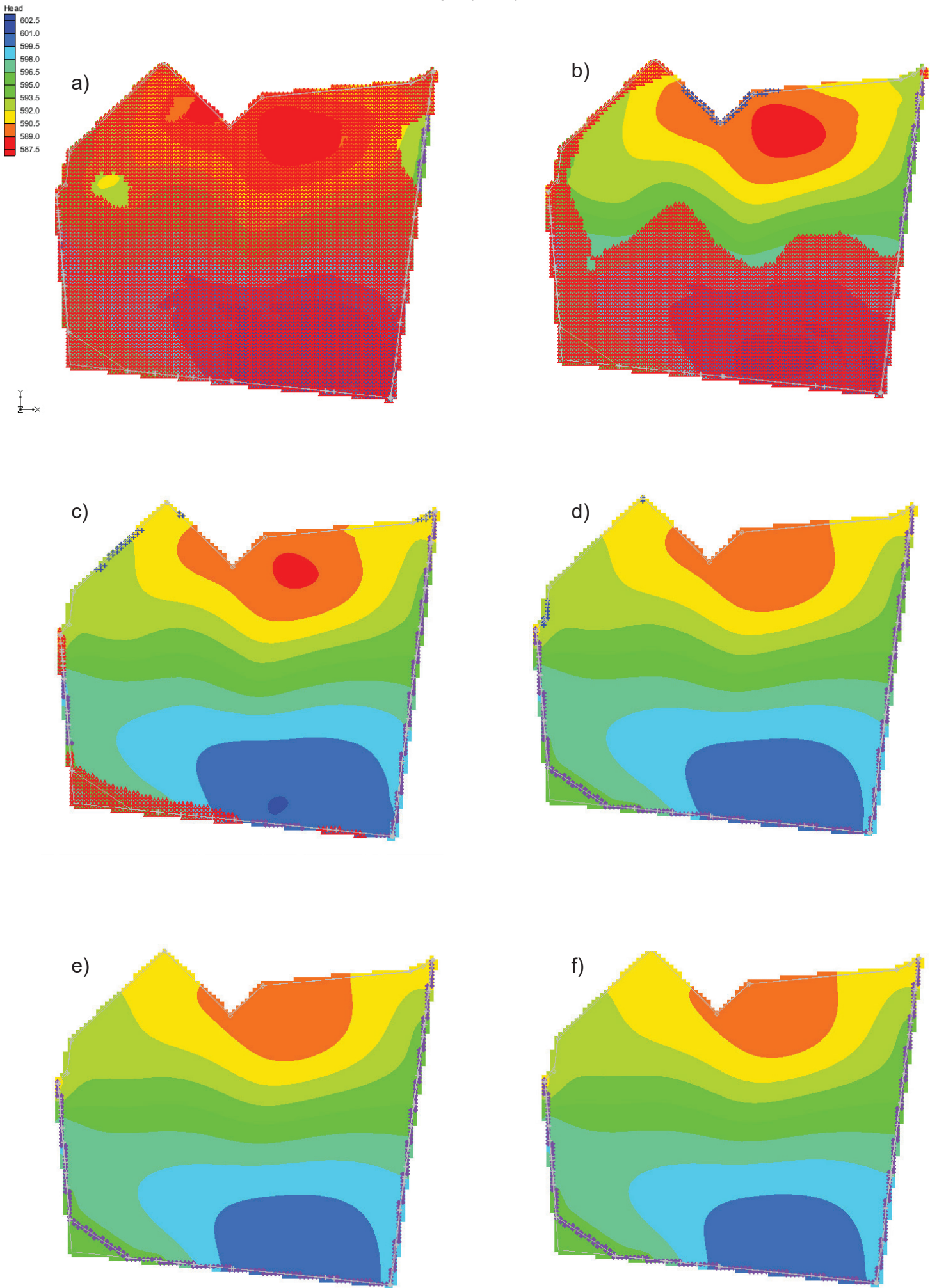


(c)

