

POR

Leslie M. Finger¹ e Nelson Luna-Caicedo²

RESUMO -- O movimento da água subterrânea é descrito pela equação linearizada de Boussinesq. Um algoritmo numérico baseado na decomposição espacial através dos polígonos de Thiessen é usado para resolver a equação em termos de coeficientes de influência de pulsos unitários de bombeamento. O problema inverso é formulado como um problema de otimização no qual limites superiores e inferiores de transmissividades e porosidades efetivas são adicionados para garantir plausibilidade hidrológica. O algoritmo tira vantagem do princípio da superposição e somente usa os coeficientes de influência calculados ao final do primeiro intervalo de tempo de duração unitária.

INTRODUÇÃO

A escassez de recursos e o alto grau de contaminação das águas superficiais faz com que o mundo moderno se volte progressivamente para a utilização das reservas de água subterrânea. Modos matemáticos para a simulação do fluxo subterrâneo têm grande aplicação em nossos dias e os métodos de resolução estão sendo aprimorados, conhecem-se diversas técnicas cuja aplicabilidade varia com as condições do problema em questão, disponibilidade e capacidade computacional. Os métodos analíticos são de simples e rápida aplicação, porém contêm grandes simplificações do sistema real. As equações diferenciais representativas do comportamento físico dificilmente têm soluções analíticas na prática, para resolvê-las recorre-se a métodos numéricos os quais discretizam o sistema no tempo e no espaço. A quantidade de informações disponíveis determinam o tamanho da malha. Para que não se tenha um grande número de células pequenas onde não existam dados disponíveis são introduzidas células poligonais baseadas nos polígonos de Thiessen. TYSON e WEBER (1964), BOONSTRA e RIDDER (1983) utilizaram esta decomposição para o cálculo de alturas piezométricas em aquíferos finitos, heterogêneos e isotrópicos.

Na simulação do comportamento de aquíferos depara-se com a dificuldade de obtenção dos parâmetros hidrogeológicos, transmissividade e porosidade, principalmente pelo alto custo envolvido nos testes de bombeamento empregados na determinação a campo. Além disto, os testes são locais e nem sempre refletem a realidade em escala regional. Atualmente, existem técnicas numéricas que possibilitam a identificação dos parâmetros, baseando-se em dados oriundos da observação do comportamento do aquífero no passado.

¹Aluna do Curso de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos.

²Professor do Instituto de Pesquisas Hidráulicas
Cx. Postal 530 - 90.049 - P. Alegre - RS.

O processo de identificação ou calibração dos parâmetros é de nominado de problema inverso. NEUMAN (1973) divide o problema inverso, segundo os métodos utilizados na determinação dos parâmetros, em 2 grupos: Diretos e Indiretos. Os primeiros determinam os parâmetros em cada célula a partir da equação diferencial do fluxo subterrâneo e das alturas piezométricas em cada ponto. Os trabalhos de KLEINECKE (1971), NAVARRO (1977), SMITH e PIPER (1978), BACHMAT e DAX (1979), entre outros, são exemplos de métodos diretos. Os métodos indiretos partem de valores iniciais das alturas piezométricas em cada célula e, através de um processo de otimização, determinam o valor ótimo para os parâmetros desconhecidos, segundo critérios rígidos de controle do processo de ajuste, procurando garantir plausibilidade hidrológica aos mesmos. Como exemplo de aplicação do método citam-se os trabalhos de LOVEL et al (1972), CHANG e YEH (1976), LUNA-CAICEDO (1983), entre outros.

Objetivo

O objetivo principal deste trabalho é desenvolver e implementar um modelo matemático que utilizando coeficientes de influência e dados hidrológicos observados identifique as características físicas de aquíferos regionais.

Espera-se que o modelo minimize tempo e recursos econômicos alocados para a realização de trabalhos similares.

DESCRIÇÃO DO MODELO

O modelo tem por objetivo a identificação dos parâmetros hidrogeológicos, transmissividade e porosidade efetiva, em aquíferos heterogêneos, isotrópicos, com fluxo vertical desprezível.

