

ANÁLISE MATEMÁTICA DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO DE TIPO 3 DO MODELO DE SIMULAÇÃO DO FLUXO DA ÁGUA SUBTERRÂNEA – MODFLOW

Stela Dalva Santos Cota¹ & Carlos Alberto de Carvalho Filho¹

Resumo – A escolha das condições de contorno mais adequadas para simular matematicamente sistemas hidrogeológicos é uma etapa essencial do processo de modelagem. Longe de ser uma tarefa trivial, ela depende do conhecimento pormenorizado do sistema a ser simulado e das especificidades matemáticas do modelo escolhido. O presente trabalho apresenta uma análise comparativa, do ponto de vista matemático, do funcionamento de quatro pacotes ou módulos do código de computador MODFLOW: Rio, Dreno, “General Head Boundary” (GHB) e Evapotranspiração (EVT). Todos representam condições de contorno do tipo 3, matematicamente funcionam de forma muito similar, e têm por finalidade simular os efeitos do fluxo entre a condição de contorno e o sistema aquífero. A análise desenvolvida vem contribuir para uma maior compreensão do funcionamento das rotinas matemáticas que descrevem as condições de contorno de tipo 3, auxiliando, portanto, os hidrogeólogos a desenvolver modelos que melhor representem a realidade.

Abstract – The choice of the more adequate boundary conditions to simulate mathematically hydrogeologic systems is an essential task of the modeling process. Far from being a trivial task, it depends on the detailed knowledge of the system being simulated and the mathematical characteristics of the chosen model. This work presents a comparative analysis, from a mathematical point of view, between four packages or modules of the ground water flow model, MODFLOW: River, Drain, “General Head Boundary” (GHB) and Evapotranspiration (EVT). All these modules implement type 3 boundary conditions and are very similar. Their objective is to simulate the interaction effects between the boundary conditions and the aquifer system. By improving the understanding of the type 3 boundary conditions of the MODFLOW code, the developed analysis may help the hydrogeologist to develop models that better represent the reality.

Palavras-chave – Aquífero, Modelagem matemática, MODFLOW

¹ Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear – CDTN/CNEN - Rua Prof. Mário Werneck, s/no., CP 941 30.161-970, Belo Horizonte, MG; Tel: (031) 3499-3418, Fax: (031) 3499-3390, E-mail: sdsc@cdtn.br

INTRODUÇÃO

Na análise de segurança de instalações nucleares são feitos estudos prospectivos do transporte de radionuclídeos no solo e nas águas subterrâneas. Essas avaliações são comumente realizadas através da utilização de modelos matemáticos que simulam os mecanismos de migração de contaminantes no aquífero.

Para se definir um modelo de transporte de radionuclídeos nas águas subterrâneas, assim como de qualquer contaminante, faz-se necessário caracterizar o comportamento do escoamento da água no sistema aquífero em estudo. Assim, a partir dos dados hidrogeológicos e hidrometeorológicos, pode-se estabelecer um modelo hidrogeológico conceitual para o aquífero, que servirá de base para a elaboração do modelo matemático de simulação do fluxo da água.

Em termos gerais, modelos matemáticos de simulação do fluxo da água subterrânea consistem de uma equação governante, condições de contorno e condições iniciais [ANDERSON e WOESSNER, 1992; FREEZE e CHERRY, 1979; DOMENICO e SCHWARTZ, 1997]. A equação principal representa o processo físico que ocorre no sistema. As condições iniciais representam a distribuição de carga no início da simulação. As condições de contorno são enunciados matemáticos que especificam a variável dependente (carga) ou a derivada da variável dependente (fluxo) nos limites ou fronteiras do domínio do problema.

As condições de contorno do sistema físico (real), destacam-se como um dos aspectos que apresentam maiores dificuldades de ser simulados matematicamente. A determinação dos parâmetros que controlam a dinâmica da comunicação hídrica entre estas condições de contorno e o aquífero, não é tarefa simples e muitas vezes só se chega a valores estimados. Entretanto, o conhecimento desta dinâmica, é um dos fatores que irão contribuir para aumentar a confiabilidade no modelo de simulação.

