



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE TECNOLOGIA**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA HIDRÁULICA E AMBIENTAL**  
**PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA HIDRÁULICA E AMBIENTAL**  
**ÁREA DE RECURSOS HÍDRICOS**

**JEAN LEITE TAVARES**

**CALIBRAÇÃO DA DISPERSIVIDADE LONGITUDINAL DE**  
**AQUÍFEROS ATRAVÉS DO MÉTODO ITERATIVO DO**  
**GRADIENTE DE CONCENTRAÇÃO**

**FORTALEZA – CE**

**2014**

**JEAN LEITE TAVARES**

**CALIBRAÇÃO DA DISPERSIVIDADE LONGITUDINAL DE  
AQUÍFEROS ATRAVÉS DO MÉTODO ITERATIVO DO  
GRADIENTE DE CONCENTRAÇÃO.**

Tese submetida à Coordenação do Curso de Pós-graduação em Engenharia Hidráulica e Ambiental, da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Recursos Hídricos.

Orientador: Prof. Marco Aurélio Holanda de Castro, Ph.D.

Co-orientador: Prof. Paulo Roberto Lacerda Tavares, Doutor.

**FORTALEZA – CE**

**2014**

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca de Pós-Graduação em Engenharia - BPGE

- 
- T23c      Tavares, Jean Leite.  
            Calibração da dispersividade longitudinal de aquíferos através do método iterativo do gradiente de concentração / Jean Leite Tavares. – 2014.  
            110 f. : il. color., enc. ; 30 cm.
- Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia, Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil: Recursos Hídricos, Fortaleza, 2014.  
            Área de Concentração: Recursos Hídricos.  
            Orientação: Prof. Dr. Marco Aurélio Holanda de Castro.  
            Coorientação: Prof. Dr. Paulo Roberto Lacerda Tavares.
1. Recursos hídricos. 2. Águas subterrâneas. 3. Modelagem computacional. I. Título.

Esta tese foi submetida como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de Doutor em Recursos Hídricos, outorgado pela Universidade Federal do Ceará, e encontra-se à disposição dos interessados na Biblioteca Central da referida Universidade.

A citação de qualquer trecho desta Tese é permitida, desde que seja feita de acordo com as normas da ética científica.



Jean Leite Tavares

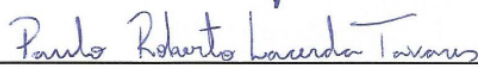
Em: Fortaleza, 27 de Novembro de 2014.

BANCA EXAMINADORA




---

Prof. Marco Aurélio Holanda de Castro, Ph.D. (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará – UFC




---

Prof. Paulo Roberto Lacerda Tavares, Doutor (Co-orientador)  
Universidade Federal do Ceará – UFC



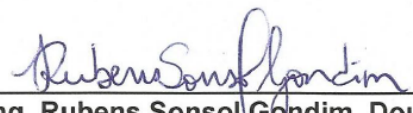

---

Prof. Horst Frischkorn, Doutor  
Universidade Federal do Ceará – UFC



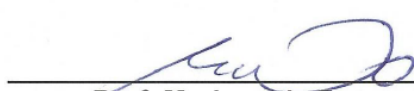

---

Prof. André Luis Calado Araujo, Ph.D.  
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Rio Grande do Norte - IFRN




---

Eng. Rubens Sonsol Gondim, Doutor  
Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária – EMBRAPA




---

Prof. Mariano da Franca Alencar Neto, Doutor  
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará - IFCE

**“O poço abria redondo, quase, ou ovalado. Como no recesso do mato, ali intrin, toda luz verdeja. Mas a água, mesma, azul, dum azul que haja – que roxo logo mudava...”**  
**João Guimarães Rosa**

## AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus pela proteção em todos os momentos de minha vida.

Agradeço à minha família, em especial à minha esposa, conselheira, amiga e eterna namorada, Francimara, à minha mãe, Da Guia, e aos meus anjos da guarda nesta vida, tia Carminha e tio Bonifácio.

Ofereço principalmente ao meu filho Ian, que ilumina todos os nossos dias, desde que soubemos de sua vinda para dividir seus sorrisos conosco, novamente, nesta vida.

Ofereço este trabalho e seus frutos à minha família, em especial às minhas irmãs, Jerlian e Jerlane, aos meus sobrinhos, Jean Gabriel, Maria Gabrielly e Júlia Raquel, aos meus cunhados e cunhadas, ao meu pai Evaldo, ao meu padrao Raimundo e aos meus sogros Aprígio e Oneide.

Ao meu orientador, professor Marco Aurélio, a quem devo toda a confiança e incentivo. Sem sua ajuda e sua generosidade este trabalho não teria sido desenvolvido.

Ao meu co-orientador, professor Paulo Tavares a quem devo, com toda gratidão, pela paciência em me ajudar durante todo o processo de desenvolvimento do método de calibração.

Aos amigos que fiz no programa de pós-graduação, em especial aos colegas João Marcelo, Erlandson, Graciano e Raquel Jucá pela inestimável ajuda nas etapas do doutorado e do presente trabalho.

Meu agradecimento também a todo corpo de professores do POSDEHA, em especial aos professores Francisco de Assis, Raimundo e Nilson Campos.

A todos os funcionários do Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental que sempre de forma amigável me ajudaram em todas as fases do trabalho, em especial aos amigos Erivelton Ferreira, Shirley Gomes, Edineuza Firmino e Júnior.

Aos amigos do IFRN sem os quais não seria possível desenvolver este trabalho, em especial ao colega Tito Matias e a cada um dos professores do DIAREN, principalmente aos colegas André Calado, Handson Pimenta, José Beldson, Milton Vale e Leonardo Pivotto. Aos diretores acadêmicos, João Batista e Jonas, e ao Diretor Geral do campus Natal Central, José Arnóbio. Todos têm minha eterna gratidão que será demonstrada com minha dedicação à nossa instituição.

Agradeço eternamente aos amigos pelos sorrisos e ajudas em todos os momentos em que eu e minha família estivemos no Ceará: Adriana Guimarães, Vicente Paulo, Ana Bárbara, Maurício Barreto, Patrícia Mesquita, Marcelo Gondim, Marcelo Teles, Carol, Thiago, Luana, Márcia Lorena e Socorro Hortegal.

Agradeço à Companhia de Gerenciamento dos Recursos Hídricos de Estado do Ceará – COGERH, Gerência Regional do Crato, nas pessoas de José Yarley de Brito Gonçalves e Claire Anne Viana de Sousa pela amizade e disponibilidade dos dados.

## ÍNDICE

1. INTRODUÇÃO .....	1
1.1.1 – Poluição das águas subterrâneas .....	2
1.1.2 – Modelagem do transporte de poluentes em aquíferos .....	4
1.1.3 – Calibração de parâmetros de transporte .....	6
1.1.4 - Contaminação das águas subterrâneas no município do Crato .....	8
1.2 – Objetivos.....	9
1.2.1 – Objetivo geral .....	9
1.2.2 – Objetivos específicos.....	10
1.3 – Estrutura da tese .....	10
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....	11
2.1 – Águas subterrâneas e tipos de aquíferos .....	11
2.3 – Problemática da contaminação da água subterrânea .....	13
2.4 – Modelagem matemática em águas subterrâneas.....	15
2.5 – Fundamentos do fluxo hídrico subterrâneo .....	16
2.5.1 – Velocidade de Darcy .....	16
2.5.2 – Equação da continuidade do fluxo subterrâneo .....	16
2.5.3 - Porosidade Total .....	17
2.5.4 - Porosidade efetiva.....	17
2.5.5 - Condutividade Hidráulica .....	17
2.5.6 – Velocidade intersticial.....	18
2.5.7 – Transmissividade.....	19
2.5.8 - Armazenamento Específico .....	19
2.5.9 – Gradiente hidráulico .....	20
2.6 – Fundamentos do Transporte de contaminantes em água subterrânea .....	20
2.6.1 – Aspectos gerais .....	20
2.6.2 – Processo de advecção .....	22
2.6.3 – Processo de difusão ou difusão molecular.....	23
2.6.4 – Processo de dispersão mecânica.....	24
2.6.5 – Processo de dispersão hidrodinâmica.....	26
2.6.6 – Coeficiente de dispersão e dispersividade .....	27
2.7 – Aspectos gerais da modelagem em águas subterrâneas.....	29
2.7.1 – Fatores intervenientes .....	29
2.7.2 – Influência da disponibilidade de dados no resultado da modelagem .....	29
2.7.3 – Etapa de calibração na modelagem em águas subterrâneas .....	30
2.7.4 – Etapa de validação do modelo .....	30
2.8 – Características e comportamento do nitrato em águas subterrâneas .....	30



3. METODOLOGIA.....	33
3.1 – Bases dos métodos iterativos com uso de gradientes .....	33
3.1.1 – Fundamentos do Método Iterativo do Gradiente Hidráulico (MIGH) .....	33
3.1.2 – Método Iterativo do Gradiente Hidráulico Alternativo .....	35
3.1.3 – Uso de dados de concentrações na calibração de parâmetros de transporte ...	37
3.2 – Etapas do processo de calibração.....	39
3.3 – Desenvolvimento do Método Iterativo do Gradiente de Concentração .....	40
3.4 – Caracterização da área de estudo.....	43
3.4.1 – Localização.....	43
3.4.2 – Caracterização climatológica.....	44
3.4.3 – Vegetação .....	44
3.4.4 – Geomorfologia .....	44
3.4.5 – Hidrogeologia .....	45
3.5 – Estudos de casos .....	46
3.5.1 – Exemplo hipotético 1 .....	46
3.5.2 – Exemplo hipotético 2 .....	48
3.5.3 – Caso Real.....	50
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	55
4.1 – Caso hipotético 1 .....	55
4.2 – Caso hipotético 2 .....	61
4.3 – Modelagem 1 do caso real .....	67
4.4 – Modelagem 2 do caso real .....	73
4.5 – Modelagem 3 do caso real .....	79
5. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	86
6. REFERÊNCIAS.....	89

## LISTA DE SÍMBOLOS E VARIÁVEIS

$v_x$ : velocidade fictícia ou velocidade de Darcy na direção x (L/T) .....	16
K: condutividade hidráulica (L/T) .....	16
dh/dx: gradiente hidráulico na direção x (L/L) .....	16
$v_y$ : velocidade fictícia ou velocidade de Darcy na direção y (L/T) .....	17
$v_z$ : velocidade fictícia ou velocidade de Darcy na direção z (L/T) .....	17
n: porosidade total.....	17
$V_v$ : volume de vazios ( $L^3$ ) .....	17
V: volume total ( $L^3$ ) .....	17
$\rho_p$ : massa específica das partículas ( $M/L^3$ ).....	17
$\rho_d$ : massa específica total ( $M/L^3$ ) .....	17
$n_e$ : porosidade efetiva.....	17
$V_D$ : volume de água drenada por gravidade ( $L^3$ ) .....	17
k: permeabilidade intrínseca do meio poroso ( $L^2$ ) .....	18
$\mu$ : viscosidade absoluta (M/TL) .....	18
$\nu$ : viscosidade cinemática ( $L^2/T$ ) .....	18
g: aceleração da gravidade ( $L/T^2$ ) .....	18
$v_i$ : velocidade intersticial, onde i, em coordenadas cartesianas bidimensional (L/T).....	18
T: transmissividade ( $L^2/T$ ) .....	19
b: espessura saturada do aquífero (L) .....	19
$S_s$ : armazenamento específico ( $L^{-1}$ ) .....	19
S: coeficiente de armazenamento.....	19
C: concentração do soluto ( $M/L^3$ ) .....	22
dC/dt: gradiente de concentração no tempo ( $M/L^3/T$ ) .....	22
dC/dx: gradiente de concentração na direção x ( $M/L^3/L$ ) .....	22
$F_x$ : Fluxo de massa do soluto na direção x por unidade de área por unidade de tempo ( $M/L^2.T$ ) .....	23
$D_d$ : Coeficiente de difusão ( $L^2/T$ ) .....	23
$D^*$ : coeficiente de difusão efetivo ( $L^2/T$ ) .....	23
$\omega$ : coeficiente de tortuosidade.....	23
$\alpha_L$ : dispersividade longitudinal [L] .....	26
$\alpha_T$ : dispersividade transversal [L] .....	26
$D_L$ : coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal ( $L^2/T$ ) .....	27
$D_T$ : coeficiente de dispersão hidrodinâmica transversal ( $L^2/T$ ).....	27
$F_{obj}$ : Função objetivo a ser minimizada.....	33
i: Índice da observação ou iteração.....	33

$h_i^{obs}$ : carga hidráulica observada (L) .....	33
$h_i^{calc}$ : carga hidráulica calculada (L) .....	33
$\nabla h^{calc}$ : gradiente hidráulico calculado.....	34
$\nabla h^{obs}$ : gradiente hidráulico observado.....	34
R: domínio do fluxo ( $L^2$ ) .....	34
$\partial F_{obj} / \partial T_j$ : derivada parcial da função objetivo com relação ao parâmetro a ser calibrado, no caso a transmissividade da célula.....	35
$\nabla h_j$ : gradiente hidráulico na célula j.....	35
$r_j$ : pequeno subdomínio do domínio R do modelo.....	35
$T_j^{i+1}$ : transmissividade da célula j na iteração $i+1$ .....	35
$T_j^i$ : transmissividade da célula j na iteração $i$ .....	35
$\lambda$ : fator de comprimento de passo.....	35
$ \nabla h_j^{i calc} $ : módulo do gradiente hidráulico calculado.....	35
$ \nabla h_j^{i obs} $ : módulo do gradiente hidráulico observado.....	35
N: Número de células ativas do aquífero modelado.....	36
RMSEH: <i>Root Mean Square Error of Head</i> (Raiz do Erro Médio Quadrático da carga hidráulica) .....	36
$c_i^{obs}$ : concentração observada ( $M/L^3$ ) .....	38
$c_i^{calc}$ : concentração calculada ( $M/L^3$ ) .....	38
$\kappa_{w_j}^{i+1}$ : coeficiente de decaimento do cloro no trecho “j” na iteração “i + 1”.....	38
$\kappa_{w_j}^i$ : coeficiente de decaimento do cloro no trecho “j” na iteração “i”.....	38
$ \nabla c_{tj}^{i obs} $ : módulo do gradiente de concentração observado no trecho “j” na iteração “i”.....	39
$ \nabla c_{tj}^{i calc} $ : módulo do gradiente de concentração calculado no trecho “j” na iteração “i”.....	39
$\alpha_{L_j}^{i+1}$ : dispersividade longitudinal da célula j na iteração “i+1”.....	40
$\alpha_{L_j}^i$ : dispersividade longitudinal da célula j na iteração “i”.....	40
$ \nabla c_j^{i calc} $ : módulo do gradiente de concentração calculado na célula j na iteração “i”.....	40
$ \nabla c_j^{i obs} $ : módulo do gradiente de concentração observado na célula j na iteração “i”.....	40
$\varphi_j$ : é o ângulo formado pelos vetores dos gradientes de concentração observado e calculado no espaço bidimensional.....	40
RMSEC: <i>Root Mean Square Error of Concentrations</i> (Raiz do Erro Médio Quadrático de Concentrações).....	41

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Dispersão de uma substância em meio poroso.....	2
Figura 2 – Inserção da modelagem na gestão ambiental dos recursos hídricos.....	5
Figura 3 – Fluxograma das etapas básicas para o desenvolvimento de modelos aplicados a águas subterrâneas.....	7
Figura 4 – Percentuais de abastecimento d'água e esgotamento sanitário do município do Crato – CE nos anos de 2006 e 2011.....	9
Figura 5 - Classificação da água situada abaixo da superfície do solo.....	11
Figura 6 – Tipos de aquíferos.....	13
Figura 7 – Relação entre a disposição de efluentes líquidos e aquíferos urbanos.....	14
Figura 8 – Transporte de contaminantes em águas sub-superficiais e subterrâneas	21
Figura 9 - Mecanismos associados a migração de contaminantes (solutos) em solos e águas subterrâneas.....	22
Figura 10 – Trajetória do soluto dissolvido em meio poroso.....	24
Figura 11 – Causas para as diferentes velocidades da água subterrânea.....	25
Figura 12 – Efeito conjunto das dispersões longitudinal e transversal.....	25
Figura 13 – Efeito da advecção, difusão e dispersão no transporte de poluentes.....	27
Figura 14 – Fontes e rotas das formas de nitrogênio em águas subterrâneas.....	32
Figura 15 – Fluxograma do processo de calibração pelo Método Iterativo do Gradiente de concentração.....	42
Figura 16 – Localização do município do Crato.....	43
Figura 17 – Localização do município do Crato em relação aos domínios sedimentares e cristalino do estado do Ceará.....	45
Figura 18 – Representação do aquífero referente ao exemplo hipotético 1.....	47
Figura 19 – Representação do aquífero referente ao exemplo hipotético 2.....	48
Figura 20 – Localização da Área-Crato, incluindo poços com dados de concentrações.....	51
Figura 21 – Representação do aquífero referente ao caso real – modelagem 1.....	52
Figura 22 – Representação do aquífero referente ao caso real – modelagem 2.....	53
Figura 23 – Linhas potenciométricas iniciais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para o exemplo hipotético 1. Valor inicial para $\alpha_L$ de 200m.....	56

Figura 24 – Linhas potenciométricas finais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para o exemplo hipotético 1. Valor final para $\alpha_L$ de 19,1m.....	57
Figura 25 – Média dos ângulos $\varphi$ , em graus, formado pelos vetores gradientes das concentrações observadas e calculadas x iteração para o exemplo hipotético 1.....	58
Figura 26 – Raiz do erro quadrático médio das concentrações em mg/L (RMSEC) x iteração para o exemplo hipotético 1.....	58
Figura 27 – Comparação entre concentrações observadas e calculadas através do MIGC para o exemplo hipotético 1.....	59
Figura 28 – Distribuição percentual dos valores da dispersividade longitudinal (m) na área do exemplo hipotético 1 no final da 6ª iteração após calibração com o MIGC.....	59
Figura 29 – Distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal (m) na área do exemplo hipotético 1 no final da 6ª iteração após calibração com o MIGC.....	60
Figura 30 – Linhas potenciométricas iniciais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para o exemplo hipotético 2. Valor inicial para $\alpha_L$ de 1000m.....	62
Figura 31 - Linhas potenciométricas finais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para o exemplo hipotético 2. Valor final para $\alpha_L$ de 99,96m.....	63
Figura 32 – Média dos ângulos $\varphi$ , em graus, formado pelos vetores gradientes das concentrações observadas e calculadas x iteração para o exemplo hipotético 2.....	64
Figura 33 – Raiz do erro quadrático médio das concentrações em mg/L (RMSEC) x iteração para o exemplo hipotético 2.....	64
Figura 34 – Comparação entre concentrações observadas e calculadas através do MIGC para o exemplo hipotético 2.....	65
Figura 35 – Distribuição percentual dos valores da dispersividade longitudinal na área do exemplo hipotético 2 no final da 62ª iteração após calibração com o MIGC.....	65
Figura 36 – Distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal (m) na área do exemplo hipotético 2 no final da 62ª iteração após calibração com o MIGC.....	66
Figura 37 – Linhas potenciométricas iniciais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para modelagem 1 do caso real. Valor inicial para $\alpha_L$ de 1000m.....	68

Figura 38 – Linhas potenciométricas finais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para a modelagem 1 do caso real. Valor final para $\alpha L$ de 102,3m.....	69
Figura 39 – Média dos ângulos $\varphi$ , em graus, formado pelos vetores gradientes das concentrações observadas e calculadas x iteração para a modelagem 1 do caso real.....	70
Figura 40 – Raiz do erro quadrático médio das concentrações em mg/L (RMSEC) x iteração para a modelagem 1 do caso real.....	70
Figura 41 – Comparação entre concentrações observadas e calculadas através do MIGC para a primeira modelagem do caso real.....	71
Figura 42 – Distribuição percentual dos valores da dispersividade longitudinal na área da primeira modelagem do caso real no final da 18ª iteração.....	72
Figura 43 – Distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal (m) obtidos com a 1ª modelagem na área do caso real no final da 18ª iteração após calibração com o MIGC.....	72
Figura 44 – Linhas potenciométricas iniciais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para modelagem 2 do caso real. Valor inicial para $\alpha L$ de 1000m.....	74
Figura 45 – Linhas potenciométricas finais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para a modelagem 2 do caso real. Valor final para $\alpha L$ de 97,6m. ....	75
Figura 46 – Média dos ângulos $\varphi$ , em graus, formado pelos vetores gradientes das concentrações observadas e calculadas x iteração para a modelagem 2 do caso real. ....	76
Figura 47 – Raiz do erro quadrático médio das concentrações em mg/L (RMSEC) x iteração para a modelagem 2 do caso real. ....	76
Figura 48 – Comparação entre concentrações observadas e calculadas através do MIGC para a segunda modelagem do caso real. ....	77
Figura 49 – Distribuição percentual dos valores da dispersividade longitudinal na área da segunda modelagem do caso real no final da 7ª iteração.....	78
Figura 50 – Distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal (m) obtidos com a 2ª modelagem na área do caso real no final da 7ª iteração após calibração com o MIGC. ....	79
Figura 51 – Linhas potenciométricas iniciais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para modelagem 3 do caso real. Valor inicial para $\alpha L$ de 1000m.....	80

Figura 52 – Linhas potenciométricas finais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para a modelagem 3 do caso real. Valor final para $\alpha L$ de 98m. ....	81
Figura 53 – Média dos ângulos $\varphi$ , em graus, formada pelos vetores gradientes das concentrações observadas e calculadas x Iteração para a modelagem 3 do caso real. ....	82
Figura 54 – Raiz do erro quadrático médio das concentrações em mg/L (RMSEC) x Iteração para a modelagem 3 do caso real.....	82
Figura 55 – Comparação entre concentrações observadas e calculadas através do MIGC para a terceira modelagem do caso real.....	83
Figura 56 – Distribuição percentual dos valores da dispersividade longitudinal na área da terceira modelagem do caso real no final da 13 <sup>a</sup> iteração.....	84
Figura 57 – Distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal obtidos com a 3 <sup>a</sup> modelagem na área do caso real no final da 13 <sup>a</sup> iteração após calibração com o MIGC.....	85

**LISTA DE TABELAS**

Tabela 1 – Identificação e localização dos poços com concentrações usadas como pontos fixos para o exemplo hipotético 1.....	48
Tabela 2 – Identificação e localização dos poços com concentrações usadas como pontos fixos para o exemplo hipotético 2.....	50
Tabela 3 – Identificação e localização dos poços com respectivas concentrações usadas nas modelagens do caso real.....	54



## RESUMO

O entendimento de como ocorre o transporte de solutos em águas subterrâneas é fundamental para o correto gerenciamento deste recurso cada vez mais sujeito a pressões antrópicas. Para a modelagem deste processo, um parâmetro fundamental é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica, cujo componente mais importante, em meio poroso, é a dispersividade longitudinal ( $\alpha_L$ ). A determinação de  $\alpha_L$  ocorre normalmente através de experimentos com aplicação restrita às áreas de interesse e resultados normalmente imprecisos. O presente trabalho teve como objetivo principal calibrar  $\alpha_L$  em aquíferos através do Método Iterativo do Gradiente de Concentração (MIGC) elaborado a partir de uma adaptação da metodologia proposta para o Método Iterativo do Gradiente Hidráulico (MIGH). O processo se inicia a partir da simulação hidrodinâmica, posteriormente são inseridas concentrações obtidas em campo ou hipotéticas no modelo de simulação de transporte de solutos. Em seguida é gerada uma matriz de concentrações que servirá de base para o processo iterativo do MIGC. Foram estruturados dois modelos, um denominado modelo observado ou fixo, no qual as concentrações de campo são fixadas e outro modelo denominado de calculado ou não fixo. Ao longo do processo de calibração são geradas matrizes de concentrações que permitem calcular os gradientes espaciais de concentração nos modelos fixo e não fixo. A média dos ângulos entre os gradientes de concentrações observados e calculados e o erro médio quadrático são os critérios de convergência para aferir o processo de calibração. Nas cinco modelagens apresentadas, os resultados para estes dois critérios indicam a eficiência do método de calibração. Seguindo a metodologia clássica de calibração de parâmetros, no MIGC as iterações continuam enquanto os valores mínimos para os referidos critérios não forem atingidos e ocorre, por conseguinte, a alteração dos valores da dispersividade longitudinal entre as iterações. Este mecanismo é baseado na razão entre os gradientes de concentrações observados e calculados em cada uma das células do modelo. Os resultados foram obtidos a partir do uso de concentrações de nitrato em dois exemplos hipotéticos com graus de complexidade diferenciados e um caso real aplicado na região do município do Crato, inserido na Bacia Sedimentar do Araripe, situada no sul do estado do Ceará, Brasil. Para os casos estudados houve uma convergência expressiva das médias dos ângulos formados entre os gradientes de concentração observados e calculados e do erro médio quadrático das concentrações, obtendo-se, como resultado final, uma matriz com a maioria dos valores de  $\alpha_L$  próximos aos determinados inicialmente. O MIGC se apresenta como um método prático e rápido para a calibração da dispersividade longitudinal. Sugere-se o desenvolvimento de um programa computacional que automatize o MIGC para que o mesmo seja otimizado em situações mais complexas.

Palavras-chave: modelagem computacional, dispersão de poluentes, água subterrânea.

## ABSTRACT

The understanding of how the transport of solutes in ground water occurs is critical to the proper management of this resource increasingly subjected to thropogenic pressures. In order to model this process, a key parameter is the coefficient of hydrodynamic dispersion, whose most important component in porous environments is the longitudinal dispersivity ( $\alpha_L$ ). The determination of  $\alpha_L$  usually takes place through experiments restricted to areas of interest and with often inaccurate results. Numerical methods are also used in order to attain parameter estimation. This study aimed mainly at calibrating  $\alpha_L$  in aquifers through the Iterative Method of the Gradient of Concentration (IMGC) derived from an adaptation of the methodology proposed for the Iterative Method of Hydraulic Gradient (IMHG). The process starts from the hydrodynamic simulation. Later, concentrations obtained from fields or in a hypothetic way are inserted using the model of simulation of solute transportation. Then, a matrix of concentrations is generated, which will work as the basis for the iterative process of IMGC. Two models were structured: one called observed or fixed model in which the concentration field is fixed and another model named calculated or not fixed. Throughout the calibration process arrays of concentrations are generated and used for calculating the spatial concentration of gradients in fixed and not fixed models. The average angle between the gradients of observed and calculated concentrations and the mean squared error are the convergence criteria to assess the calibration process. In the five models presented in this research, the results for these two criteria indicate the efficiency of the calibration method. Following the classical methodology of parameter calibration in the IMGC iterations continue as the minimum values for these criteria are not attained, therefore, the change of the longitudinal dispersivity varies among iterations. This mechanism is based on the ratio between the observed and calculated gradients of concentrations at each model cells. The results were obtained from the use of nitrate concentrations at two hypothetical samples with different degrees of complexity and also with a real case applied int he municipality of Crato, inserted in the Sedimentary Basin region of Araripe. For the cases analyzed in this study, there was a significant decay of the average angle formed between the gradients of observed and calculated concentration and the mean squared error of concentrations, obtaining as a result, a matrix with  $\alpha_L$  values close to those initially stipulated. IMGC presents itself as a practical method. It is suggested the development of a computer program that automates IMGC so that it is better used in more complex situation.

keywords: computational modeling, pollutant dispersion, underground water.

## 1. INTRODUÇÃO

Segundo estimativas da ONU, cerca de 26 países distribuídos por todos os continentes já enfrentam sérias dificuldades ocasionadas pela falta d'água, conseqüente do aumento do consumo e da poluição dos mananciais superficiais e subterrâneos. Dados mostram que o consumo total de água do mundo passou de aproximadamente  $2 \times 10^3$  km<sup>3</sup>/ano para  $5,3 \times 10^3$  km<sup>3</sup>/ano nas últimas décadas (TUNDISI, 2005).

A escassez hídrica interfere diretamente no desenvolvimento social e surge como uma das principais barreiras, principalmente nos países em desenvolvimento, que afetam as possibilidades de expansão das capacidades e habilidades humanas (MEHTA, 2014).

A concepção de que a água é um bem inesgotável foi substituída pelo entendimento de que a mesma se trata de um recurso escasso e portanto se trata de um bem econômico, com uma demanda cada vez maior em comparação à oferta cada vez mais reduzida em função, principalmente, da má distribuição e da degradação da qualidade.

A proteção dos aquíferos subterrâneos surge como uma necessidade urgente e se apresenta como um dos principais focos de investimentos dos poderes públicos no que se refere às políticas ambientais e de gestão hídrica (RIBEIRO *et al.*, 2009).

A adequada gestão dos mananciais hídricos, inclusive os subterrâneos, depende de estudos que possibilitem o desenvolvimento de ferramentas técnicas que traduzem o comportamento desses sistemas, subsidiando os tomadores de decisão (FRAGOSO JR., 2009; LAVOIE *et al.*, 2013).

Dentre estas ferramentas, a modelagem matemática, associada ao avanço da computação, permite desenvolver programas preditivos que tanto auxiliam na gestão dos aspectos quantitativos quanto dos qualitativos.

A exploração sustentável dos mananciais subterrâneos conta com o recurso dos modelos de fluxo, nos quais são feitas simulações em diversas situações de usos e recargas. Atualmente, tais simulações utilizam sobretudo os Modelos Computacionais Numéricos, que apresentam a grande vantagem de permitirem a avaliação conjunta dos aspectos quantitativos e qualitativos (SOUZA, 2007; BEAR, 1972).

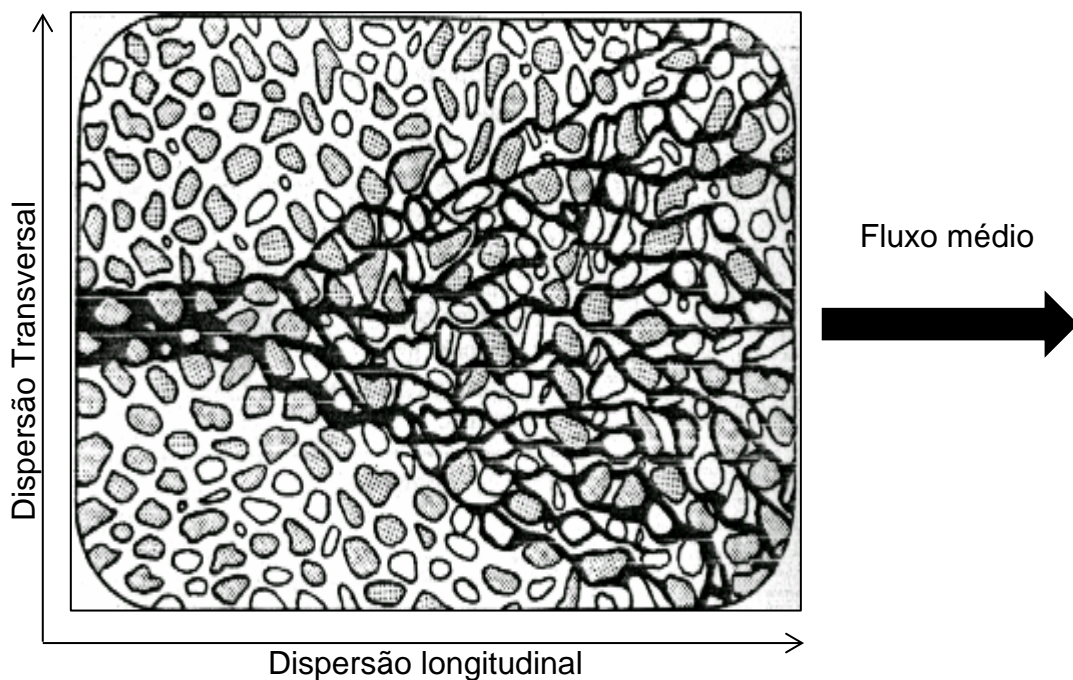
### 1.1.1 – Poluição das águas subterrâneas

Os poluentes podem ser encontrados no subsolo em diferentes formas. No entanto, são encontrados normalmente na forma dissolvida (soluto) em água (solvente). Quando há o fluxo da água, há, também, o transporte dos poluentes.

A simples análise macroscópica de um meio poroso indica que o transporte de poluentes é governado pela direção do fluxo. Esse processo se denomina advecção e consiste no transporte de solutos ao longo das linhas de corrente da velocidade de filtração. Entretanto, uma análise mais detalhada, na escala microscópica, mostra que o meio poroso é composto de pequenas partículas e poros. O fluxo ocorre ao redor destas partículas e através dos poros. Assim, a água, para fluir, percorre trajetórias mais complexas, acarretando a dispersão lateral, o que implica em uma trajetória maior que a da corrente principal. Esse processo tem como consequência um fenômeno de fluxo denominado dispersão mecânica.

O efeito mais importante da dispersão é a mistura entre as diferentes camadas que fluem pelos poros, acarretando o espalhamento do poluente para além da zona que ocuparia, se não existisse este fenômeno, retratado na figura 1.

Figura 1 – Dispersão de uma substância em meio poroso.



Fonte: Adaptado de Freeze & Cherry, 1979.

Ao enfatizar o aspecto do transporte dos poluentes nas águas subterrâneas, destaca-se a dificuldade em avaliar como ocorre o processo de dispersão.

O presente trabalho pretende desenvolver um método numérico para a calibração da dispersividade longitudinal, propriedade do aquífero relacionada ao processo de dispersão de poluentes. Para isso o método proposto foi aplicado em dois exemplos hipotéticos e um aquífero real na região do município do Crato, situado na Bacia Sedimentar do Araripe, sul do Estado do Ceará, Brasil.

O poluente utilizado na modelagem foi o nitrato, devido sua importância como contaminante de águas subterrâneas em diversas partes do mundo. Além disso, o nitrato pode ser considerado inerte em aquíferos, o que simplifica o processo de modelagem.

Os mananciais subterrâneos são fontes de abastecimento de água doce para grande parte dos principais centros urbanos no mundo. A escassez dos recursos hídricos superficiais associada ao crescimento populacional, à deterioração acelerada da qualidade dos mananciais e ao processo de mudanças climáticas traz como consequência direta a necessidade de proteção dos recursos subterrâneos, sendo de fundamental importância o desenvolvimento de modelos que simulem situações reais para possibilitar o planejamento e a gestão dos mesmos envolvendo os aspectos quantitativo e qualitativo.

Niu *et al.* (2014) fizeram um levantamento dos principais temas envolvidos em pesquisas sobre águas subterrâneas nas últimas duas décadas, e o nitrato aparece em posição de destaque em termos globais como um dos principais contaminantes dos mananciais subterrâneos.

O número de estudos sobre este contaminante reflete o fato da contaminação das águas subterrâneas por nitrato ter aumentado de forma alarmante em várias partes do mundo, devido, principalmente, ao aumento da utilização dos fertilizantes nitrogenados associados à expansão da agroindústria, às mudanças nos padrões de uso do solo e ao aumento da poluição do solo por esgotos domésticos e industriais (SHARMA & SOBTI, 2012).

A contaminação das águas por nitrato cada vez mais se torna um problema, principalmente, nos chamados aquíferos urbanos (SINGH, 2014).

### 1.1.2 – Modelagem do transporte de poluentes em aquíferos

A proteção e descontaminação dos recursos hídricos subterrâneos dependem principalmente da quantificação do fluxo e do transporte de contaminantes em seu interior. Estes parâmetros podem ser determinados por medidas de campo e por modelagem matemática. A abordagem, utilizando as medidas de campo, é a mais direta e a mais precisa; entretanto, raramente é a única a ser utilizada, devido às questões de alto custo e de dificuldades operacionais (CLEARY, 1991 *apud* RIBEIRO *et al.*, 2007).

Assim, a abordagem quantitativa utilizada com maior frequência é a modelagem matemática. Os modelos matemáticos empregam uma série de equações que simulam e preveem respostas de um aquífero sujeito a modificações tais como o transporte de um poluente no seio da massa líquida.