O aquífero é dividido em células poligonais (polígonos de Thiesen). O ponto central de cada polígono é denominado nó e a ele é associada uma porosidade efetiva representativa da área. Nos limites entre células é associada uma transmissividade intermediária, obtida pela média harmônica entre aquelas assimiladas para cada nó. O comportamento do aquífero é simulado pela equação de balanço de volumes em cada polígono.

A natureza linear da equação que governa o fluxo permite a utilização do princípio da superposição, isto é, o efeito total (em termos de níveis d'água) em um determinado ponto do sistema é igual à soma geométrica dos efeitos individuais produzidos pelos estímulos distintos em um intervalo de tempo.

O acoplamento dos efeitos é feito através de Coeficientes de Influência (Kernels). Os Coeficientes de Influência nada mais são senão respostas (em termos de níveis d'água) a excitações particulares de natureza pulsante.

A técnica de Reinicialização (ILLANGASEKARE, 1980) é utilizada e os Coeficientes Discretos são calculados apenas no final do primeiro intervalo de tempo de duração unitária.

A Função Objetiva usada na busca da solução ótima para o problema inverso é estabelecida pela programação quadrática. São fixadas restrições relacionadas aos limites superiores e inferiores da transmissividade e porosidade efetiva para garantir realidade física.

Desenvolvimento das equações de fluxo

A formulação numérica do problema inverso inicia com a divisão do aquífero em células poligonais. Para cada célula do sistema é feito um balanço de volumes, assumindo-se que o fluxo existente dentro do polígono é o que ocorre através das fronteiras adjacentes. Qualquer propriedade do polígono é representada por um único valor assinalado no nó.

O balanço de volumes em um polígono (Figura 1), e considerando que o único estímulo externo ao sistema é o bombeamento Q_i , é:

$$\sum_m T_{m,i} \frac{W_{m,i}}{L_{m,i}} (s_i - s_m) = \frac{\phi_i A_i}{\Delta t} (s_i^t - s_i^{t+1}) + Q_i \quad (1)$$

onde $T_{m,i}$ é a transmissividade harmônica entre os polígonos i e m ($L^2 T^{-1}$); ϕ_i é a porosidade efetiva; $W_{m,i}$ é o comprimento da bissetriz perpendicular associado aos polígonos i e m (L); $L_{m,i}$ representa a distância entre os polígonos i e m (L); \sum é o somatório dos termos associados aos lados do polígono i ($L^2 T^{-1}$); A_i é a área do polígono i (L^2); s_i^t é o rebaixamento no nó i e no tempo t tomado em relação a um Plano Horizontal de Referência (L); Δt é o intervalo de tempo (T).

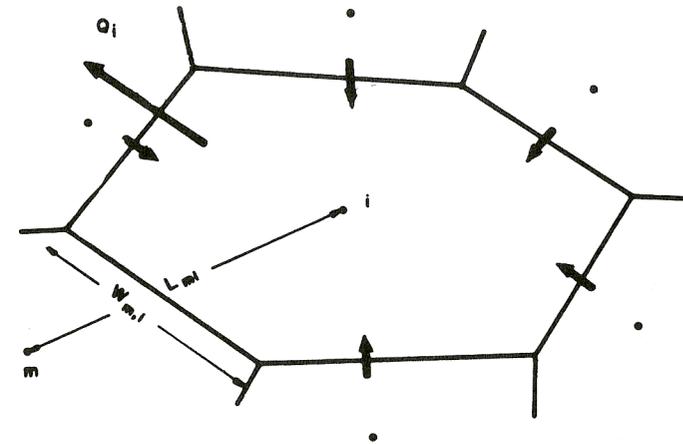


Figura 1 - Balanço de volumes no polígono i .

O lado esquerdo da equação representa o fluxo nas fronteiras do polígono i, através do lado de comprimento $W_{i,m}$. No lado direito, o primeiro termo representa o armazenamento dentro da área i e o segundo os estímulos externos.