Em termos matemáticos, as condições de contorno hidrogeológicas são representadas por três tipos distintos (ANDERSON e WOESSNER, 1992): tipo 1 – contorno com carga especificada; tipo 2 – contorno com fluxo especificado; tipo 3 – contorno com fluxo dependente da carga; neste caso, o fluxo através do contorno é calculado a partir do valor da carga.

O presente trabalho tem por objetivo apresentar uma análise comparativa do funcionamento de quatro pacotes ou módulos do código de computador MODFLOW [ANDERSON e WOESSNER, 1992; DOMENICO e SCHWARTZ, 1997; ANDERSEN, 1993]: Rio, Dreno, “General Head Boundary” (GHB) e Evapotranspiração (EVT). Todos representam condições de contorno do tipo 3, matematicamente funcionam de forma muito similar, e têm por finalidade simular os efeitos do fluxo entre a condição de contorno e o sistema aquífero.

CONDIÇÕES DE CONTORNO DE TIPO 3

As condições de contorno do tipo 3 não visam somente simular o fluxo nos limites do domínio aquífero, mas também representar matematicamente fontes e sumidouros localizadas no interior do sistema. Descreve-se a seguir o funcionamento de cada um dos módulos de condições de contorno do tipo 3 do código MODFLOW. Os símbolos utilizados estão listados na Tabela 1.

Tabela 1 – Lista de símbolos referenciados no trabalho e suas definições

Símbolo	Definição
h	Carga hidráulica [L] do aquífero na célula onde foi aplicada a condição de contorno.
h_s	Elevação [L] do topo da célula onde foi aplicada a condição de contorno. Na condição de contorno EVT trata-se da “superfície de evapotranspiração”.
h_f	Elevação [L] do fundo (base) da célula onde foi aplicada a condição de contorno.
d	Elevação [L] da água nas condições de contorno GHB, Rio e Dreno. Na condição de contorno EVT, refere-se à elevação da superfície de extinção, ou seja, à elevação mínima para que a evapotranspiração esteja ativa.
$cond$	Condutância [L^2/T]. Reflete o grau de conectividade entre a condição de contorno (GHB, Rio e Dreno) e o aquífero, na célula onde na qual a condição de contorno foi atribuída.
QD	Descarga volumétrica [L^3/T] de água trocada entre a condição de contorno e o aquífero na célula onde a condição de contorno foi atribuída.
$RBOT$	Elevação [L] do fundo da camada que compõe o leito do rio na condição de contorno Rio.
Q_{max}	Descarga volumétrica máxima [L^3/T] de água trocada entre a condição de contorno EVT e o aquífero na célula onde esta condição de contorno foi atribuída.
p_{ext}	Profundidade [L] de extinção, abaixo da qual a evapotranspiração torna-se nula.

Módulo “General Head Boundary” (GHB)

Este módulo representa a forma mais geral dos quatro tipos de condição de contorno em análise. Pode-se dizer que os demais foram desenvolvidos a partir de modificações deste módulo, com a adição de características que permitem a simulação de fenômenos particulares.

Basicamente, a diferença dos outros pacotes com relação ao GHB dá-se através dos limites de validade da equação que calcula a descarga de água na condição de contorno. Enquanto a equação base para cálculo da descarga é válida para todos os valores de carga no pacote GHB, os demais pacotes se caracterizam por apresentarem limites para sua validade.

No modelo MODFLOW, a equação base para o cálculo da descarga de água (QD) entre as condições de contorno de tipo 3 e o aquífero é dada por (McDONALD e HARBAUGH, 1988):

$$QD = cond.(d - h) \quad (1)$$

onde h é a carga hidráulica na célula com atribuição de condição de contorno, d é uma elevação relativa à condição de contorno e $cond$ é um parâmetro de proporcionalidade.

Pode-se observar que a descarga de água trocada entre a célula com atribuição de condição de contorno e a própria condição de contorno é proporcional à diferença entre d e h . A constante de proporcionalidade da equação de descarga, denominada condutância ($cond$), descreve o grau de conectividade entre a condição de contorno GHB e a célula na qual a condição de contorno GHB foi atribuída. Por ser um termo matemático de proporcionalidade, a condutância é essencialmente um parâmetro de calibração da equação, mas, em alguns pacotes, é possível se estabelecer uma relação com parâmetros físicos, como será discutido oportunamente.