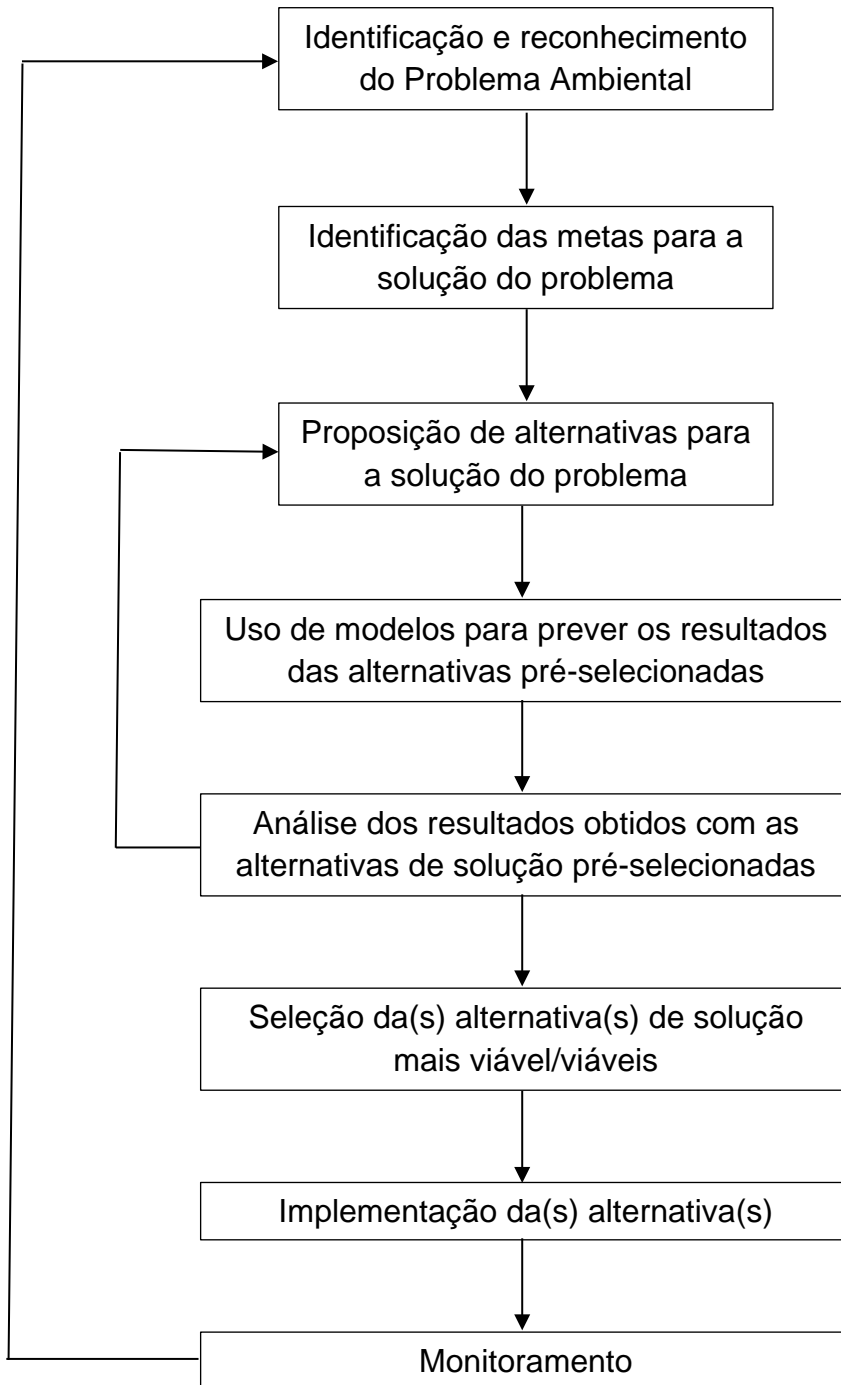
A modelagem matemática consiste na representação matemática do que acontece na natureza a partir de um modelo conceitual, baseado no levantamento e na interpretação de dados e nas observações de um sistema real. Objetiva, além do entendimento da situação atual, a possibilidade de se prever situações futuras buscando direcionar ações de decisão.

A aplicação da técnica de modelagem matemática para diferentes fins tornou-se uma ferramenta rotineira no auxílio da solução de diferentes problemas, inclusive de águas subterrâneas, sendo usada com frequência em projetos de gestão de recursos hídricos. Assim, este trabalho discute conceitos e fundamentos da modelagem matemática como ferramenta para a gestão dos recursos hídricos subterrâneos.

A modelagem associada às águas subterrâneas assume sua vocação por primazia, que é o de contribuir com as já disponíveis informações de campo oriundas de uma pesquisa intensiva e bem direcionada, de maneira que, juntas, possam determinar direções na tomada de decisões, seja de regulamentação, previsão ou gestão dos mananciais.

A figura 2 apresenta uma proposta de como a atividade de modelagem pode ser inserida na tomada de decisões relacionadas à gestão ambiental adequada dos recursos hídricos.

Figura 2 – Inserção da modelagem na gestão ambiental dos recursos hídricos.



Fonte: Adaptado de Bear, 1972.

Os principais passos para o processo de modelagem matemática e computacional em aquíferos são:

- identificação das informações necessárias à gestão da tomada de decisões;
- desenvolvimento de um modelo conceitual;
- desenvolvimento do modelo matemático;
- desenvolvimento do modelo numérico e computacional;
- calibração do modelo;
- aplicação do modelo;
- análise da sensibilidade do modelo;
- resumo, conclusões e repasse de informações.

A figura 3 apresenta um fluxograma para o desenvolvimento de modelos aplicados a águas subterrâneas.

#### 1.1.3 – Calibração de parâmetros de transporte

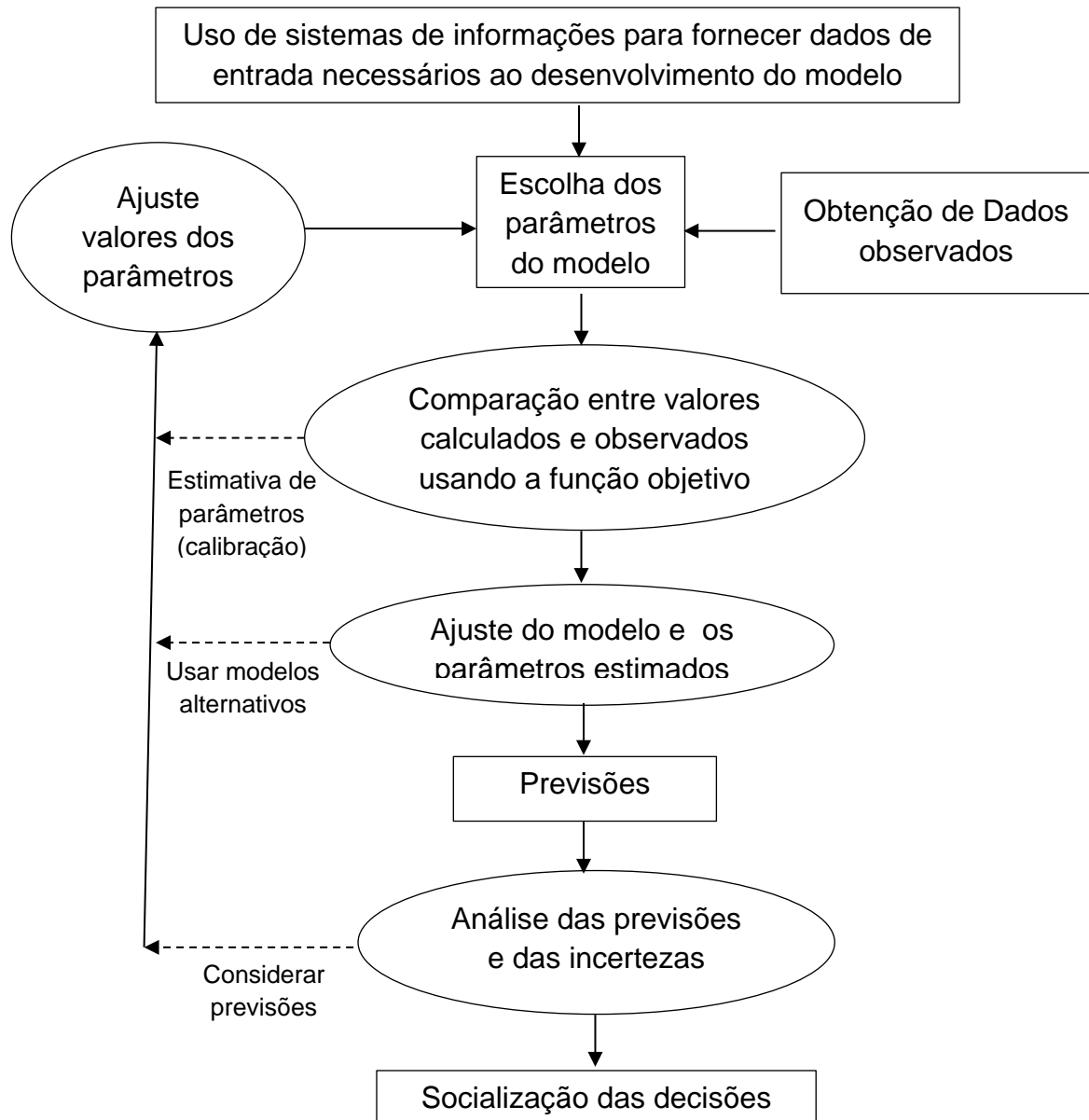
Segundo Sun (1995), a construção de um modelo aplicado a águas subterrâneas consiste em associar um conjunto de equações governantes e condições de contorno relacionadas às características do aquífero, do fluxo hídrico e ao transporte de massa.

Dificilmente todas as exigências para se ter um processo de modelagem completo em águas subterrâneas são obtidas. Isso se deve, em primeiro lugar, ao fato de que as equações selecionadas que governam o modelo podem não ter sido as mais adequadas; em segundo lugar, não se sabe com exatidão o valor correto de cada parâmetro de entrada e, em terceiro lugar, as informações sobre condições de contorno, fontes ou saídas de contaminantes do sistema (sumidouros), geralmente não são suficientes ou são imprecisas.

Devido a todas estas dificuldades, após a construção de um modelo, baseado em um entendimento preliminar do sistema real, tem-se necessidade de calibrá-lo com o uso de dados de campo.



Figura 3 - Fluxograma das etapas básicas para o desenvolvimento de modelos aplicados a águas subterrâneas.



Fonte: Adaptado de Hill & Tiedeman, 2007.

Em modelos aplicados a águas subterrâneas, a etapa de calibração ou estimativa de parâmetro consiste basicamente em mudar os valores dos parâmetros de entrada, dentro de um intervalo razoável, em uma tentativa de corresponder a um estado hidráulico do aquífero ou ao comportamento do soluto dentro de alguns critérios aceitáveis (MDEQ, 2014).

Os principais processos que governam o transporte de solutos em águas subterrâneas são a advecção, a difusão e a dispersão hidrodinâmica. Este último é frequentemente representado por uma relação que envolve a velocidade do fluido no

interior dos poros e um parâmetro que expressa a capacidade de dispersão do meio poroso, denominado de dispersividade, unidade escalar geralmente dada em metros (KOVARIK, 2000). A componente longitudinal da dispersividade é o parâmetro de transporte mais frequentemente calibrado e normalmente são utilizados experimentos laboratoriais para a sua determinação (BEAR, 1972, FREEZE & CHERRY, 1979, GELHAR *et al.*, 1985).

Delgado (2007) esclarece que valores da dispersividade obtidos através de experimentos laboratoriais podem estar até seis vezes menores que os resultados obtidos a partir de dados de campo, implicando em alterações significativas no processo de modelagem.

Uma alternativa é calibrar o referido parâmetro através de métodos numéricos associados a modelos computacionais.

O Processing Modflow Pro (PMWIN), por exemplo, é um programa computacional desenvolvido inicialmente por Chiang & Kinzelbach (1991) e posteriormente por Chiang (2006). Funciona como pré e pós-processador para o MODFLOW (MCDONALD e HARBAUGH, 1988) e para o MT3DMS (ZHENG & WANG, 1999), o primeiro desenvolvido pelo U. S. Geological Survey e o segundo pelo U.S. Army Corps of Engineers para a solução das equações que governam o escoamento das águas subterrâneas e o transporte de solutos por meio do método das diferenças finitas.

A pesquisa teve como meta principal o desenvolvimento de um método iterativo de calibração da dispersividade longitudinal com o uso do gradiente de concentrações como critério de otimização.

#### 1.1.4 - Contaminação das águas subterrâneas no município do Crato

O município do Crato possui uma população de mais de 121 mil pessoas com 83% do contingente populacional vivendo na zona urbana. (IPECE, 2013).

A principal fonte de abastecimento do município é o aquífero médio na região do cariri cearense. A pressão ambiental sobre o manancial aumenta a cada ano com o crescimento populacional e a falta de investimentos em saneamento ambiental.

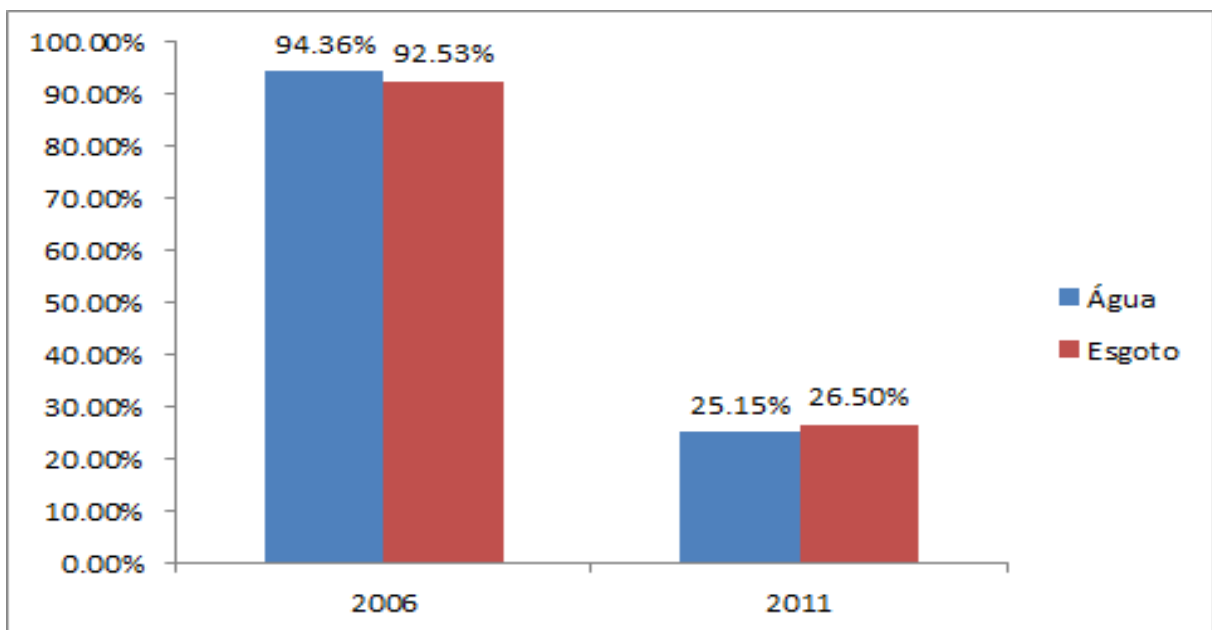
A figura 4 apresenta os níveis de cobertura dos sistemas de abastecimento e esgotamento sanitário do município do Crato. Destaca-se o baixo índice referente a

coleta e tratamento de esgotos, o que indica maior possibilidade de contaminação do aquífero.

Outro fator que mostra a necessidade de desenvolver estratégias de controle e gestão da qualidade da água subterrânea no município do Crato é que o mesmo possui 54% da extensão do seu aquífero classificada como altamente vulnerável (TAVARES *et al.*, 2009).

O estudo de modelagem matemática hidrológica realizado pela Companhia de Gestão dos Recursos Hídricos do Estado do Ceará (COGERH) e financiado pelo Banco Mundial, concluído em 2011, alerta para a necessidade de se prosseguir com o monitoramento e a caracterização da evolução da contaminação por nitrato já instalada na região (COGERH, 2011).

Figura 4 – Percentuais de abastecimento d'água e esgotamento sanitário do município do Crato – CE nos anos de 2006 e 2011.



Fonte: SEINFRA, 2011 *apud* IPECE, 2013.

## 1.2 – Objetivos

### 1.2.1 – Objetivo geral

O objetivo geral da tese é desenvolver o Método Iterativo do Gradiente de Concentração aplicado à calibração da dispersividade longitudinal em aquíferos.

### 1.2.2 – Objetivos específicos

- a) Elaborar procedimento de integração entre o Método Iterativo do Gradiente de Concentração e simuladores do fluxo hídrico subterrâneo e de transporte de poluentes em meio poroso.
- b) Calibrar a dispersividade longitudinal em aquíferos, usando o Método Iterativo do Gradiente de Concentração.
- c) Determinar a distribuição potenciométrica da dispersividade longitudinal do aquífero da região do Crato, inserido na Bacia Sedimentar do Araripe.

### 1.3 – Estrutura da tese

Este trabalho está dividido em seis partes principais, descritas a seguir.

No Capítulo 1, consta a introdução, onde estão definidos os objetivos e as justificativas da pesquisa, bem como a organização da tese.

O Capítulo 2 faz referência ao embasamento teórico relacionado aos principais temas abordados no trabalho, destacando alguns estudos que contribuem com o entendimento da pesquisa.

O Capítulo 3 apresenta a metodologia da pesquisa, com o detalhamento do Método Iterativo do Gradiente de Concentração, associado à calibração da dispersividade longitudinal de aquíferos com base em dados de concentrações observados e calculados.

O Capítulo 4 apresenta os resultados e discussões relativos aos três estudos de caso.

O Capítulo 5 contempla as conclusões e recomendações para trabalhos futuros.

O Capítulo 6 finaliza o trabalho e apresenta as referências bibliográficas.

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 – Águas subterrâneas e tipos de aquíferos

Os hidrogeólogos dividem a água presente no solo de acordo com a localização nas zonas saturada ou não saturada. Esta divisão é apresentada na figura 5.

Assim, a água subterrânea é definida como a água presente na zona de saturação e, segundo Freeze & Cherry (1979), pode estar armazenada em três tipos de estruturas geológicas:

- Aquíferos: são unidades geológicas saturadas e permeáveis que podem transmitir quantidades significativas de água com a existência de gradientes hidráulicos normais.
- Aquicludes: são definidos como estruturas geológicas saturadas que são incapazes de transmitir quantidades significativas de água na presença de gradientes hidráulicos normais.
- Aquitardes: é descrito como a camada de menor permeabilidade em uma sequência estratigráfica. Geralmente, estas camadas são suficientemente permeáveis para transmitir quantidades de água importantes em estudos do fluxo regional de água subterrânea, mas não possuem permeabilidade suficiente para uso como fonte de abastecimento.

Figura 5 - Classificação da água situada abaixo da superfície do solo

Zona Vadosa (Zona de Aeração)	Água vadosa	Água no solo	Limite da zona de água no solo
		Zona Vadosa Intermediária	Limite intermediário
		Água capilar	Franja capilar
Limite superior do Lençol freático			
Zona de saturação (Zona freática)	Água Subterrânea		

Fonte: Adaptado de Fetter (2001).

A principal estrutura de armazenamento das águas subterrâneas são os aquíferos. Sua caracterização ocorre através de parâmetros dimensionais como extensão, espessura e geometria, todos estes influenciados pela estrutura geológica, pela configuração estratigráfica e pelos parâmetros hidrodinâmicos, como por exemplo: transmissividade, capacidade de armazenamento, porosidade efetiva, condições de recarga e descarga além de variáveis de estado que descrevem a situação do manancial subterrâneo – superfície piezométrica, qualidade de água, condições de exploração etc.

Os aquíferos podem ser classificados de acordo com a pressão das águas nas suas superfícies limítrofes e também em função da capacidade de transmissão de água das respectivas camadas limítrofes: confinante superior e confinante inferior (FEITOSA *et al.*, 2008).

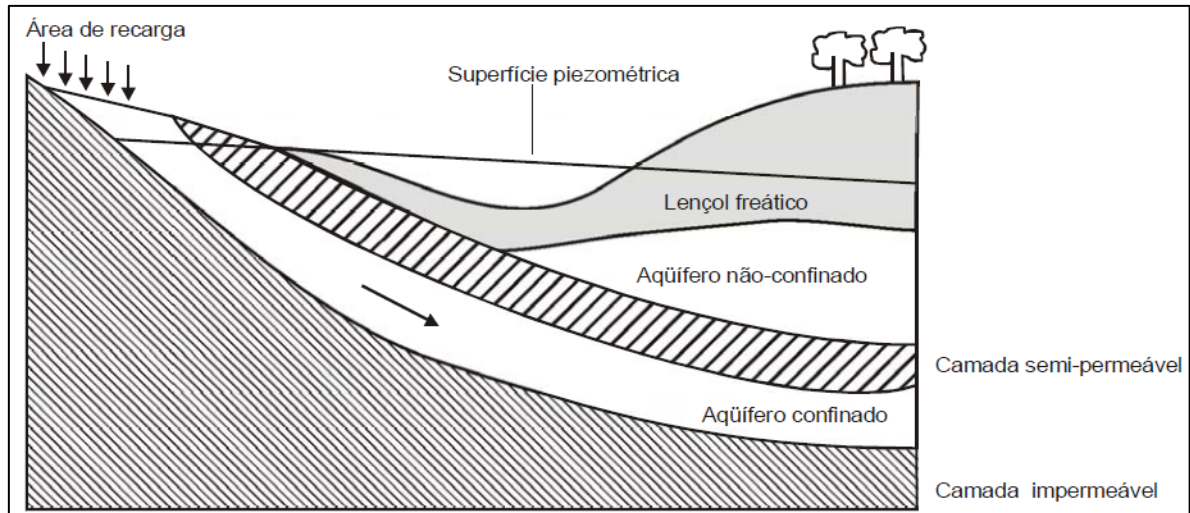
O aquífero confinado, também chamado de aquífero sob pressão, é aquele no qual a pressão da água no topo é maior do que a pressão atmosférica, com toda espessura saturada e pode ser drenante e não drenante. O não drenante é aquele cujas camadas limítrofes são formações geológicas impermeáveis (aquicludes) e o drenante é o aquífero no qual, pelo menos, uma das camadas limítrofes é semipermeável, permitindo a entrada e saída de fluxos.

No aquífero livre ou não confinado não existe camada limitante na fase superior. Os aquíferos livres são aqueles onde o limite superior é a superfície freática, cuja posição é função do regime de fluxo subterrâneo e na qual todos os pontos da superfície se encontram na pressão atmosférica. Podem ser também drenantes ou de base semipermeável e não drenantes de base impermeável. A forma da superfície superior do aquífero livre é denominada de superfície do lençol freático. Essa forma vai depender em parte da topografia do terreno, tendendo, em geral, a acompanhar a conformação da superfície do solo. O limite superior do aquífero livre é definido pela própria superfície freática.

Aquífero suspenso é um caso especial de aquífero livre formado sobre uma camada impermeável ou semipermeável de extensão limitada e situada entre a superfície freática e o nível do terreno (FEITOSA *et al.*, 2008).

A figura 6 apresenta um esquema com os tipos de aquíferos.

Figura 6 – Tipos de aquíferos



Fonte: Menescal, 2008.

### 2.3 – Problemática da contaminação da água subterrânea

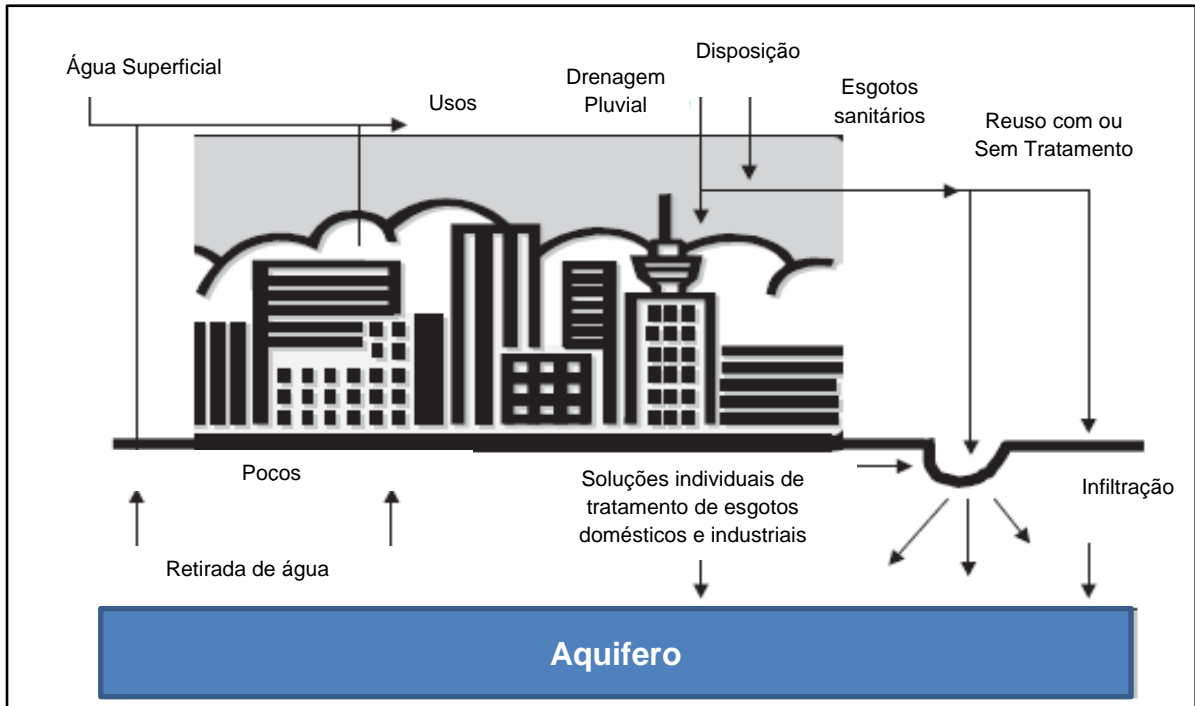
À medida que as águas subterrâneas desempenham cada vez um papel mais importante como fonte potencial de recursos hídricos em nível global, mais medidas de proteção devem ser adotadas contra a contaminação destes mananciais. Os crescimentos populacional, agrícola e industrial, experimentados a partir da segunda metade do século XX, em conjunto com o aumento da necessidade de mais recursos energéticos, trazem como consequência que a quantidade de resíduos gerados supera a capacidade de absorção destes por parte do ambiente (FREEZE & CHERRY, 1979).

O quadro descrito acima se intensifica nas áreas urbanas, onde os mananciais subterrâneos estão mais expostos a impactos quantitativos e qualitativos.

Um ponto crítico relacionado à gestão da qualidade das águas subterrâneas é o que trata das interligações com as águas superficiais, geralmente mais susceptíveis e mais poluídas. Estas interfaces ocorrem, por exemplo, nas estruturas que permitem o abastecimento público, à destinação final dos resíduos sólidos e líquidos produzidos nas áreas urbanas, os impactos resultantes do uso e ocupação do solo nas cidades, o escoamento superficial nas áreas urbanas que infiltram no solo, entre outras possíveis fontes de poluição (GESSNER *et al.*, 2014).

A figura 7 apresenta as principais interações entre águas subterrâneas e a disposição de dejetos nas zonas urbanas.

Figura 7 – Relação entre a disposição de efluentes líquidos e aquíferos urbanos.



Fonte: Adaptado de LERNER *et al.* (2004).

Segundo Bear (1972), as principais fontes de contaminação da água subterrânea são:

- Organismos patogênicos: geralmente a presença dos organismos patogênicos nas águas subterrâneas está associada à falta de coleta e tratamento adequados dos esgotos.
- Contaminantes inorgânicos: os mais comuns são cloreto, compostos sulfurados, compostos nitrogenados, metais pesados, entre outros relacionados também à falta de coleta adequada de resíduos líquidos, mas também sólidos.
- Contaminantes orgânicos: associados principalmente à contaminação derivada de resíduos industriais e compostos como hidrocarbonetos clorados e aromáticos.



## 2.4 – Modelagem matemática em águas subterrâneas

Segundo Campos (2009), pode-se definir um modelo como conjunto de hipóteses sobre a estrutura ou o comportamento de um sistema físico pelo qual se procura explicar ou prever, dentro de uma teoria científica, as propriedades de um sistema. O modelo é a representação conceitual do sistema, a qual preserva as principais características do sistema.

As aplicações mais usuais de modelos em hidrogeologia permitem classificá-los em três tipos principais (TAVARES, 2010):

- Preditivos: usados para prever respostas dos aquíferos a qualquer tipo de modificação das condições originais.
- Interpretativos: usados para estudar a configuração dos sistemas, organização e distribuição das informações na área.
- Genéricos: usados para analisar o escoamento em sistemas hidrogeológicos.

Com relação à estruturação do modelo é possível classificá-los também em:

- Modelos físicos: simulam, em laboratórios, o escoamento subterrâneo diretamente em tanques de sedimentação.
- Modelos analógicos: utilizam quadros elétricos e dispositivos eletrônicos para simular as características dos aquíferos, o fluxo hídrico e o transporte de solutos.
- Modelos matemáticos: simulam, geralmente, de forma computacional, o escoamento das águas subterrâneas através da solução das equações governantes do fenômeno.

Segundo Sun (1999), os modelos matemáticos, por sua vez, são classificados em:

- Determinísticos e estocásticos: dependendo se variáveis aleatórias aparecem no modelo.
- Linear e não linear: dependendo se as equações do modelo são lineares ou não lineares.

- Estacionários e dinâmicos: dependendo se a variável tempo está incluída no modelo.
- Global e distribuído: dependendo do tratamento espacial das variáveis e parâmetros.

Segundo Tavares (2010), na modelagem de água subterrânea predominam os modelos distribuídos, descritos por equações diferenciais parciais, e os métodos utilizados para a solução destes problemas são de dois tipos: métodos analíticos e métodos numéricos.

A seguir, tem-se o equacionamento geral dos aspectos principais da modelagem em águas subterrâneas: fluxo hídrico e transporte de solutos.

## 2.5 – Fundamentos do fluxo hídrico subterrâneo

### 2.5.1 – Velocidade de Darcy

A Lei de Darcy descreve o fluxo hídrico subterrâneo através da taxa de escoamento em meio poroso. É proporcional à perda de carga hidráulica e inversamente proporcional ao comprimento da linha de fluxo. A equação 1 apresenta a Lei de Darcy.

$$v_x = -K \cdot \frac{dh}{dx} \quad (1)$$

Em que:

$v_x$  [L/T]: é a velocidade fictícia ou velocidade de Darcy;

$K$  [L/T]: é a condutividade hidráulica;

$dh/dx$  [L/L]: é o gradiente hidráulico. O sinal negativo indica que o fluxo de água acontece na direção da menor carga hidráulica.

### 2.5.2 – Equação da continuidade do fluxo subterrâneo

Considerando o regime de fluxo no estado permanente, a equação da continuidade ou balanço de massa do fluido mostra que a quantidade de água que entra num sistema é igual à quantidade de água que sai. A equação da continuidade é apresentada a seguir (STRACK, 1989 *apud* SOUZA, 2007):

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (2)$$

Em que:  $v_x$ ,  $v_y$  e  $v_z$  [L/T] são, respectivamente, fluxo de Darcy nas direções x, y e z.

### 2.5.3 - Porosidade Total

A porosidade total ( $n$ ) é a medida da quantidade de vazios ou interstícios presentes no solo expressos pela razão entre o volume de vazios ( $V_v$ ) e o volume total ( $V$ ) (TODD, 1980).

$$n = \frac{V_v}{V} = 1 - \frac{\rho_g}{\rho_d}, \quad (3)$$

Em que:

$\rho_g$  [M/L<sup>3</sup>]: massa específica das partículas;

$\rho_d$  [M/L<sup>3</sup>]: massa específica total.

### 2.5.4 - Porosidade efetiva

A porosidade efetiva ( $n_e$ ) expressa a quantidade de água disponível nos poros para o fluxo do fluido (TODD, 1980), já que parte do líquido é retido pelas forças moleculares e pela tensão superficial.

$$n_e = \frac{V_D}{V} \quad (4)$$

Em que:

$V_D$  [L<sup>3</sup>]: volume de água drenada por gravidade;

$V$  [L<sup>3</sup>]: volume total.

### 2.5.5 - Condutividade Hidráulica

A condutividade hidráulica ( $K$ ), que é o coeficiente de proporcionalidade na lei de Darcy, depende de fatores físicos, como porosidade, distribuição e

tamanho das partículas, forma das partículas, arranjo das partículas além das propriedades do próprio fluido (TODD, 1980).

A vazão é diretamente proporcional ao peso específico do fluido e inversamente proporcional à viscosidade dinâmica do fluido ( $\nu$ ), a qual é a medida da resistência ao cisalhamento.

A condutividade hidráulica é a medida da habilidade do aquífero em transportar um fluido. É um parâmetro que expressa a facilidade com que um fluido é transportado através do meio poroso (SOUZA, 2007).

$$K = \frac{k\rho g}{\mu} = \frac{kg}{\nu} \quad (5)$$

Em que:

K [L/T]: condutividade hidráulica,

k [L<sup>2</sup>]: permeabilidade intrínseca do meio poroso;

$\rho$  [M/L<sup>3</sup>]: massa específica;

$\mu$  [M/TL]: viscosidade absoluta;

$\nu$  [L<sup>2</sup>/T]: viscosidade cinemática;

g [L/T<sup>2</sup>]: aceleração da gravidade.

#### 2.5.6 – Velocidade intersticial

É a velocidade que o fluido assume entre os interstícios do solo e está relacionada à velocidade de Darcy com a porosidade efetiva (RUBIN *et al.*, 2008). A equação 6 apresenta a fórmula da velocidade intersticial.

$$v_i = \frac{K}{n_e} \frac{dh}{dx} \quad (6)$$

Em que:

$v_i$  [L/T]: velocidade fictícia ou velocidade de Darcy na direção x (L/T);

$K dh/dx$ : velocidade de Darcy na direção x;

$n_e$ : porosidade efetiva.

### 2.5.7 – Transmissividade

A transmissividade é conceituada como a quantidade de água que pode ser transmitida horizontalmente por toda a espessura do aquífero. Também pode ser entendida como a taxa de escoamento através de uma faixa vertical do aquífero com largura unitária e um gradiente hidráulico unitário (CABRAL, 1997).

O conceito de transmissividade é utilizado em estudos bidimensionais. Para aquíferos confinados a transmissividade é dada pela expressão (MAIDMENT, 1993; CHOW, 1998):

$$T = Kb \quad (7)$$

Em que:

T [L<sup>2</sup>/T]: transmissividade;

K [L/T]: condutividade hidráulica;

b [L]: espessura saturada do aquífero.

### 2.5.8 - Armazenamento Específico

Segundo Feitosa *et al.* (2008) o armazenamento específico de um aquífero saturado é definido como o volume de água liberado por um volume unitário do aquífero submetido a um decréscimo unitário de carga hidráulica.

O armazenamento específico pode ser calculado pela seguinte expressão (MAIDMENT, 1993; CHOW, 1998):

$$S_s = \frac{S}{b} \quad (8)$$

Em que:

S<sub>s</sub> [L<sup>-1</sup>]: armazenamento específico;

S: coeficiente de armazenamento;

b [L]: espessura saturada do aquífero.

### 2.5.9 – Gradiente hidráulico

O gradiente hidráulico  $\partial h/\partial x$ , onde  $h$  é a altura da coluna d'água e  $x$  é a coordenada espacial na direção  $x$ , representa a inclinação da superfície potenciométrica ou, em aquíferos não confinados, é o equivalente à inclinação do lençol freático. Os valores típicos variam de 0,0001 a 0,05 m/m. Valores altos do gradiente hidráulico em pontos ou áreas localizadas podem interferir na modelagem do transporte de solutos (NEWELL *et al.*, 1996).

## 2.6 – Fundamentos do Transporte de contaminantes em água subterrânea

### 2.6.1 – Aspectos gerais

O transporte de contaminantes em água subterrânea se inicia quando um líquido contaminante atravessa a zona não saturada e eventualmente chega à zona saturada. Vários processos químicos, físicos e biológicos podem ocorrer através do encaminhamento dos contaminantes através da zona não saturada antes de chegar ao aquífero.

Depois de chegar ao aquífero o contaminante poderá ser transportado por todo o manancial até os exutórios (rios, lagos, nascentes e poços de captação). Ao longo deste percurso, a concentração do contaminante poderá ser gradualmente reduzida devido a vários processos, também físicos, químicos e biológicos. Em grande parte dos casos, estes contaminantes podem tornar o aquífero sem utilidade para a maioria dos usos. A figura 8 indica como ocorre o transporte de contaminantes em águas sub-superficiais e subterrânea.

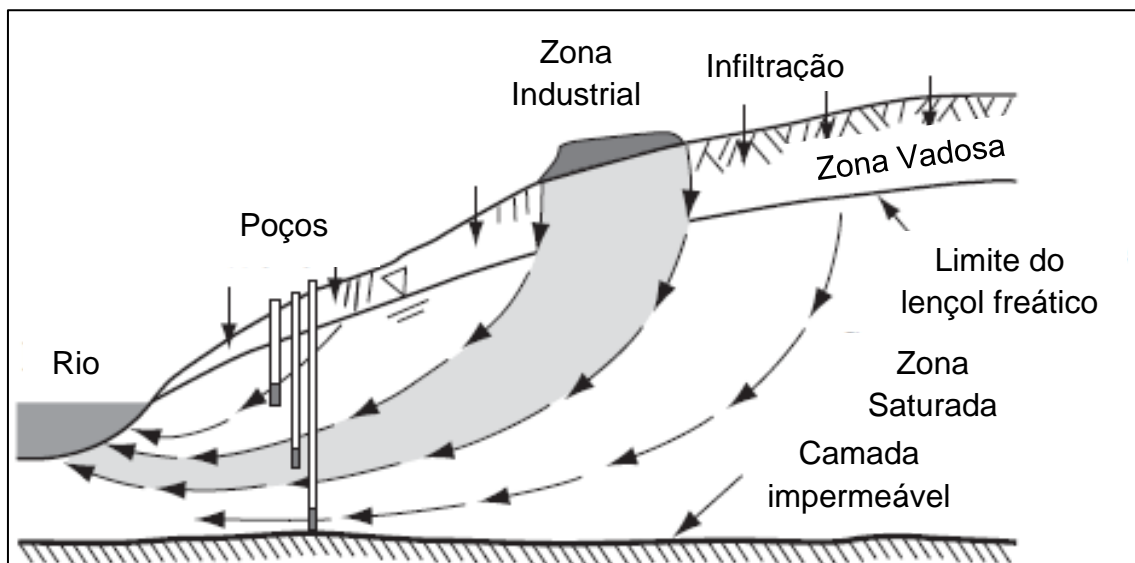
Além dos parâmetros referentes ao modelo de fluxo, a porosidade efetiva e a dispersividade são necessárias para simular o transporte de solutos em águas subterrâneas.