Os rebaixamentos em cada nó variam no tempo devido às modificações na recarga e/ou escala de bombeamento, por consequência a equação (1) deve ser resolvida para sucessivos intervalos de tempo. Utilizando um esquema numérico implícito, onde Δt não depende de critérios de estabilidade e considerando que $T_{m,i}$ e Q_i são expressos na unidade de Δt , pode-se reescrever a equação 1:

$$s_i^{t+1} T_{i,i} - \sum_m s_m^{t+1} T_{i,m} + \phi_i^* s_i^{t+1} = s_i^t \phi_i^* + Q_i^{t+1/2} \quad (2)$$

onde $T_{m,i} = T_{m,i} \frac{W_{m,i}}{L_{m,i}}$ é a condutância entre os polígonos m e i; $\phi_i^* = \phi_i A_i, Q_i$ é a retirada média no intervalo t, t+1.

A equação 2, ao ser escrita para cada polígono, dá origem a um sistema linear de equações cuja variável desconhecida é o rebaixamento s_i^{t+1} . Na forma matricial

$$|T| \{s_i^{t+1}\} + |\phi^*| \{s_i^{t+1}\} = |\phi^*| \{s_i^t\} + \{Q_i^{t+1/2}\} \quad (3)$$

onde |T| é uma matriz simétrica que contém as condutâncias entre polígonos adjacentes;

$$T_{i,m} > 0, \text{ para } i = m;$$

$$T_{i,m} < 0, \text{ para } i \neq m;$$

$$T_{i,i} = \sum_m T_{i,m};$$

|\phi^*| é uma matriz diagonal;

$$\phi_{i,m}^* = 0, \text{ para } i \neq m;$$

$$\phi_{i,m}^* = \phi_i A_i, \text{ para } i = m;$$

\{s_i^{t+1}\} é o vetor que contém os rebaixamentos ao final do período;

\{s_i^t\} é o vetor que contém os rebaixamentos no início do período;

\{Q_i^{t+1/2}\} é o vetor que contém os estímulos médios externos ao sistema no intervalo de tempo (t, t+1);

$$q_i^{t+1/2} > 0, \text{ para retiradas no sistema;}$$

$$q_i^{t+1/2} < 0, \text{ para recargas no sistema.}$$

As equações originadas pelo balanço de volume nos polígonos de um sistema são semelhantes às obtidas pelo método numérico que aproxima a equação diferencial parcial do fluxo bi-dimensional a uma equação de diferenças finitas (LUNA-CAICEDO, 1983).

Para que a equação 3 produza a solução de um problema particular, as Condições Iniciais e as de Fronteira devem ser especificadas. As condições de Fronteira podem ser uma barreira impermeável, um potencial hidráulico conhecido e/ou qualquer fluxo que atravesse os limites físicos do sistema.

Coefficientes de influência

Existem 3 fatores básicos que influenciam o comportamento de aquíferos: os estímulos externos que provocam alterações no sistema, o efeito das fronteiras que o limitam e o posicionamento inicial dos níveis piezométricos. A seguir analisa-se a reação que cada um provoca dentro do sistema.

Estímulos externos -- considera-se que existe bombeamento no polígono i enquanto os demais são mantidos nas Condições Iniciais e de Fronteira.

Condições de fronteira -- para modelar o efeito das condições de fronteira considera-se o regime permanente e a não interferência de nenhum estímulo externo ao sistema.

Condições iniciais -- considera-se o estado não permanente com condições de fronteira homogêneas e não ocorrência de estímulos externos.

Os rebaixamentos no final de N intervalos de tempo de duração unitária são resultantes da superposição dos efeitos produzidos por cada um dos fatores que estimularam o sistema. Para efeitos práticos, os rebaixamentos do estado permanente são considerados incluídos nas Condições Iniciais.

$$s_i(n) = s_i(n-1) + \sum_m \delta_{im} (\bar{Q}_m(n) - \tilde{Q}_m(n)) \quad (4)$$

onde: δ_{im} é o coeficiente de influência entre os polígonos i e m;

$\bar{Q}_m(n)$ é o bombeamento médio no período;

$\tilde{Q}_m(n) = \sum_p T_{mp} s_p(n-1)$ é a descarga artificial associada aos rebaixamentos calculados no início do enésimo período.