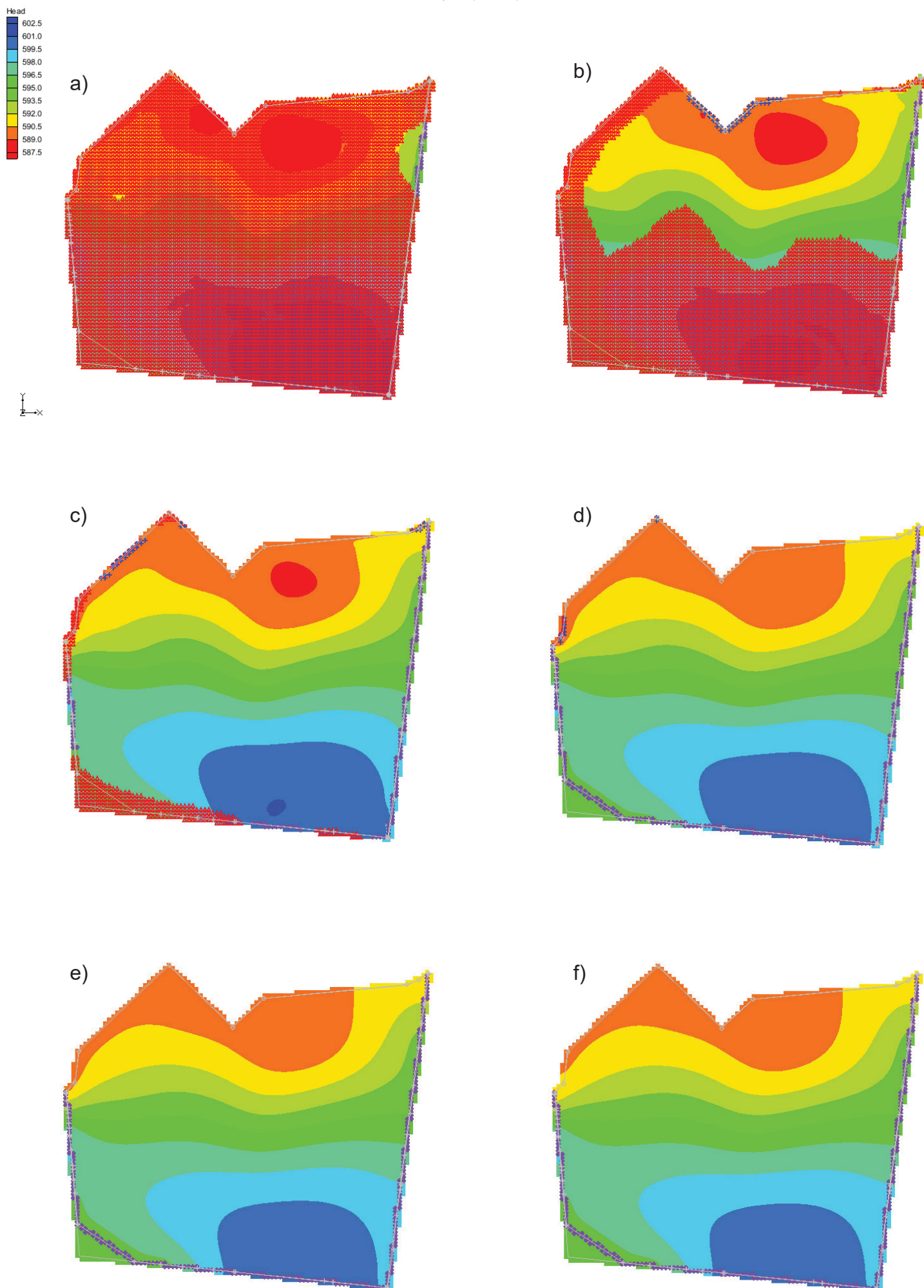


Anexo 12: Grids gerados. O grid é mostrado em planta em (a), em perspectiva em (b) e lateralmente em (c).

