



MINISTÉRIO DO EQUIPAMENTO SOCIAL

Laboratório Nacional de Engenharia Civil

A DISPERSÃO DE POLUENTES EM ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

Análise custo-eficácia de modelos matemáticos
e ensaios de traçadores para a realização
de estudos de impacto ambiental

Volume 1

Lisboa, Janeiro de 1986

J. P. Cárcomo Lobo Ferreira

Tese apresentada a concurso para a obtenção do grau
de especialista e acesso à categoria de Investigador Auxiliar
do Laboratório Nacional de Engenharia Civil

I&D
TESE
HIDRÁULICA

MINISTÉRIO DAS OBRAS PÚBLICAS, TRANSPORTES E COMUNICAÇÕES

LABORATÓRIO NACIONAL DE ENGENHARIA CIVIL

DEPARTAMENTO DE HIDRÁULICA

NUCLEO DE HIDROLOGIA E HIDRÁULICA FLUVIAL

Proc. 62/11/8491

Obra 62/53/404

A DISPERSÃO DE POLUENTES

EM

ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

- Análise custo-eficácia de modelos matemáticos e ensaios de traçadores para a realização de estudos de impacto ambiental.

VOLUME 1

J. P. Cárcamo Lobo Ferreira

Tese apresentada a concurso para a obtenção do grau de Especialista e acesso à categoria de Investigador Auxiliar do Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

Lisboa, Janeiro de 1986



Pae. e Rafael.

com Amizade

Jane 23.5.86

*That the birds of
Worry and care
Fly above your head,
This you cannot change,
But that they build
Nests in your hair,
This you can prevent.*

Chinese proverb

RESUMO

O trabalho que se apresenta inicia, em Portugal, o estudo das metodologias mais adequadas à quantificação do transporte de massa (poluentes) em águas subterrâneas (equação diferencial da convecção-dispersão em meios porosos).

A experiência adquirida permite o desenvolvimento de estudos de impacto ambiental de poluição de águas subterrâneas, originados pela Indústria e Minas, pela Agricultura, por efluentes de Aglomerados Populacionais e por Acidentes Ambientais.

Após uma apresentação geral dos principais métodos matemáticos adequados à resolução do problema do transporte de massa (soluções analíticas, método das células de mistura, método das diferenças finitas, método das características, método do percurso aleatório, método dos elementos finitos e método dos elementos de fronteira) desenvolve-se uma análise custo-eficácia dos modelos testados, para a obtenção de um escalonamento objectivo e de um escalonamento subjectivo (com base em oito variáveis ponderadas) dos vários modelos. Os escalonamentos permitem a selecção do método matemático e do modelo mais eficaz para a resolução de estudos de poluição de águas subterrâneas, dos pontos de vista da precisão dos resultados, dos custos e prazos do projecto, e da carência de dados. Para facilitar a selecção traçaram-se quatro Árvores de Decisão que abrangem

problemas reais ou potenciais de poluição de águas subterrâneas.

O tratamento matemático da equação diferencial do transporte de massa requer o conhecimento prévio da variável dispersão longitudinal (ou da variável dispersividade longitudinal) do meio poroso. Analisam-se as técnicas de realização de ensaios de traçadores em águas subterrâneas e os métodos destinados à interpretação dos seus resultados. Descrevem-se os ensaios de traçadores realizados com cloreto de sódio e com sulforodamina B no aquífero de areias brancas de Rio Maior.

A aplicação dos métodos matemáticos e experimentais analisados é exemplificada pelo desenvolvimento de um estudo hidrogeológico de poluição, que inclui a consideração de vários cenários de gestão e de poluição de águas subterrâneas.

O trabalho é completado pela apresentação dos aspectos básicos da poluição de águas subterrâneas, pela apresentação do estado dos conhecimentos na modelação matemática das águas subterrâneas (problemas de escoamento, de transporte e de gestão) e ainda pela apresentação das conclusões do estudo e dos temas sugeridos para o prosseguimento da investigação.