Neste ponto, deseja-se ressaltar a distinção entre a carga h e a elevação d , por ser comum a confusão do significado desses valores. A condição de contorno deve ser visualizada como uma fonte ou sumidouro de água, externa ao domínio, embora ligada a ele através das células nas quais se atribui uma condição de contorno. Nesta fonte ou sumidouro, o nível da água é mantido constante, sendo igual à elevação d . A carga h representa o valor da carga hidráulica do aquífero nas células com atribuição de condição de contorno, passando a ser influenciada pela condição de contorno. Portanto, a carga h é relativa ao aquífero, enquanto d é um parâmetro da condição de contorno.

A Fig. 1 traz uma representação da ligação entre a célula do domínio e a condição de contorno GHB. À esquerda da figura tem-se a representação da célula do domínio, com carga h , onde foi atribuída a condição de contorno GHB, representada à direita. Observa-se que a condição de contorno é mantida com carga constante d .

É intuitivo supor que quando a carga h na célula é maior do que d , a condição de contorno atua como um sumidouro de água. Por outro lado, quando a carga h cai abaixo da elevação d , a condição de contorno passa a atuar como fonte de água para o aquífero. A área cinza na Fig. 1 representa um elemento de resistência à passagem de água entre a condição de contorno e o aquífero, que é descrito matematicamente através do parâmetro condutância.

O pacote GHB simula a retirada ou fornecimento de água do aquífero nas células do domínio nas quais foi atribuída a condição de contorno GHB. A Fig. 2 mostra, de forma esquemática, o funcionamento deste pacote, para diferentes valores de carga, com a forma de cálculo da descarga QD entre a célula do domínio com atribuição de condição de contorno e a própria condição de contorno.

A Fig. 2 apresenta uma célula com atribuição de GHB, onde a representação da condição de contorno é mostrada na sua parte central. As linhas h_s e h_f indicam, respectivamente, o topo e o fundo da célula na qual foi atribuída a condição de contorno. O parâmetro d representa o valor do nível da água na condição de contorno GHB. A carga h do aquífero na célula é mostrada em cinza, variando de valores superiores a d (podendo, inclusive, ser superior a h_s) até valores inferiores a d (devendo ser superiores a h_f).

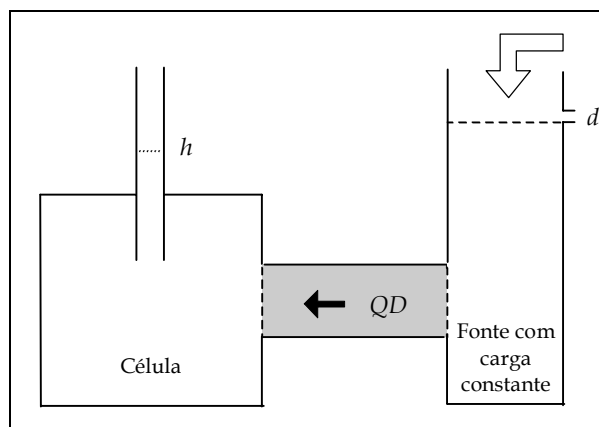


Figura 1 – Representação da ligação entre a célula do domínio e a condição de contorno
(Fonte: McDONALD e HARBAUGH, 1988)

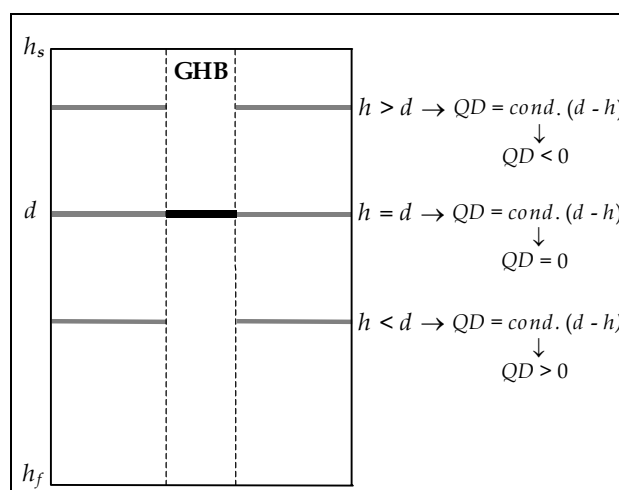


Figura 2 – Esquema de funcionamento do pacote GHB.