Neste contexto, o correto gerenciamento ambiental dos recursos hídricos subterrâneos deve contar com ferramentas educacionais, legais, políticas e tecnológicas. Dentre as últimas se destaca o uso de modelos relacionados ao transporte de contaminantes em aquíferos.

BEAR (1972) destaca que, em princípio, a estrutura e o conteúdo de um modelo de transporte de contaminantes não difere do modelo de fluxo. No entanto, esclarece que a principal diferença é que no modelo de fluxo a quantidade

transportada se refere à massa da fase fluida, enquanto no modelo de transporte de contaminantes, a quantidade a ser transportada se refere à massa do produto químico, presente no interior da massa líquida. No primeiro caso, a quantidade mássica está relacionada à densidade do fluido, enquanto no segundo está relacionada à concentração do contaminante. Também podem ser considerados vários contaminantes que interagem entre si.

Figura 8 – Transporte de contaminantes em águas sub-superficiais e subterrâneas



Fonte: Adaptado de Bear, 1972.

A interação solo-água-contaminante envolve muitos fenômenos físicos, químicos e biológicos que podem ocorrer simultaneamente. O movimento de contaminantes não depende apenas do fluxo do fluido no qual essas substâncias estão dissolvidas, mas sim de todos os mecanismos aos quais essas substâncias são submetidas tais como condições que favorecem a difusão e a dispersão.

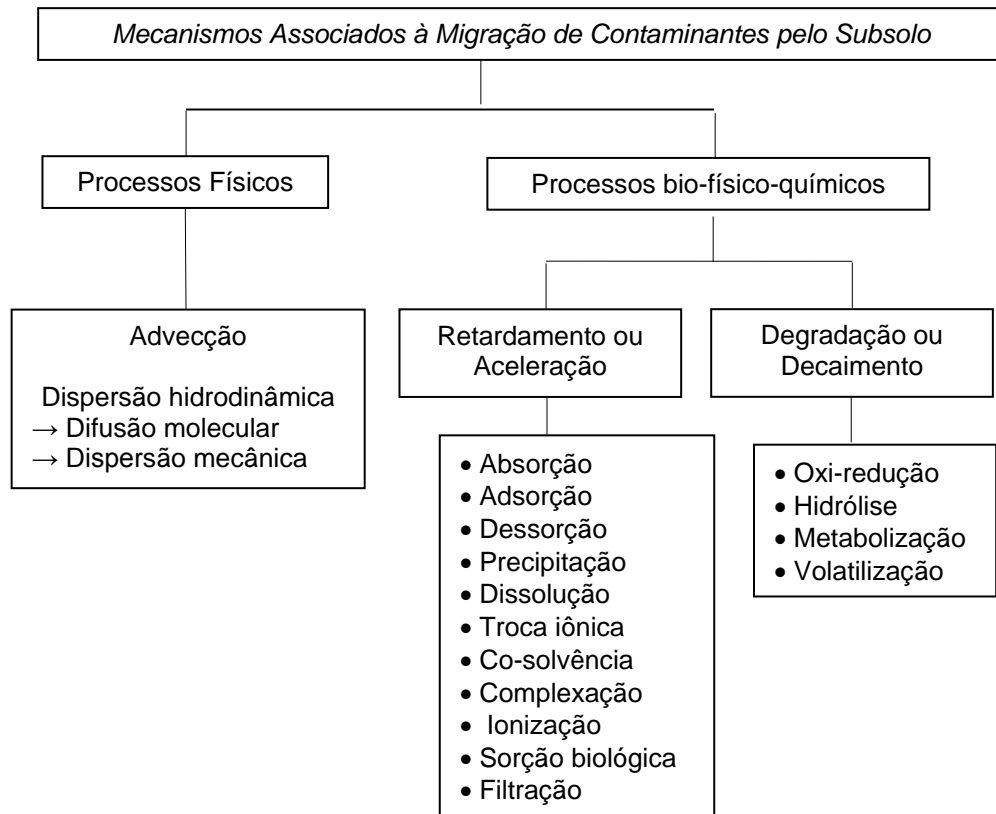
A figura 9 apresenta um esquema ilustrativo dos mecanismos de migração de substâncias através de meios porosos.

FREEZE & CHERRY (1979) destacam a influência dos processos físicos, advecção e a dispersão hidrodinâmica, no transporte de solutos, principalmente quando se trata de compostos não reativos, como o nitrato.

FRIND (1987) esclarece que em situações típicas envolvendo o transporte de compostos solúveis em águas subterrâneas, o contaminante introduzido através da fonte situada sobre o solo é transportado por advecção

devido ao fluxo da água, por dispersão hidrodinâmica devido, principalmente, à heterogeneidade do meio e também pela difusão molecular.

Figura 9 - Mecanismos associados à migração de contaminantes (solutos) em solos e águas subterrâneas



Fonte: Adaptado de Bear, 1972; Freeze & Cherry, 1979; Fetter, 2001.

### 2.6.2 – Processo de advecção

A Advecção está relacionada ao fluxo de água que, por sua vez também carrega os solutos (contaminantes) dissolvidos. Devido a este processo, movem-se na direção das linhas de fluxo e se deslocam com uma velocidade igual à velocidade média linear da água, mas sem causar alteração na concentração do composto (Lopes, 2005).

A seguir é apresentada a equação diferencial do transporte por advecção para o caso unidimensional (Bear, 1972):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (8)$$

Em que:

C: concentração do soluto (M/L<sup>3</sup>);

$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)$ : Gradiente de concentração no tempo (M/L<sup>3</sup>/T);



$v_x$ : velocidade fictícia ou velocidade de Darcy na direção x (L/T);

$\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)$ : Gradiente de concentração na direção x (M/L<sup>3</sup>/L).

Em uma situação hipotética na qual o transporte de massa só ocorresse devido ao processo de advecção, todas as partículas se movimentariam com a mesma velocidade e ocorreria uma interface abrupta entre uma massa de água com concentração igual à inicial e outra com concentração nula.

### 2.6.3 – Processo de difusão ou difusão molecular

Normalmente há uma distribuição heterogênea dos contaminantes na solução. Como consequência, surge um gradiente de concentração e o contaminante tende a se difundir de regiões de maior concentração para regiões de menor concentração, independente se a fase líquida está se movendo ou não. Este processo é chamado difusão.

O processo de difusão pode ser descrito a partir da 1ª lei de Fick, apresentada para um caso unidimensional na equação 9 (Bear, 1972):

$$F_x = -D_d \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right) \quad (9)$$

Em que:

$F_x$ : Fluxo de massa do soluto na direção x por unidade de área por unidade de tempo (M/L<sup>2</sup>.T);

$D_d$ : Coeficiente de difusão (L<sup>2</sup>/T) - Observação:  $D_d$  varia de  $1 \times 10^{-9}$  a  $2 \times 10^{-9}$  m<sup>2</sup>/s a 25°C;

$\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)$ : Gradiente de concentração na direção x (M/L<sup>3</sup>/L).

Em meio poroso, o soluto dissolvido na água sofre influência das tortuosidades das rotas de encaminhamento devido às partículas sólidas presentes. A Figura 10 representa este fenômeno.

Ao considerar o aspecto da turtuosidade, deve-se utilizar o chamado coeficiente de difusão efetivo na Lei de Fick, apresentado na equação 10.

$$D^* = \omega D_d \quad (10)$$

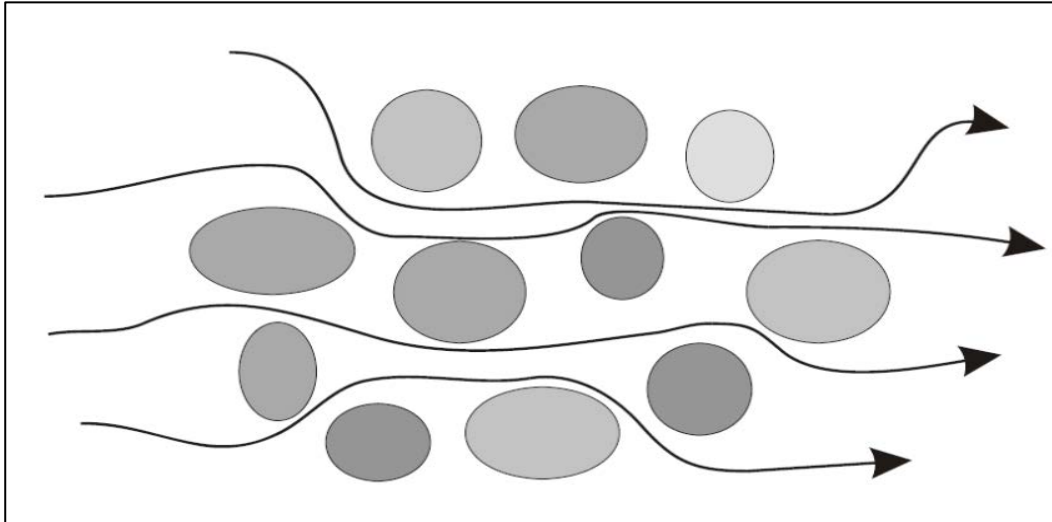
Em que:

$D^*$ : coeficiente de difusão efetivo (L<sup>2</sup>/T);

$\omega$ : coeficiente de turtuosidade que varia de  $0,01 < \omega < 0,5$ .

Observa-se que o coeficiente de difusão efetivo  $D^*$  frequentemente está na faixa de  $0,005$  a  $0,05 \text{ m}^2/\text{ano}$  (FRIED, 1975).

Figura 10 – Trajetória do soluto dissolvido em meio poroso



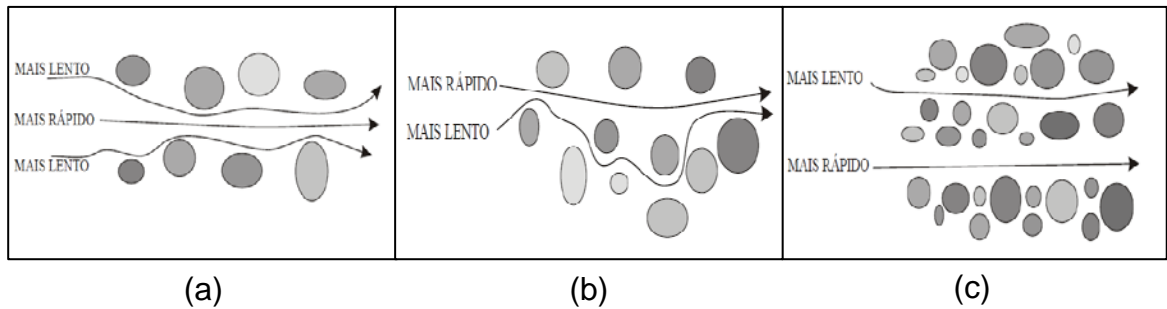
Fonte: Autor, 2014.

#### 2.6.4 – Processo de dispersão mecânica

O movimento de uma solução heterogênea em um meio poroso leva a outro processo, que difere da difusão, mas tende a produzir um efeito análogo. Esse processo é chamado dispersão mecânica, e resulta da não uniformidade microscópica da velocidade de fluxo nos poros do solo, levando a uma diluição do contaminante (HILLEL, 1980 *apud* MENESCAL, 2008).

A água subterrânea se movimenta com velocidades que são diferentes da velocidade linear média ( $V_x$ ). As três situações possíveis são apresentadas na figura 11.

Figura 11 – Causas para as diferentes velocidades da água subterrânea



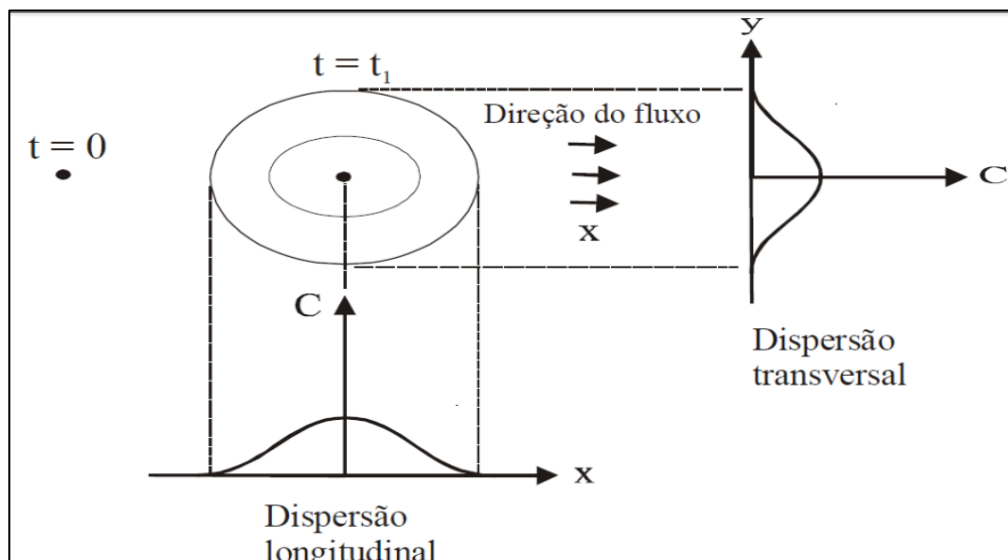
Fonte: Autor, 2014.

Legendas: (a) a velocidade da água é maior no centro dos poros do que próximo às partículas sólidas; (b) existem diferentes comprimentos de trajetórias da água; (c) há poros de diferentes tamanhos.

Como resultado direto destas diferentes velocidades, as massas de água com diferentes concentrações tendem a sofrer um processo de mistura. Este fenômeno é denominado Dispersão Mecânica e causa uma dispersão na frente de concentração.

A figura 12 mostra que a mistura ocorre na direção do fluxo, aí denominada de dispersão longitudinal e também se dá na direção normal ao escoamento, sendo chamada de dispersão transversal.

Figura 12 – Efeito conjunto das dispersões longitudinal e transversal



Fonte: Autor, 2014.

Em aquíferos, o processo de dispersão controla o mecanismo de transporte e a difusão é, na maioria das situações, irrelevante (BEAR, 1972; FREEZE e CHERRY, 1979).

Assumindo que a dispersão pode ser descrita também pela lei de Fick e que a quantidade de mistura mecânica é função da velocidade linear de percolação da água subterrânea, pode-se introduzir um coeficiente de dispersão advectiva ou mecânica, conforme apresentado nas Equações 11 e 12:

$$\text{Coeficiente de dispersão mecânica longitudinal: } \alpha_L v_x \quad (11)$$

$$\text{Coeficiente de dispersão mecânica transversal: } \alpha_T v_y \quad (12)$$

Em que:

$\alpha_L$ : dispersividade longitudinal [L];

$\alpha_T$ : dispersividade transversal [L];

$v_x$ : velocidade do fluxo na direção x [L/T].

A dispersividade é uma característica local do ambiente (KONIKOW & MERCER, 1988) e expressa o efeito, sobre o fluxo, das interações da fase fluida com a fase sólida do meio poroso saturado (BEAR, 1972).

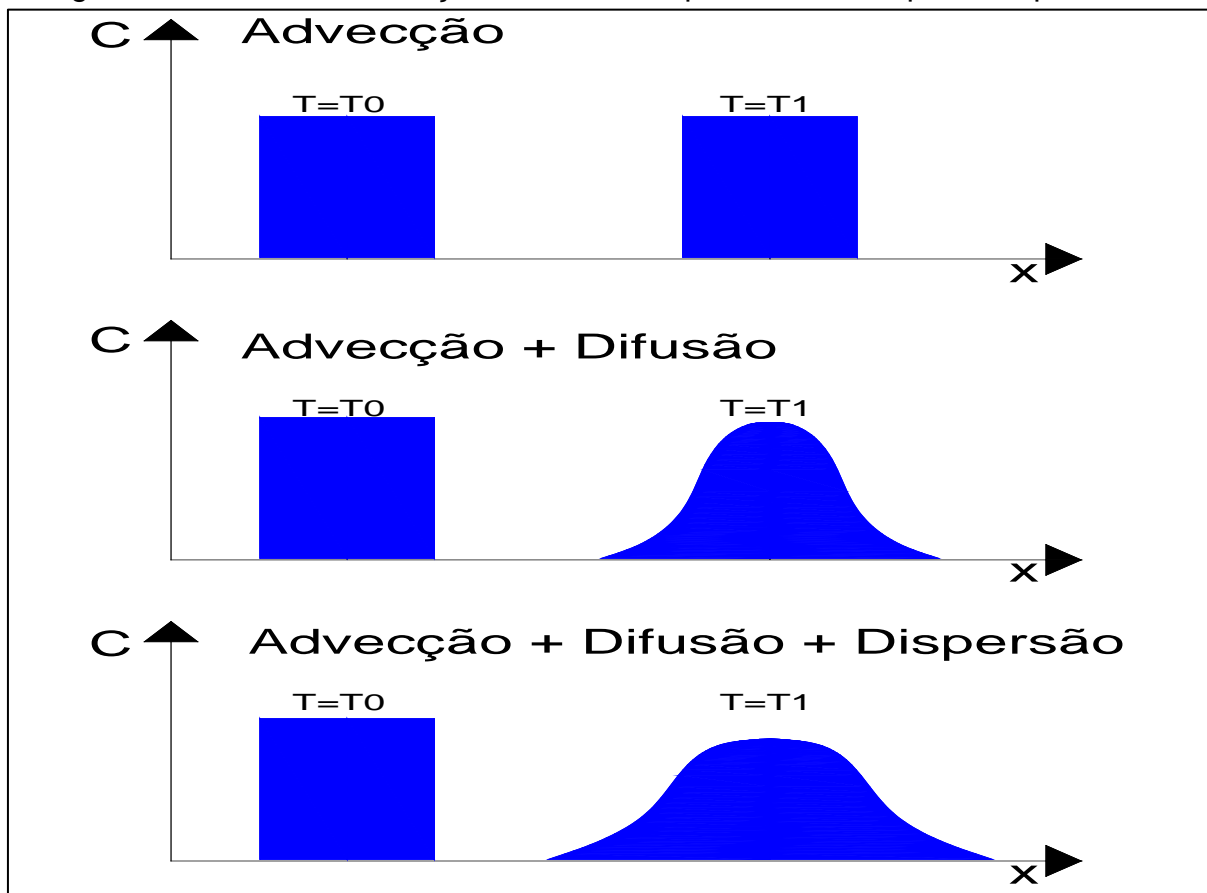
O coeficiente de dispersão, por sua vez, pode variar no tempo e espaço, pois também depende da velocidade do fluxo, conforme as equações apresentadas anteriormente.

#### 2.6.5 – Processo de dispersão hidrodinâmica

Devido à similaridade de efeitos entre a difusão e a dispersão mecânica, assume-se que os dois efeitos são aditivos. Os mecanismos de difusão e de dispersão mecânica são, portanto, combinados em um único termo chamado dispersão hidrodinâmica. A magnitude do parâmetro da dispersão pode variar bastante, dependendo da direção. No sentido transversal ao fluxo, a dispersão é geralmente muito menor que no sentido longitudinal.

A Figura 13 apresenta a influência dos processos de advecção, difusão e dispersão no transporte de uma massa de poluentes em meio hídrico.

Figura 13 – Efeito da advecção, difusão e dispersão no transporte de poluentes.



Fonte: Autor, 2014.

#### 2.6.6 – Coeficiente de dispersão e dispersividade

A partir da combinação da difusão e da dispersão mecânica, define-se o coeficiente de dispersão hidrodinâmica, dado por:

$$D_L = \alpha_L v_x + D^* \quad (13)$$

$$D_T = \alpha_T v_x + D^* \quad (14)$$

Em que:

$D_L$ : coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal ( $L^2/T$ );

$D_T$ : coeficiente de dispersão hidrodinâmica transversal ( $L^2/T$ );

Um número considerável de ensaios de laboratório foi realizado para verificar a aplicabilidade do modelo advectivo-dispersivo. Os dados disponíveis sugerem que na maioria dos casos o modelo é adequado para finalidades práticas (FRIED, 1975).

O coeficiente de dispersão está diretamente relacionado com a velocidade do escoamento do meio poroso e sintetiza dois termos: a mecânica de dispersão hidrodinâmica e a difusão molecular.

Para um meio isotrópico, as componentes cartesianas (x e y) do coeficiente de dispersão são representadas como (BEAR, 1972):

$$D_{XX} = \alpha_T |\vec{V}| + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{(V_x)^2}{|\vec{V}|} + D^* \quad (15)$$

$$D_{YY} = \alpha_T |\vec{V}| + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{(V_y)^2}{|\vec{V}|} + D^* \quad (16)$$

$$D_{XY} = D_{YX} = \alpha_T |\vec{V}| + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{V_x V_y}{|\vec{V}|} + D^* \quad (17)$$

Em que:

$V_x$  e  $V_y$ : componentes do vetor velocidade intersticial da água no meio poroso;

$|\vec{V}|$ : é o módulo deste vetor velocidade;

$D^*$ : coeficiente de difusão molecular, da ordem de  $10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$  (SCHNOOR, 1996, *apud* MENESCAL, 2008).

Uma observação importante é que a dispersividade é maior na direção do fluxo, ou seja, na direção longitudinal, e a dispersividade transversal ao fluxo,  $\alpha_T$ , é usualmente pequena.

Segundo De Josselin de Jong (1958 *apud* BEAR, 1972), a dispersividade longitudinal é de 8 a 24 vezes maior que a dispersividade transversal.

Daí tem-se que:

$$\alpha_L \gg \alpha_T \quad (18)$$

Bear (1972) indica que valores da dispersividade transversal são aproximadamente 1/10 da dispersividade longitudinal, o que é aplicado em modelos como o MT3DMS ® utilizado no presente estudo.

A determinação da dispersividade pode ser feita em campo com o uso de traçadores e comparando os resultados com as respostas obtidas através de resoluções numéricas e ou analíticas.

Bear (1972) e Murty & Scott (1977) propõem a determinação das dispersividades pelo método inverso, onde, conhecido o campo de concentrações,

obtém-se uma solução ótima a partir da minimização de uma determinada função objetivo.

## **2.7 – Aspectos gerais da modelagem em águas subterrâneas**

### **2.7.1 – Fatores intervenientes**

A modelagem do transporte de solutos em águas subterrâneas ocorre de forma iterativa com a modelagem de fluxo. Assim, todos os processos intervenientes e dados de entrada dos dois modelos são utilizados simultaneamente.

No desenvolvimento da estratégia de modelagem, é necessário estabelecer algumas informações prévias, por exemplo, se a natureza de fluxo será estacionária ou transiente ou ambos; quais as metas ou alvos devem ser atingidos após o processo e quais parâmetros serão calibrados. Para o presente estudo, que se baseou no modelo MT3DMS® para a modelagem do transporte de soluto, foi escolhida a dispersividade longitudinal.

É fundamental também entender quais as variáveis mais relevantes no processo de modelagem para serem consideradas como dados de entrada ou condições de contorno do modelo.

### **2.7.2 – Influência da disponibilidade de dados no resultado da modelagem**

Frequentemente a avaliação dos dados disponíveis para o processo de modelagem em águas subterrâneas pode indicar que os mesmos são indisponíveis ou insuficientes para se obter todos os resultados previstos com a aplicação do modelo. Nestes casos, uma decisão deve ser tomada a respeito dos objetivos do processo de modelagem: se é realmente necessário à obtenção de dados relativamente precisos ou se é possível também considerar os resultados obtidos a partir de informações prévias incompletas. Assim, caso o objetivo seja ter um reforço na compreensão de como se dá o processo de transporte dos poluentes, o modelo, mesmo com poucos dados de entrada pode fornecer informações valiosas para a tomada de decisões. Por exemplo, quais os dados de campo ou experimentais devem ser complementados ou em quais locais as pesquisas devem ser concentradas.

### 2.7.3 – Etapa de calibração na modelagem em águas subterrâneas

A etapa de calibração na modelagem matemática do fluxo hídrico subterrâneo ou do transporte de solutos em aquíferos geralmente descreve um processo em que a estrutura do modelo e os valores dos parâmetros são ajustados, utilizando procedimentos formais de otimização matemática, até o resultado do modelo corresponder satisfatoriamente a um conjunto de metas pré-estabelecidas. Hill & Tiedeman (2007) sugerem que um resultado satisfatório para a etapa de calibração do modelo deve ser considerado no contexto de confiabilidade dos dados utilizados como variáveis de entrada e das próprias limitações do modelo.

### 2.7.4 – Etapa de validação do modelo

Não há consenso na comunidade científica para uma definição exata do termo validação do modelo em relação a águas subterrâneas. Pode ser considerada como esta etapa na qual o modelo calibrado se mostra capaz de reproduzir dados obtidos em campo ou experimentalmente sem ajustes adicionais ao parâmetro calibrado (SCHNEIDER, 2012; CARVALHO *et al.*, 2014).

## 2.8 – Características e comportamento do nitrato em águas subterrâneas

O nitrato é um íon de ocorrência natural e faz parte do ciclo de nitrogênio. O íon nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ) é uma forma estável de combinação de nitrogênio e oxigênio (FEWTRELL, 2004). Destaca-se que o nitrato é um contaminante persistente, com grande mobilidade, não degrada facilmente em meio aeróbio, além disso, o principal mecanismo de degradação é a desnitrificação, que exige um ambiente redutor, presença de bactérias desnitrificantes, carbono facilmente degradável ou uma substância equivalente redutora de elétrons, condições extremamente raras em ambientes de águas subterrâneas (CABRAL *et al.*, 2009).

O íon nitrato é um dos poluentes mais comumente encontrados em águas subterrâneas, tornando-se um problema generalizado em diversas áreas do mundo (SPALDING & EXNER, 1993 *apud* WARD *et al.*, 2005).

Associa-se o aporte deste contaminante às atividades antrópicas, principalmente as relacionadas à agricultura e à disposição inadequada de resíduos sólidos e líquidos.



O íon nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ) é a principal forma na qual o nitrogênio é encontrado em águas subterrâneas. Nitrogênio dissolvido também ocorre na forma de amônio ( $\text{NH}_4^+$ ), amônia ( $\text{NH}_3$ ), nitrito ( $\text{NO}_2^-$ ), gás nitrogênio ( $\text{N}_2$ ), óxido nitroso ( $\text{N}_2\text{O}$ ) e nitrogênio orgânico.

O nitrato presente em águas subterrâneas geralmente se origina a partir de fontes existentes na superfície ou subsuperficialmente, quando resíduos ricos em nitrogênio são depositados, ou através do uso intensivo de fertilizantes agrícolas (WICK *et al.*, 2012); são as chamadas fontes diretas de nitrato. Em outros casos, o nitrato se origina da conversão de nitrogênio orgânico ou amoniacal ( $\text{NH}_4^+$  ou  $\text{NH}_3$ ) que ocorre naturalmente ou é introduzido por atividades antrópicas. O processo de conversão de nitrogênio orgânico para nitrogênio amoniacal é conhecido como *amonificação*. O processo de conversão *nitrificação* ocorre quando o nitrogênio amoniacal é convertido para  $\text{NO}_3^-$  por oxidação. Estes dois processos ocorrem geralmente na zona não saturada, onde frequentemente o oxigênio e a matéria orgânica são abundantes.

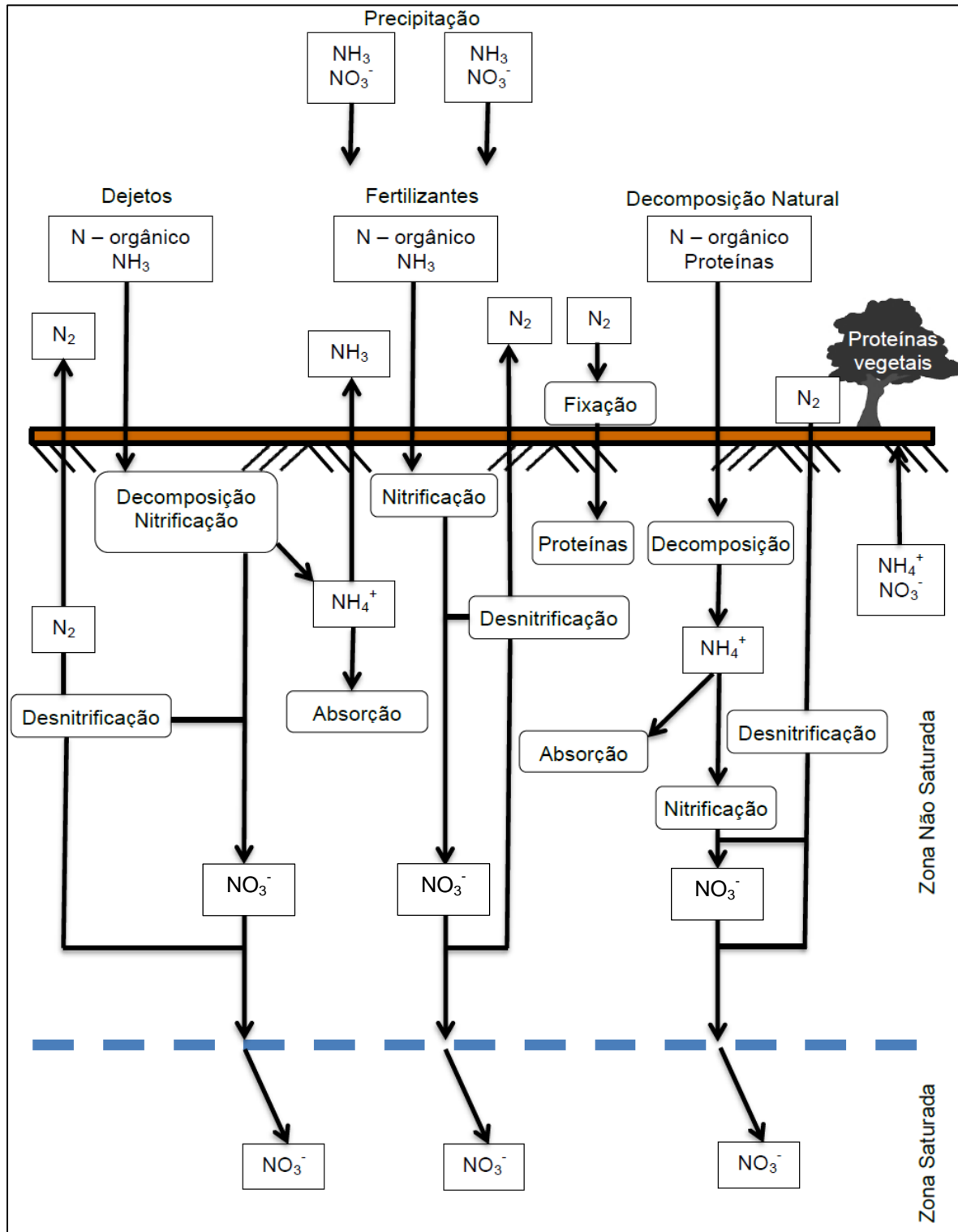
O  $\text{NO}_3^-$  apresenta grande mobilidade em águas subterrâneas. Em situações onde há a presença de condições fortemente oxidantes, o  $\text{NO}_3^-$  se apresenta como a forma estável de nitrogênio dissolvido. Move-se com o fluxo da água subterrânea, sem transformação e com pouco ou nenhum retardamento.

Com a exceção de situações específicas, geralmente o processo de *desnitrificação* não é significativo, principalmente na zona saturada, onde há pouca disponibilidade de matéria orgânica e de bactérias desnitrificantes.

A presença de nitrato nas águas, sobretudo as subterrâneas, é citada na literatura mundial como um dos principais fatores de riscos à saúde relacionados direta ou indiretamente à água de abastecimento, como por exemplo, a metemoglobinemia, doença que dificulta o transporte de oxigênio no sangue e pode ser fatal principalmente para crianças recém-nascidas (FERNÍCOLA & AZEVEDO 1981; FEWTRELL, 2004).

A figura 14 apresenta as principais fontes e rotas do íon  $\text{NO}_3^-$  em águas subterrâneas.

Figura 14 – Fontes e rotas das formas de nitrogênio em águas subterrâneas



Fonte: Adaptado de Freeze & Cherry, 1979 .

### 3. METODOLOGIA

O presente estudo desenvolveu uma rotina de calibração da dispersividade longitudinal que utilizou de forma integrada um modelo hidrodinâmico (MODFLOW®) e outro de transporte de solutos (MT3DMS®), ambos inseridos em uma plataforma computacional (PMWIN), além de planilhas computacionais para o desenvolvimento dos ciclos de iterações, envolvendo critérios de otimização e de minimização do erro médio quadrático entre as concentrações observadas e calculadas e os ângulos dos gradientes de concentração observados e calculados.

Os próximos itens descrevem a evolução dos métodos iterativos com o uso de gradientes.

#### 3.1 – Bases dos métodos iterativos com uso de gradientes

##### 3.1.1 – Fundamentos do Método Iterativo do Gradiente Hidráulico (MIGH)

A estimativa de parâmetros consiste em uma das principais etapas da modelagem em águas subterrâneas. Tradicionalmente se observa na literatura que a estimativa de parâmetros consiste na minimização de uma função objetivo que relaciona a diferença entre valores de cargas hidráulicas observadas e simuladas ou calculadas. Normalmente se utiliza a técnica dos mínimos quadrados para esta finalidade. A função objetivo a ser minimizada é do tipo apresentado na Equação 19.

$$F_{\text{obj}} = \sum_{i=1}^N (h_i^{\text{obs}} - h_i^{\text{calc}})^2 \quad (19)$$

Em que:

$F_{\text{obj}}$ : Função objetivo a ser minimizada;

N: Número de observações de cargas hidráulicas;

i: Índice da observação ou iteração;

$h_i^{\text{obs}}$ : carga hidráulica observada (L);

$h_i^{\text{calc}}$ : carga hidráulica calculada (L).

A equação acima se apresenta como um típico problema de otimização multidimensional, que normalmente é solucionada com uso do algoritmo de Gauss-Newton (COELLY, 1977, 1979 *apud* GUO & ZHANG, 2000).

No início da década de 1990, Guo & Zhang desenvolveram um método alternativo à metodologia aplicada ao PEST para a estimativa de parâmetros. O método prático denominado pelos autores de Método Comparativo do Gradiente Hidráulico (GUO & ZHANG, 2000) ou Método Iterativo do Gradiente Hidráulico (SCHUSTER & ARAÚJO, 2004). Através do referido método o problema inverso é formulado com base na minimização de uma função objetivo baseada na diferença entre os gradientes hidráulicos no domínio do modelo. Caracteriza-se por:

- estar em consonância com a Lei de Darcy;
- basear-se em técnicas de otimização matemática;
- ser um método inverso para a resolução do problema de estimativa de parâmetros em aquíferos;
- apresentar independência espacial.

Ao desenvolver o método, os autores se basearam nas diferenças entre os gradientes hidráulicos observados e os gradientes hidráulicos calculados. Com isso, a função objetiva a ser minimizada é do tipo apresentado na Equação 20.

$$F_{obj} = \int_R (\nabla h^{calc} - \nabla h^{obs}). (\nabla h^{calc} - \nabla h^{obs}) dx dy \quad (20)$$

Em que:

$F_{obj}$ : Função objetivo a ser minimizada;

$\nabla h^{calc}$ : gradiente hidráulico calculado;

$\nabla h^{obs}$ : gradiente hidráulico observado;

R: domínio do fluxo ( $L^2$ ).

O procedimento numérico do MIGH utiliza iterações, com o parâmetro a ser calibrado assumindo, inicialmente, valor arbitrário e sendo ajustado a cada novo ciclo. Devido a estas características é considerado um método inverso indireto de calibração.

Para o MIGH, a derivada parcial da função objetivo em relação ao parâmetro a ser calibrado, por exemplo, a Transmissividade T é dada pela expressão:

$$\frac{\partial F_{obj}}{\partial T_j} = -\frac{2}{T_j} \int_{r_j} (\nabla h_j^{calc} - \nabla h_j^{obs}) \cdot \nabla h_j^{calc} dx dy = 0 \quad (21)$$

Em que:

$\frac{\partial F_{obj}}{\partial T_j}$ : derivada parcial da função objetivo com relação ao parâmetro a ser calibrado, no caso a transmissividade da célula.

$\nabla h_j$ : gradiente hidráulico na célula  $j$ ;

$r_j$ : pequeno subdomínio do domínio  $R$  do modelo.

Conforme a metodologia do MIGH, após cada iteração o valor do parâmetro hidrodinâmico a ser calibrado será ajustado pelo procedimento do método de descida profunda (GUO & ZHANG, 2000; SCHUSTER & ARAÚJO, 2004).

$$T_j^{i+1} = T_j^i - \lambda \left( \frac{\partial F_{obj}}{\partial T_j} \right)^i \quad (22)$$

Em que:

$T_j^{i+1}$ : transmissividade da célula  $j$  na iteração  $i+1$ ;

$T_j^i$ : transmissividade da célula  $j$  na iteração  $i$ ;

$\lambda$ : fator de comprimento de passo;

### 3.1.2 – Método Iterativo do Gradiente Hidráulico Alternativo

Schuster & Araújo (2004), ainda sem conhecimento dos trabalhos de Guo & Zhang (2000) e atendendo a uma consultoria, desenvolveram um método que posteriormente denominaram de Método Iterativo do Gradiente Hidráulico Alternativo (MIGHA). O objetivo dos autores do MIGHA foi o de não utilizar o método dos mínimos quadrados na função objetivo, pois segundo os mesmos, quando não se conhecia o zoneamento de campo da condutividade hidráulica, o resultado era muitas vezes insatisfatório.