Conhecidas as condições iniciais e armazenadas os Coeficientes de Influência em todos os pontos do aquífero, os rebaixamentos podem ser simulados para qualquer tempo utilizando a reinicialização sequencial (ILLANGASEKARE, 1980).

Identificação dos parâmetros

Para a resolução do problema de identificação os elementos da matriz $|\Delta|$ para todos os poços de observação (nós) devem ser identificados, e os rebaixamentos em cada nó e para todos os intervalos de tempo do período de calibração determinados (equação 4).

Assume-se conhecidos os rebaixamentos e as descargas e/ou recargas em todos os nós e ao longo do período de duração do processo.

O problema de identificação resulta em um problema de otimização que se fundamenta na determinação dos Coeficientes de Influência que minimizam a Função Objetiva ($J(\Delta)$), mantendo os parâmetros Transmissividade (T) e Porosidade Efetiva (ϕ) dentro das restrições impostas pelo modelo físico.

A fim de que sejam reduzidos gastos de memória de computador, diminui-se o número de equações a serem resolvidas utilizando-se o conceito de subsistemas. Um subsistema, pode ser definido pelos elementos que participam diretamente do balanço de volume no polígono i . A equação do fluxo é resolvida somente para os Coeficientes de Influência internos ao subsistema, estimulando seu polígono central enquanto mantém os demais nas condições de fronteira estabelecidas inicialmente. Cada subsistema é avaliado individualmente, estabelecendo-se uma Função Objetiva para o polígono central i , e o problema de otimização no mesmo é:

$$M_{in} \{J(\Delta) = \sum_n (s_i(n) - \hat{s}_i(n))^2\} \quad (5)$$

sujeito a:

$$|T_{inf}| \leq |T_i| \leq |T_{isup}|$$

$$|\phi_{inf}| \leq |\phi_i| \leq |\phi_{isup}|$$

onde $s_i(n)$ e $\hat{s}_i(n)$ são os rebaixamentos observados e calculados respectivamente no nó i .

Os índices inf e sup referem-se aos limites inferiores e superiores para os parâmetros. Estes limites são adicionados para garantir o significado físico das Transmissividades e Porosidades Efetivas calculadas.

A otimização do sistema é colocado da seguinte forma:

$$M_{in} \{J(\Delta) = \sum_i J(\Delta_i)\} \quad (6)$$

para $i = 1, 2, \dots, I$, onde I é o número total de subsistemas, sujeito a:

$$|T_{inf}| \leq |T| \leq |T_{sup}| \quad (7)$$

$$|\phi_{inf}| \leq |\phi| \leq |\phi_{sup}|$$

Se a Função Objetiva total (equação 6) for menor ou igual ao erro máximo tolerável ou não se verificar mudanças significativas entre 2 iterações consecutivas o processo é encerrado. Do contrário o sistema move-se para o primeiro subsistema e se inicia uma nova iteração.

ALGORÍTMO DE CÁLCULO

O problema inverso fundamenta-se na busca dos Coeficientes de Influência, e conseqüentemente das Transmissividades e Porosidades Efetivas associadas com cada polígono do sistema. Para isto usa-se o algoritmo de otimização de Rosenbrock para uma função de várias variáveis e com restrição.

Os valores ótimos dos parâmetros são encontrados iterativamente a partir da otimização de cada subsistema tomado individualmente. O ajuste dos coeficientes é analisado pelos rebaixamentos calculados ao longo do período de calibração no polígono central i .

Embora cause aumento no número de incógnitas, são otimizadas as transmissividades intermediárias ao invés das assinaladas em cada nó, pelas seguintes razões: o modelo matemático utiliza diretamente os valores intermediários e somente indiretamente os pontuais cuja identificação não é necessária ao funcionamento do algoritmo; a identificação dos valores das transmissividades no nó introduz um maior grau de indeterminação na solução do problema visto que cada transmissividade intermediária é determinada por infinitos pares de transmissividades pontuais; a utilização das transmissividades no nó não é capaz de reproduzir a mesma solução para diferentes conjuntos de parâmetros iniciais, mesmo em uma grande número de iterações.