Pode-se observar na Fig. 2 que, quando a carga h for maior do que d , a descarga é negativa, indicando que a água está deixando o aquífero. Observe que, no pacote GHB, não há limite superior para a descarga QD . Este valor negativo de descarga é tanto maior (em módulo) quanto maior for a carga h , podendo ser, inclusive, superior ao topo h_s da célula.

À medida que a carga h cai, o valor de QD também cai (em módulo), atingindo o valor zero quando $h = d$. A partir deste ponto, a descarga torna-se positiva, indicando que a água está entrando no aquífero. Neste caso, quanto menor o valor de h , maior será o valor de QD , isto é, mais água fluirá da condição de contorno para o aquífero.

No entanto, há um limite inferior para h que é uma imposição do próprio modelo, não sendo inerente à condição de contorno. Quando h atinge o fundo da célula, esta torna-se inativa (célula seca). Assim, a partir da Eq. (2), que é uma modificação da Eq. (1) para h tendendo a h_f , pode-se

calcular, para uma determinada célula do domínio, a maior descarga de água possível que entra no aquífero proveniente da condição de contorno GHB.

$$QD_{\max} = \lim_{h \rightarrow h_f} QD(h) = \text{cond}(d - h_f) \quad (2)$$

Concluindo, a condição de contorno GHB se caracteriza pela inexistência de limites para a validade da Eq. (1), em termos de carga, que sejam inerentes à própria condição GHB, ao contrário das demais condições de contorno, abordadas neste trabalho, como será discutido a seguir.

Módulo Rio

O pacote Rio simula o fluxo de água entre a condição de contorno Rio e o aquífero nas células do domínio onde esta condição de contorno foi atribuída. A Fig. 3 mostra, de forma esquemática, o funcionamento deste pacote, para diferentes valores de carga, com a forma de cálculo da descarga QD entre a célula do domínio com atribuição de condição de contorno e a própria condição de contorno.

Analisando a Fig. 3, pode-se observar que, da mesma forma que ocorre na condição GHB, a descarga de água trocada entre a célula com atribuição de condição de contorno e a própria condição de contorno é proporcional à diferença entre d e h , sendo a Eq. (1) válida também para este pacote (McDONALD e HARBAUGH, 1988). A diferença, neste caso, é que há limites para sua validade, como será discutido a seguir.

Em comparação com a Fig. 2, a Fig. 3 apresenta uma diferença importante. Pode-se observar nesta figura que a condição de contorno Rio apresenta outro parâmetro em adição à elevação da água d . Matematicamente, este parâmetro, denominado $RBOT$, é o limite para mudança da validade da equação de cálculo de descarga na célula. No entanto, estabelecendo uma correlação com o fenômeno físico, é possível relacioná-lo com a cota do fundo do leito do rio.

Analisando a Fig. 3, pode-se verificar que, para valores de h superiores a $RBOT$, a relação entre a descarga QD e a carga h para o pacote Rio é exatamente igual à observada para o pacote GHB (Eq. (1)). Quando h torna-se igual a $RBOT$, o valor de QD atinge seu valor máximo, igual a:

$$QD = \text{cond}(d - RBOT) \quad (3)$$

Para valores de carga h inferiores a $RBOT$, a Eq. (1) não é mais válida. O valor da descarga passa a ser constante, igual ao seu valor máximo, dado pela Eq. (3), independentemente da carga h .

A constante de proporcionalidade da equação de descarga, aqui também denominada condutância (cond), descreve o grau de conectividade entre a condição de contorno Rio e a célula do domínio onde esta condição de contorno foi atribuída. Apesar de ser um termo matemático de proporcionalidade, é possível se estabelecer uma relação com parâmetros físicos de um rio, tais como a espessura e a condutividade hidráulica do leito do rio.