A diferenciação básica do MIGHA para o método anterior MIGH é a substituição da equação 22 pela equação 23.

$$T_j^{i+1} = T_j^i \frac{|\nabla h_j^{i,calc}|}{|\nabla h_j^{i,obs}|} \quad (23)$$

Em que:

$|\nabla h_j^{i\text{calc}}|$ : módulo do gradiente hidráulico calculado;

$|\nabla h_j^{i\text{obs}}|$ : módulo do gradiente hidráulico observado.

O MIGHA ainda prevê que em cada ciclo de iteração  $i$  seja calculado o ângulo  $\varphi$  formado pelos vetores dos gradientes hidráulicos, observado e calculado em cada célula  $j$ .

$$\arccos\varphi_j = \frac{\nabla h_j^{i\text{obs}} \cdot \nabla h_j^{i\text{calc}}}{|\nabla h_j^{i\text{obs}}| |\nabla h_j^{i\text{calc}}|} \quad (24)$$

Para a otimização do processo de calibração, o MIGHA considera apenas os ângulos menores que  $60^\circ$ , os valores maiores não são considerados até que as transmissividades das células vizinhas induzam à diminuição do ângulo  $\varphi_j$  nas iterações seguintes. A tradução matemática para este critério de otimização é apresentada na equação 25.

$$T_j^{i+1} = \begin{cases} T_j^i \frac{|\nabla h_j^{i\text{calc}}|}{|\nabla h_j^{i\text{obs}}|} & \text{se } \varphi < 60^\circ \\ T_j^i & \text{se } \varphi > 60^\circ \end{cases} \quad (25)$$

O MIGHA define como critério de convergência no processo de otimização o valor mínimo para o somatório dos ângulos  $\sum \varphi_i / N$ , conforme descrito na equação 26.

$$\sum_{j=1}^N \varphi_j = \text{Mínimo} \quad (26)$$

O processo de calibração termina quando a raiz do erro quadrático médio (RMSEH - *root mean square error of heads*), conforme equação 27, alcança um valor pré-definido e/ou quando o valor do critério de convergência (equação 26) não diminui e atinge um valor estável.

$$\text{RMSEH} = \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^M (h_{\text{obs}} - h_{\text{calc}})_i^2 \right]^{1/2} \quad (27)$$

### 3.1.3 – Uso de dados de concentrações na calibração de parâmetros de transporte

A determinação dos parâmetros para modelos de transporte em água subterrânea, notadamente a dispersividade longitudinal, é fundamental para a acurácia dos resultados obtidos.

Vários trabalhos se dedicam à determinação da referida propriedade, sobretudo com o uso de metodologias experimentais (KIRKHAM & POWERS, 1972; FRIED & COMBARNOUS, 1971 *apud* MURTY & SCOTT, 1977). No entanto, além de aplicações com restrições espaciais, os resultados obtidos não se aplicam a aquíferos subterrâneos, principalmente devido às grandes variações de magnitude e direção apresentadas pelos vetores de velocidade.

Fried (1972 *apud* MURTY & SCOTT, 1977) já sugeria o uso de medições de concentrações de marcadores ambientais em associação com modelagem numérica para se obter valores da dispersividade.

Murty & Scott (1977) esclarecem que a determinação dos parâmetros para modelos de transporte em água subterrânea se trata de um problema inverso. Os mesmos autores desenvolveram um algoritmo para a calibração da dispersividade longitudinal com base na diferença dos mínimos quadrados dos valores de concentrações calculados e observados.

As etapas do método são descritas de forma resumida a seguir:

- 1ª Etapa: Determinação de valores disponíveis de concentrações observadas do soluto.

No modelo de transporte, esses dados entram como concentrações iniciais, e a escolha de dados adequados é fundamental para o sucesso do processo de calibração. Zheng *et al.* (2012) enumeram algumas dificuldades na escolha dos dados iniciais e associam ao fato do transporte de soluto ser fortemente afetado pelas variabilidades nas propriedades químicas e físicas dos aquíferos. Daí o uso indiscriminado de medições pontuais de concentrações no campo tendem a apresentar grandes variações no espaço e no tempo e por isso podem não se configurar em uma estratégia adequada para basear o processo de calibração. Os autores sugerem estratégias para remediar esta situação, tais como o uso de momentos de pluma, posições frontais e valores de pico de concentrações. Esta última foi a estratégia adotada no presente estudo para a escolha das concentrações

observadas a serem inseridas no início do processo de calibração dos modelos fixo e não fixo.

- 2ª Etapa: escolhe-se um valor inicial para a entrada de dados do parâmetro a ser calibrado (parâmetro de modelagem);
- 3ª Etapa: A partir do valor inicial do parâmetro de modelagem, determinam-se os valores calculados das concentrações. Estes valores são referentes aos pontos nos quais as chamadas concentrações observadas foram consideradas previamente;
- 4ª Etapa: O método prevê que a partir da soma das diferenças entre os valores das concentrações observadas e calculadas para cada célula do modelo, determina-se o erro total, e o limite de tolerância para esse erro pode ser fixada previamente.

Assim, a meta do algoritmo desenvolvido por Murty & Scott (1977) é minimizar uma função objetivo do tipo descrito na equação 28.

$$F_{obj} = \sum_{i=1}^N (c_i^{obs} - c_i^{calc})^2 \quad (28)$$

Em que:

$F_{obj}$ : Função objetivo a ser minimizada;

N: Número observações de concentrações;

i: Índice da observação ou iteração;

$c_i^{obs}$ : concentração observada (M/L<sup>3</sup>);

$c_i^{calc}$ : concentração calculada (M/L<sup>3</sup>).

Pereira (2009) adaptou o MIGHA para uso com gradiente de concentrações para uma situação unidimensional, na qual o objetivo foi calibrar do coeficiente de decaimento do cloro em paredes de tubulações de sistemas de abastecimento de água.

A autora desenvolveu um método de correção entre as interações cuja expressão, adaptada para o presente trabalho, é apresentada na equação 29.

$$K_{wj}^{i+1} = K_{wj}^i \frac{|\nabla c_{tj}^{i\ obs}|}{|\nabla c_{tj}^{i\ calc}|} \quad (29)$$

Em que:



$\kappa_w^{i+1}$ : coeficiente de decaimento do cloro no trecho “j” na iteração “i + 1”;

$\kappa_w^i$ : coeficiente de decaimento do cloro no trecho “j” na iteração “i”;

$|\nabla c_{tj}^{i\text{ obs}}|$ : módulo do gradiente de concentração observado no trecho “j” na iteração “i”;

$|\nabla c_{tj}^{i\text{ calc}}|$ : módulo do gradiente de concentração calculado no trecho “j” na iteração “i”.

### 3.2 – Etapas do processo de calibração

O objetivo principal do presente trabalho é desenvolver a metodologia de calibração da dispersividade longitudinal através do Método Iterativo do Gradiente de Concentração (MIGC). Para esta tarefa foi tomado como base o trabalho desenvolvido por Tavares (2010) na adaptação feita ao Método Iterativo do Gradiente Hidráulico.

O processo de calibração utilizou dois programas computacionais MODFLOW® e MT3DMS®. Ambos estavam inseridos como pacotes do Processing Modflow Pro (PMWIN). Esta configuração tem a vantagem de que a partir dos códigos-fontes desses programas é possível novos programas computacionais que funcionariam de forma independente do PMWIN.

O procedimento seguiu as seguintes etapas:

- 1ª Etapa: Escolha do modelo hidrodinâmico que serviu de base para o transporte de fluxo, base para a posterior modelagem do transporte de contaminantes. Para esta etapa foi utilizado o programa computacional Modflow® versão 7.1.4;
- 2ª Etapa: Escolha do modelo para o transporte de contaminantes. Para esta etapa foi utilizado o programa computacional MT3DMS® (Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model);
- 3ª Etapa: Estudo e adaptação da técnica do Método Iterativo do Gradiente Hidráulico, adaptado dos estudos de Guo & Zhang (2000) e Schuster & Araujo (2004);
- 4ª Etapa: Desenvolvimento do Método Iterativo do Gradiente de Concentração (MIGC);
- 5ª Etapa: Aplicação da técnica do MIGC em casos hipotéticos;

- 6ª Etapa: Aplicação da técnica do MIGC em casos reais;
- 7ª Etapa: Avaliação do processo de calibração. Para esta etapa foram calculados o somatório dos ângulos dos componentes vetoriais dos gradientes de concentrações nos eixos x e y, o erro médio quadrático entre os valores das concentrações observadas e calculadas e para a dispersividade longitudinal foram utilizados o erro médio percentual relativo e o erro absoluto.

### 3.3 – Desenvolvimento do Método Iterativo do Gradiente de Concentração

O Método Iterativo do Gradiente de Concentração (MIGC) desenvolvido no presente trabalho será aplicado para otimizar a calibração da dispersividade longitudinal ( $\alpha_L$ ), principal componente do coeficiente de dispersão hidrodinâmico. Utiliza procedimentos iterativos em conjunto com o simulador hidrodinâmico Modflow® e o simulador do transporte de solutos MT3DMS®.

O MIGC tem como dispositivo de alteração da dispersividade longitudinal uma relação entre o gradiente de concentração observado e o gradiente de concentração calculado, conforme equação 30.

$$\alpha_{L_j}^{i+1} = \alpha_{L_j}^i \frac{|\nabla c_j^{i,calc}|}{|\nabla c_j^{i,obs}|} \quad (30)$$

Em que:

$\alpha_{L_j}^{i+1}$ : dispersividade longitudinal da célula  $j$  na iteração “ $i+1$ ”;

$\alpha_{L_j}^i$ : dispersividade longitudinal da célula  $j$  na iteração “ $i$ ”;

$|\nabla c_j^{i,calc}|$ : módulo do gradiente de concentração calculado na célula  $j$  na iteração “ $i$ ”;

$|\nabla c_j^{i,obs}|$ : módulo do gradiente de concentração observado na célula  $j$  na iteração “ $i$ ”;

Ao final de cada ciclo de iteração “ $i$ ”, como critério de convergência, será calculado um ângulo  $\varphi$  formado pelos vetores dos gradientes de concentração observado e calculado no espaço bidimensional com auxílio da equação 31.

$$\arccos \varphi_j = \frac{\nabla c_j^{i,obs} \cdot \nabla c_j^{i,calc}}{|\nabla c_j^{i,obs}| |\nabla c_j^{i,calc}|} \quad (31)$$

Em que:

$\varphi_j$ : é o ângulo formado pelos vetores dos gradientes de concentração observado e calculado no espaço bidimensional.

Para a otimização da calibração, o MIGC considera apenas os ângulos entre os gradientes menores que  $60^\circ$ , os valores maiores não são considerados até que os valores da dispersividade longitudinal das células vizinhas induzam à diminuição do ângulo  $\varphi_j$  nas iterações seguintes. A equação 32 apresenta os critérios de otimização adotados.

$$\alpha_{L_j}^{i+1} = \begin{cases} \alpha_{L_j}^i \frac{|\nabla c_j^{i, \text{calc}}|}{|\nabla c_j^{i, \text{obs}}|} & \text{se } \varphi < 60^\circ \\ \alpha_{L_j}^i & \text{se } \varphi > 60^\circ \end{cases} \quad (32)$$

O MIGC define como critério de convergência no processo de otimização o valor mínimo para o somatório dos ângulos  $\varphi_i$ , conforme descrito na equação 33.

$$\sum_{j=1}^N \frac{\varphi_j}{N} = \text{Valor Mínimo Estipulado} \quad (33)$$

Em que:

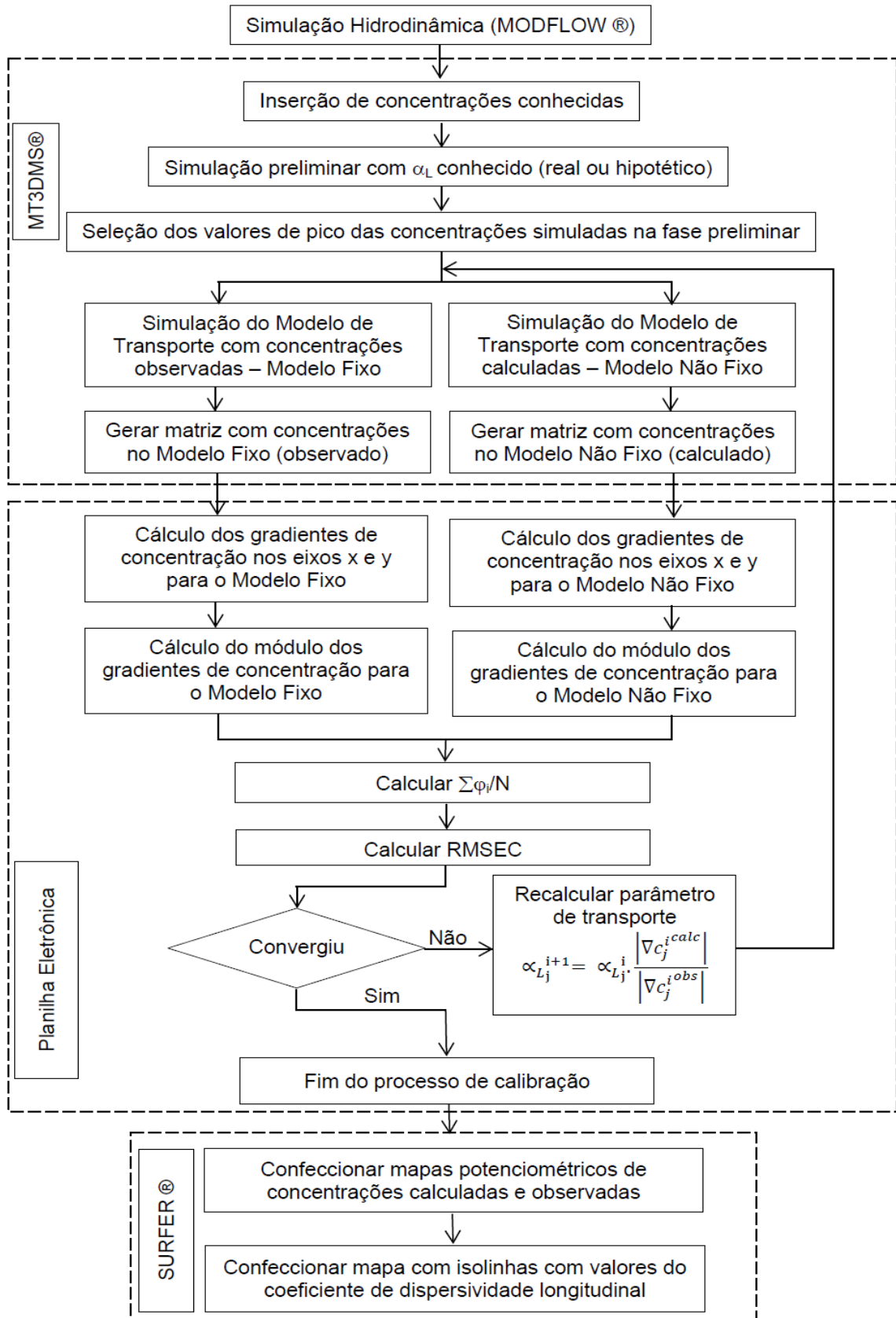
N: número de células ativas.

O processo de calibração termina quando a raiz do erro quadrático médio RMSEC (*root mean square error of concentrations*), conforme equação 34, alcança um valor pré-definido e/ou quando o valor do critério de convergência (equação 33) não diminui e atinge um valor estável.

$$\text{RMSEC} = \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^M (c_{\text{obs}} - c_{\text{calc}})_i^2 \right]^{1/2} \quad (34)$$

O fluxograma da figura 15 apresenta as etapas do processo de calibração do parâmetro de transporte pelo Método Iterativo do Gradiente de Concentração.

Figura 15 – Fluxograma do processo de calibração pelo Método Iterativo do Gradiente de Concentração.

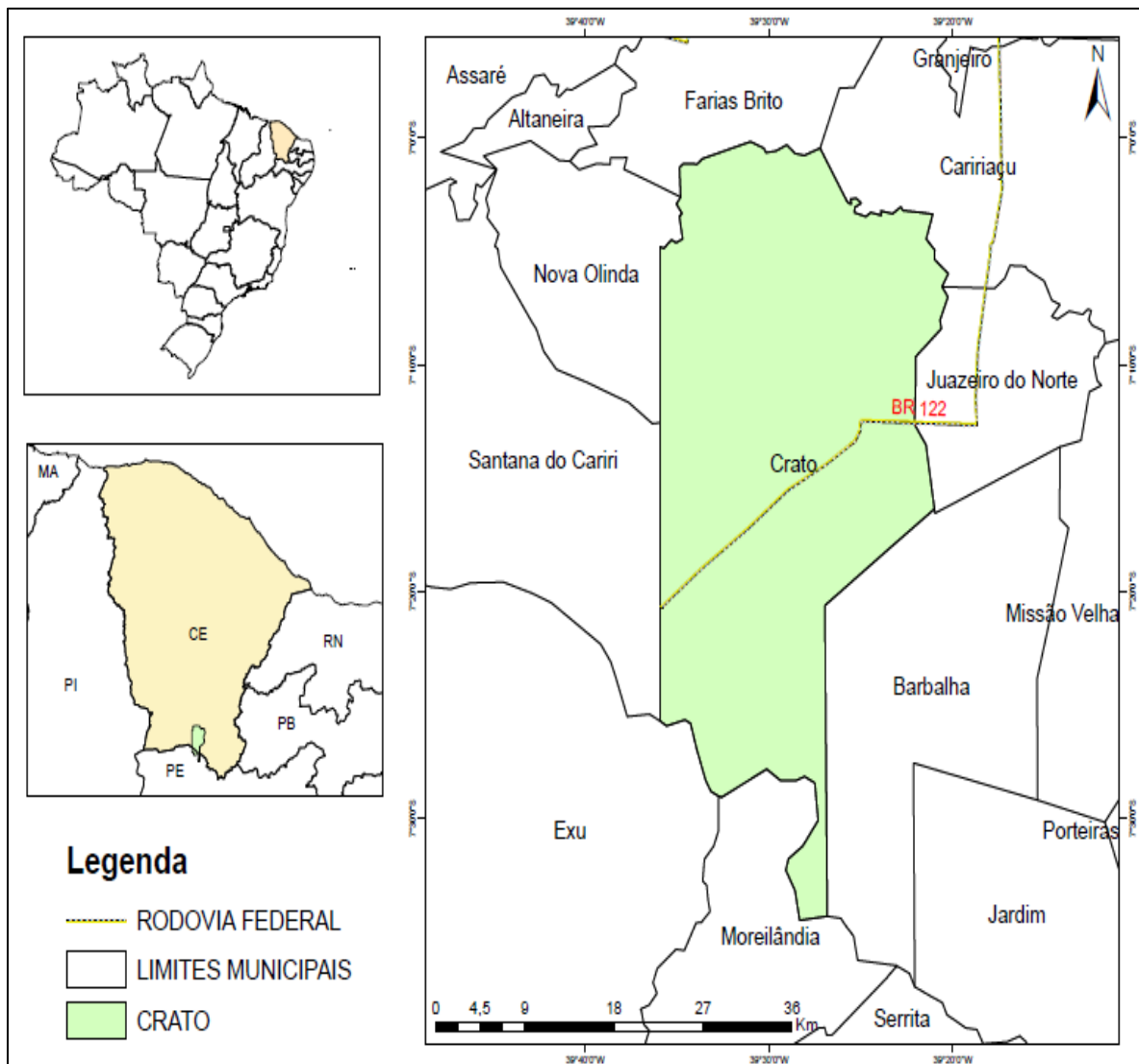


### 3.4 – Caracterização da área de estudo.

#### 3.4.1 – Localização

O município do Crato está situado na região sul do estado do Ceará, Brasil, e tem como coordenadas geográficas: 7°14'03" (S) e 39°24'34" (W). Apresenta uma área de 1.009,20 km<sup>2</sup> e altitude média de 426,9 m. Faz fronteira ao norte com os municípios de Caririagu e Farias Brito, ao sul com o município de Barbalha e o estado de Pernambuco, a leste também com o município de Barbalha, além de Juazeiro do Norte e Caririagu e a oeste com os municípios de Nova Olinda, Santana do Cariri e o estado do Pernambuco (IPECE, 2013). A figura 16 apresenta a localização do município do Crato.

Figura 16 – Localização do município do Crato



Fonte: Autor, 2014.

### 3.4.2 – Caracterização climatológica

Segundo o sistema de classificação climática de Köppen (KÖPPEN e GEIGER, 1928), a área caracteriza-se por um clima quente e úmido com estação seca no inverno.

Segundo a FUNCEME (2006) e IPECE (2013), os principais dados climatológicos da região do Crato são:

- pluviometria média anual de 1.090,9mm, com o período chuvoso concentrado entre os meses de janeiro a maio;
- a temperatura média anual varia de 24°C a 26°C;
- a evaporação média total em tanque “classe A” é de 2.288,6 mm, com mínima em abril (100,5 mm) e máxima em setembro (292,8 mm);
- a média anual de umidade relativa do ar na região é em torno de 64%;
- os níveis de insolação apresentam-se com valores elevados, com o total de horas ensolaradas de 2.848 horas. A média mais elevada ocorre em setembro (276,4 horas de insolação), e a média mais baixa ocorre em fevereiro, com 191,9 horas de insolação.

### 3.4.3 – Vegetação

A vegetação nativa da região é caracterizada pela presença de floresta ombrófila densa montana (mata úmida), de savana (cerrado) e de savana florestada (cerradão). Há também áreas de carrasco, ocorrendo em solos arenosos sobre chapadas contíguas à vegetação de caatinga (AUSTRAGÉSILO FILHO *et al.*, 2001; ARAÚJO *et al.*, 1998; VELOSO, 1991 *apud* TAVARES *et al.*, 2009).

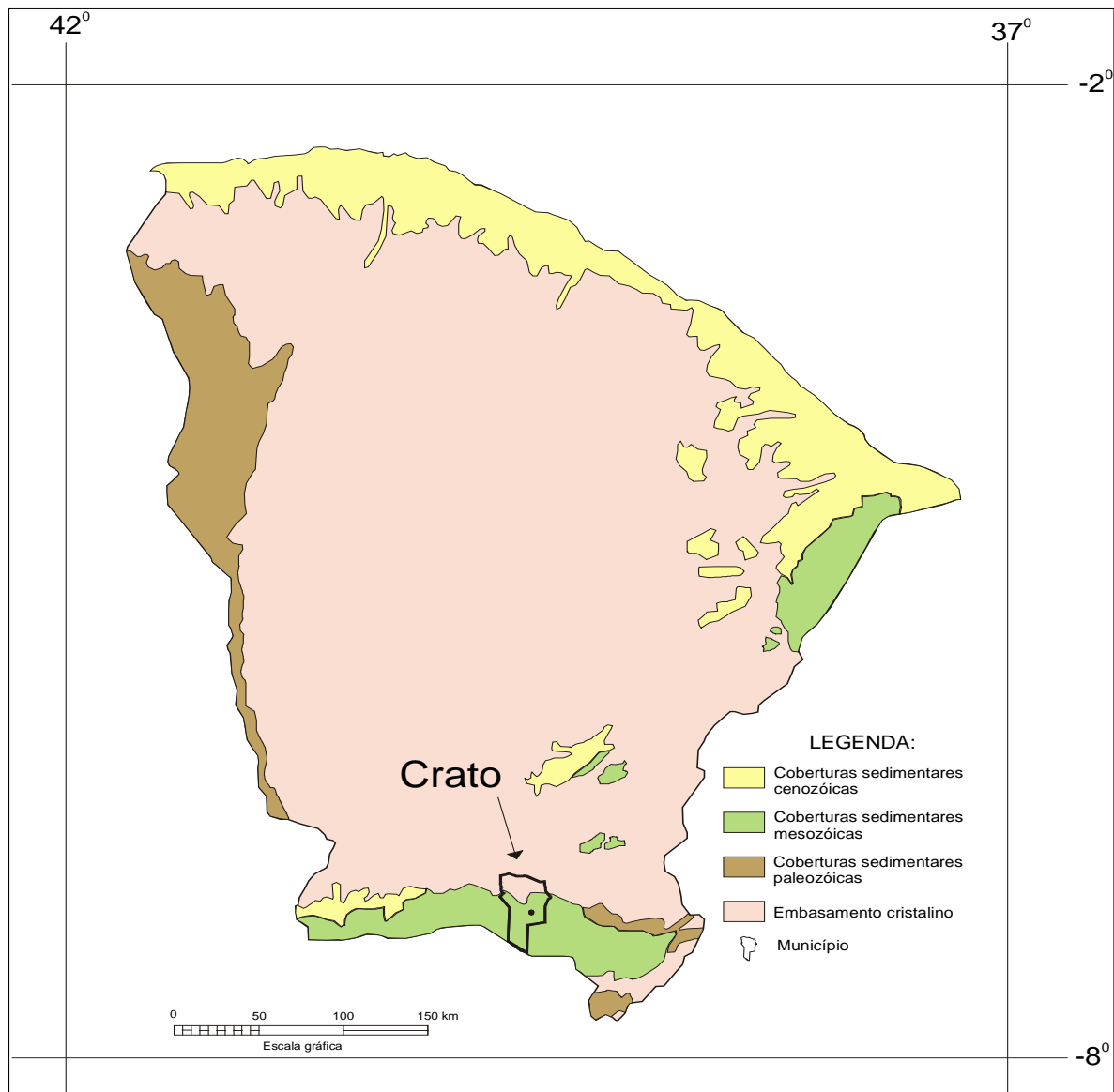
### 3.4.4 – Geomorfologia

Geralmente há duas formas de descrever o relevo da região do entorno do Crato. Um grupo de autores divide o relevo em Planalto Sedimentar (Chapada do Araripe), com altitude média de 900m e a Depressão Sertaneja (Vale do Cariri), com altitude média de 400m (SMALL, 1913; RIBEIRO & VERÍSSIMO, 1996 *apud* TAVARES *et al.*, 2009). Uma segunda forma de descrever o relevo da região é o que indica haver três zonas distintas: Zona de Chapada; Zona de Talude e Zona de Pediplano, com destaque à Zona de Talude, onde estão localizadas centenas fontes (DNPM, 1996 *apud* TAVARES *et al.*, 2009).

### 3.4.5 – Hidrogeologia

Estudos realizados na área comprovam a importância hidrogeológica da região do entorno do Crato, confirmando a existência de espessuras sedimentares consideráveis, o que dá ao local um grande potencial de armazenamento hídrico subterrâneo. A bacia apresenta uma litologia caracterizada pelas sequências alternadas de arenitos, siltitos, calcários, argilitos e folhelhos, podendo alcançar uma espessura total da ordem de 1600 m. A figura 17 apresenta a localização do município do Crato com relação aos domínios hídricos subterrâneos do estado do Ceará.

Figura 17 – Localização do município do Crato em relação aos domínios sedimentares e cristalino do estado do Ceará.



Fonte: CPRM, 1998.

A divisão hidrogeológica da bacia é: Sistema Aquífero Superior (formações Exu e Arajara), com espessura de aproximadamente 320 m; Aquicluda Santana, com espessura de aproximadamente 180 m; Sistema Aquífero Médio (formações Rio da Batateira, Abaiara e Missão Velha), com espessura de aproximadamente 500 m; Aquicluda Brejo Santo, com espessura no entorno de 400 m e Sistema Aquífero Inferior (formação Mauriti e parte basal da Formação Brejo Santo), com espessura entre 60 e 100m (PONTE & PONTE FILHO, 1996; DNPM, 1996 *apud* TAVARES *et al.*, 2009).

### 3.5 – Estudos de casos

Para testar a aplicação do método iterativo do gradiente de concentração foram trabalhados três exemplos, sendo dois casos hipotéticos e um caso de aquífero real situado na região do município do Crato – inserido na bacia sedimentar do Araripe, sul do estado do Ceará. O detalhamento de cada caso é apresentado nos próximos itens.

#### 3.5.1 – Exemplo hipotético 1

O Exemplo 1 foi baseado em um problema hipotético encontrado no manual do modelo MT3DMS® que envolve o transporte de contaminantes em um aquífero heterogêneo em um plano bidimensional (Zheng & Wang, 1999).

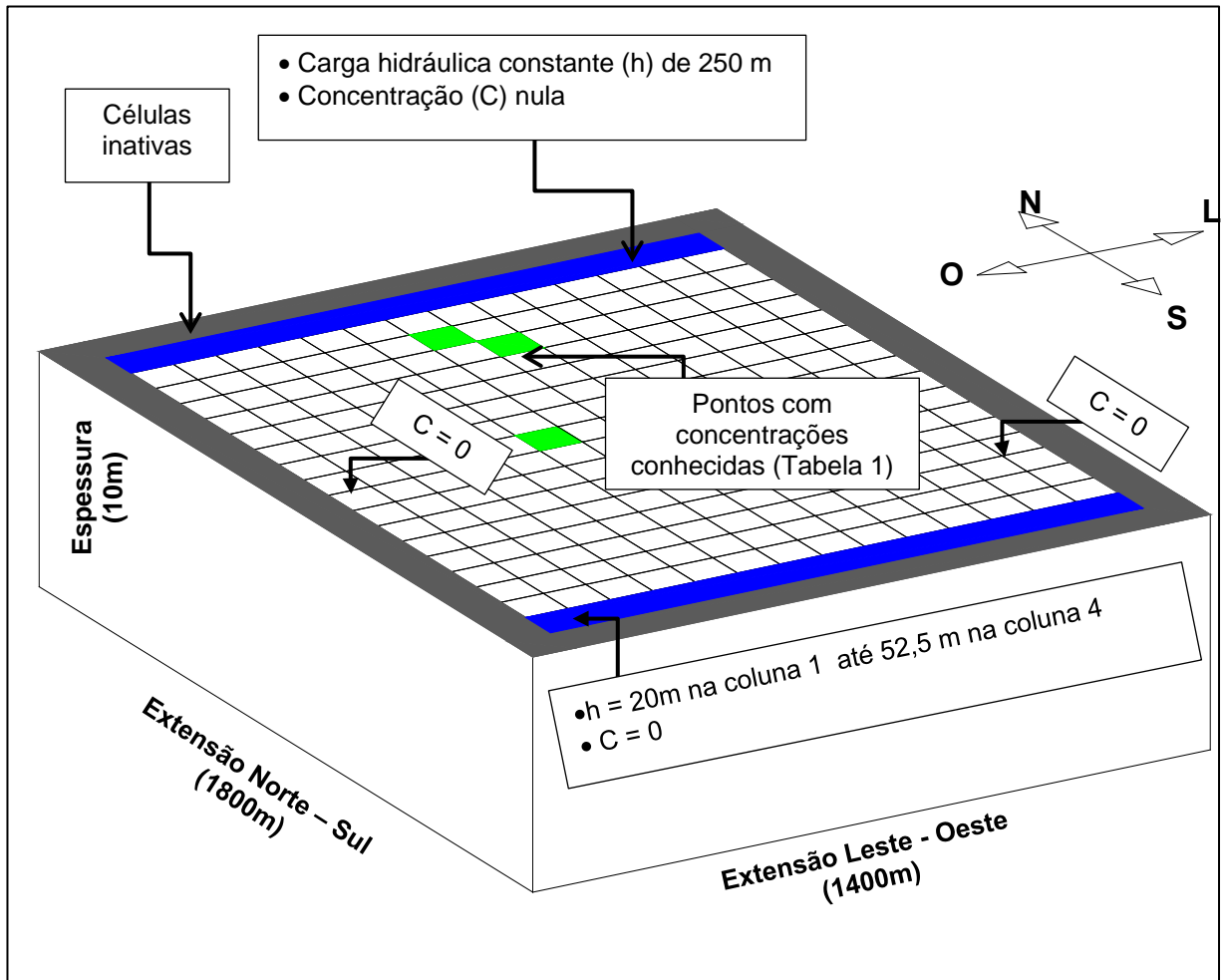
A figura 18 apresenta o esquema do aquífero hipotético 1

a) Dados de entrada e condições de contorno para o modelo hidrodinâmico do exemplo hipotético 1.

- O domínio do fluxo é discretizado em 14 colunas, 18 linhas e 1 camada com células de 100m por 100m.
- As fronteiras leste e oeste não possuem fluxo.
- A fronteira norte possui uma carga hidráulica (h) constante de 250m.
- A fronteira sul com  $h = 20\text{m}$  no centro da coluna 1 que aumenta com um gradiente de  $2,5/100$  até atingir  $52,5\text{ m}$  na coluna 4.
- Células com dimensões constantes de  $\Delta x = \Delta y = 100\text{ m}$ .
- Dimensão da camada do aquífero ( $\Delta z$ ) = 10 m.
- Porosidade ( $\theta$ ) = 0,3.



Figura 18 – Representação do aquífero referente ao exemplo hipotético 1.



Fonte: Autor, 2014.

b) Dados de entrada e condições de contorno para o modelo de transporte de soluto do exemplo hipotético 1.

- Dispersividade longitudinal = 20m.
- Razão entre as dispersividades horizontal e longitudinal = 0,2.
- Não há fluxo de massa nas fronteiras norte, sul, leste e oeste.
- A fronteira sul apresenta um fluxo advectivo, o que confere a esta borda o comportamento de uma linha de sumidouros de massa do aquífero.

A tabela 1 detalha os pontos de localização dos poços com as concentrações utilizadas na simulação do modelo de transporte.

Tabela 1 – Identificação e localização dos poços com concentrações usadas como pontos fixos para o exemplo hipotético 1.

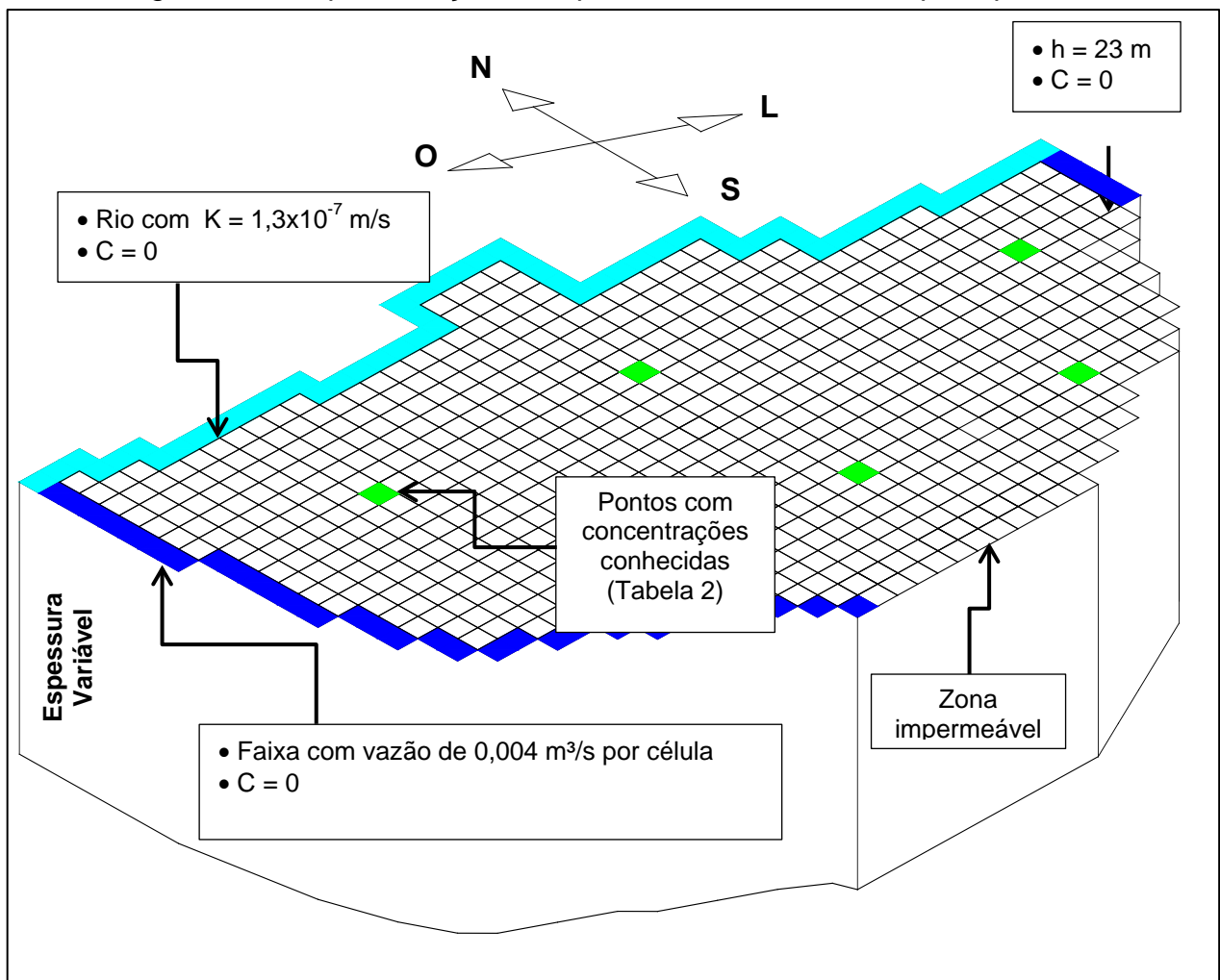
Poço	x (m)	y (m)	C (mg/L)
C1	750	1550	3,54
C2	850	1500	2,52
C3	650	950	1,73

### 3.5.2 – Exemplo hipotético 2

O Exemplo 2 foi baseado no caso hipotético estudado por Schuster & Araújo (2004); Chiang *et al.* (1998); Souza (2007) e Tavares (2010). Trata-se de uma modelagem estacionária aplicada em um aquífero aluvial não confinado, isotrópico.