SYNOPSIS

This research work begins, in Portugal, the study of methodologies for the quantification of the dispersion of pollutants in groundwaters (differential mass transport equation or diffusion-convection equation in porous media).

The aim of the study is the analysis of mathematical methods, including a comparative study of computer models, and experimental methods for dye tracing experiments in groundwaters, for the effective development of environmental groundwater pollution studies, originated by Industry, Agriculture, waste disposals and environmental pollution accidents.

After a general presentation of the main mathematical methods, suited for the solution of the dispersion problem (analytical solutions, finite state mixing cell method, finite difference method, method of characteristics, random-walk method, finite element method and boundary element method) a cost effectiveness analysis of the selected mathematical models is developed for the evaluation of an objective ranking and of a subjective ranking (based on eight weight variables) of the models. This ranking allows the selection of the most effective mathematical model for the solution of actual pollution problems, from the viewpoints of the precision of the model results, the costs and execution time of the project, and the scarcity of the available hydrogeological data. To make the selection easier

four Decision Trees were drawn to solve groundwater pollution problems.

The mathematical treatment of the mass transport differential equation requires the previous knowledge of the longitudinal dispersion (or of the longitudinal dispersivity) of the porous medium. Techniques for dye tracing experiments and methods for the analysis of their results were studied and applied to the white sands aquifer of Rio Maior. The dyes analyzed were the sodium chloride and the sulphorodamine B.

The mathematical and the experimental methodologies studied were applied to hydrogeological pollution problem, that includes several management and groundwater pollution scenarios of a proposed industrial and mining project in Central Portugal.

This work also includes an introductory presentation of the basic aspects of groundwaters pollution, a state-of-the-art of the groundwater modeling in areas related to the transport of pollutants (flow and optimization problems), and suggested topics for further research.

AGRADECIMENTOS

A realização de um estudo com as características do que se apresenta só se torna possível com a colaboração de inúmeras pessoas. A todas gostaria de expressar o meu reconhecimento.

Desejo salientar as excelentes condições que me foram proporcionadas pela hierarquia do Laboratório Nacional de Engenharia Civil. Ao Eng. João Bau, ex-Chefe do Núcleo de Hidrologia e Hidráulica Fluvial (NHHF) e actual Sub-Director do LNEC, ao Eng. Luís Veiga da Cunha, ex-Chefe do NHHF, ao actual Chefe do NHHF Eng. João Rocha, ao Eng. Fernando Abecasis e Eng. J. Pires Castanho, Ex-Chefe e Chefe do Departamento de Hidráulica (DH) e ao Eng. Julio Ferry Borges Ex-Director do LNEC e ao Eng. Artur Ravara, actual Director do LNEC, agradeço reconhecidamente os meios concedidos.

Ao Eng. Luís Veiga da Cunha e ao Eng. João Bau desejo ainda agradecer a formação científica e técnica e o estímulo transmitido, directa ou indirectamente, de forma exemplar, durante a chefia do Núcleo.

Ao Dr.-Ing. H. Bretschneider e ao Dr.-Ing. R. Damrath, da Universidade Técnica de Berlim, agradeço o apoio prestado durante as estadias nessa Universidade, que contribuíram de forma decisiva para o arranque deste trabalho.

Ao Dr. José Delgado Rodrigues agradeço a constante disponibilidade e o importante apoio manifestado durante todo o trabalho.

Aos colegas do LNEC nomeadamente aos Drs. Mendes de Carvalho e Maria Alzira Santos e aos Engs. Nunes Correia, Eduardo Oliveira, Rui Correia, Maria Rafaela Abreu e Maria Helena Marecos agradeço as trocas de impressão que tiveram comigo sobre a tese e o material cedido para os ensaios desenvolvidos em Rio Maior.

Agradeço ao Professor A. Sá da Costa e ao Eng. Veloso da Veiga, docentes do Instituto Superior Técnico e da Universidade do Minho, a cedência de dois dos programas de computador que se testaram e a disponibilidade manifestada para trocas de impressão.