Assim, a condutância do pacote Rio pode ser estimada para determinada célula através da equação (McDONALD e HARBAUGH, 1988):

$$cond_{Rio} = \frac{K.L.W}{E} \quad (4)$$

onde K [L/T] é a condutividade hidráulica do material que compõe o leito do rio, L [L] é o comprimento do rio na célula para a qual a condutância está sendo calculada, W [L] é a largura do rio e E [L] é a espessura do leito do rio.

Em resumo, a diferença entre os pacotes de condição de contorno GHB e Rio está relacionada com o limite de validade da equação geral de cálculo de descarga (Eq. (1)). Enquanto o contorno GHB não apresenta um limite para o valor da descarga para a faixa válida de valores de carga ($h > h_f$), na condição Rio, quando h se torna inferior a $RBOT$, os valores da descarga são limitados a um valor máximo, calculado pela Eq. (3).

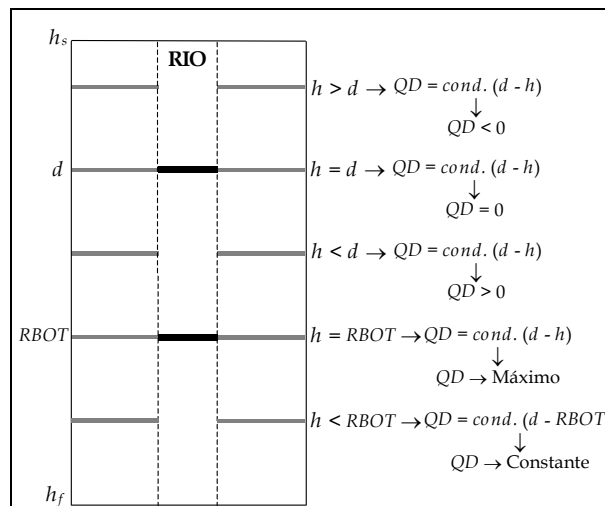


Figura 3 – Esquema de funcionamento do pacote Rio.

Módulo Dreno

O pacote da condição de contorno Dreno se caracteriza por atuar apenas como um sumidouro de água do aquífero. Quando a carga na célula na qual foi atribuído o contorno Dreno atinge determinado limite inferior, o fluxo de água cessa e a condição de contorno se torna inativa. A equação base de cálculo de descarga (Eq. (1)) é válida até este limite de carga, abaixo do qual a descarga torna-se nula (McDONALD e HARBAUGH, 1988). A Fig. 4 mostra de forma esquemática o funcionamento deste pacote, para diferentes valores de carga.

Comparando-se a Fig. 4 com a Fig. 2, pode-se verificar que, para valores de h superiores a d , a relação entre a descarga QD e a carga h para o pacote Dreno é exatamente a mesma da observada para o pacote GHB, sendo regida pela Eq. (1). Entretanto, para valores de carga inferiores a d , a Eq. (1) perde a validade e a descarga torna-se nula.

Desta forma, o módulo Dreno pretende simular o comportamento passivo dos drenos. Estas estruturas retiram água do aquífero, promovendo o rebaixamento de seu nível. Entretanto, ao contrário dos grandes corpos d'água, não apresentam um caudal de água suficiente para alimentar o aquífero. Assim, quando há um rebaixamento expressivo no aquífero, estas estruturas deixam de exercer influência.

A constante de proporcionalidade da equação de descarga, condutância (*cond*), descreve o grau de conectividade entre a condição de contorno Dreno e a célula onde a condição de contorno Dreno foi atribuída. Como foi feito na análise do pacote Rio, também aqui é possível se estabelecer uma relação com parâmetros físicos de um dreno. Para a simulação de um dreno aberto, a condutância pode ser estimada utilizando a mesma expressão da condutância do Rio (Eq. (4)), onde os termos têm o mesmo significado.