A figura 19 apresenta o esquema do aquífero hipotético 2.

Figura 19 – Representação do aquífero referente ao exemplo hipotético 2.



Fonte: Autor, 2014.

O domínio do aquífero hipotético a ser modelado é discretizado em 42 células na direção x e 27 células na direção y com dimensões constantes de  $\Delta x = \Delta y = 100$  m. Total de 1134 células com 764 células são ativas.

a) Dados de entrada e condições de contorno para o modelo hidrodinâmico do exemplo hipotético 2.

As condições de contorno utilizadas para a simulação do modelo hidrodinâmico MODFLOW® são apresentadas a seguir:

- Fronteira Norte: há um rio com uma condutividade hidráulica do leito do rio de  $K_{rio} = 1,3 \times 10^{-7}$  m/s o que caracteriza um fluxo dependente da carga hidráulica.
- Fronteira Oeste: há uma contribuição da fronteira montanhosa com condição hidráulica determinada por fluxo subterrâneo, com vazão de  $Q = 0,012$  m<sup>3</sup>/s distribuído em 30 células, o que resulta numa vazão de 0,004 m<sup>3</sup>/s por célula.
- Fronteira Sul: zona impermeável e, portanto com uma condição do tipo de fluxo nulo.
- Fronteira Leste: apresenta carga hidráulica constante e especificada com valor de  $h = 23$  m.

b) Dados de entrada e condições de contorno para o modelo de transporte de soluto do exemplo hipotético 2.

Para o modelo de transporte de soluto foram introduzidas, em 5 pontos, concentrações iniciais fictícias.

Para a simulação através o modelo MT3DMS ® foram consideradas as seguintes condições, além das previstas no modelo hidrodinâmico:

- considerou-se que o soluto não apresentou reação cinética durante a modelagem;
- foi considerado o processo de advecção;
- a relação entre a dispersividade horizontal e a dispersividade longitudinal foi de 0,2;
- a relação entre a dispersividade vertical e a dispersividade longitudinal foi de 0,1;
- não foi considerado o processo de difusão molecular.

A tabela 2 detalha os pontos de localização dos poços com as concentrações utilizadas na simulação do modelo de transporte.

Tabela 2 - Identificação e localização dos poços com concentrações usadas como pontos fixos para o exemplo hipotético 2.

Poço	x (m)	y (m)	C (mg/L)
C1	950	1750	43,60
C2	2150	1650	37,00
C3	2250	650	53,56
C4	3250	550	26,04
C5	3650	1250	32,94

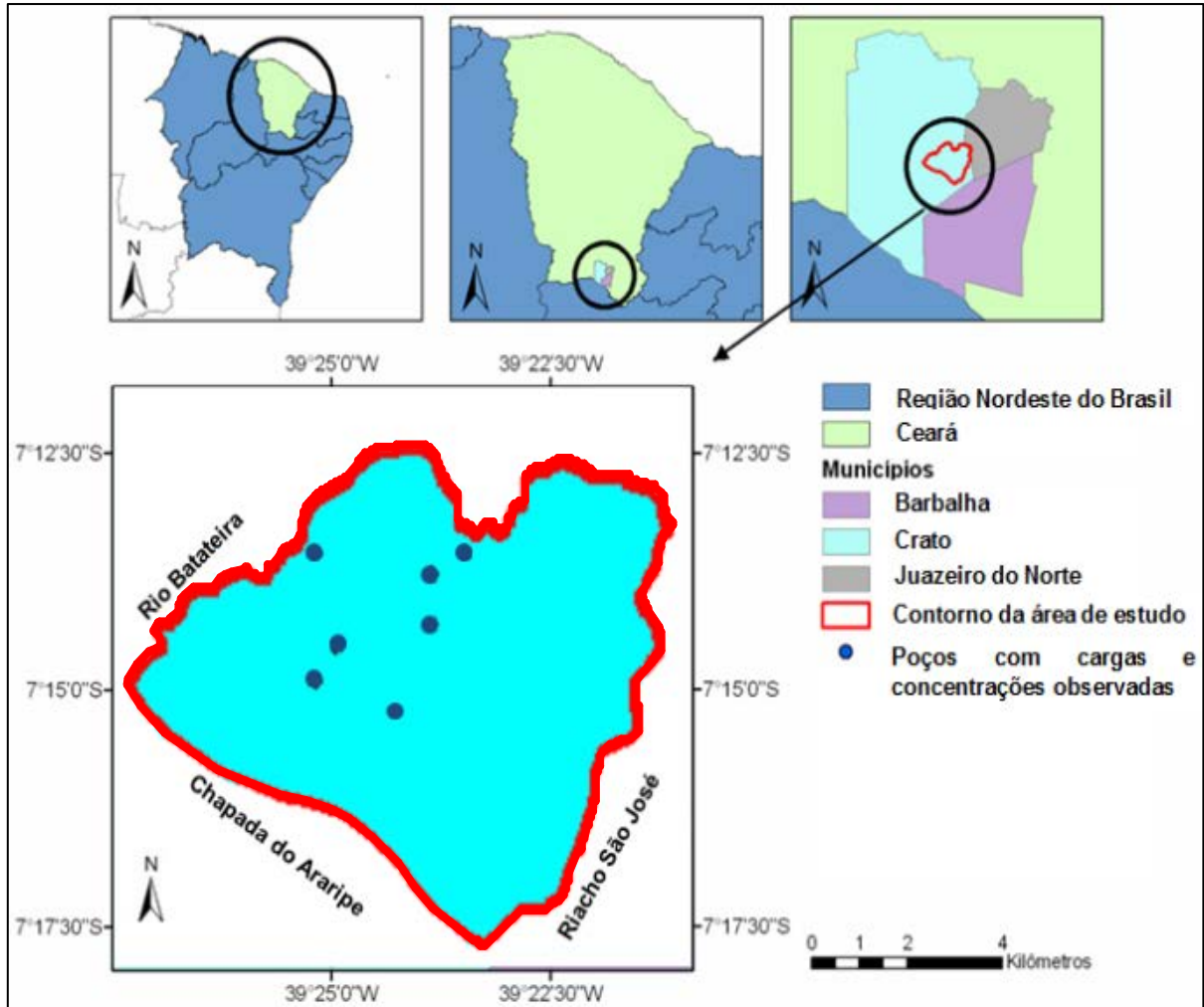
### 3.5.3 – Caso Real

A aplicação do MIGC em um caso real foi feita a partir do aquífero situado na área do município do Crato. Além da importância estratégica, econômica e ambiental das águas subterrâneas para a região, outro critério que influenciou na escolha da área foram os estudos prévios de Tavares (2010) que também aplicou o Método Iterativo do Gradiente Hidráulico na mesma área. Assim, pretendeu-se também complementar a calibração de um parâmetro hidrodinâmico (condutividade hidráulica) com a calibração do parâmetro de transporte (dispersividade longitudinal).

O local de estudo possui uma área de aproximadamente 49,7km<sup>2</sup> e está localizado na porção cearense da Bacia Sedimentar do Araripe, região Nordeste do Brasil. A área tem como limites o rio Batateira, o riacho São José e a Chapada do Araripe, está praticamente, em sua totalidade, inserida no Município do Crato, conforme figura 20.

A etapa da modelagem hidrodinâmica foi feita com o uso dos dados de Tavares (2010) e as concentrações para a modelagem do transporte de contaminantes foram obtidas a partir do relatório final do Plano de Monitoramento e Gestão dos Aquíferos da Bacia do Araripe, estado do Ceará, elaborado pela Companhia de Gestão dos Recursos Hídricos do Ceará (COGERH) e finalizado em 2009.

Figura 20 – Localização da Área-Crato, incluindo poços com dados de concentrações.



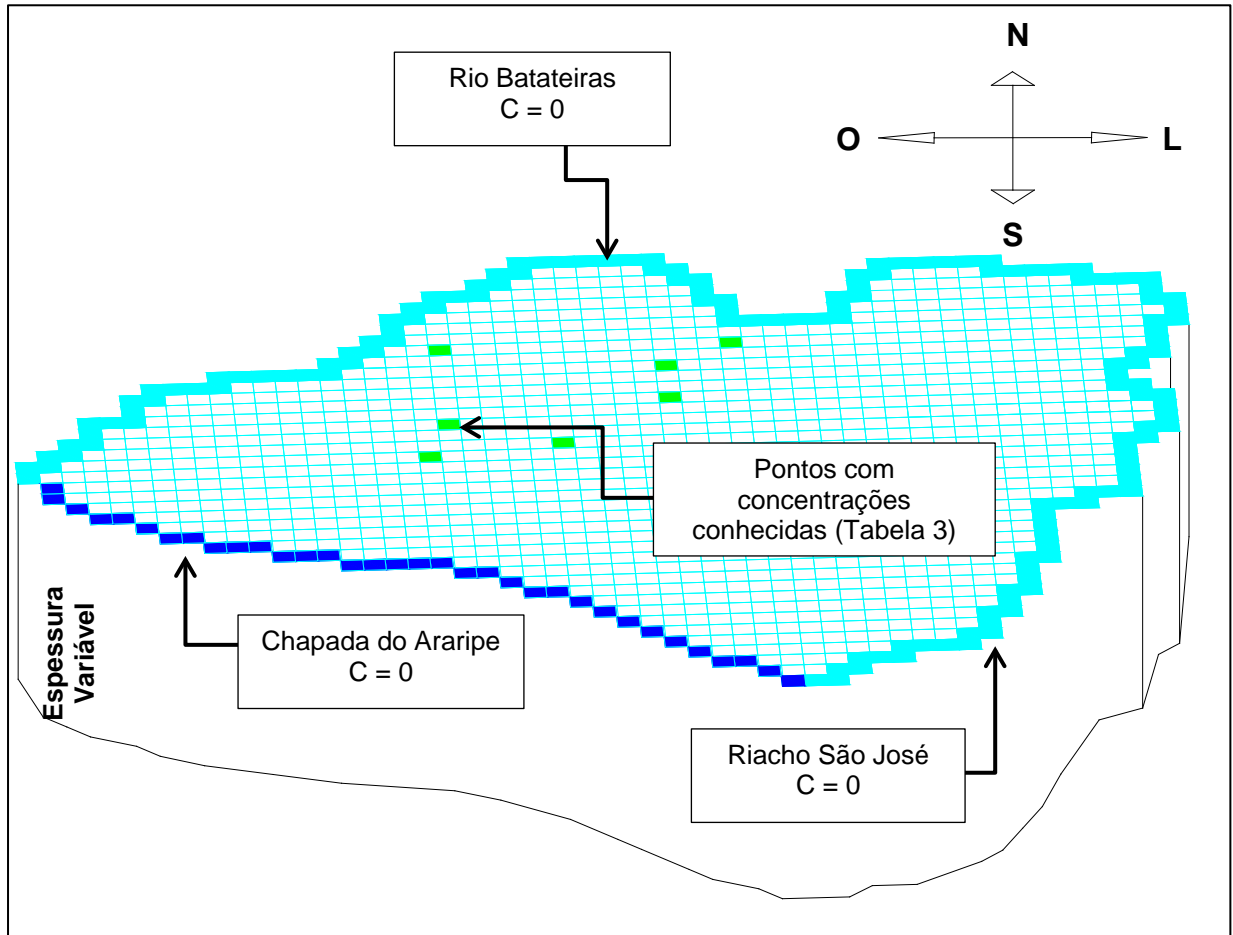
Fonte: Adaptado de Tavares, 2010.

A área foi discretizada em células com dimensões constantes de  $\Delta x = \Delta y = 200,00$  m, sendo 55 na direção Leste-Oeste e 42 na direção Norte-Sul, totalizando 2310 células, das quais 1334 são ativas. A largura da camada apresentou variação de 93m a 563m (Tavares, 2010).

Foram realizadas três modelagens para a situação real. A primeira considerou que os rios que delimitam a área possuíam concentrações nulas de nitrato (Figura 21). A segunda considerou que havia uma concentração de 8,8 mg/L na parte nordeste da área (Figura 22) e a terceira acrescentou às condições de contorno da segunda modelagem uma etapa a mais. Neste acréscimo, o modelo de transporte foi aplicado com o uso de um valor estimado para a dispersividade longitudinal. A partir daí, foi gerado um mapa potenciométrico com concentrações em todas as células. Este processo garantiu uma maior distribuição de

concentrações na área do aquífero. Em seguida foi feita a fixação das concentrações de pico, dando origem a um modelo fixo mais abrangente.

Figura 21 – Representação do aquífero referente ao caso real – modelagem 1.



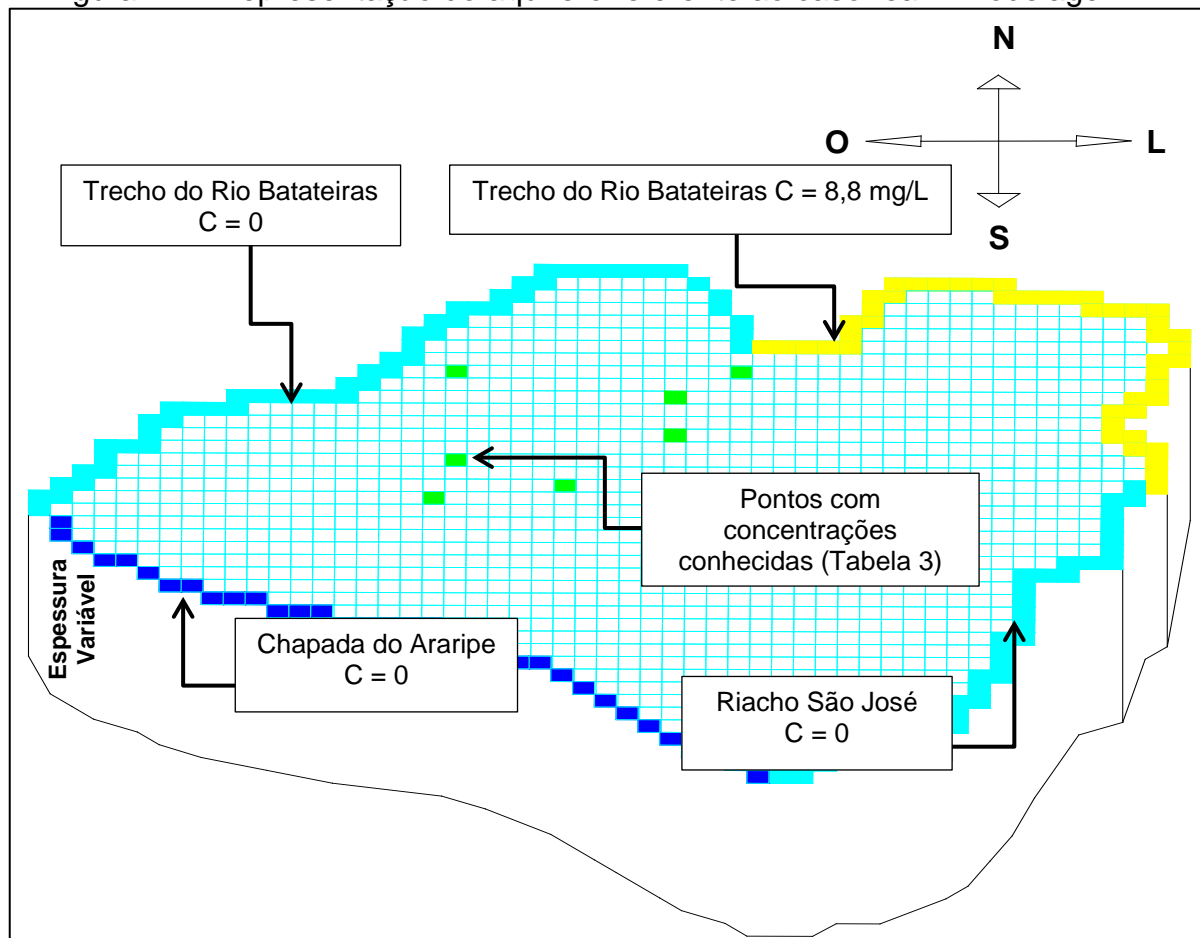
Fonte: Autor, 2014.

a) Dados de entrada e condições de contorno para o modelo hidrodinâmico do caso real.

O contorno hidrodinâmico da área ficou caracterizado por condições do tipo fluxo dependendo da carga hidráulica, caracterizado pelo rio Batateira e riacho São José e na porção sudoeste tem-se a Chapada do Araripe, onde se identifica uma contribuição de exutório naturais de água (fontes), com vazão total contribuinte de  $0,285 \text{ m}^3/\text{s}$ , distribuída por 34 células.

Para o zoneamento da condutividade hidráulica horizontal, adotou-se a alternativa 3 desenvolvida por Tavares (2010), na qual o aquífero possui três zonas com os valores de  $K1 = 0,000347 \text{ m/s}$ ,  $K2 = 0,000191 \text{ m/s}$  e  $K3 = 0,000139 \text{ m/s}$ .

Figura 22 – Representação do aquífero referente ao caso real – modelagem 2.



Fonte: Autor, 2014.

b) Dados de entrada e condições de contorno para o modelo de transporte de soluto caso real.

Para a modelagem de transporte de solutos foram utilizadas as concentrações iniciais apresentadas na tabela 3.

Para a modelagem 1 não foram consideradas as concentrações nas fronteiras norte, sul, leste e oeste, apenas as concentrações obtidas em poços no interior da área estudada, conforme tabela 3.

A modelagem 2 tem como diferencial que o trecho a jusante do município, na fronteira nordeste, apresentou uma concentração de 8,8 mg/L.

Tabela 3 - Identificação e localização dos poços com respectivas concentrações usadas nas modelagens do caso real.

Poço	UTM Leste (m)	UTM Norte (m)	C (mg/L)
CRT/04	454310	9201543	1,88
CRT/05	456936	9201544	12,81
CRT/07	455187	9199608	12,34
CRT/09	454000	9199465	6,22
CRT/10	454168	9200085	3,80
CRT/11	456272	9200409	5,99
CRT/13	456307	9201152	12,7



## 4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 4.1 – Caso hipotético 1

Após a simulação do modelo hidrodinâmico foi feita a simulação do transporte de soluto com a dispersividade longitudinal sugerido pelo manual do MT3DMS®, cujo valor era de 20m. Com esses dados obteve-se uma matriz de concentrações de onde foram retirados os valores de pico já apresentados na tabela 1.

Após essa etapa o processo de calibração teve início com um valor da dispersividade longitudinal de 200m. Foram obtidas as linhas potenciométricas apresentadas na figura 23.

A cor vermelha representa as linhas potenciométricas das concentrações observadas (modelo fixo), enquanto as linhas potenciométricas das concentrações calculadas ( modelo não fixo) são representadas pelas linhas de cor azul.

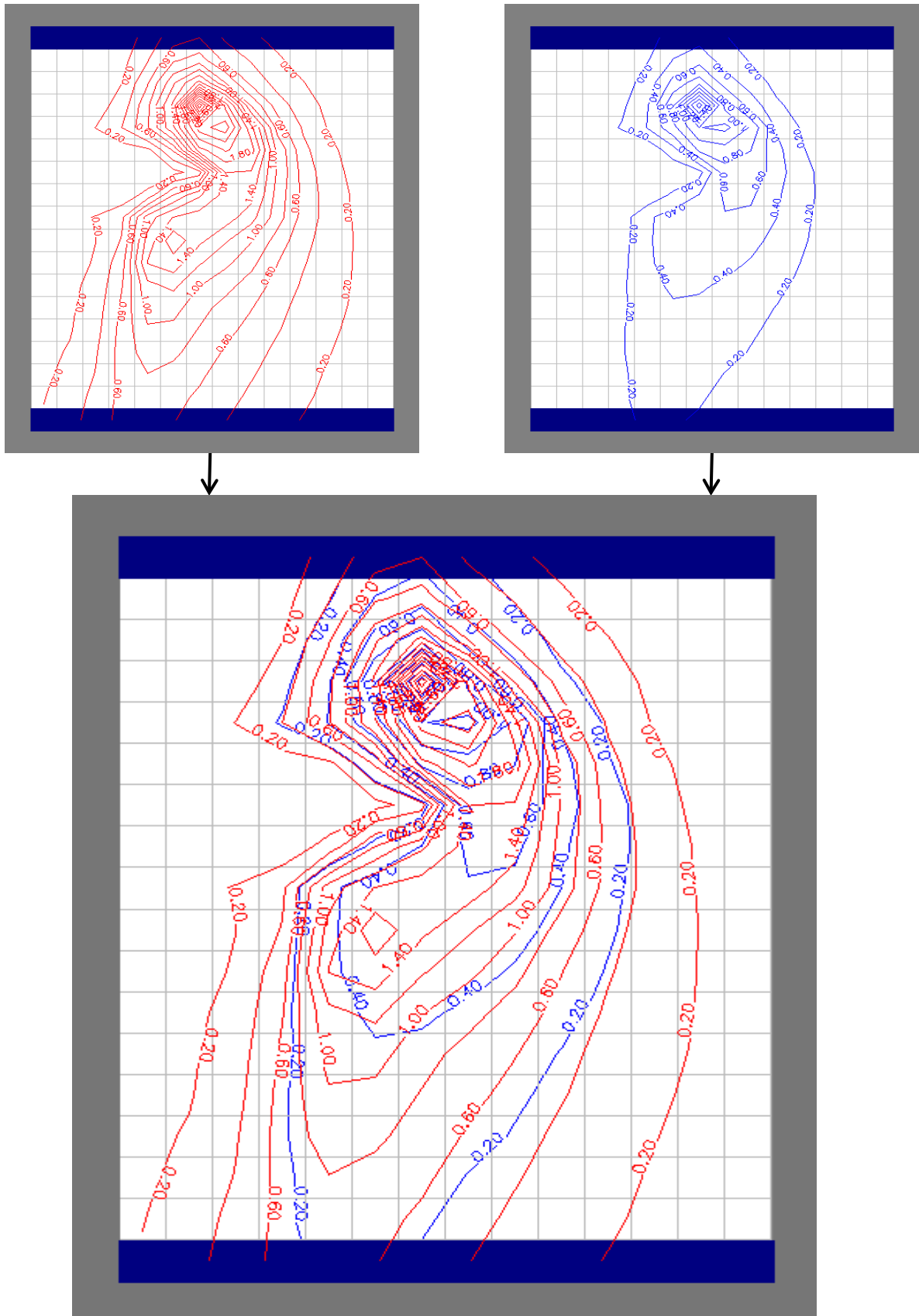
Ao final do processo iterativo com o MIGC, que ocorreu em 6 iterações, os valores calculados se mostraram bastante próximos dos valores observados, como pode ser visualizado na figura 24.

Analisando os critérios de convergência para o MIGC, a média dos ângulos  $\varphi$  formados pelos vetores gradientes de concentração observada e calculada, conforme Equação 33, seguiu a tendência de se aproximar de um valor estável e próximo a  $0,14^\circ$  em poucas iterações (Figura 25).

Igualmente, para a raiz do erro quadrático médio das concentrações (RMSEC), conforme definido pela Equação 34, apresentou uma redução considerável e, no final do processo de calibração, chegou a um valor em torno de 0,13mg/L.

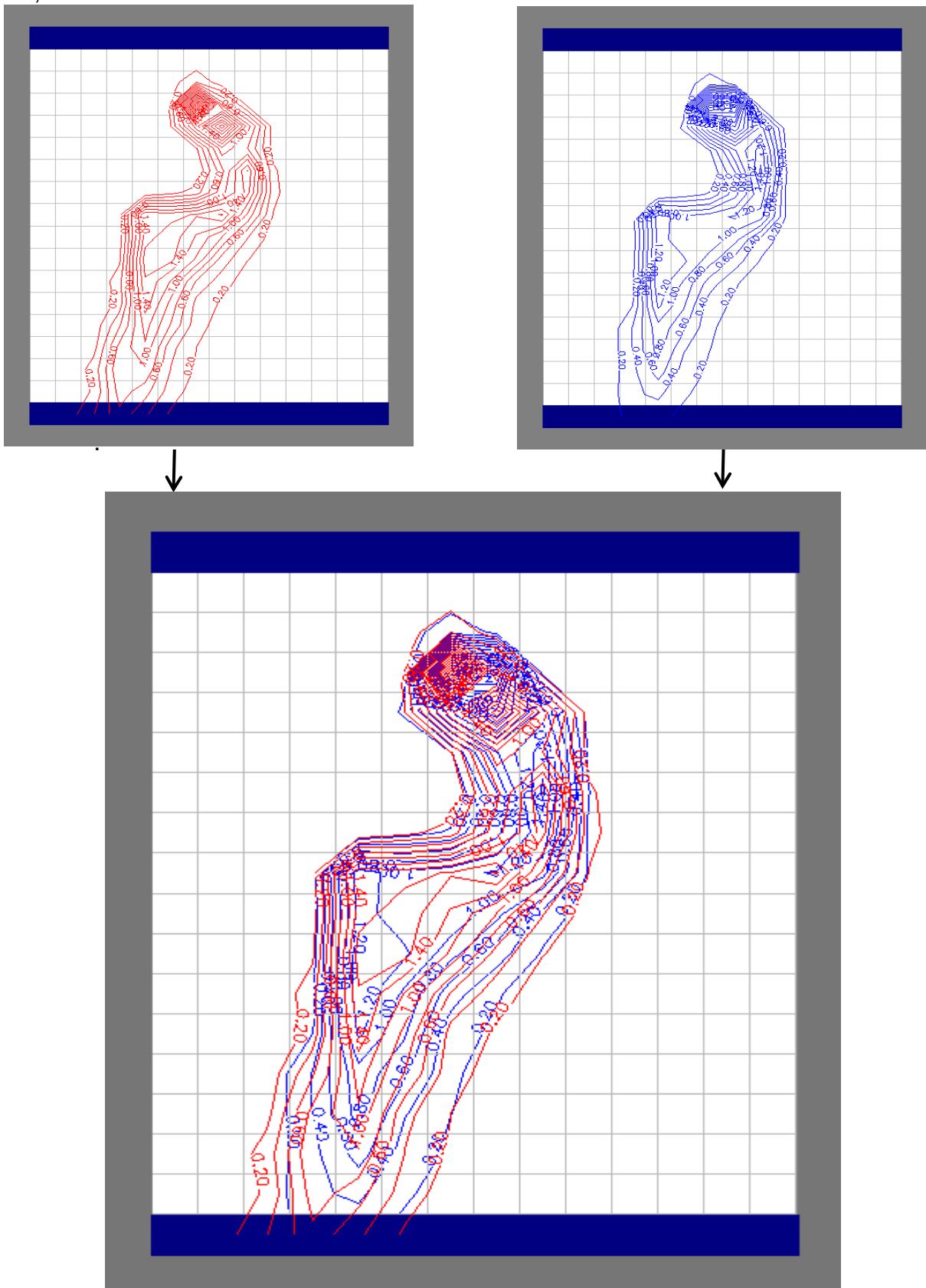
Destaca-se que o processo teve início com o valor de 200m para a dispersividade longitudinal e na sexta iteração atingiu o valor de 19,11 m, bastante próximo ao valor considerado real estabelecido no exemplo que foi de 20m (Figura 26).

Figura 23 - Linhas potenciométricas iniciais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para o exemplo hipotético 1. Valor inicial para  $\alpha_L$  de 200m.



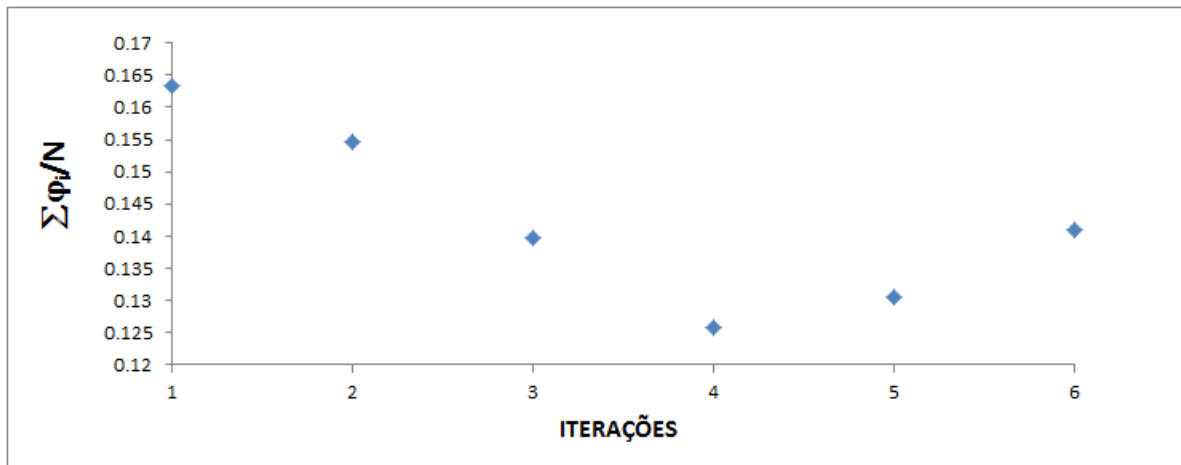
Fonte: Autor, 2014.

Figura 24 - Linhas potenciométricas finais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para o exemplo hipotético 1. Valor final para  $\alpha_L$  de 19,1m.



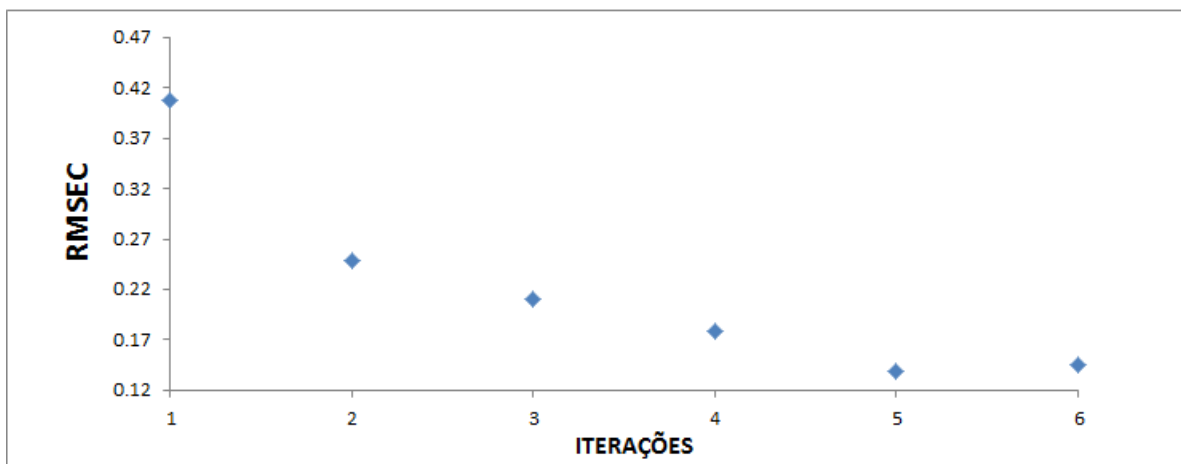
Fonte: Autor, 2014.

Figura 25 – Média dos ângulos  $\varphi$ , em graus, formada pelos vetores gradientes das concentrações observadas e calculadas x Iteração para o exemplo hipotético 1.



Fonte: Autor, 2014.

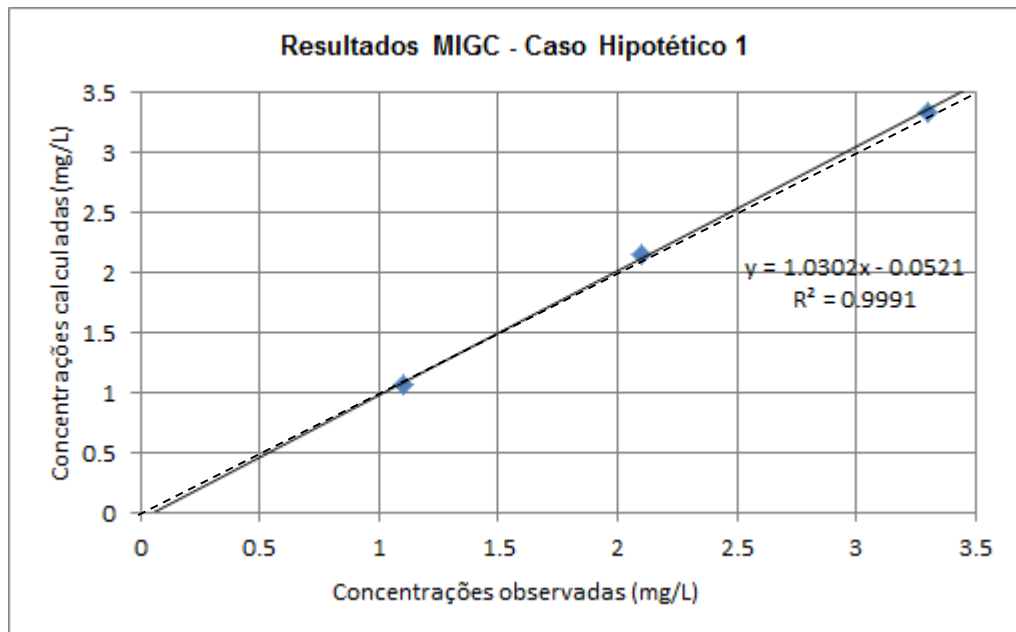
Figura 26 – Raiz do erro quadrático médio das concentrações em mg/L (RMSEC) x Iteração para o exemplo hipotético 1.



Fonte: Autor, 2014.

A figura 27 apresenta uma comparação entre os valores das concentrações calculadas e observadas. A linha tracejada com ângulo de  $45^\circ$  em relação à horizontal representa a igualdade entre valores de concentrações observadas e calculadas. Percebe-se que os valores resultantes da calibração através do MIGC se aproximam consideravelmente dos valores observados. O que é comprovado através da proximidade da linha de tendência central para com a linha tracejada.

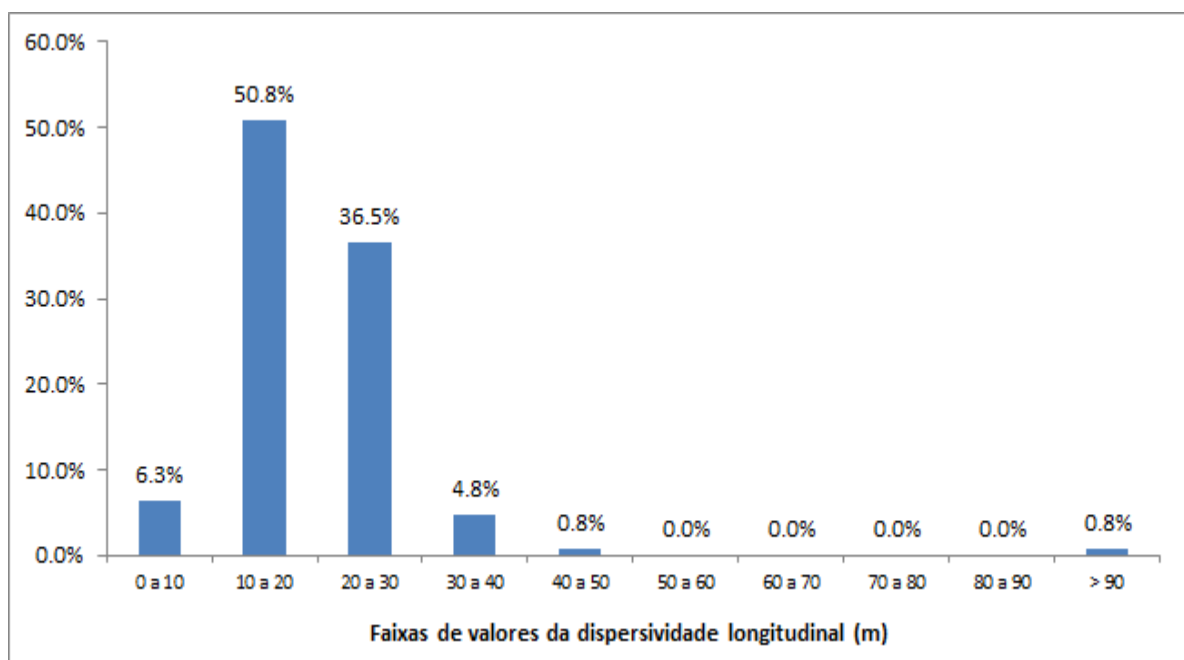
Figura 27 – Comparação entre concentrações observadas e calculadas através do MIGC para o exemplo hipotético 1.



Fonte: Autor, 2014.

Após o processo de calibração, o MIGC fornece uma matriz de valores da dispersividade longitudinal. O gráfico apresentado na figura 28 mostra a distribuição percentual desses valores.