Agradeço ao Prof. Emilio Custodio da Universidade de Barcelona as trocas de impressões que teve comigo durante o Curso de Poluição de Águas Subterrâneas, em Madrid (1981), e em ocasiões posteriores. Agradeço ao Dr. Robert Thomas da Organização das Nações Unidas para a Alimentação a cedência de importante material bibliográfico e as trocas de impressões que teve comigo sobre o estudo.

Agradeço aos Ajudantes de Experimentador Jorge Vicoso Patrício e Maria José Henriques a excelente colaboração prestada durante todo o trabalho e a execução de grande parte dos desenhos e da dactilografia do texto. Agradeço também às Programadoras de Sistemas Maria Palmira Cruz e Margarida Alcaide a adaptação de grande número de programas ao computador do LNEC.

Agradeço ao Eng. Leite, do CPCE do LNEC, a forma interessada como projectou parte da aparelhagem necessária à realização dos ensaios de Rio Maior. Agradeço também a colaboração dos Srs. Carroggio e Reis da Sala de Desenho do DH, dos Srs. Melo Banha e Fernando Mendes, das Artes Gráficas do LNEC e ainda do desenhador Luís Pinto.

A Electricidade de Portugal, E.P. através do Eng. Mariano, facilitou a utilização de meios necessários à realização dos ensaios de Rio Maior. Agradeço as facilidades concedidas. Salienta-se a excelente colaboração prestada, em Rio Maior, pelo Sr. Avelino.

A Câmara Municipal de Rio Maior, através do Eng. Carolino, facilitou a utilização de meios imprescindíveis à realização dos ensaios. Agradece-se a colaboração prestada.

Agradeço profundamente a meus Pais o empenho que sempre mostraram pela minha formação científica. A eles dedico este trabalho.

Não esquecerei o estímulo ímpar, cultural e científico, que tu, Cândida, me transmitiste. Dedico-te o texto que a tua força ajudou a construir.

A DISPERSÃO DE POLUENTES

EM

AGUAS SUBTERRANEAS

- . Análise custo-eficácia de modelos matemáticos e ensaios de traçadores para a realização de estudos de impacto ambiental.

INDICE

VOLUME 1

	Pág
1. INTRODUÇÃO	1
1.1 - Tema do estudo	1
1.2 - Estudo desenvolvido	3
2. ASPECTOS BÁSICOS DA POLUIÇÃO DAS AGUAS SUBTERRANEAS	7
2.1 - Introdução	7
2.2 - Definições	7
2.3 - Identificação do problema	8
2.4 - Aspectos físicos, químicos e biológicos da contaminação das águas subterrâneas	9
2.4.1 - Generalidades	9

2.4.2 - Aspectos físicos	10
2.4.3 - Aspectos químicos	11
2.4.4 - Aspectos biológicos	12
2.5 - Medidas para protecção e controle da qualidade das águas subterrâneas	14
2.6 - Conclusões	16
3. ESTADO ACTUAL DOS CONHECIMENTOS NA MODELAÇÃO	
MATEMÁTICA DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS	19
3.1 - Introdução	19
3.2 - Tipos de modelos empregados na engenharia de recursos hídricos	19
3.3 - Perspectiva histórica da hidrologia das águas subterrâneas	22
3.4 - Modelação matemática das águas subterrâneas	24
3.4.1 - Generalidades	24
3.4.2 - Modelos de escoamento	26
3.4.3 - Modelos de transporte de massa	31
3.4.4 - Modelos de gestão	35
3.5 - Comparação de modelos matemáticos de transporte de massa em águas subterrâneas	37
4. ANÁLISE COMPARATIVA DOS PRINCIPAIS MÉTODOS MATEMÁTICOS	