Para drenos fechados (dutos), entretanto, a estimativa da condutância é bem mais complexa. A resistência à entrada de água no dreno sofre a influência de vários fatores, tais como o número e o tamanho das aberturas presentes no conduto drenante; a condutividade hidráulica nas proximidades do dreno; a quantidade, o tipo e a condutividade hidráulica do material que normalmente obstrui as aberturas, etc. Diante do exposto, na prática é mais fácil determinar a condutância do dreno a partir de calibragem do modelo.

Em resumo, comparando-se com a condição de contorno GHB, o módulo Dreno apresenta um limite inferior para a validade da equação de cálculo da descarga ($h = d$), abaixo do qual a descarga torna-se nula e esta condição de contorno deixa de atuar no sistema.

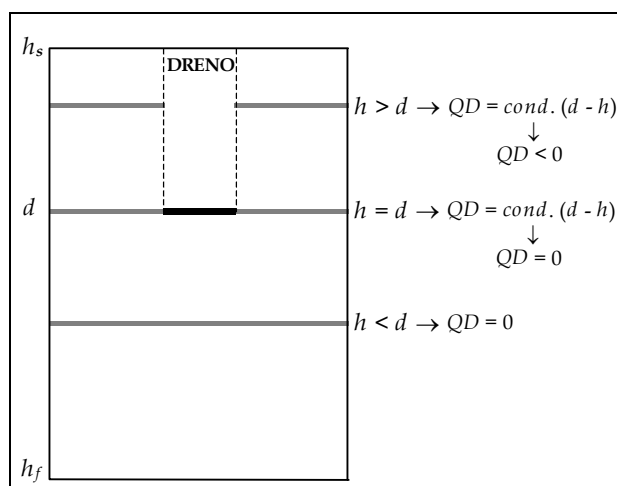


Figura 4 – Esquema de funcionamento do pacote Dreno.

Módulo Evapotranspiração (EVT)

O pacote da Evapotranspiração (EVT) simula os efeitos da evapotranspiração sobre o aquífero, isto é, procura representar as perdas de água que ocorrem na zona saturada da água subterrânea, devido a ação conjunta da transpiração das plantas e da evaporação.

Na condição EVT, a Eq. (5) é a base de cálculo para a descarga QD , embora não seja válida para determinados valores de carga h da célula onde esta condição de contorno foi empregada, como será discutido oportunamente (McDONALD e HARBAUGH, 1988).

$$QD = -Q_{\max} \left(\frac{h-d}{h_s-d} \right) \quad (5)$$

onde Q_{\max} é a descarga máxima e d é a elevação de extinção do efeito da evapotranspiração, sendo calculada pela equação:

$$d = h_s - p_{\text{ext}} \quad (6)$$

onde p_{ext} é a profundidade de extinção para a evapotranspiração, que deve ser fornecida pelo usuário.

Deve-se observar que as Equações (1) e (5) são, na verdade, idênticas. Em ambas, a descarga é estimada como sendo diretamente proporcional à diferença entre a carga hidráulica na célula h e um parâmetro da condição de contorno d . Para as condições de contorno GHB, Rio e Dreno, a constante de proporcionalidade é dada pela condutância (*cond*), enquanto que, para a condição EVT, esta constante é dada por $Q_{\max}/(h_s - d)$.

Conforme pode-se observar na Fig. 5, quando a carga h da célula onde se aplicou a condição EVT eleva-se acima da superfície de evapotranspiração h_s , o aquífero perde água através de evapotranspiração à taxa constante, dada por Q_{\max} . Portanto, neste caso, a Eq. (5) deixa de ser válida.

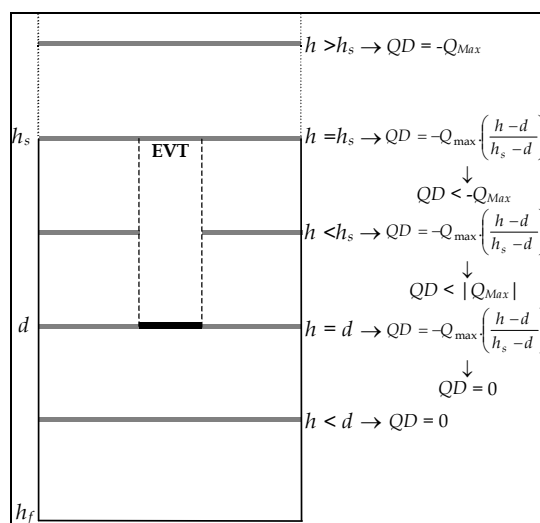


Figura 5 – Esquema de funcionamento do pacote EVT.