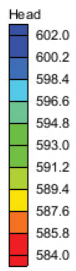
Anexo 13: Modelo numérico determinístico - camadas 1 (a, mais superficial), 2 (b), 4 (c), 6 (d), 8 (e) e 10 (f, mais profunda). Os pequenos triângulos vermelhos que aparecem em a, b e c representam células sem água (secas).



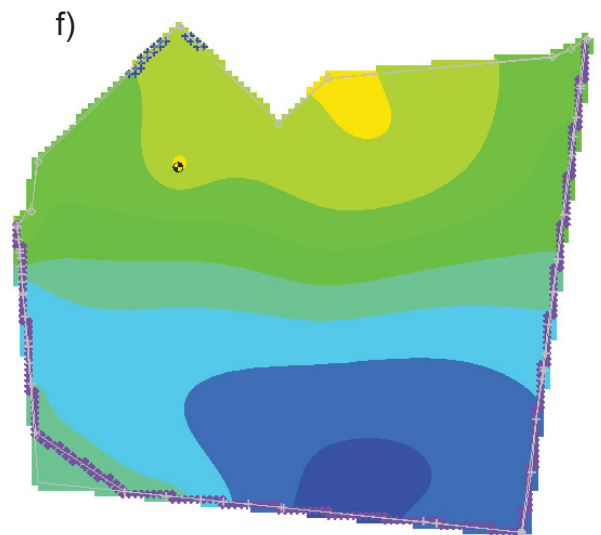
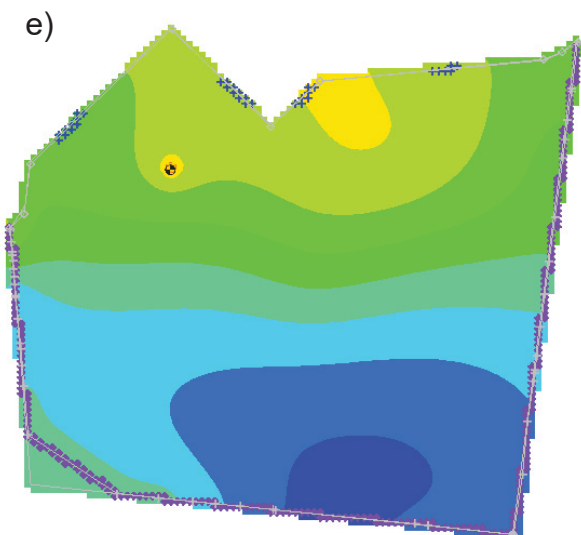