PARA A RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DO TRANSPORTE DE	
MASSA EM ÁGUAS SUBTERRÂNEAS	41
4.1 - Introdução	41
4.2 - Descrição dos métodos matemáticos estudados	44
4.2.1 - Soluções analíticas	44
4.2.1.1 - Descrição geral	44
4.2.1.2 - Modelos seleccionados	47
4.2.2 - Método das células de mistura	52
4.2.2.1 - Descrição geral	52
4.2.2.2 - Modelo seleccionado	55
4.2.3 - Método das diferenças finitas	58
4.2.3.1 - Descrição geral	59
4.2.3.2 - Modelos seleccionados	63
4.2.4 - Método das características	69
4.2.4.1 - Descrição geral	69
4.2.4.2 - Modelos seleccionados	73
4.2.5 - Método do percurso aleatório	76
4.2.5.1 - Descrição geral	76
4.2.5.2 - Modelo seleccionado	80
4.2.6 - Método dos elementos finitos	81

4.2.6.1 - Descrição geral	81
4.2.6.2 - Modelos seleccionados	95
4.2.6.2.1 - Elementos triangulares lineares	95
4.2.6.2.2 - Elementos triangulares quadráticos	97
4.2.6.2.3 - Elementos quadrangulares quadráticos	100
4.2.6.2.4 - Elementos triangulares e quadrangulares quadráticos	101
4.2.7 - Método dos elementos de fronteira	101
4.2.7.1 - Descrição geral	101
4.2.7.2 - Modelo seleccionado	110
4.3 - Testes desenvolvidos para comparação de modelos	118
4.3.1 - Introdução	118
4.3.2 - Análise de problemas unidimensionais	122
4.3.2.1 - Introdução	122
4.3.2.2 - Injecção contínua	125
4.3.2.3 - Injecção contínua com decaimento	133
4.3.2.4 - Injecção instantânea	135
4.3.2.5 - Injecção instantânea com decaimento	138
4.3.3 - Análise de problemas bidimensionais	139

4.3.3.1 - Introdução	139
4.3.3.2 - Domínio rectangular	141
4.3.3.2.1 - Injecção contínua	141
4.3.3.2.2 - Injecção instantânea	147
4.3.3.3 - Domínio bidimensional irregular	149
4.4 - Análise custo-eficácia dos modelos estudados	155
4.4.1 - Introdução	155
4.4.2 - Descrição dos critérios de avaliação	161
4.4.3 - Comparação de modelos	172
4.4.4 - Seleção dos modelos para a realização de estudos de impacto ambiental	177
 5. ENSAIOS DE TRACADORES E SUA INTERPRETAÇÃO PARA A DETERMINAÇÃO DA DISPERSÃO LONGITUDINAL DE AQUIFEROS	 185
5.1 - Introdução	185
5.2 - Descrição de métodos experimentais adequados à realização de ensaios de tracadores	187
5.2.1 - Tipo e escala dos ensaios	187
5.2.2 - Situações hidrogeológicas	192
5.2.3 - Tipos de tracadores	194

5.3 - Equipamento utilizado nos ensaios	198
5.4 - Descrição dos ensaios efectuados	201
5.4.1 - Ensaios com soluções de cloreto de sódio	201
5.4.1.1 - Introdução	202
5.4.1.2 - Utilização de dois piezómetros	205
5.4.1.3 - Utilização de um piezómetro e da captação 35	213
5.4.1.4 - Utilização de um único piezómetro	218
5.4.2 - Ensaio simultâneo de cloreto de sódio e de sulforodamina 2	226
5.5 - Interpretação dos resultados dos ensaios de tracadores	229
5.5.1 - Introdução	230
5.5.2 - Análise directa dos resultados dos ensaios	232
5.5.3 - Análise inversa dos resultados dos ensaios	263
5.5.4 - Análise das variáveis de transporte do ensaio realizado com sulforodamina 3	267
5.6 - Extrapolação da dispersão longitudinal para uma escala regional	276
6. DESENVOLVIMENTO DE UM ESTUDO DE POLUIÇÃO DE AGUAS SUBTERRANEAS	293