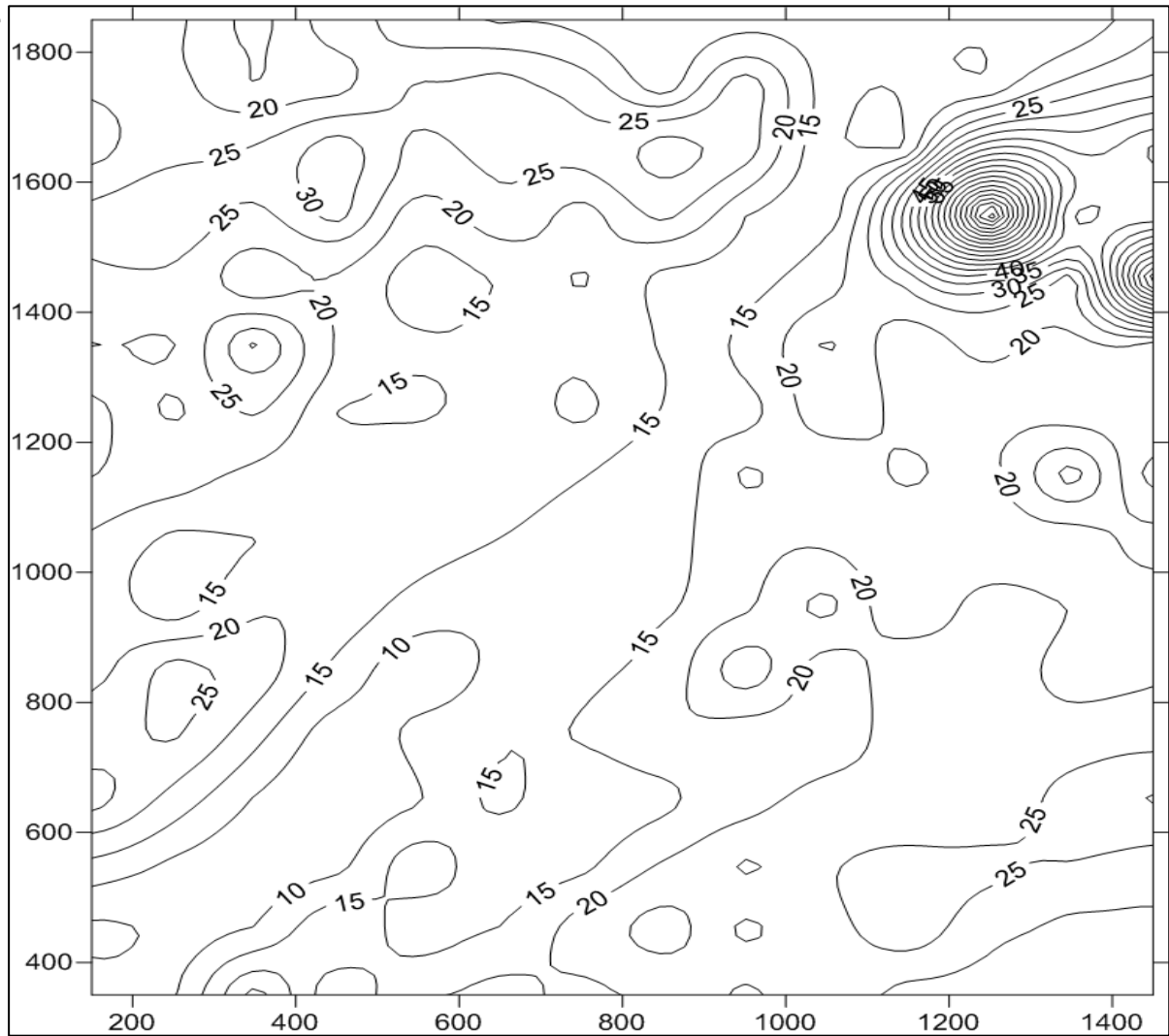
Figura 28 – Distribuição percentual dos valores da dispersividade longitudinal (m) na área do exemplo hipotético 1 no final da 6ª iteração após calibração com o MIGC.



Fonte: Autor, 2014.

A distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal na área do exemplo 1 é apresentada na figura 29.

Figura 29 – Distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal (m) na área do exemplo hipotético 1 no final da 6ª iteração após calibração com o MIGC.



Fonte: Autor, 2014.

## 4.2 – Caso hipotético 2

Após a simulação hidrodinâmica, deu-se a simulação do transporte de soluto. Para o presente exemplo, o valor estimado para a dispersividade longitudinal foi de 100m e tomou como base os estudos apresentados Gelhar *et al.* (1985). Os valores de pico resultantes da simulação do transporte de poluentes já foram apresentados na tabela 2.

Após essa etapa, o processo de calibração teve início com um valor da dispersividade longitudinal de 1000m, valor também dentro da faixa obtida nos estudos reais (GELHAR *et al.*, 1985). As linhas potenciométricas das concentrações calculadas e observadas para esta etapa são apresentadas na figura 30.

A cor vermelha representa as linhas potenciométricas das concentrações observadas (modelo fixo), enquanto as linhas potenciométricas das concentrações calculadas ( modelo não fixo) são representadas pelas linhas de cor azul.

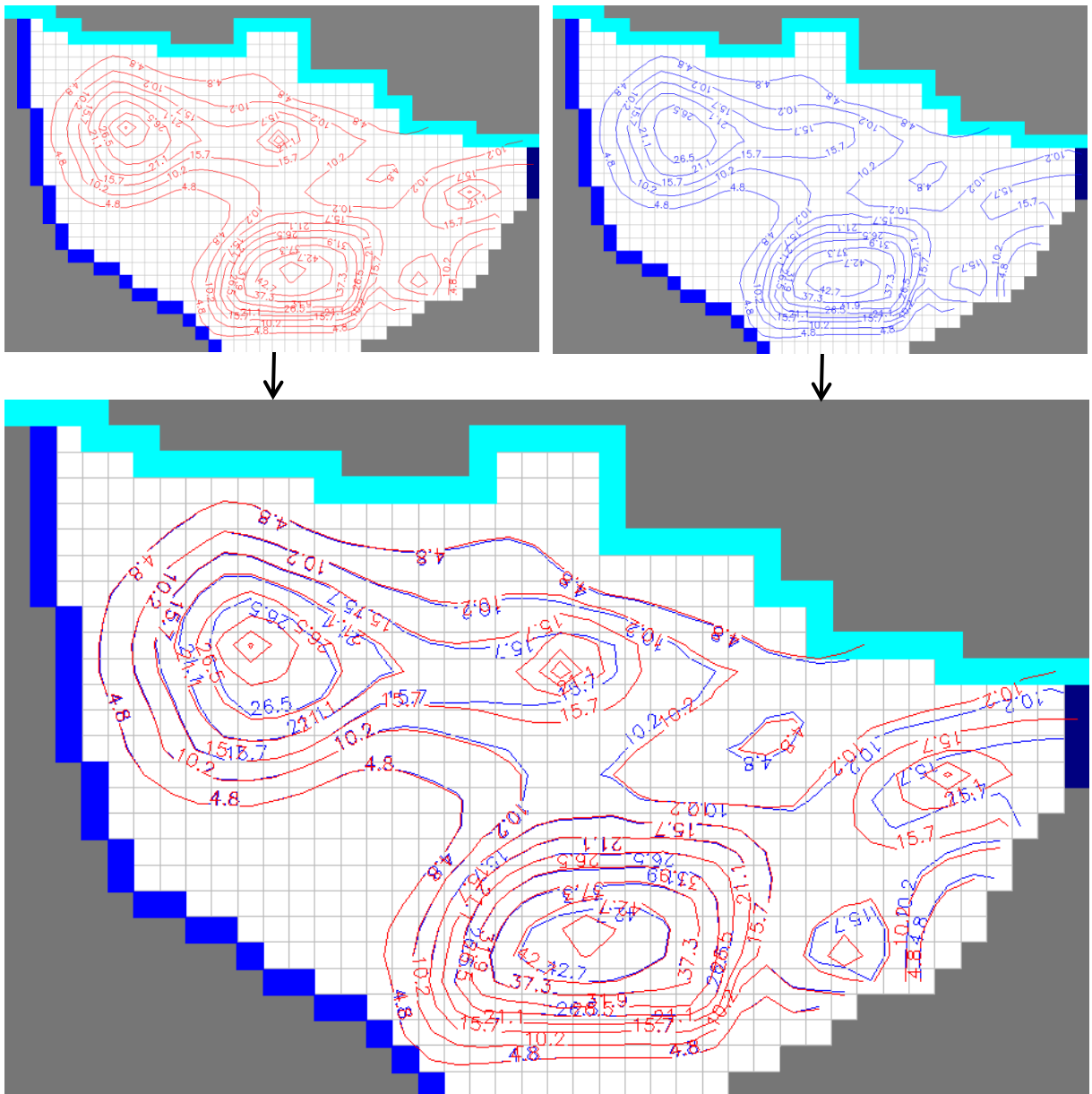
Ao final do processo iterativo com o MIGC, que ocorreu em 62 iterações, os valores calculados se mostraram coincidentes com os valores observados, como pode ser visualizado na figura 31.

A análise da convergência do processo de calibração com o MIGC possibilitada pelo cálculo da média dos ângulos  $\varphi$  formados pelos vetores gradientes de concentração observado e calculado, também chegou a valores próximos a zero graus. O gráfico com a evolução da medida é apresentado na figura 32.

A figura 33 apresenta o gráfico com a evolução da raiz do erro quadrático médio (RMSEC) e apresentou estabilidade em torno de 0,35mg/L nas iterações finais.

O processo de calibração teve início com o valor de 1000m para dispersividade longitudinal e na iteração de número 62 atingiu o valor de 99,9m, bastante próximo ao valor considerado real estabelecido no exemplo que foi de 100m.

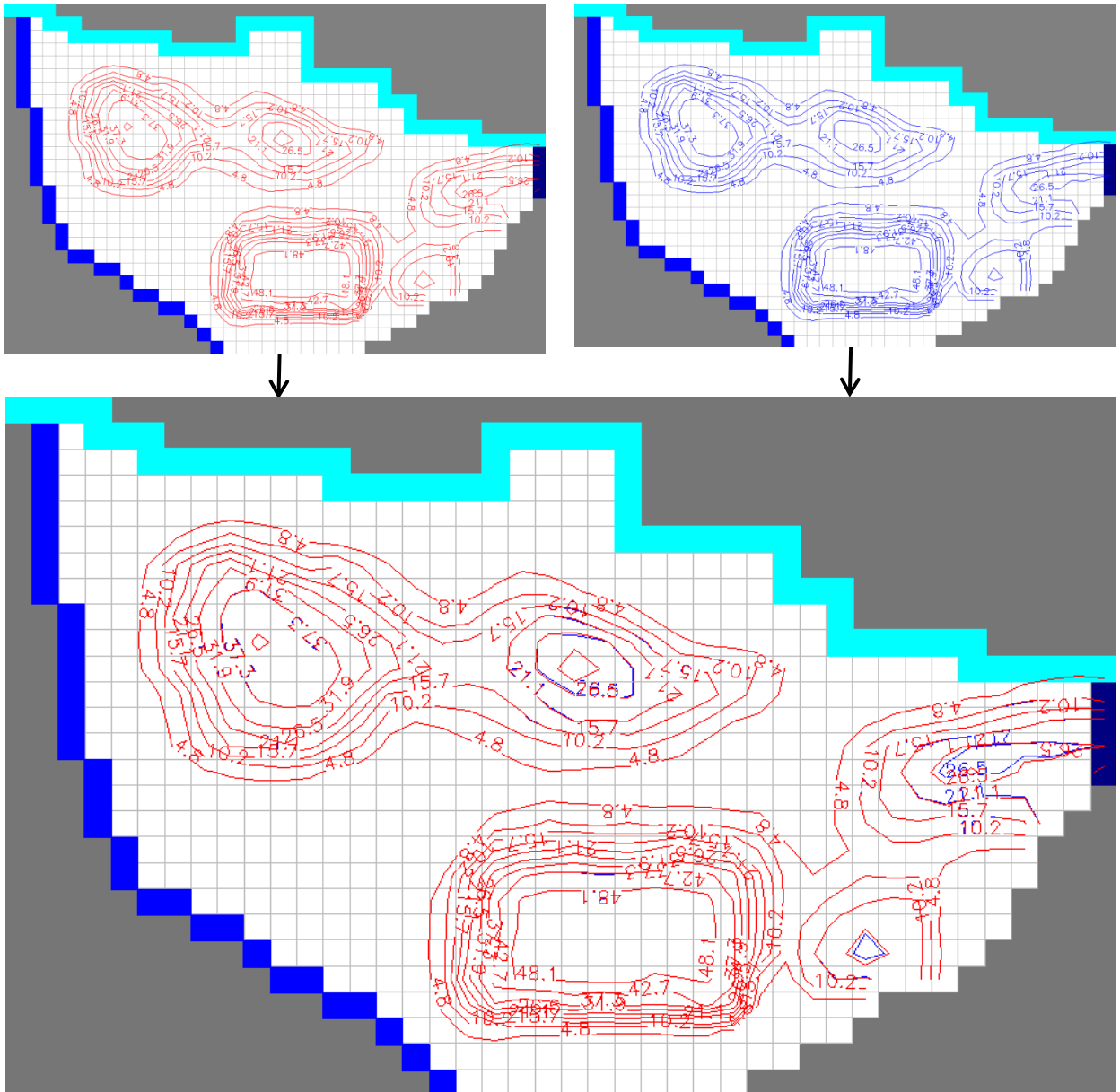
Figura 30 - Linhas potenciométricas iniciais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para o exemplo hipotético 2. Valor inicial para  $\alpha L$  de 1000m.



Fonte: Autor, 2014.

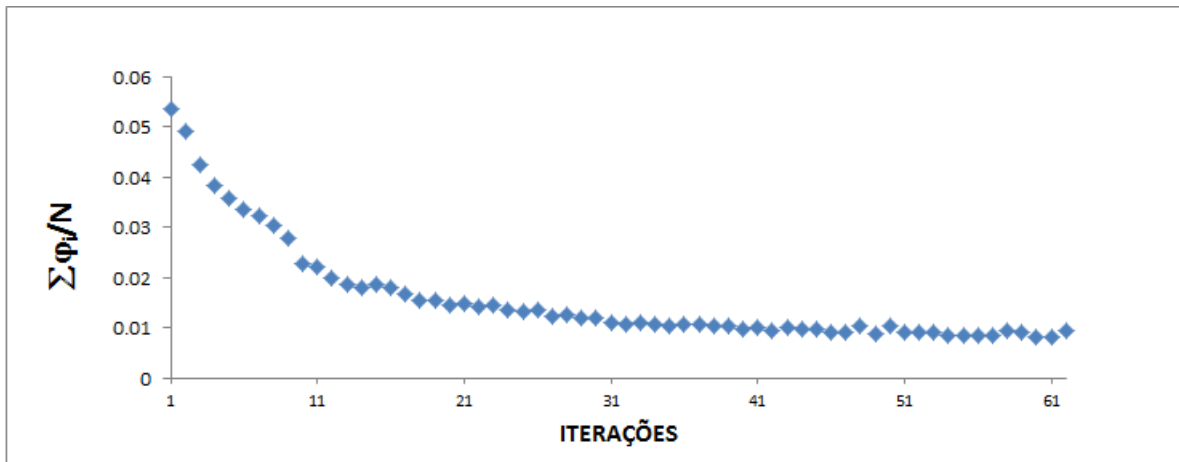


Figura 31 - Linhas potenciométricas finais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para o exemplo hipotético 2. Valor final para  $\alpha L$  de 99,96m.



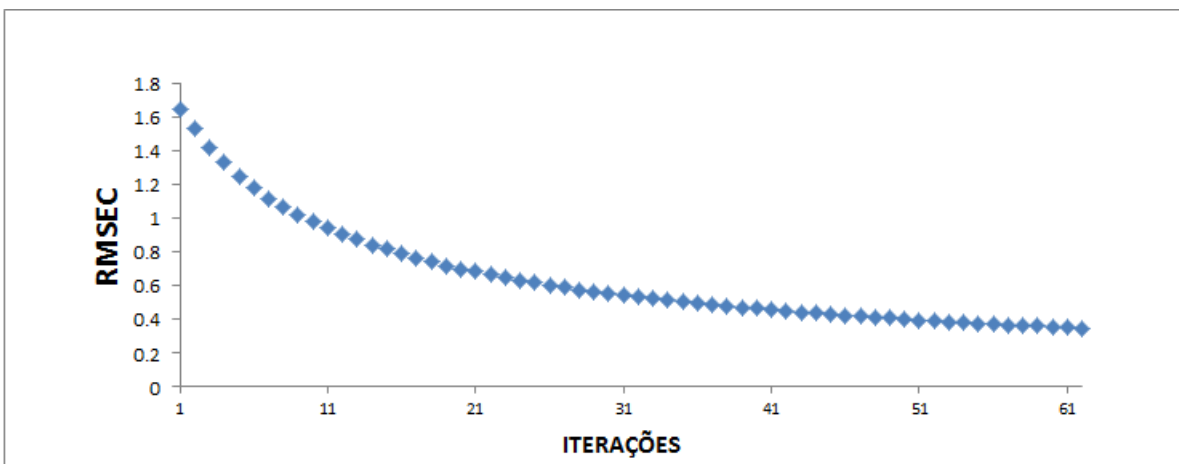
Fonte: Autor, 2014.

Figura 32 – Média dos ângulos  $\varphi$ , em graus, formado pelos vetores gradientes das concentrações observadas e calculadas x Iteração para o exemplo hipotético 2.



Fonte: Autor, 2014.

Figura 33 – Raiz do erro quadrático médio das concentrações em mg/L (RMSEC) x Iteração para o exemplo hipotético 2.



Fonte: Autor, 2014.

A figura 34 apresenta uma comparação entre os valores das concentrações calculadas e observadas. Os valores resultantes da calibração através do MIGC se apresentam próximos aos valores observados, o que pode ser visualizado melhor através da comparação entre a linha de tendência central e a linha tracejada, que indica uma igualdade entre as concentrações observadas e calculadas.

Após o processo de calibração o MIGC forneceu uma matriz de valores da dispersividade longitudinal para o exemplo hipotético 2. O gráfico apresentado na figura 35 mostra a distribuição desses valores em termos percentuais.

Figura 34 – Comparação entre concentrações observadas e calculadas através do MIGC para o exemplo hipotético 2.

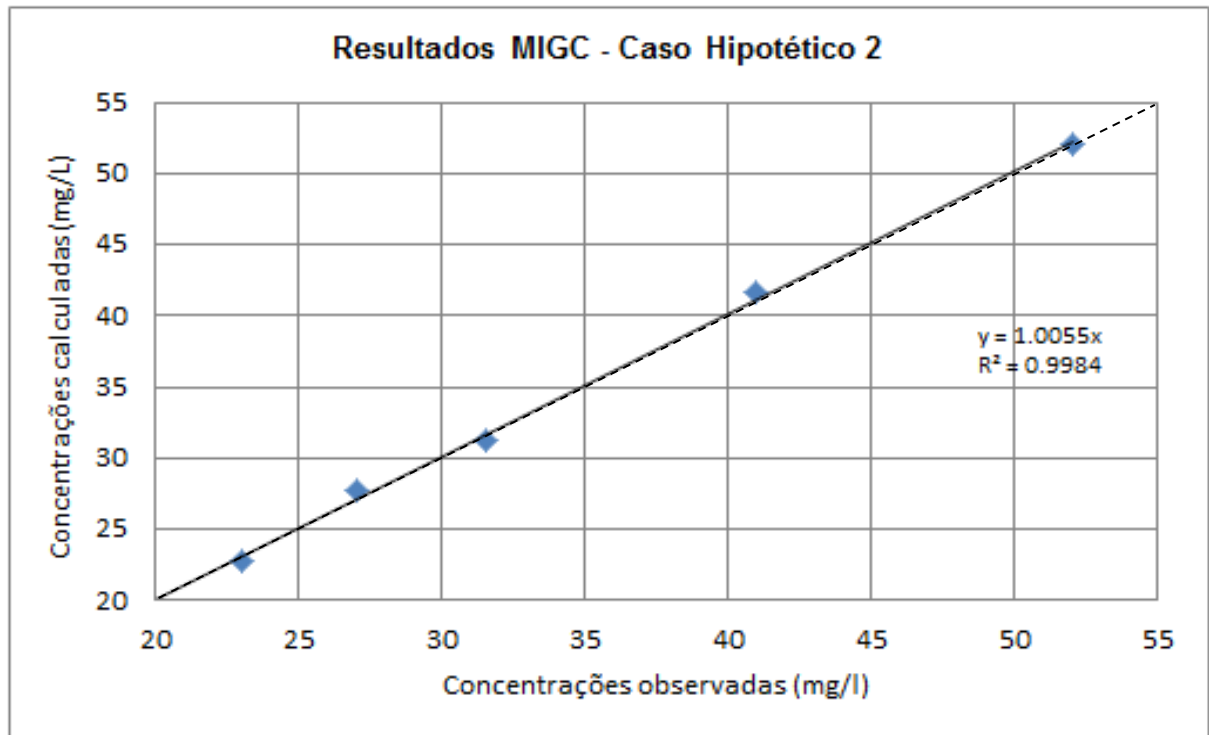
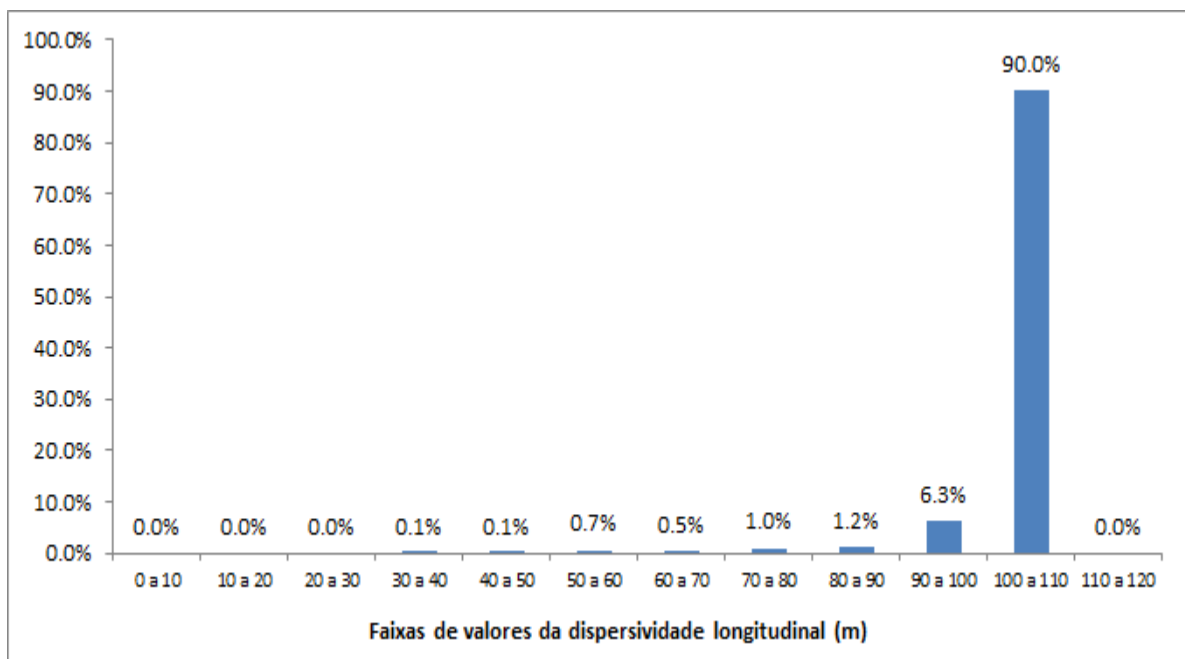


Figura 35 – Distribuição percentual dos valores da dispersividade longitudinal (m) na área do exemplo hipotético 2 no final da 62ª iteração após calibração com o MIGC.



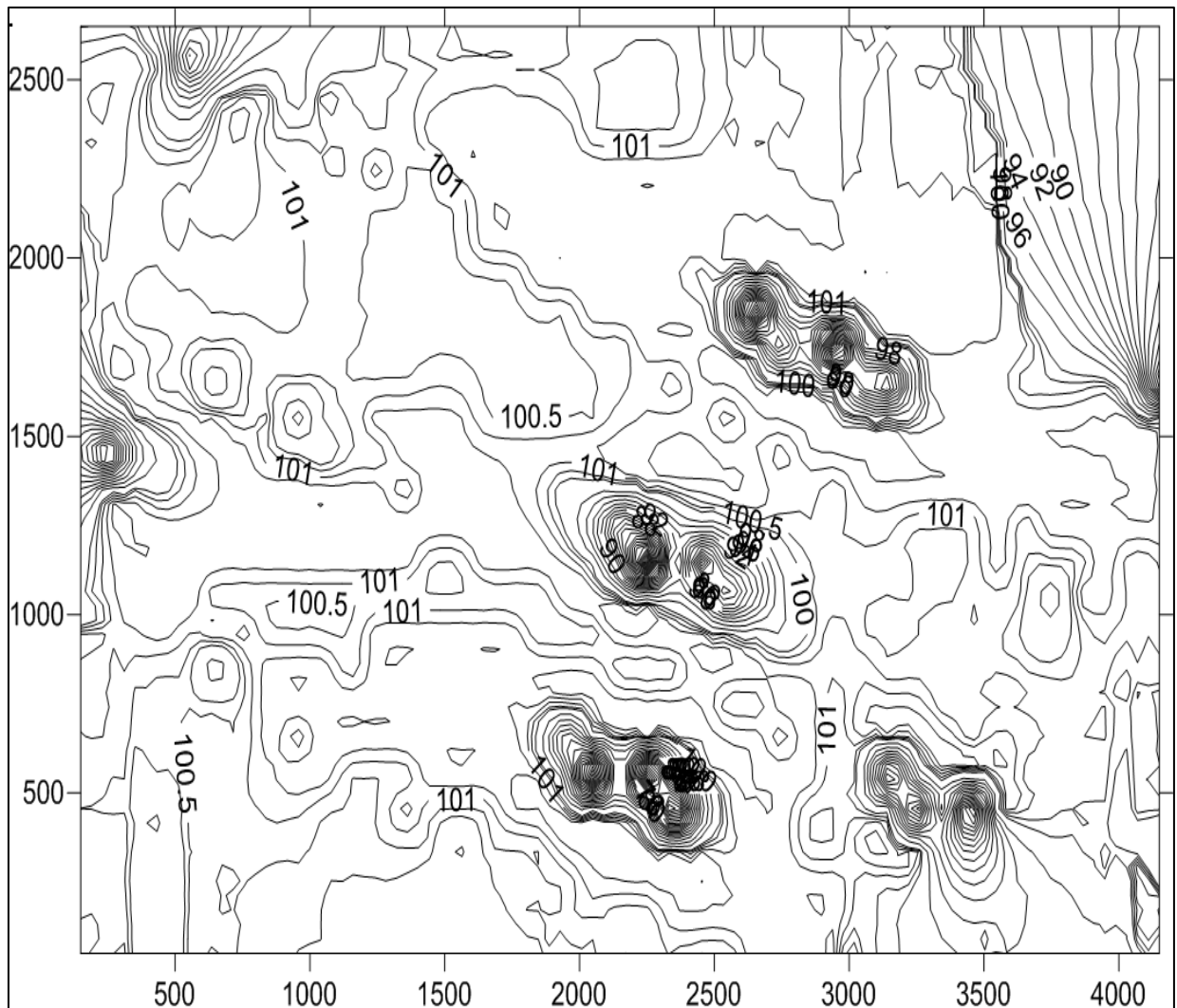
Fonte: Autor, 2014.

Observa-se que a maior parte dos valores, 96,3%, estiveram próximos a 100m, que foi o valor da dispersividade longitudinal adotado no início do problema hipotético.

A distribuição espacial dos valores dispersividade longitudinal na área do exemplo 1 é apresentada na figura 36.

Observa-se a grande homogeneidade dos valores da dispersividade longitudinal, que no final da calibração estiveram próximos a 100m.

Figura 36 – Distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal (m) na área do exemplo hipotético 2 no final da 62ª iteração após calibração com o MIGC.



Fonte: Autor, 2014.

### 4.3 – Modelagem 1 do caso real

Após a simulação hidrodinâmica desenvolvida com base nos estudos de Tavares (2010), ocorreu a simulação do transporte de soluto com as concentrações observadas em campo (Tabela 3), denominada de Modelagem 1 do caso real.

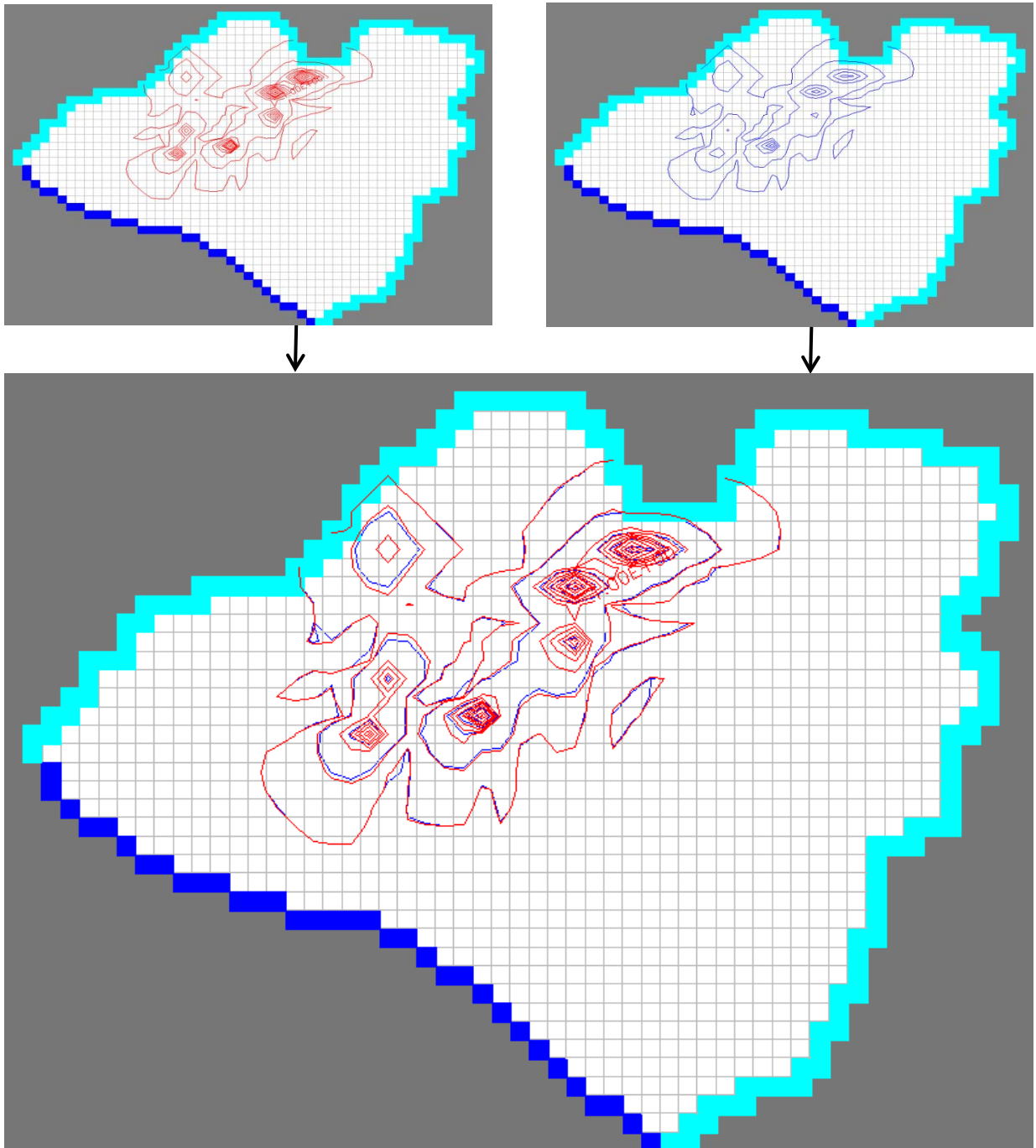
Para o caso real, o valor estimado para a dispersividade longitudinal foi de 100m, valor também baseado nos dados de Gelhar *et al.* (1985).

Após essa etapa, iniciou-se o processo de calibração com um valor da dispersividade longitudinal de 1000m e após 18 iterações foi obtido o valor de 102,3m. Os gráficos comparativos entre as cargas calculadas e observadas antes e após o processo de calibração são apresentados nas figuras 37 e 38.

A análise da convergência do processo de calibração com o MIGC possibilitada pelo cálculo da média dos ângulos  $\varphi$  formados pelos vetores gradientes de concentração observados e calculados, também chegou a valores próximos a zero ( $0,08^\circ$ ). O gráfico com a evolução da medida é apresentado na figura 39.

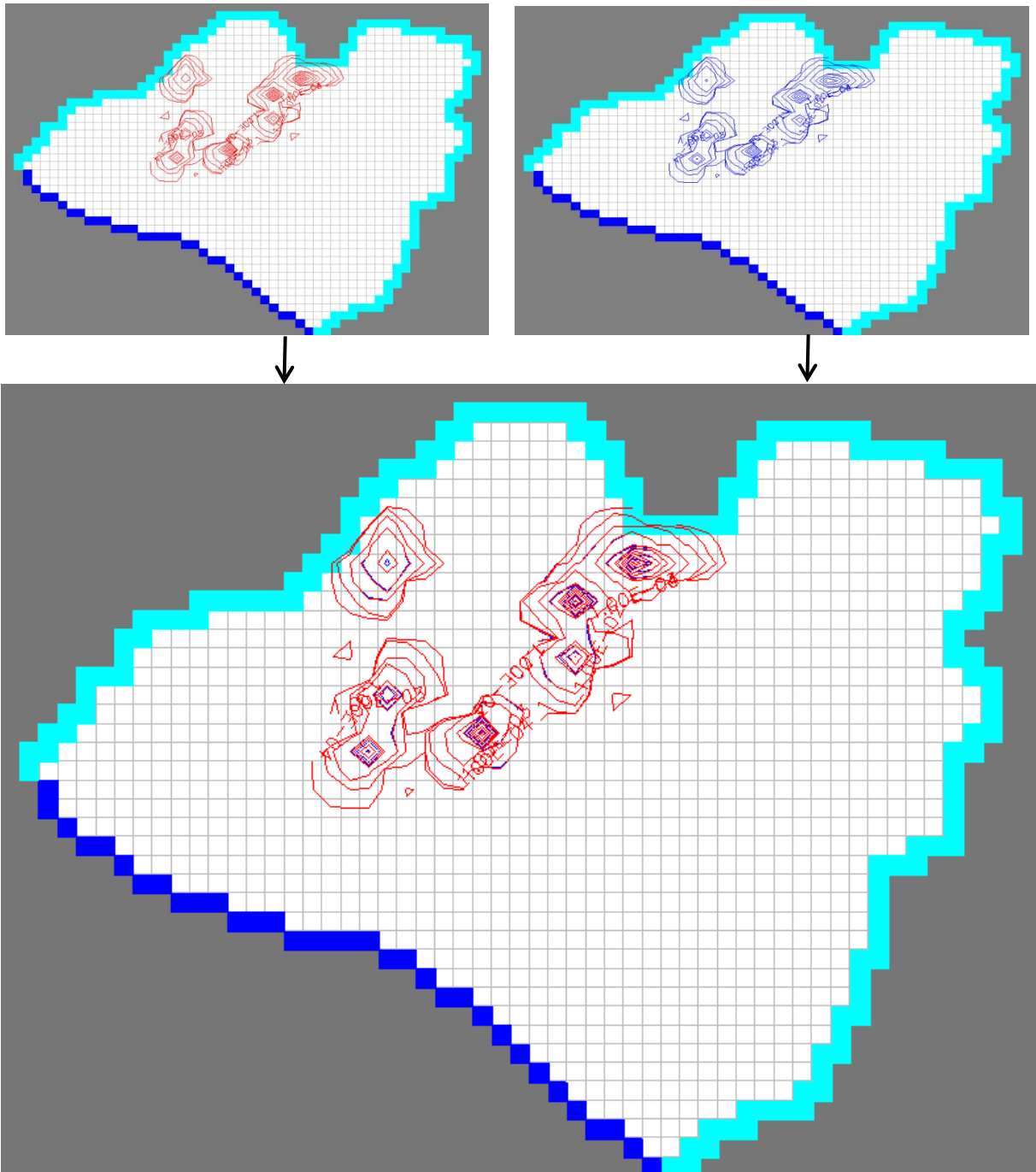
A Figura 40 apresenta o gráfico com a evolução da raiz do erro quadrático médio (RMSEC) e apresentou estabilidade em torno de 0,64mg/L nas iterações finais.

Figura 37 - Linhas potenciométricas iniciais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para modelagem 1 do caso real. Valor inicial para  $\alpha L$  de 1000m.



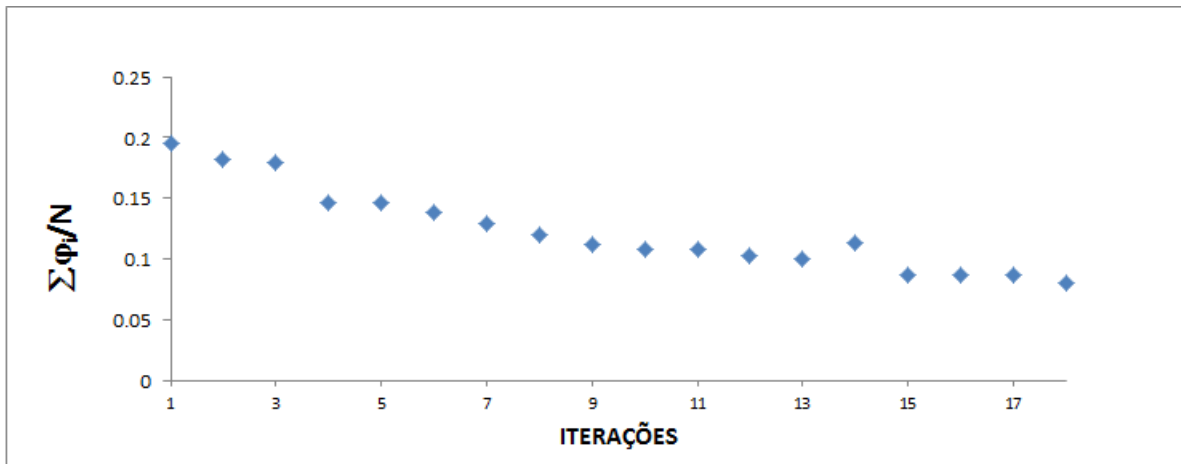
Fonte: Autor, 2014.