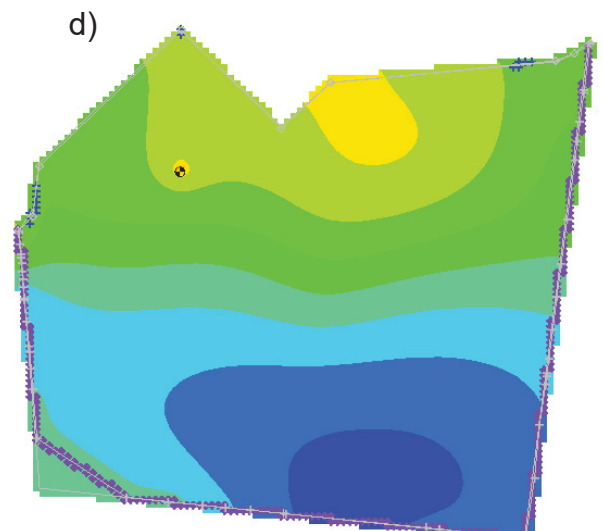
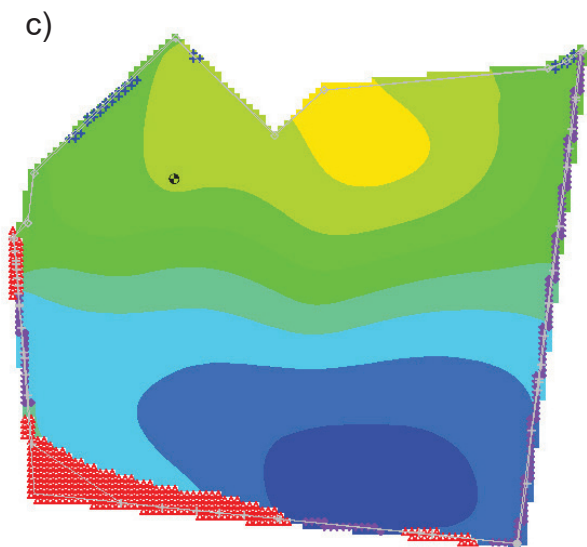
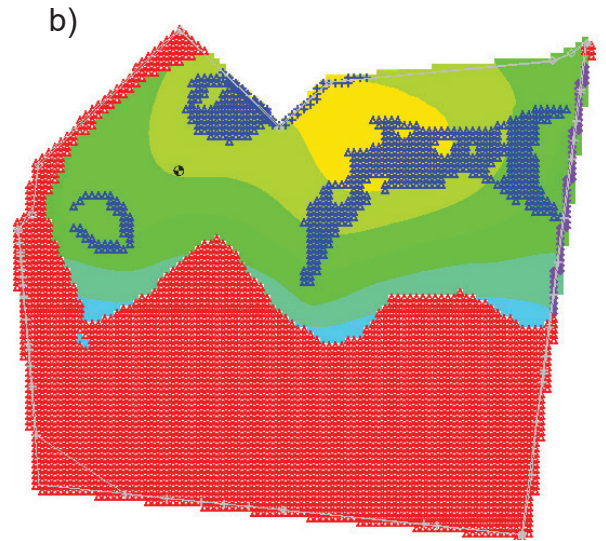
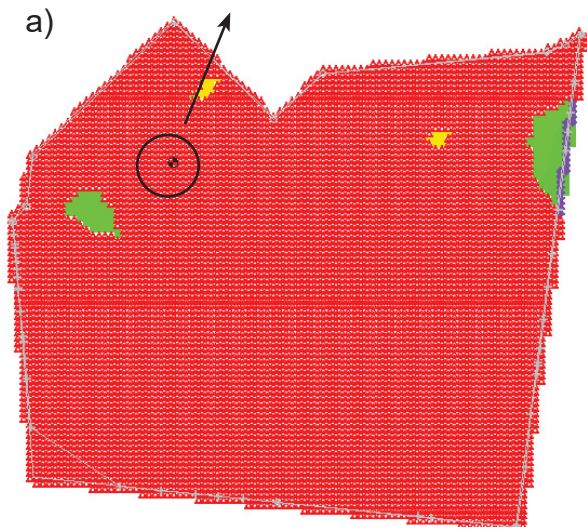
Anexo 14 : Modelo numérico calibrado - camadas de 1 (a, mais superficial), 2 (b), 4 (c), 6 (d), 8 (e) e 10 (f, mais profunda). Os pequenos triângulos vermelhos que aparecem em a, b e c representam células sem água (secas).