Procedimentos de cálculo

Inicialmente, o aquífero a ser simulado é definido pelas coordenadas geométricas dos nós, condições iniciais e de fronteira, taxas de bombeamento e rebaixamentos observados em todos os nós e ao longo do período de calibração. A numeração dos nós é feita primeiramente nos polígonos interiores ao sistema, seguidos dos limites de carga constante e, finalizando com os nós situados nos limites impermeáveis.

O próximo passo é aplicar sequencialmente o método desenvolvido a cada um dos subsistemas definidos para o aquífero, minimizando em cada passo o valor da função objetiva individual.

Os procedimentos computacionais necessários à resolução do problema inverso no subsistema i são colocados a seguir.

- 1 - Determinar as matrizes $|T_i|$, $|\phi_i|$ e $|A_i|$

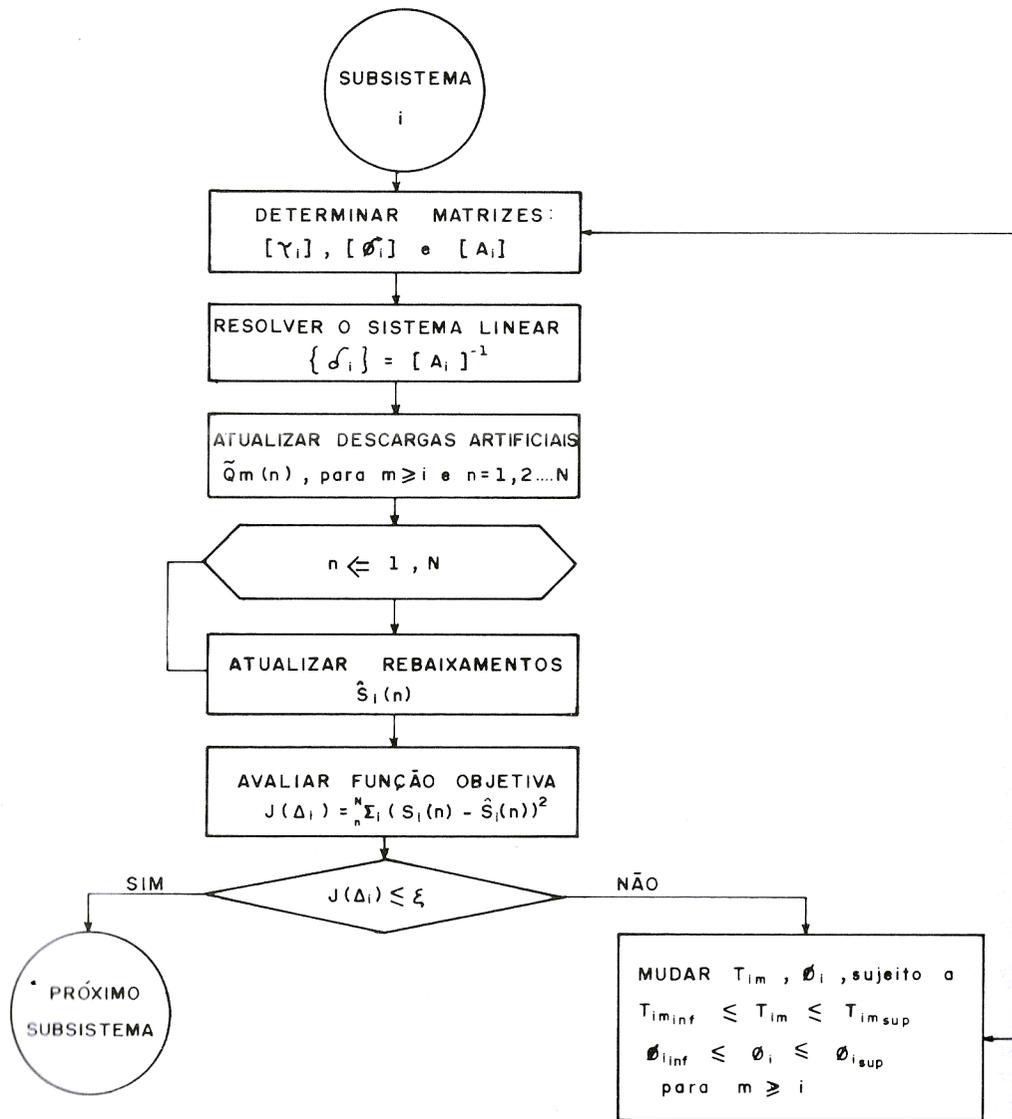


Figura 2. Fluxograma para resolução do problema inverso em um subsistema.