Figura 38 - Linhas potenciométricas finais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para a modelagem 1 do caso real. Valor final para  $\alpha L$  de 102,3m.



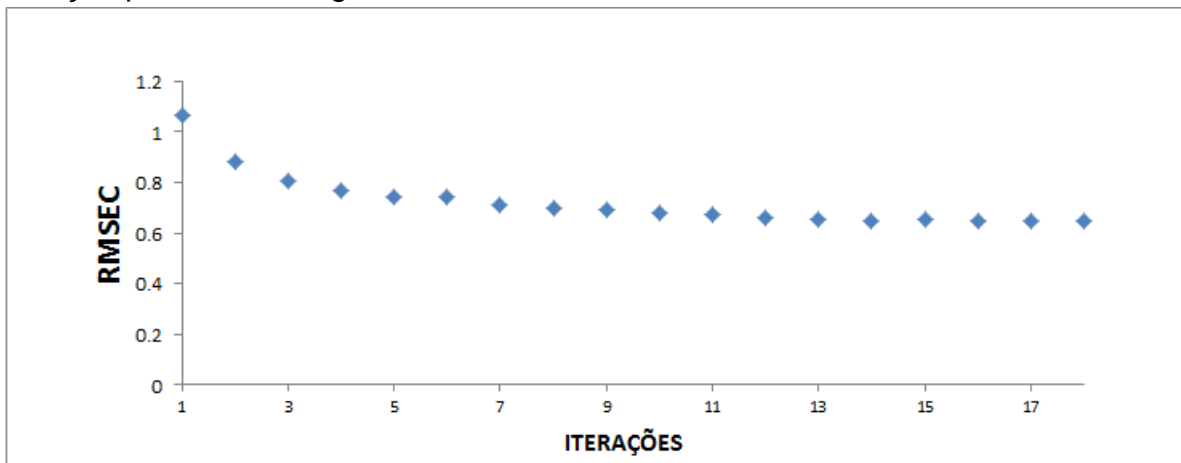
Fonte: Autor, 2014.

Figura 39 – Média dos ângulos  $\phi$ , em graus, formada pelos vetores gradientes das concentrações observadas e calculadas x Iteração para a modelagem 1 do caso real.



Fonte: Autor, 2014.

Figura 40 – Raiz do erro quadrático médio de concentrações em mg/L (RMSEC) x Iteração para a modelagem 1 do caso real.

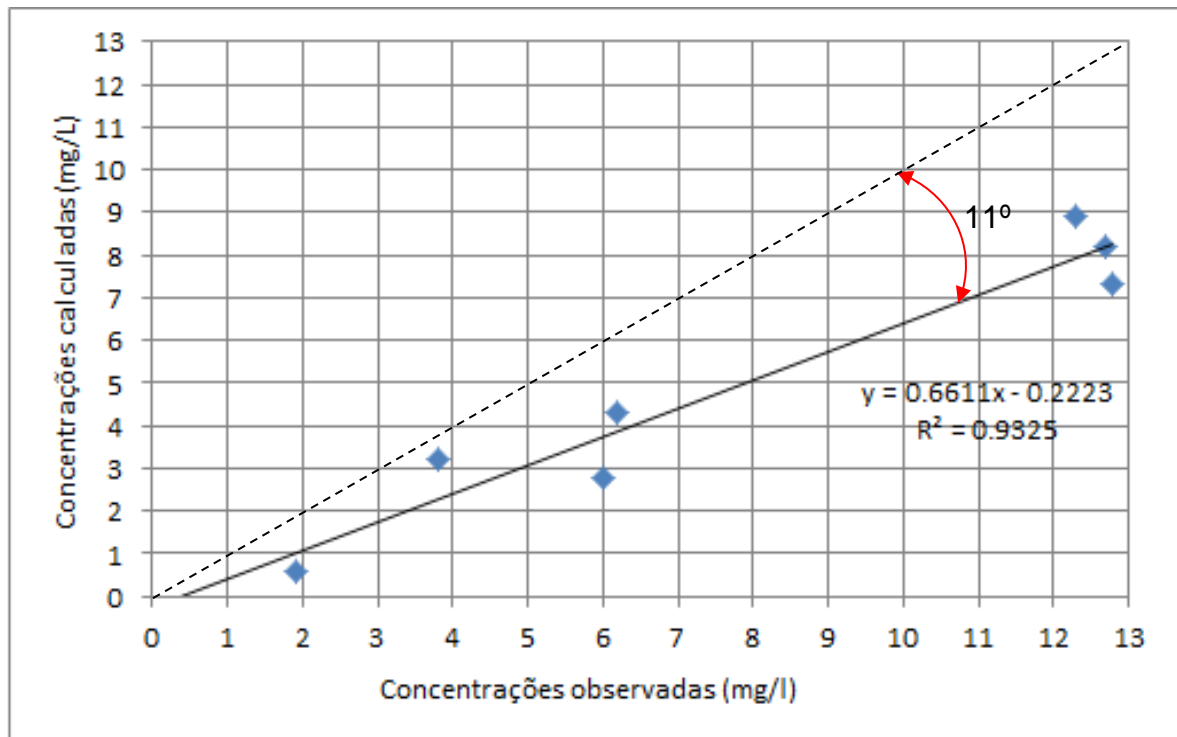


Fonte: Autor, 2014.

A figura 41 apresenta uma comparação entre os valores das concentrações calculadas e observadas. Estas últimas formam a linha tracejada com um ângulo de  $45^\circ$  em relação ao eixo x.



Figura 41 – Comparação entre concentrações observadas e calculadas através do MIGC para a primeira modelagem do caso real.



Fonte: Autor, 2014.

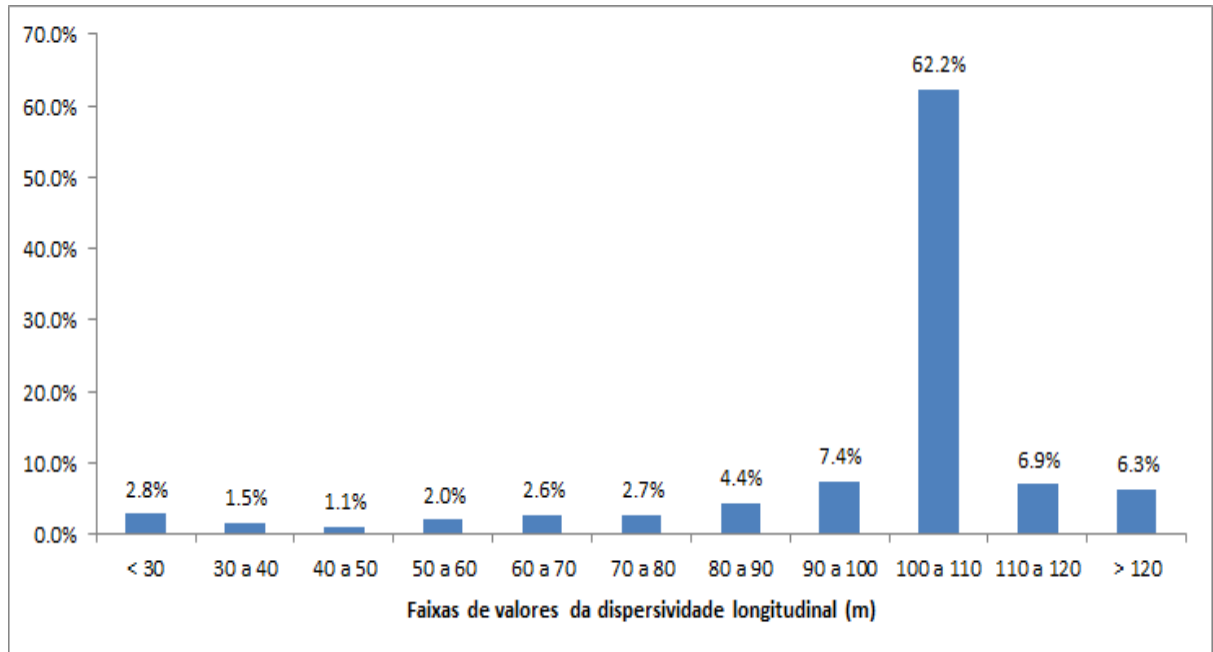
O valor do coeficiente de correlação ( $R^2$ ) que foi de 0,93 indica que há uma boa correlação entre os valores obtidos no modelo calculado (não fixo). No entanto, há um distanciamento de cerca de  $11^\circ$  entre a linha tracejada (que representa uma igualdade entre os valores dos modelos fixo e não fixo) e a linha cheia. Destaca-se que o valor do coeficiente angular da reta tracejada (0,6611) indica que as concentrações calculadas a partir do processo de calibração estão 34% subestimadas com relação às concentrações observadas. Esta discrepância se deve ao fato de terem sido utilizados poucos valores de concentrações iniciais, apenas os sete pontos apresentados na tabela 3.

Após o processo de calibração, o MIGC forneceu uma matriz de valores da dispersividade longitudinal para a modelagem 1 do caso real. O gráfico apresentado na figura 42 mostra a distribuição desses valores em termos percentuais.

Observa-se que a maior parte dos valores, 84%, encontra-se na faixa de 75m a 125m, o que indica uma boa aproximação para com o valor da dispersividade longitudinal adotado no início do problema real (100m).

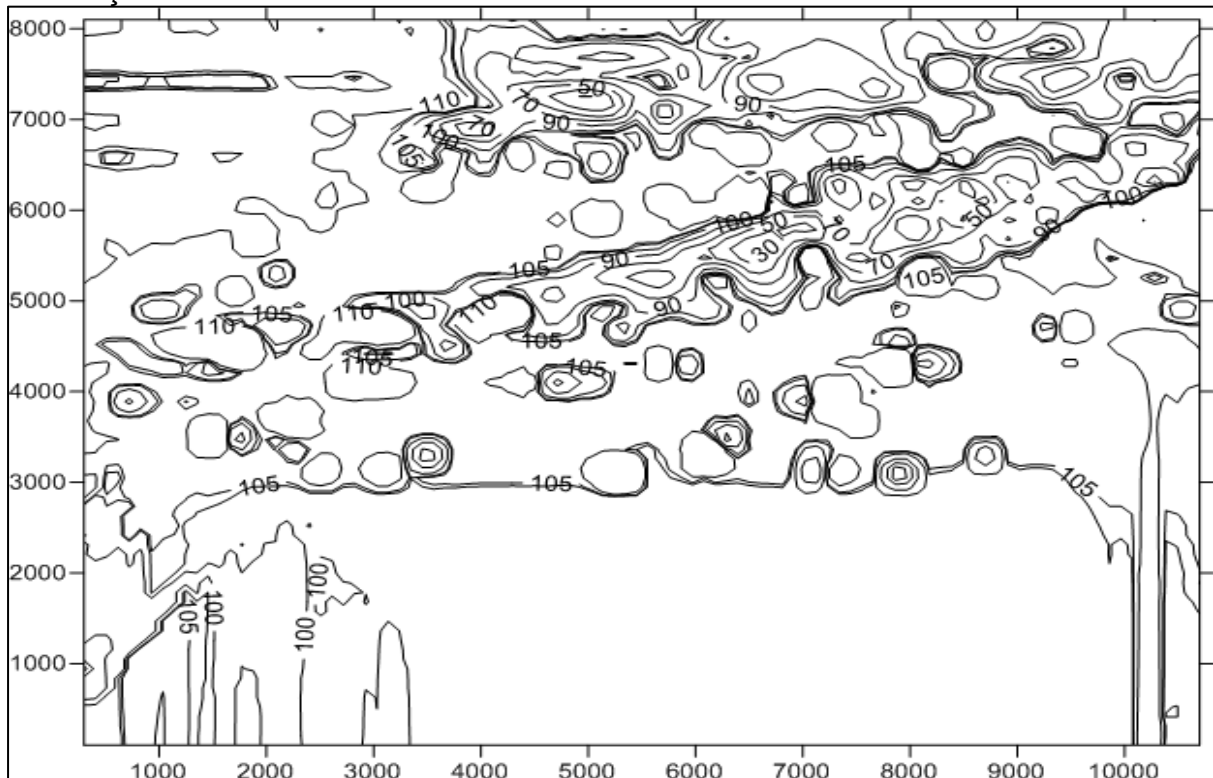
A distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal na área do caso real é apresentada na figura 43.

Figura 42 – Distribuição percentual dos valores da dispersividade longitudinal na área da primeira modelagem do Caso Real no final da 18ª iteração.



Fonte: Autor, 2014.

Figura 43 – Distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal (m) obtidos com a 1ª modelagem na área do Caso Real no final da 18ª iteração após calibração com o MIGC.



Fonte: Autor, 2014

#### 4.4 – Modelagem 2 do caso real

Para a segunda modelagem do caso real foram consideradas novamente a modelagem hidrodinâmica desenvolvida por Tavares (2010) e as concentrações obtidas em campo (Tabela 3).

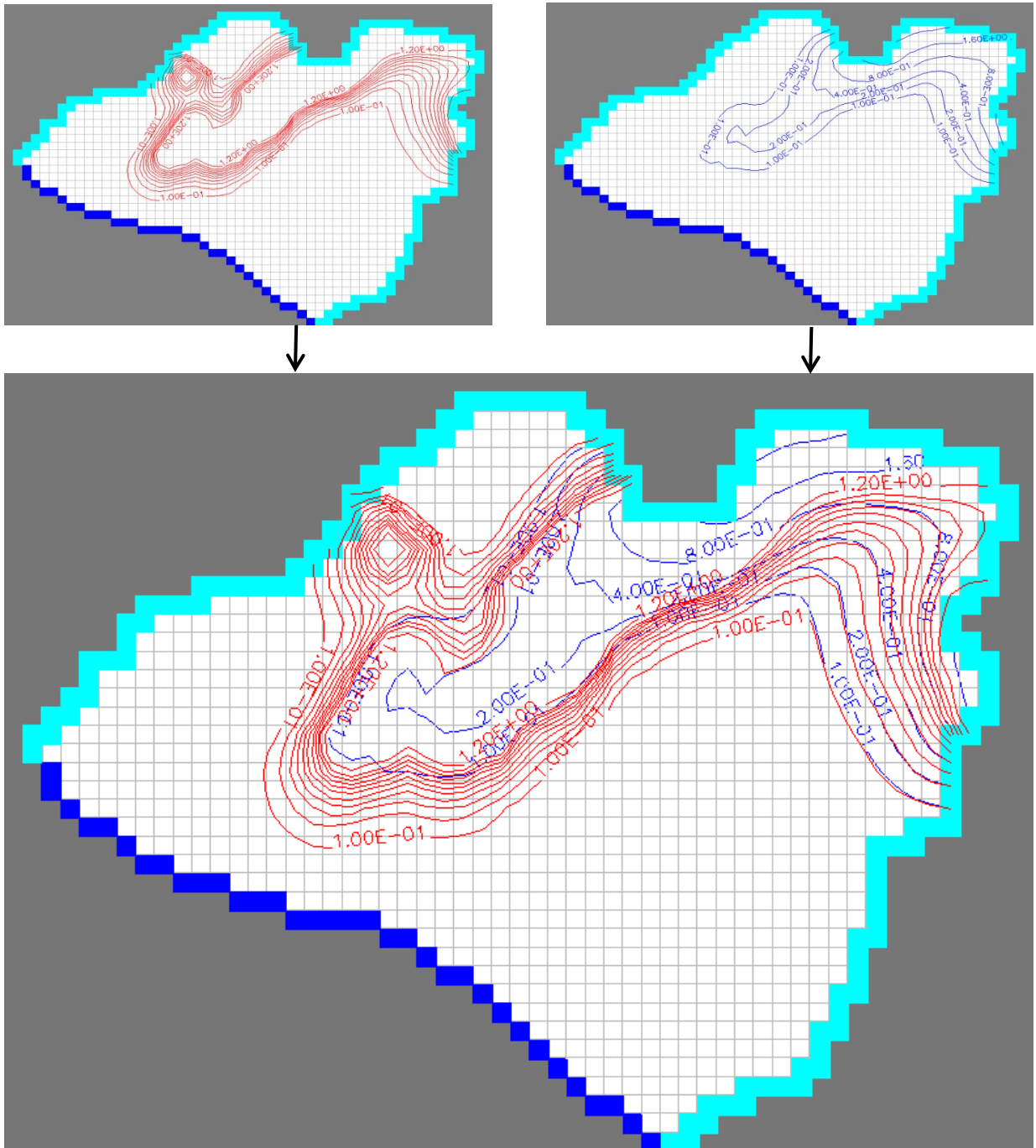
Como diferencial para esta segunda modelagem foi considerado que havia uma concentração de 8,8 mg/L na fronteira nordeste do estuário, no trecho a jusante do rio Batateiras em relação ao município do Crato. A referida concentração foi determinada com base nos estudos desenvolvidos por Sampaio *et al.* (2002) e Chaves *et al.* (2003).

O processo de calibração teve início com um valor da dispersividade longitudinal de 1000m e após 7 iterações foi obtido o melhor resultado (97,6m). As isolinhas de concentração no início e no final do processo de calibração são apresentadas nas figuras 44 e 45.

A análise da convergência do processo de calibração com o MIGC possibilitada pelo cálculo da média dos ângulos  $\varphi$  formados pelos vetores gradientes de concentração observados e calculados indica que houve uma boa aproximação, com os valores se estabilizando em torno de 0,1°. O gráfico com a evolução da medida é apresentado na figura 46.

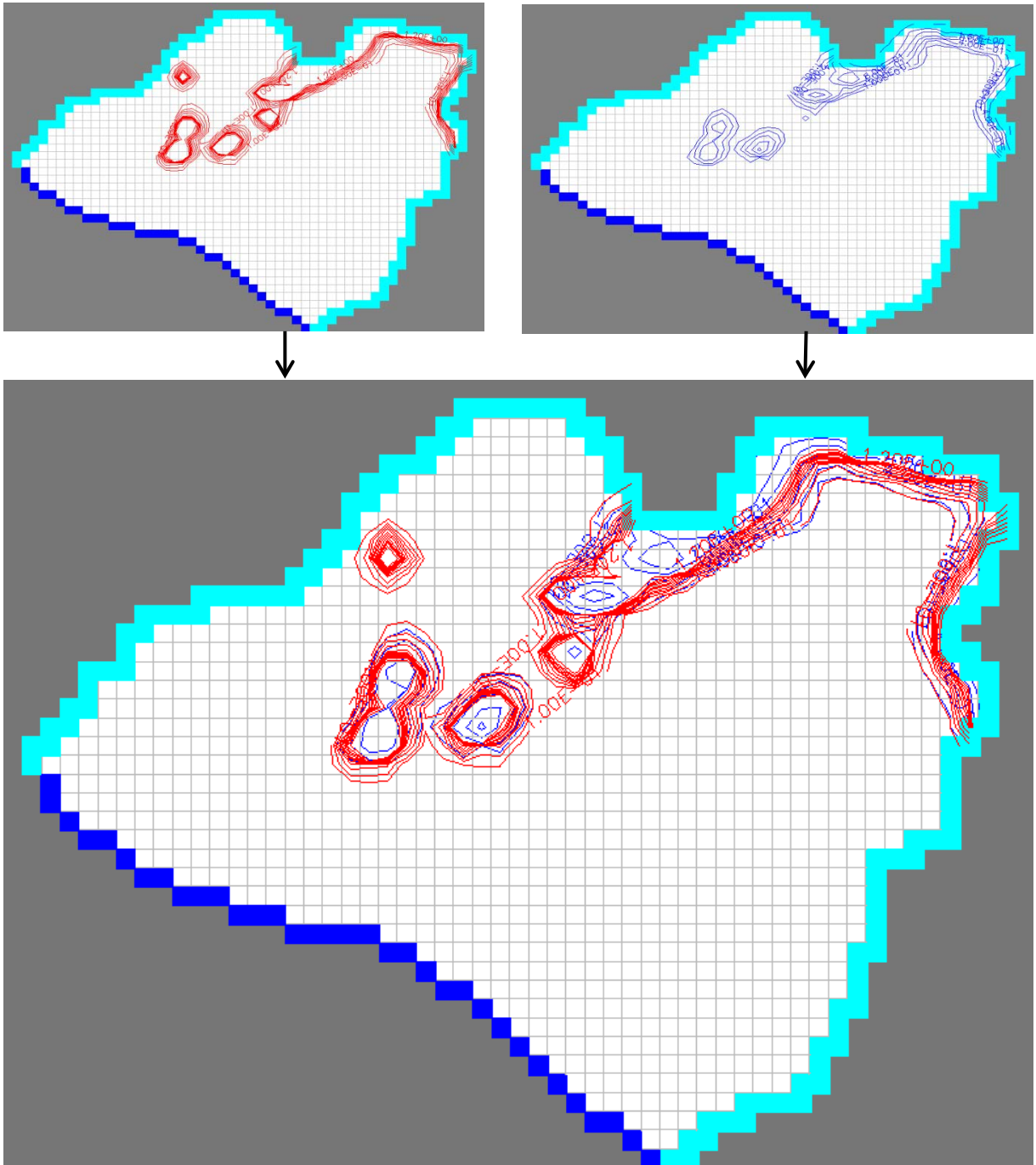
A figura 47 apresenta o gráfico com a evolução da raiz do erro quadrático médio (RMSEC) e apresentou estabilidade em torno de 0,71mg/L nas iterações finais. O processo de calibração teve início com o valor de 1000m para a dispersividade longitudinal e na iteração de número 7 atingiu o valor 97,6m, bastante próximo ao valor considerado real estabelecido no exemplo que foi de 100m.

Figura 44 - Linhas potenciométricas iniciais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para modelagem 2 do caso real. Valor inicial para  $\alpha L$  de 1000m.



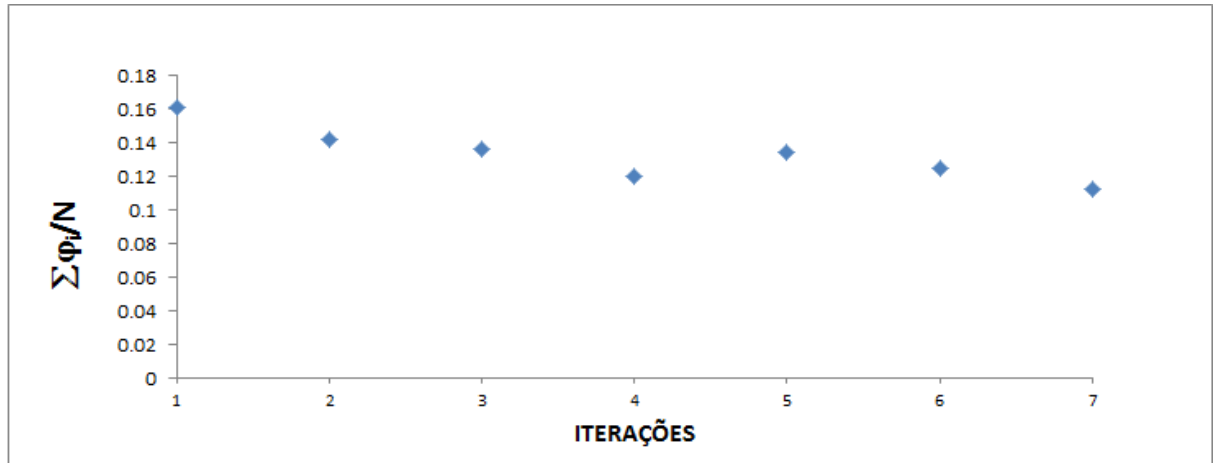
Fonte: Autor, 2014.

Figura 45 - Linhas potenciométricas finais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para a modelagem 2 do caso real. Valor final para  $\alpha L$  de 97,6m.



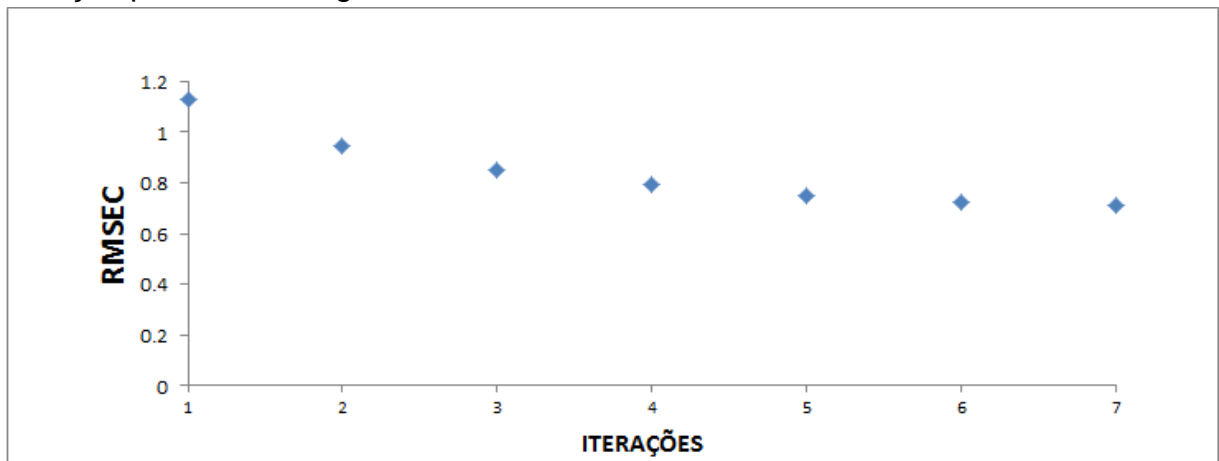
Fonte: Autor, 2014.

Figura 46 – Média dos ângulos  $\phi$ , em graus, formada pelos vetores gradientes das concentrações observadas e calculadas x Iteração para a modelagem 2 do caso real.



Fonte: Autor, 2014.

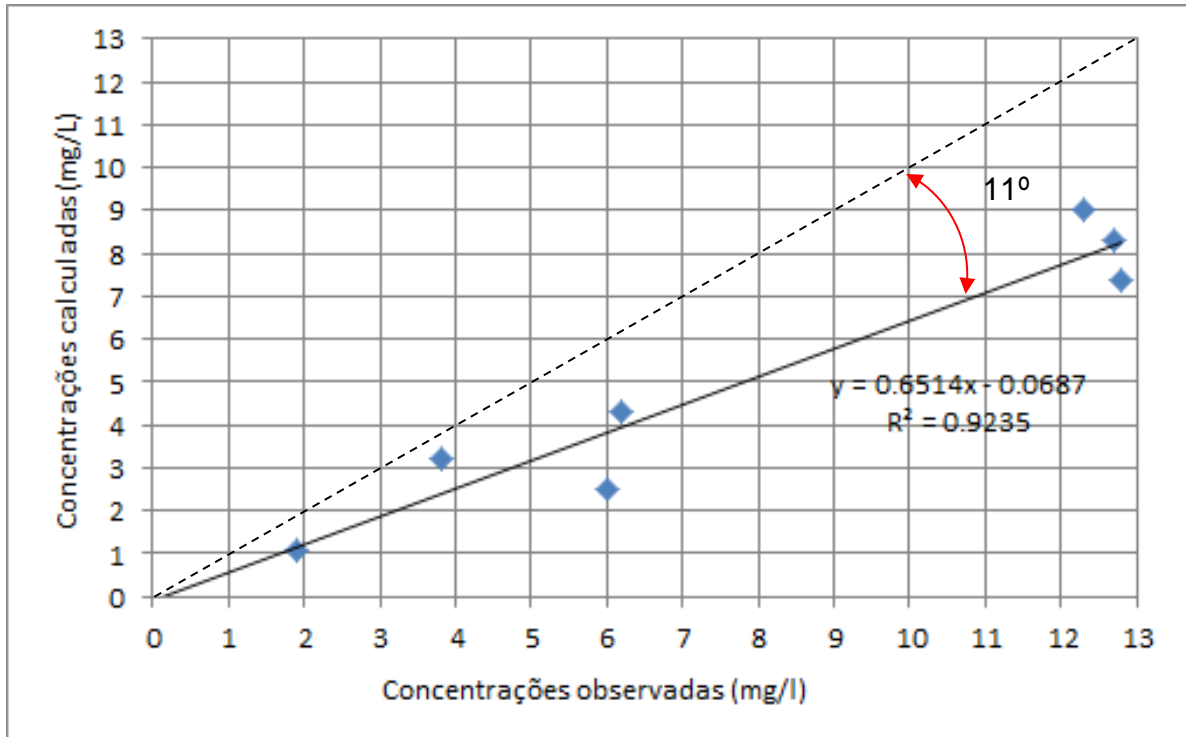
Figura 47 – Raiz do erro quadrático médio das concentrações em mg/L (RMSEC) x Iteração para a modelagem 2 do caso real.



Fonte: Autor, 2014.

A figura 48 apresenta uma comparação entre as linhas formadas pelos valores das concentrações calculadas e observadas.

Figura 48 – Comparação entre concentrações observadas e calculadas através do MIGC para a segunda modelagem do caso real.

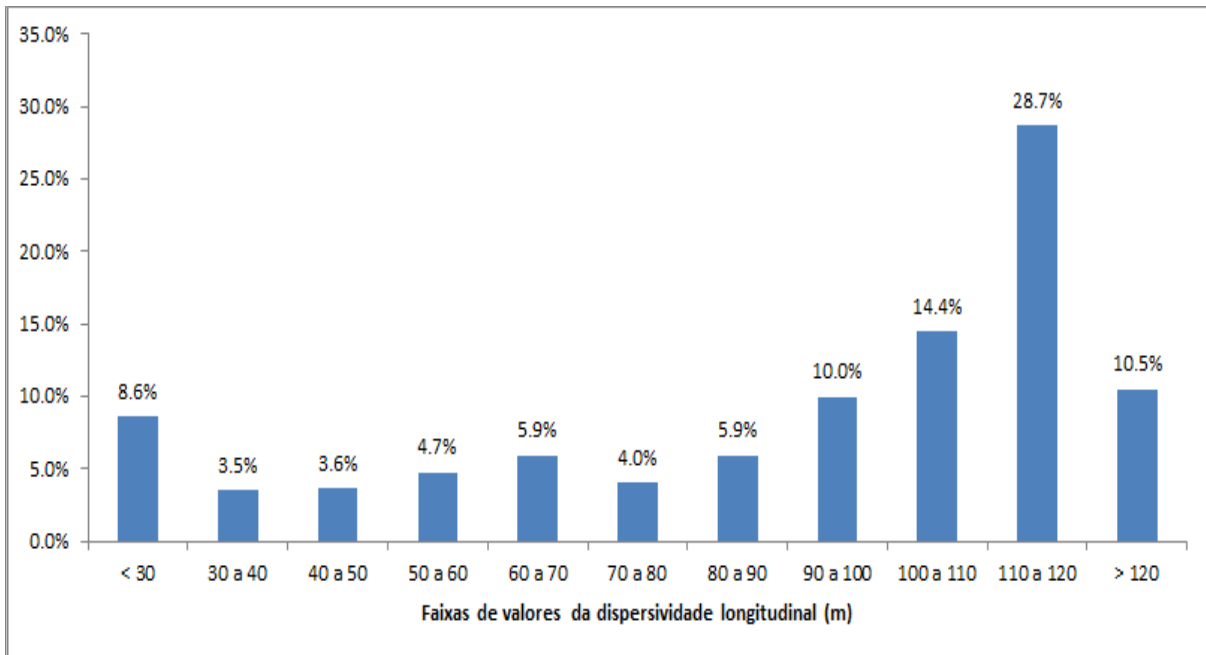


Fonte: Autor, 2014.

Os valores encontrados para essa comparação foram muito próximos daqueles observados na primeira modelagem do caso real. Uma boa correlação entre as concentrações do modelo não fixo ( $R^2 = 0,92$ ) e a reta resultante também formou um ângulo de aproximadamente  $11^\circ$  com a reta tracejada (que representa uma igualdade entre os valores dos modelos fixo e não fixo). O subdimensionamento observado na modelagem anterior apresentou um ligeiro aumento e para a presente situação, observou-se que os valores calculados estão cerca de 35% menores que os valores observados. A explicação para esta discrepância também deve estar relacionada ao pequeno número de concentrações obtidas em campo. No entanto, deve-se destacar que praticamente os mesmos resultados comparativos foram obtidos, mas com um número bem menor de iterações. Este avanço se deveu possivelmente à nova configuração das condições de contorno obtidas com a inserção de concentrações de nitrato no trecho a jusante do rio Batateiras.

Após o processo de calibração, o MIGC forneceu uma matriz de valores da dispersividade longitudinal para a modelagem 2 do caso real. O gráfico apresentado na figura 49 mostra a distribuição desses valores em termos percentuais.

Figura 49 – Distribuição percentual dos valores da dispersividade longitudinal (m) na área da segunda modelagem do Caso Real no final da 7ª iteração.



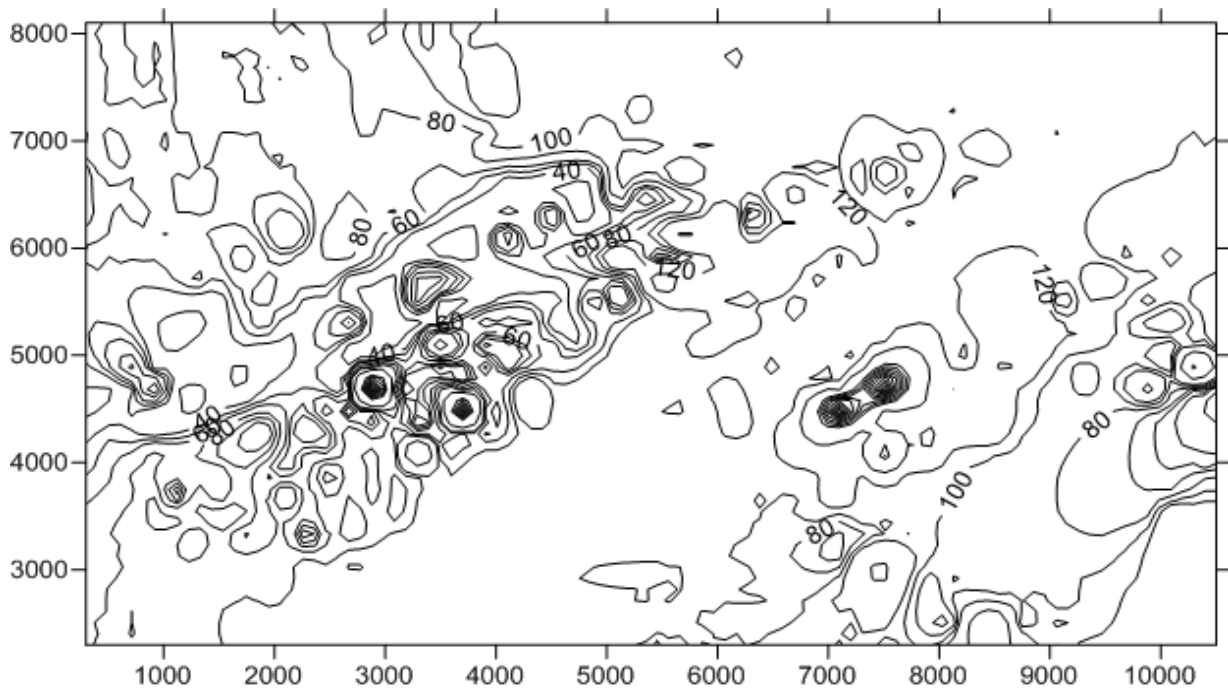
Fonte: Autor, 2014.

Observa-se que a maior parte dos valores, 59%, encontra-se na faixa de 80m a 120m, o que também indica uma boa aproximação para com o valor da dispersividade longitudinal adotado no início do problema real (100m).

A distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal na área do caso real é apresentada na figura 50.



Figura 50 – Distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal (m) obtidos com a 2ª modelagem na área do caso real no final da 7ª iteração após calibração com o MIGC.



Fonte: Autor, 2014.

#### 4.5 – Modelagem 3 do caso real

Para a terceira modelagem do caso real foram consideradas novamente a modelagem hidrodinâmica desenvolvida por Tavares (2010) e as concentrações obtidas em campo (Tabela 3). Além disso, houve uma nova etapa na qual se produziu uma matriz com valores de concentrações gerados a partir de uma simulação inicial com o uso de um valor estimado para o coeficiente de dispersividade natural. Este valor estimado foi de 100m e está na faixa de valores prevista por Gelhar *et al.* (1985). A partir daí segue a sequência do MIGC de acordo com o fluxograma apresentado anteriormente, na figura 15.