Na situação em que a carga h é igual ou menor a h_s ($h_s \geq h \geq d$), o aquífero perde água por evapotranspiração com taxa descrita pela Eq. (5) ($QD < 0$). Quando a carga h atinge um valor igual ao da elevação de extinção d , a descarga QD é nula, conforme pode-se verificar através da Eq. (5). Para valores de carga h inferiores à elevação de extinção d , a Eq. (5) deixa de ser válida e QD torna-se nula. Portanto, neste caso, a evapotranspiração torna-se inativa.

Com relação ao módulo GHB, o módulo EVT apresenta dois limites para a validade da equação básica. Um limite superior (valores de h superiores a h_s), quando a descarga atinge seu valor máximo (em módulo), tornando-se constante. Abaixo do limite inferior (valores de h inferiores a d), a descarga torna-se nula e esta condição de contorno deixa de influenciar o sistema.

DISCUSSÃO E CONCLUSÕES

Os módulos ou pacotes do modelo MODFLOW analisados neste trabalho, que são implementações de condições de contorno do tipo 3, embora matematicamente funcionem de forma similar, apresentam particularidades que os credenciam a ser usados não apenas para simular a relação entre sistemas aquíferos e as condições hidrológicas sugeridas pelos seus nomes, mas também outras condições diferentes destas.

Por exemplo, o módulo Dreno pode ser usado para representar a relação entre um aquífero e um rio temporário numa região semi-árida. De modo geral, aplica-se este pacote para simular drenos (abertos ou fechados), rios temporários, nascentes, trincheiras e qualquer outra condição que atue unicamente como sumidouro de água até um valor mínimo de carga hidráulica.

O Módulo Rio pode ser empregado para representar rios, lagos, represas e condições que assumam uma vazão constante de água para o aquífero quando a carga hidráulica deste torna-se inferior a determinado valor. O módulo GHB também pode ser usado para modelar os sistemas hidrológicos simulados pelo Módulo Rio, entretanto, deve-se considerar que não haverá limite para o fluxo de água doado pelo contorno ao aquífero. Esses dois módulos também podem ser usados como interfaces entre aquíferos adjacentes simulados separadamente.

O pacote Evapotranspiração (EVT) é indicado para simular a relação de um aquífero com terrenos alagados, mas também pode ser bem aplicado para representar drenos que possuam um valor limite para o fluxo máximo de drenagem, como é o caso de um dreno fechado, por exemplo.

Este trabalho apresentou uma avaliação das condições de contorno de tipo 3 disponíveis no modelo MODFLOW sob uma ótica matemática. Entretanto, o processo de escolha da condição de contorno mais adequada para descrever um determinado sistema físico deve ser baseado em uma avaliação criteriosa de dados de campo que caracterizem os mecanismos mais relevantes do sistema em estudo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANDERSON, M. P., WOESSNER, G. M. *Applied Groundwater Modelling*, Academic Press, San Diego, 1992.
- ANDERSEN, P. F. *A Manual of Instructional Problems for the U.S.G.S. MODFLOW Model*, EPA/600/R-93/010, U.S. Environmental Protection Agency, Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, Ada, Oklahoma, 1993.
- DOMENICO, P. A., SCHWARTZ, F. W. *Physical and Chemical Hydrogeology*, 2nd Edition, John Wiley & Sons, New York, 1997.
- FREEZE, R. A., CHERRY, J. A. *Groundwater*, Prentice-Hall, New Jersey, 1979.
- McDONALD, M. G., HARBAUGH, W. *A Modular Three-Dimensional Finite-Difference Groundwater Flow Model*, Techniques of Water-Resources Investigation, Book 6, Chapter A1, U.S. Geological Survey, Washington D.C., 1988.