6.1 - Introdução	293
6.2 - Seleccção do estudo a desenvolver	294
6.3 - Caracterizacção geral do aquifero de Rio Maior e do seu problema de poluicção de águas subterrâneas	297
6.4 - Modelacção matemática do transporte de poluentes	302
6.4.1 - Seleccção de métodos matemáticos e de programas de computador	302
6.4.2 - Estudo hidrogeológico	305
6.4.3 - Cenários de gestão	306
6.4.3.1 - Áreas de depósito de cinzas.....	306
6.4.3.2 - Impermeabilizacção dos depósitos de cinzas	307
6.4.4 - Malhas e condições de fronteira dos modelos matemáticos	310
6.4.4.1 - Malhas dos modelos matemáticos	310
6.4.4.2 - Condições de fronteira naturais e essenciais	311
6.4.4.3 - Condições de fluxo e de recarga do aquifero	312
6.4.4.4 - Condições iniciais	313
6.4.5 - Aplicacção dos modelos matemáticos	313

6.4.6 - Análise da influência da dispersão

transversal 316

6.5 - Conclusões do estudo de poluição desenvolvido 319

7. SÍNTESE, CONCLUSÕES E TEMAS PARA PROSSEGUIMENTO

DA INVESTIGAÇÃO 321

Bibliografia 333

VOLUME 2

Quadros 1

Figuras 77

Anexos 293

INDICE DE QUADROS

- Quadro 4.1 - Situações hidrogeológicas analisadas com o programa SA2D1.FOR (1a. fase)
- Quadro 4.2 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 4: 2000 dias
- Quadro 4.3 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 4: 6000 dias
- Quadro 4.4 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 4: 10000 dias
- Quadro 4.5 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 5: 2000 dias
- Quadro 4.6 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 5: 6000 dias
- Quadro 4.7 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 5: 10000 dias
- Quadro 4.8 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 6: 2000 dias
- Quadro 4.9 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 6: 6000 dias
- Quadro 4.10 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 6: 10000 dias

Quadro 4.11 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 11: 2000 dias

Quadro 4.12 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 11: 6000 dias

Quadro 4.13 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 11: 10000 dias

Quadro 4.14 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 3: 200 dias

Quadro 4.15 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 3: 600 dias

Quadro 4.16 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 3: 1000 dias

Quadro 4.17 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 7: 20000 dias

Quadro 4.18 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 7: 60000 dias

Quadro 4.19 - Comparação de modelos. Teste 1. Ensaio 7: 100000 dias

Quadro 4.20 - Resultados obtidos para várias execuções do programa RANDOM.FOR, com os mesmos dados