Anexo 15 : Influência sofrida pelo aquífero devido à instalação de um poço extraindo 7 m³/dia - camadas de 1 (a, mais superficial), 2 (b), 4 (c), 6 (d), 8 (e) e 10 (f, mais profunda)

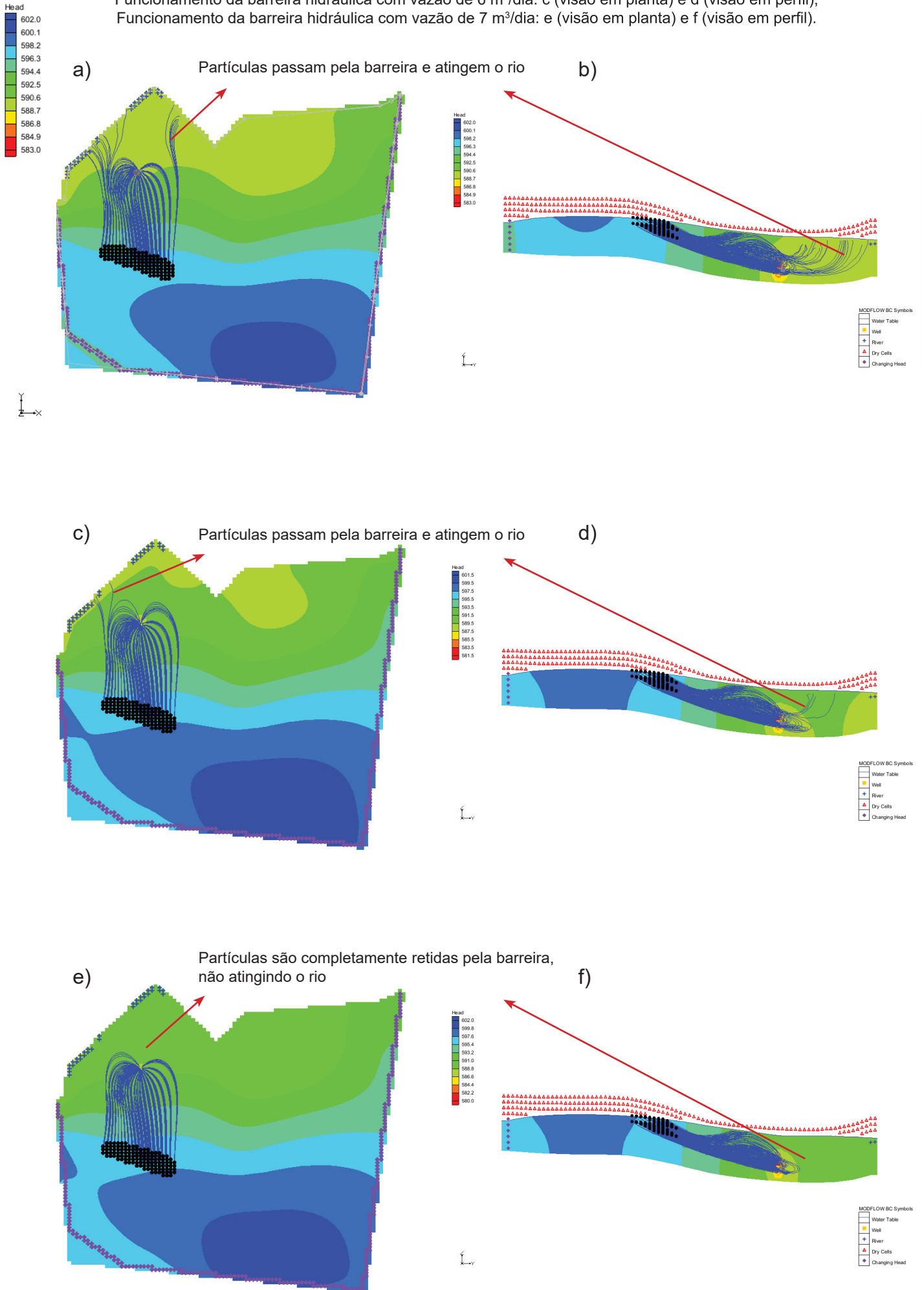


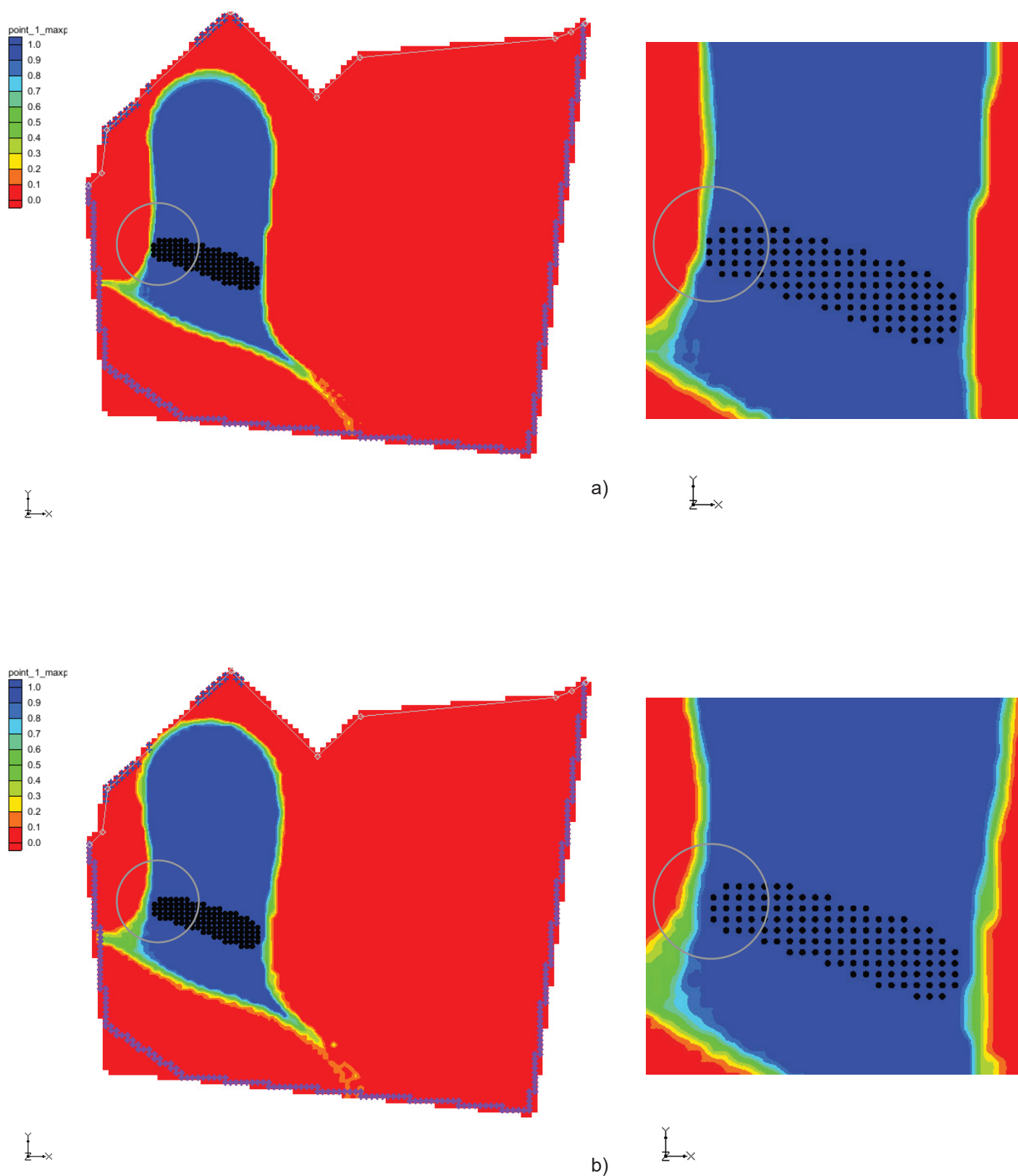
Localização do poço



Anexo 16:

Funcionamento da barreira hidráulica com vazão de 5 m³/dia: a (visão em planta) e b (visão em perfil);
 Funcionamento da barreira hidráulica com vazão de 6 m³/dia: c (visão em planta) e d (visão em perfil);
 Funcionamento da barreira hidráulica com vazão de 7 m³/dia: e (visão em planta) e f (visão em perfil).





- a) Mapa de risco para barreira com vazão de 7 m³/dia. Nas áreas destacadas, partículas estão susceptíveis a não serem capturadas pela barreira, apresentando entre 30 e 40% de chance de falha.
- b) Mapa de risco para barreira com vazão de 9 m³/dia. Com o aumento da vazão, toda a pluma se encontra em uma região completamente segura