2 - Resolver o sistema linear $\{\delta_i\} = [A_i]^{-1}$

3 - Atualizar as descargas artificiais $\tilde{Q}_m(n)$, para $m \geq i$ e $n = 1, 2, \dots, N$, mantendo constantes as transmissividades intermediárias.

4 - Atualizar os rebaixamentos no polígono central i para todos os intervalos de tempo, utilizando a média aritmética entre os rebaixamentos observados e previstos no início dos períodos, os coeficientes discretos calculados em (2) e as descargas artificiais de (3).

5 - Avaliar a função objetiva, se o valor não satisfizer a precisão estabelecida, determinar um novo conjunto de transmissividades T_{im} , para $m \geq i$ e uma nova porosidade para i , utilizando o método de otimização de Rosenbrock.

6 - Repetir 1 a 5 até que o valor da função objetiva seja aceitável ou não houver alteração entre 2 valores consecutivos.

Os valores dos coeficientes de influência obtidos em cada subsistema são mantidos constantes até que o sistema tenha sido totalmente percorrido.

O fluxograma do processo é apresentado na Figura 2.

RESULTADOS NUMÉRICOS

Para testar a performance do algoritmo, o sistema mostrado na Figura 3 foi calibrado durante um período que compreende 12 intervalos de tempo de duração igual a 1 mês cada um.

Um sistema similar foi modelado por BOONSTRA e RIDDER(1981) para a resolução do problema direto.

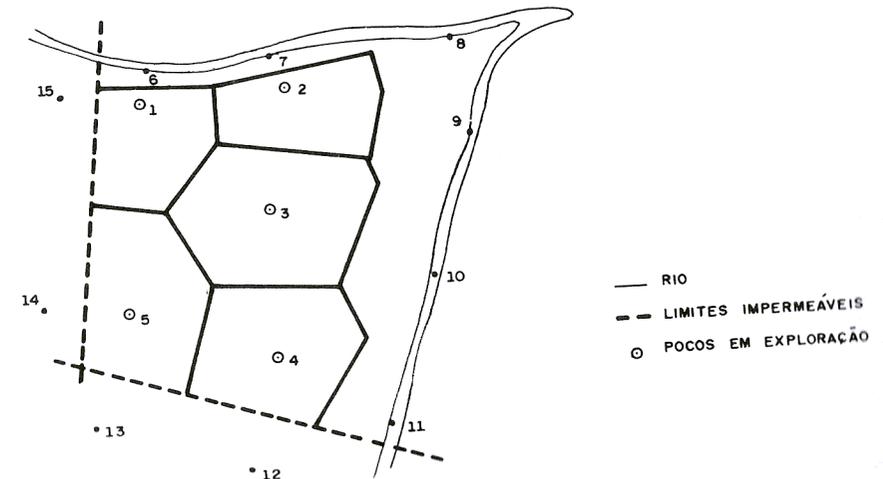


Figura 3. Aquífero hipotético

O algoritmo proposto usou apenas 1 iteração para encontrar a função objetiva no sistema (3.93 E - 3 m²) que atende à precisão desejada (1 E-2). O máximo erro individual ocorreu no polígono 5 e seu valor foi 1.84 E-3.

O tempo de execução gasto pelo computador B6700 foi de 24.25 s. Este tempo não inclui a compilação.

As transmissividades harmônicas intermediárias e as porosidades efetivas para os diferentes polígonos do aquífero são comparadas com os respectivos valores reais e os resultados mostrados nas Tabelas 1 e 2. O erro percentual de um parâmetro ou variável x é definido como $EP = \frac{\hat{x}-x}{x} \times 100$, onde \hat{x} é o valor calculado e x valor real.