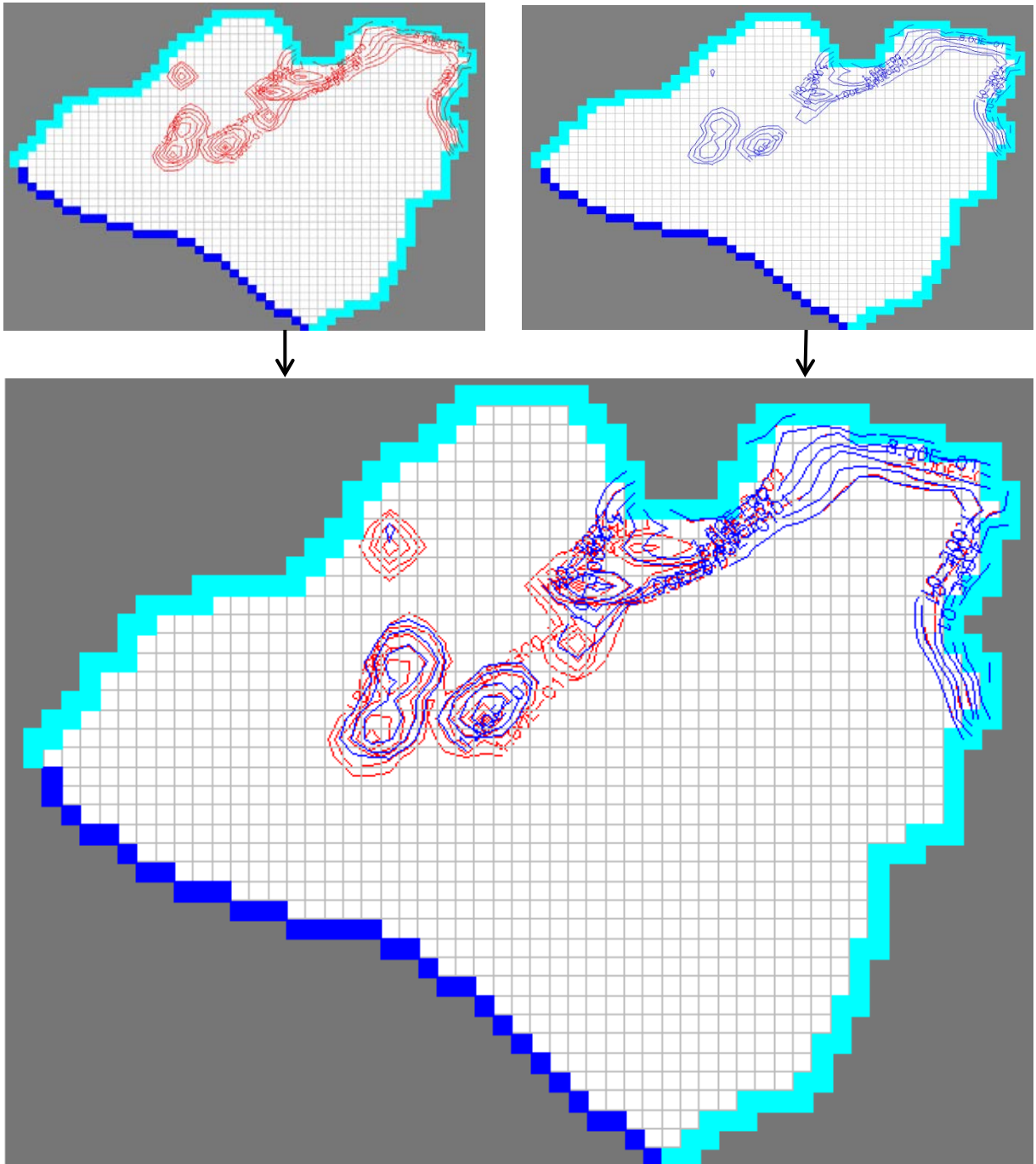
O processo de calibração teve início com um valor da dispersividade longitudinal de 1000m e após 13 iterações foi obtido o valor de 98m. Os resultados das isolinhas de concentração no início e no final do processo de calibração são apresentados nas figuras 51 e 52.

A média dos ângulos  $\varphi$  ficou estável em torno de  $0,09^\circ$ . O gráfico com a evolução da medida é apresentado na figura 53.

A figura 54 apresenta o gráfico com a evolução da raiz do erro quadrático médio (RMSEC) e apresentou estabilidade em torno de 0,45mg/L nas iterações finais. O processo de calibração teve início com o valor de 1000m para a

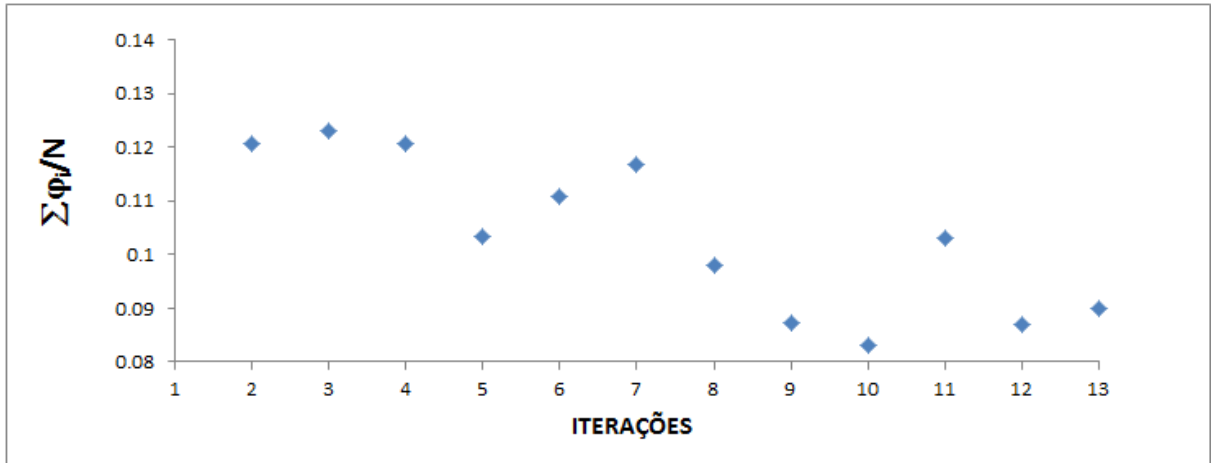


Figura 52 - Linhas potenciométricas finais. Concentrações observadas (vermelho) e concentrações calculadas (azul) para a modelagem 3 do caso real. Valor final para  $\alpha L$  de 98m.



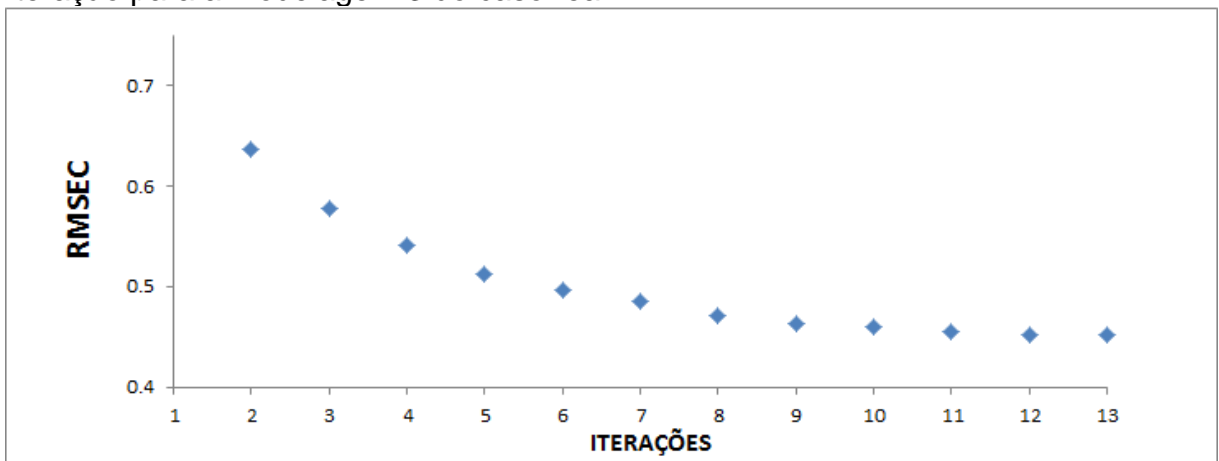
Fonte: Autor, 2014.

Figura 53 – Média dos ângulos  $\phi$ , em graus, formada pelos vetores gradientes das concentrações observadas e calculadas x Iteração para a modelagem 3 do caso real.



Fonte: Autor, 2014.

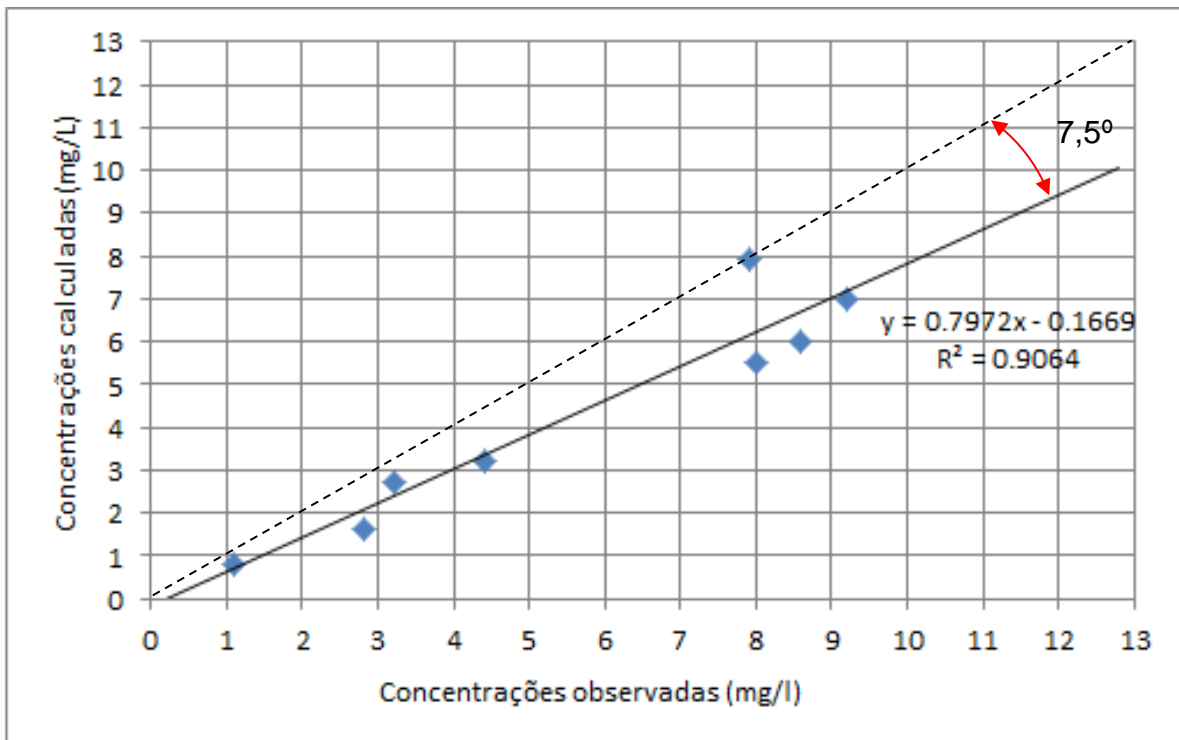
Figura 54 – Raiz do erro quadrático médio das concentrações em mg/L (RMSEC) x Iteração para a modelagem 3 do caso real.



Fonte: Autor, 2014.

A figura 55 apresenta uma comparação entre as linhas formadas pelos valores das concentrações calculadas e observadas.

Figura 55 – Comparação entre concentrações observadas e calculadas através do MIGC para a terceira modelagem do caso real.

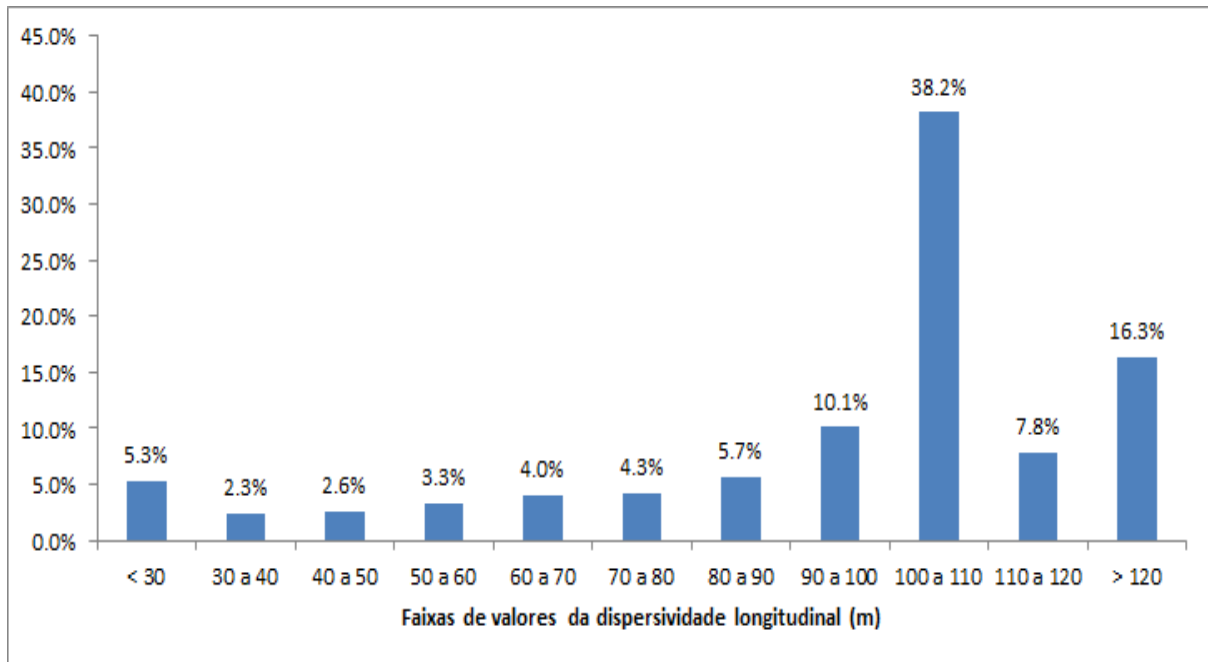


Fonte: Autor, 2014.

Os resultados apresentados acima referentes à modelagem 3 indicam uma maior aproximação entre os dados fixos e os observados, quando comparados às outras duas modelagens do caso real. A melhora significativa foi observada com a implantação da etapa de geração da matriz de concentrações obtidas a partir do uso de um valor estimado para a dispersividade longitudinal (100m) e que antecedeu ao procedimento de calibração. Uma boa correlação entre as concentrações do modelo não fixo ( $R^2 = 0,90$ ) e a reta resultante também formou um ângulo de aproximadamente  $7,5^\circ$  com a reta tracejada. Para a presente situação modelada, observou-se que os valores das concentrações calculadas estão aproximadamente 20,7% menores do que os valores das concentrações observadas. Apesar de uma significativa aproximação, quando comparada às modelagens 1 e 2 do caso real, a diferença entre as concentrações observadas e calculadas, apresentada através da figura 55, permanece significativa. Novamente, pode-se correlacionar o resultado ao ainda pequeno número de concentrações utilizadas na matriz de concentrações iniciais e também o aspecto da distribuição concentrada de poços amostrados em relação à área total do aquífero modelado.

Após o processo de calibração, o MIGC forneceu uma matriz de valores da dispersividade longitudinal para a modelagem 3 do caso real. O gráfico apresentado na Figura 56 mostra a distribuição desses valores em termos percentuais.

Figura 56 – Distribuição percentual dos valores da dispersividade longitudinal na área da terceira modelagem do caso real no final da 13ª iteração.

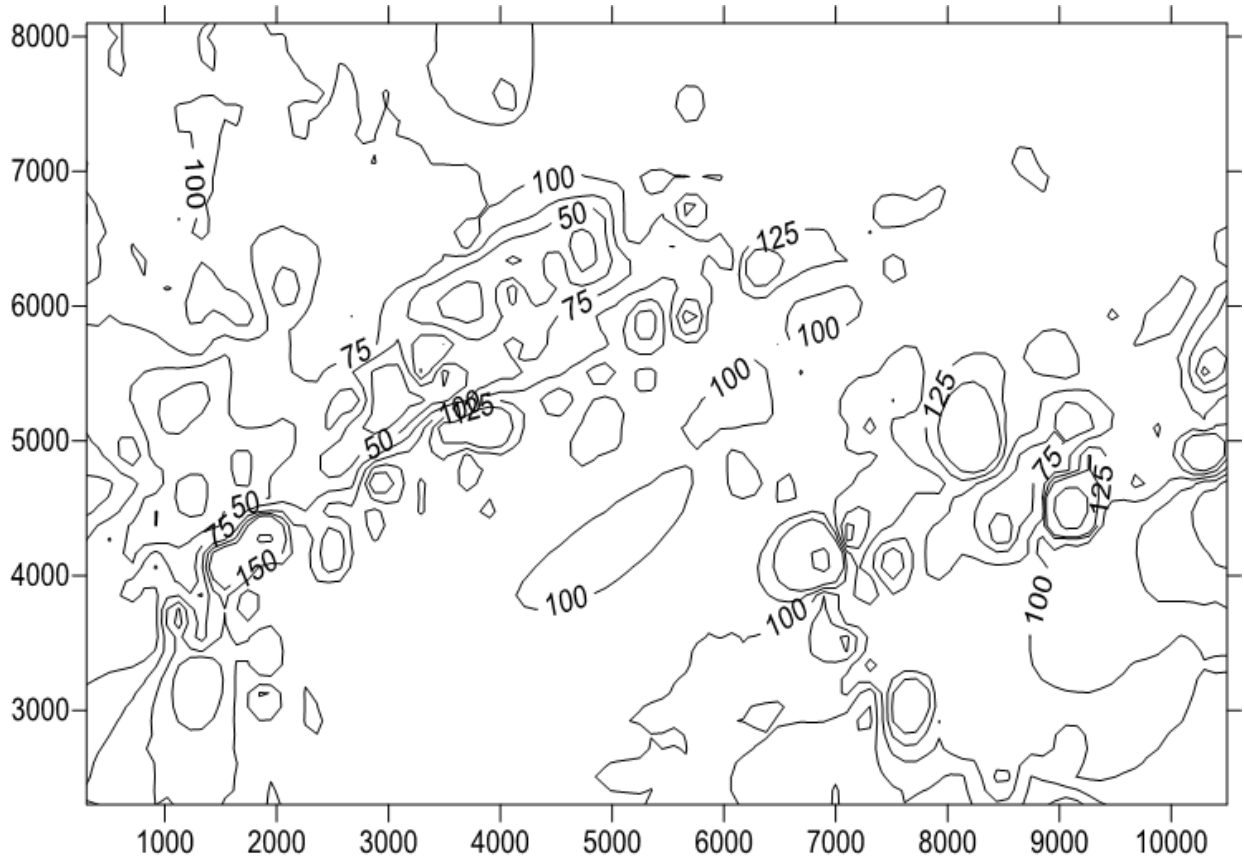


Fonte: Autor, 2014.

Observa-se que a maior parte dos valores, 61,8%, encontra-se na faixa de 80m a 120m, o que também indica uma boa aproximação para com o valor da dispersividade longitudinal adotado no início do problema real (100m).

A distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal na área do caso real é apresentada na figura 57.

Figura 57 – Distribuição espacial dos valores da dispersividade longitudinal (m) obtidos com a 3ª modelagem na área do caso real no final da 13ª iteração após calibração com o MIGC.



## 5. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

As conclusões e recomendações são apresentadas a seguir de acordo com os objetivos específicos do trabalho.

A partir de uma base hidrodinâmica modelada através do programa MODFLOW®, o Método Iterativo do Gradiente de Concentração se fundamentou basicamente em se chegar a um valor do parâmetro de transporte previamente determinado. Este procedimento se deu após uma série de iterações que utilizavam o gradiente das concentrações observadas e calculadas com o uso de um modelo computacional (MT3DMS®).

A aplicação do MIGC em associação com o simulador hidráulico (MODFLOW®) e o simulador de transporte de solutos (MT3DMS®) mostrou-se bastante eficiente. Como forma de otimização, recomenda-se a automatização do MIGC com o desenvolvimento de um programa computacional que execute ciclos de iteração, o que reduziria significativamente o tempo computacional gasto no processo de calibração.

Para o desenvolvimento do MIGC foram utilizados exemplos que permitiram desenvolver as etapas de simulação hidrodinâmica e de transporte de soluto. Os modelos utilizados possibilitaram o entendimento dos principais fatores intervenientes no processo de calibração da dispersividade longitudinal.

Através da estruturação dos exemplos foi possível conhecer com detalhes a influência das diferentes características específicas das áreas modeladas. Merece destaque dentre estes detalhes o entendimento da influência ora dos processos de advecção ora da dispersão hidrodinâmica como fatores preponderantes na evolução das plumas de contaminação.

Como consequência da interferência desses processos, ficou clara a necessidade de se estimar o valor inicial do parâmetro de transporte a ser calibrado, de modo que o mesmo esteja dentro de uma faixa aceitável (Gelhar *et al.*, 1985). Mesmo com a ressalva de que para a calibração com o MIGC não seja necessário o conhecimento do seu valor real. Esta é uma das vantagens do Método Iterativo do Gradiente Hidráulico (Tavares, 2010), que também foi observada para o MIGC.

O sucesso do processo de calibração com o MIGC foi aferido através dos parâmetros de minimização da média do ângulo entre os gradientes de



concentração observado e calculado ( $\sum\theta/N$ ) e o erro médio quadrático computado entre as concentrações observadas e calculadas (RMSEC).

Foram desenvolvidas cinco modelagens, duas situações hipotéticas e três baseadas em uma situação real referente ao aquífero na região da cidade do Crato, situada no sul do Ceará.

O uso do Método Iterativo do Gradiente de Concentração para a calibração da dispersividade longitudinal de contaminantes em meio poroso mostrou-se eficiente e com boa convergência durante o processo e apresentando resultados satisfatórios seja para exemplos mais simples até o caso real relativamente mais complexo.

A análise das duas medidas para aferir os resultados, média dos ângulos e a raiz do erro médio quadrático das concentrações, demonstra que, para os exemplos hipotéticos e para o caso real, o processo de calibração com o MIGC se mostrou bastante satisfatório.

Ressalta-se o uso de poucos pontos de observação em relação às áreas trabalhadas nos exemplos e no caso real, o que permite deduzir que o MIGC se mostra como uma valiosa ferramenta para calibração de parâmetros de transporte em aquíferos quando há escassez de resultados amostrados.

Outra pesquisa que se mostra de grande relevância para a validação do método seria a verificação da aplicabilidade do MIGC em uma área com uma maior densidade e melhor distribuição espacial dos pontos com dados de contaminação conhecidos para que se possa determinar a dispersividade longitudinal em campo e compará-la com os dados da calibração.

A análise do MIGC permite destacar que o método também possui uma das principais vantagens destacadas por Tavares (2010) para o Método Iterativo do Gradiente Hidráulico. O uso da matriz de concentrações observadas, geradas através da simulação do transporte de soluto para a fixação dos valores aferidos em campo, garante uma maior confiabilidade em termos hidrogeológicos do que o uso de interpolações que requerem manipulações para o desenvolvimento do processo de calibração.

Os produtos decorrentes da calibração com o MIGC, com destaque aos mapas potenciométricos com valores da dispersividade, podem ser utilizados como importantes ferramentas de análise para a predição de impactos em aquíferos subterrâneos associados à expansão da pluma de contaminação. Os mapas

gerados com manchas de diferentes valores da dispersividade longitudinal indicam diferentes níveis de susceptibilidade à contaminação da água subterrânea, o que pode ser utilizado na tomada de decisões referentes ao controle do uso e ocupação do solo.

As modelagens feitas a partir do caso real podem ser utilizadas para determinar pontos estratégicos de proteção na região do aquífero situado no município do Crato e devem servir de base para a elaboração de políticas de monitoramento e proteção do manancial.

Sugere-se também o estudo para o uso do MIGC na calibração do parâmetro de transporte de solutos em aquíferos com múltiplas camadas e em regime transiente de modo a ampliar a aplicabilidade do MIGC para situações reais diversas.

Ao longo do desenvolvimento dos casos estudados ficou demonstrada a importância da dispersividade longitudinal como parâmetro de transporte de solutos em meio poroso. Daí merece destaque uma outra vantagem da aplicação do MIGC, que é a estimativa da dispersividade longitudinal sem a necessidade do uso de métodos empíricos de aplicabilidade restrita a situações espaciais e temporais específicas.

## 6. REFERÊNCIAS

- BEAR, J. **Dynamics of fluids in porous media**. New York: American Elsevier, 1972. 764 p.
- BLACK, D. C.; WALLBRINK, P. J.; JORDAN, P. W. **Towards best practice implementation and application of models for analysis of water resources management scenarios**. Environmental Modelling & Software. Vol 52, pp 136-148, 2014.
- CABRAL, N. M. T.; RIGHETTO, A. M.; QUEIROZ, M. A. **Comportamento do nitrato em poços do aquífero Dunas/Barreiras nas explorações Dunas e Planalto, Natal, RN, Brasil**. Rev. Eng. Sanit. Ambient. Vol. 14.n3. pp: 299-306. 2009.
- CABRAL, J. P. **Movimento das Águas Subterrâneas**. In: FEITOSA, F.A.C.; MANOEL FILHO, J. (Coord.) Hidrogeologia: Conceitos e Aplicações. Fortaleza: CPRM, LABHID-UFPE. Capítulo 3. 1997.
- CAMPOS, J. N. B. **Lições em modelos e simulação hidrológica**. ASTEF/EXPRESSÃO GRÁFICA. Fortaleza, Brasil. 2009.
- CARVALHO, D. A.; OLIVEIRA, R. M.; SILVA, C. R. S.; MARTINHON, P. T.; SILVA, S. A. **Análise de BTEX em água: comparação entre duas colunas cromatográficas**. Ambiente & Água - An Interdisciplinary Journal of Applied Science, 2014.
- CHAVES, M. S.; LIMA, M. G. S.; ARAÚJO, G. M.; AMORIM, S. M.; GOMES, L. A. **Estudo da qualidade da água de mananciais subterrâneos utilizados como fonte de abastecimento do município de Crato – Ceará**. 22º Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental. Joinville - Santa Catarina, 2003.
- CHIANG, W. H.; KINZELBACH, W. **Processing Modflow (PM): Pre and post processors for the simulation of flow and contaminant transport in groundwater system with MODFLOW, MODPATH and MT3D**. Washington: Distributed by Scientific Software Group, 1991.
- CHIANG W. H.; KINZELBACH, W.; RAUSCH, R. **Aquifer Simulation Model for Windows - Groundwater flow and transport modeling, an integrated program**. Gebrüder Borntraeger, Berlin Stuttgart, 1998.
- CHIANG, W. H. **Processing Modflow PRO. A Simulation System for Modeling Groundwater Flow and Transport Processes**. Irvine. California. USA. 2006.
- CHOW, V.T., MAIDMENT, D.R., MAYS, L.W. **Applied Hidrology**. Mc-Graw-Hill, New York, UK 572p. 1988.
- COGERH. **Plano de Monitoramento e Gestão dos Aquíferos da Bacia do Araripe, Estado do Ceará. Relatório Final**. COMPANHIA DE GESTÃO DE GESTÃO DOS RECURSOS HÍDRICOS, 2009.
- COGERH. **Modelagem Matemática Hidrogeológica do Aquífero Médio e do Aquífero Mauriti da Região do Cariri, no Estado do Ceará. Relatório Final**. COMPANHIA DE GESTÃO DE GESTÃO DOS RECURSOS HÍDRICOS, 2011.

- CPRM. **Programa de Recenseamento de Fontes de Abastecimento por Água Subterrânea no Estado do Ceará – Diagnóstico do Município do Crato.** Serviço Geológico do Brasil, 1998.
- DELGADO, J. M. P. Q. **Longitudinal and Transverse Dispersion in Porous Media.** Institution of Chemical Engineers. Porto, Portugal, 2007.
- FEITOSA, F. A.C.; MANOEL FILHO, J.; FEITOSA, E. C.; DEMETRIO, J. G. **Hidrogeologia: Conceitos e Aplicações** - 3ª Edição Revisada e Ampliada - Rio de Janeiro: CPRM: LABHID. 812p. 2008.
- FERNÍCOLA, N. G. G.; AZEVEDO, F. A. **Metemoglobinemia e nitrato nas águas.** Rev. Saúde Pública. V. 15. pp: 242-248, 1981.
- FETTER, C. W. **Applied Hydrogeology.** 4th ed.p.cm.Pretice-Hall Inc. New Jersey. 2001.
- FEWTRELL, L. **Drinking-water nitrate, methemoglobinemia, and global burner of disease: a discussion.** Environmental Health Perspectives. Vol. 112. Num. 14. 2004.
- FOSTER, S. S. D. **Fundamental concepts in aquifer vulnerability, pollution risk and protection strategy.** In: Vulnerability of Soil and Groundwater to Pollutants, 38.,1987, Noordwijk. Proceedings and Information of the International Conference held in the Netherlands. Noordwijk: TNO Committee on Hydrological Research. p.69-86, 1987.
- FRAGOSO Jr, C. R.; MARQUES, D. da M.; FERREIRA, T. F. **Modelagem ecológica em ecossistemas aquáticos** – São Paulo: Oficina de Textos, 2009.
- FREEZE, R. A., E CHERRY, J. A. **Groundwater,** Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. Jersey. 1979.
- FRIND, E. O. **Simulation of ground water contamination in three dimensions.** Pp. 749-763 in Proceedings of Solving Ground Water Problems with Models. National Water Well Association, Denver, Colorado. 1987.
- FUNCEME. **Zoneamento geoambiental do estado do Ceará: parte II mesorregião do sul cearense.** Fundação Cearense de Meteorologia e Recursos Hídricos. Fortaleza, 2006.
- GELHAR, L. W., MONTGLOU A., WELTY C., REHFELDT K. R. **A Review of Field Scale Physical Solute Transport Processes in Saturated and Insaturated Porous Media, Final Proj. Report, EPRI EA-4190.** Eletric Power Research Institute. Palo Alto, CA, 1985.
- GESSNER, M. O.; HINKELMANN, R.; NÜTZMANN, G.; JEKEL, M.; SINGE, G.; LEWANDOWSKI, J.; NEHLS, T.; BARJENBRUCH, M. **Urban water interfaces.** Journal of Hydrology. 514. 226–232. 2014.
- GOLDER/PIVOT. **Implantação do Sistema de Monitoramento/Gestão de uma Área Piloto do Aquífero Missão Velha na Bacia Sedimentar do Cariri, no Estado do Ceará.** Relatório Final do Projeto, v. 8. 2005.
- GUO, X; ZHANG, C.-M.. **Hydraulic gradient comparison method to estimate aquifer hydraulic parameters under steady-state conditions.** Ground Water. v. 38, n. 6, p. 815-826, 2000.

HILL, M. C.; TIEDEMAN, C. R. **Effective groundwater model calibration: with analysis of data, sensitivities, predictions, and uncertainty.** John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2007.

IBGE. **Censo demográfico de 2010. Dados referentes ao município do Crato.** INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA, 2010.

IPECE. **Perfil Básico Municipal do Crato.** INSTITUTO DE PESQUISA E ESTRATÉGIA ECONÔMICA DO CEARÁ, 2013.

KONIKOW, L. F.; MERCER, J. W. **Groundwater flow and transport modeling.** Journal of Hydrology, 100. 379 – 409. 1988.

KÖPPEN, W.; GEIGER, R. **Klimate der Erde.** Gotha: Verlag Justus Perthes. 1928.

KOVARIK, K. **Numerical models in groundwater pollution.** Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2000.

LAVOIE, R.; LEBEL, A.; JOERIN, F.; RODRIGUEZ, M. J. **Integration of groundwater information into decision making for regional planning: A portrait for North America.** Journal of Environmental Management. Volume 114, pp 496-504, 2013.

LERNER, D. N. **Urban groundwater pollution.** A.A. Balkeema Publishers, The Netherlands, pp. 1–299. 2004.

LOPES, D. F. **Transporte de contaminantes em meios porosos: aplicação da técnica da transformada integral.** Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Pará, Belém, 2005.

MAIDMENT, D. R. **Handbook of Hydrology.** Vol.1. McGraw-Hill. New York. USA. 1993.

MCDONALD M. G.; HARBAUGH A. W. **MODFLOW: A modular three-dimensional finite difference ground-water flow model.** U. S. Geological Survey, 1988.

MENESCAL, G. C. **Modelagem numérico-analítica da Contaminação de aquíferos utilizando o método de colocação RBF livre de malha.** Tese de Doutorado. Universidade Federal do Ceará, Fortaleza. 2008.

MEHTA, L. **Water and Human Development.** World Development Vol. 59, pp-59-69. 2014.

MICHIGAN DEPARTMENT OF ENVIRONMENTAL QUALITY (MDEQ). **Groundwater Modeling: Remediation and Redevelopment Division Resource Materials.** Lansing, 2014.

MURTY, V. V. N., and SCOTT, V. H., 1977. **Determination of Transport Model Parameters in Groundwater Aquifers.** Water Resour. Res, 13, 941.

NEWELL, C. J.; MCLEOD, R. K.; GONZALEZ, J. R. **Bioscreen User's Manual. National Attenuation Decision Support System.** Version 1.3, National Risk Management Research Laboratory, EPA/600/R-96/087, August. 1996.

NIU, B.; LOÀICIGA, H. A.; WANG, Z.; ZHAN, F. B.; HONG, S. **Twenty years of global groundwater research: A Science Citation Index Expanded-based bibliometric survey (1993–2012).** Journal of Hydrology 519. 966–975, 2014.

- PEREIRA, R. F. **Calibração do coeficiente de decaimento do cloro ( $k_w$ ) em redes de abastecimento de água utilizando o método iterativo do gradiente hidráulico alternativo (MIGHA)**. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Ceará. UFC. 2009.
- RIBEIRO, M. L.; BONGANHA, C. A.; GUIGUER Jr., N.; PEREIRA, S. Y.; OLIVEIRA, L. C. **Conceitos e Fundamentos da Modelagem Matemática para Gerenciamento de Recursos Hídricos Subterrâneos**. Revista Analytica, N<sup>o</sup>. 30 – Agosto/Setembro, 2007.
- RIBEIRO, W. C. Org. **Governança da água no Brasil: uma visão interdisciplinar** – São Paulo: Annablume; FAPESP; CNPq, 2009.
- RUBIN, H.; YANIV, S.; SPILLER, M.; KÖNGETER, J. **Parameters that control the cleanup of fractured permeable aquifers**. Journal of Contaminant Hydrology. V. 96, p. 128 – 149, 2008.
- SAMPAIO, A. M. D.; SOUSA, C. V.; PEDROZA, M. M. **Avaliação da qualidade físico-química das águas dos rios Batateiras e Granjeiro, na região do Cariri, município do Crato/Ce**. VI Simpósio Ítalo Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental. Vitória – ES, 2002.
- SCHNEIDER, A. C. **Estudo em tempo real da migração de etanol na zona vadosa em experimento de campo** [dissertação] / Ana Cláudia Schneider; orientador, Henry Xavier Corseuil – Universidade Federal de Santa Catarina – Florianópolis, SC, 2012.
- SCHUSTER, H. M. D.; ARAÚJO, H. D. B. **Uma formulação alternativa do método iterativo de gradiente hidráulico no procedimento de calibração dos parâmetros hidrodinâmicos do sistema aquífero**. Revista Brasileira de Recursos Hídricos, v. 9, n. 2, p. 31-37, 2004.
- SHARMA, S. K.; SOBTI, R. C. **Nitrate removal from ground water: a review**. E-J. Chem. 9 (4), 2012.
- SOUZA, C. D. de. **Simulação Computacional do Fluxo Hídrico Subterrâneo na Região do Cariri e Calibração Utilizando Gradiente das Cargas Hidráulicas**. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Ceará, Fortaleza. 2007.
- SINGH, A. **Groundwater resources management through the applications of simulation modeling: A review**, Sci Total Environ (2014).
- SUN, N.-Z. **Mathematical Modeling of Groundwater Pollution**. Springer-Verlag, New York, NY, 1996.
- SUN, N.-Z. **Inverse problem in groundwater modeling**. Norwell, Massachusetts: Kluwer Acad, 1999.
- TAVARES, P. R. L.; CASTRO, M. A. H.; COSTA, C. T. F.; SILVEIRA, J. G. P.; ALMEIDA JÚNIOR, F. J. B. **Mapeamento da vulnerabilidade à contaminação das águas subterrâneas localizadas na Bacia Sedimentar do Araripe, Estado do Ceará, Brasil**. R. Esc. Minas, Ouro Preto, 62(2): 227-236, abr. jun. 2009.
- TAVARES, P. R. L. **Modelagem computacional e calibração da Condutividade hidráulica horizontal em aquífero da Bacia sedimentar do Araripe utilizando o Método Iterativo do Gradiente Hidráulico**. Tese de Doutorado. Universidade Federal do Ceará, Fortaleza. 2010.

TODD, D. K. **Groundwater Hydrology**. New York: John Wiley. 1980.

TUNDISI, J. G. **Água no século XXI: enfrentando a escassez** - São Paulo: 2ª Ed. RIMA, 2005.

WARD, M. H.; DEKOK, T. M.; LEVALLOIS, P.; BRENDER, J.; GULLIS, G.; NOLAN, B. T.; VANDERSLICE, J. **Workgroup report: Drinking-water Nitrate and Health – Recent Findings and Research Needs**. Environmental Health Perspectives. Volume 113. Number 11. 2005.

WICK, K.; HEUMESSER, C.; SCHMID, E. **Groundwater nitrate contamination: Factors and indicators**. Journal of Environmental Management. 111. pp: 178 -186, 2012.

ZHENG, C.; P. P. WANG. **MT3DMS: A modular 3-D multispecies model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems**. Documentation and user's guide. Contract Report SERDP-99-1. Vicksburg, Mississippi: Army Engineer Research and Development Center, 1999.

ZHENG, C.; HILL, M. C.; CAO, G.; MA, R. **MT3DMS: Model use, calibration, and validation**. American Society of Agricultural and Biological Engineers. Vol. 55(4): 1549-1559, 2012.