O maior erro percentual nas transmissividades harmônicas (17.15%) ocorreu entre os polígonos 4 e 11 e nas porosidades efetivas (2.78%) no polígono 1.

Tabela 1. Transmissividades harmônicas calculadas.

ENTRE NÓS	REAL m ² /dia	CALCULADA m ² /dia	ERRO PERCENTUAL %
1 - 6	2400,0	2331,0	2,87
1 - 2	2307,7	2269,0	1,68
1 - 3	2000,0	1787,0	10,65
1 - 5	954,6	878,3	7,99
1 -15	0,0	0,0	0,00
2 - 7	3750,0	3760,0	0,27
2 - 8	3750,0	3134,0	16,43
2 - 9	3750,0	4109,0	9,55
2 - 3	3750,0	3514,0	6,29
3 - 9	3000,0	2672,0	10,93
3 -10	3750,0	4065,0	8,40
3 - 4	3428,6	3114,0	9,18
3 - 5	1135,1	1263,0	11,27
4 -10	4444,4	3682,0	17,15
4 -11	4800,0	4322,0	9,96
4 -12	0,0	0,0	0,00
4 - 5	1191,5	1142,0	4,15
5 -13	0,0	0,0	0,00
5 -14	0,0	0,0	0,00

Tabela 2. Porosidades efetivas calibradas.

Nº	REAL	CALCULADA	ERRO PERCENTUAL
1	0,180	0,185	2,78
2	0,200	0,198	1,00
3	0,180	0,179	0,56
4	0,140	0,140	0,00
5	0,070	0,070	0,00

Os rebaixamentos computados durante a calibração pouco diferem dos observados, produzindo erros percentuais muito pequenos. Os rebaixamentos calculados e observados e o erro percentual no polígono 5 são mostrados na Tabela 3.

Tabela 3. Rebaixamentos calculados.

TEMPO (mês)	REAL m	CALCULADO m	ERRO PERCENTUAL %
1	227,03	227,03	0,00
2	227,61	227,61	0,00
3	228,02	228,03	4,40 E-3
4	228,07	228,08	4,40 E-3
5	227,73	227,73	0,00
6	227,51	227,52	4,40 E-3
7	227,10	227,10	0,00
8	226,64	226,65	4,40 E-3
9	225,81	225,83	8,90 E-3
10	225,26	225,28	8,90 E-3
11	225,59	225,61	8,90 E-3
12	226,16	226,18	8,80 E-3

CONCLUSÕES

Um modelo de calibração ou identificação das propriedades físicas de um aquífero com fluxo bi-dimensional foi apresentado. O algoritmo usa a rotina de Rosenbrock para minimizar as diferenças quadráticas entre rebaixamentos observados e calculados em todos os polígonos pertencentes ao domínio do aquífero e para todos os intervalos de tempo que compreende o período de calibração. A plausibilidade hidrológica dos parâmetros é garantida pelas restrições impostas ao problema de otimização.

O tempo de execução e o espaço de memória computacional exigidos por um determinado modelo cresce linearmente com o número de células a serem computadas. Por consequência, a grande vantagem do método apresentado é a decomposição física do sistema em pequeno número de células poligonais, nas quais existem dados disponíveis, diminuindo o número de equações a serem resolvidas a cada iteração.

TYSON, H.N. Jr. & WEBER, E.M., 1964. "Ground-Water Management for the Nation's Future Computer Simulation of Ground-Water Basins" Journal of the Hydraulics Division, v.90, n.HY4, July, pp.59-77.

ABSTRACT -- The groundwater movement is assumed to be described by the linearized Boussinesq equation. A numerical algorithm based on the spatial decomposition through Thiessen polygons is used to solve the governing equation in terms of influence coefficients of unit-pulse pumping excitations. The inverse problem is formulated as an optimization problem in which upper and lower bounds on the transmissivity and effective porosity are added to ensure hydrologic plausibility. The algorithm uses superposition principle and only employs influence coefficients evaluated at the end of the first time interval of unit duration.