Quadro 4.21 - Comparação de modelos. Teste 2. Ensaio 1: 2000 dias

Quadro 4.22 - Comparação de modelos. Teste 2. Ensaio 1: 6000 dias

Quadro 4.23 - Comparação de modelos. Teste 2. Ensaio 1: 10000 dias

Quadro 4.24 - Comparação de modelos. Teste 3. Ensaio 1: 2000 dias

Quadro 4.25 - Comparação de modelos. Teste 3. Ensaio 1: 6000 dias

Quadro 4.26 - Comparação de modelos. Teste 3. Ensaio 1: 10000 dias

Quadro 4.27 - Comparação de modelos. Teste 3. Ensaio 2: 2000 dias

Quadro 4.28 - Comparação de modelos. Teste 3. Ensaio 2: 6000 dias

Quadro 4.29 - Comparação de modelos. Teste 3. Ensaio 2: 10000 dias

Quadro 4.30 - Comparação de modelos. Teste 3. Ensaio 3: 2000 dias

Quadro 4.31 - Comparação de modelos. Teste 3. Ensaio 3: 6000 dias

Quadro 4.32 - Comparação de modelos. Teste 3. Ensaio 3: 10000 dias

Quadro 4.33 - Comparação de modelos. Teste 4. Ensaio 1: 2000 dias

Quadro 4.34 - Comparação de modelos. Teste 4. Ensaio 1: 6000 dias

Quadro 4.35 - Comparação de modelos.	Teste 4.	Ensaio 1:	10000 dias
Quadro 4.36 - Comparação de modelos.	Teste 5.	Ensaio 1:	2000 dias, 400m
Quadro 4.37 - Comparação de modelos.	Teste 5.	Ensaio 1:	6000 dias, 1400m
Quadro 4.38 - Comparação de modelos.	Teste 5.	Ensaio 1:	10000 dias, 2400m
Quadro 4.39 - Comparação de modelos.	Teste 5.	Ensaio 1:	10000 dias, 400m
Quadro 4.40 - Comparação de modelos.	Teste 5.	Ensaio 1:	10000 dias, 1400m
Quadro 4.41 - Comparação de modelos.	Teste 5.	Ensaio 2:	2000 dias, 400m
Quadro 4.42 - Comparação de modelos.	Teste 5.	Ensaio 2:	6000 dias, 1400m
Quadro 4.43 - Comparação de modelos.	Teste 5.	Ensaio 2:	10000 dias, 2400m
Quadro 4.44 - Comparação de modelos.	Teste 5.	Ensaio 2:	10000 dias, 400m
Quadro 4.45 - Comparação de modelos.	Teste 5.	Ensaio 2:	10000 dias, 1400m
Quadro 4.46 - Comparação de modelos.	Teste 5.	Ensaio 3:	2000 dias, 400m

- Quadro 4.47 - Comparação de modelos. Teste 5. Ensaio 3: 6000 dias, 1400m
- Quadro 4.48 - Comparação de modelos. Teste 5. Ensaio 3: 10000 dias, 2400m
- Quadro 4.49 - Comparação de modelos. Teste 5. Ensaio 3: 10000 dias, 400m
- Quadro 4.50 - Comparação de modelos. Teste 5. Ensaio 3: 10000 dias, 1400m
- Quadro 4.51 - Comparação de modelos. Teste 6. Ensaio 1: 2000 dias, 900m
- Quadro 4.52 - Comparação de modelos. Teste 6. Ensaio 1: 6000 dias, 1900m
- Quadro 4.53 - Comparação de modelos. Teste 6. Ensaio 1: 10000 dias, 2900m
- Quadro 4.54 - Comparação de modelos. Teste 7. Rio Maior: Captação 35
- Quadro 4.55 - Comparação de modelos. Teste 7. Rio Maior: Captação 84
- Quadro 4.56 - Comparação de modelos. Teste 7. Rio Maior: Espadanal
- Quadro 4.57 - Análise da precisão dos resultados em relação a soluções analíticas: Análise unidimensional (Testes 1, 2 e 3)
- Quadro 4.58 - Análise da precisão dos resultados em relação a

soluções analíticas: Análise bidimensional (Testes 5 e 6)

Quadro 4.59 - Análise da precisão dos resultados de testes sem solução analítica: Análise unidimensional (Teste 4)

Quadro 4.60 - Análise da precisão dos resultados de testes sem solução analítica: Análise bidimensional (Teste 7)

Quadro 4.61 - Análise dos tempos de CPU necessários à execução dos programas

Quadro 4.62 - Características dos programas testados

Quadro 4.63 - Análise custo-eficácia dos programas testados: Classificação objectiva

Quadro 4.64 - Análise custo-eficácia dos programas testados: Classificação subjectiva

Quadro 6.1 - Resultados do estudo de impacto ambiental do aquífero de Rio Maior. DISP4.FOR: DT/DL = 0.10

Quadro 6.2 - Resultados do estudo de impacto ambiental do aquífero de Rio Maior. KONIK3.FOR: DT/DL = 0.10

Quadro 6.3 - Resultados do estudo de impacto ambiental do aquífero de Rio Maior. DISP4.FOR: DT/DL = 0.30

Quadro 6.4 - Resultados do estudo de impacto ambiental do aquífero de Rio Maior. KONIK3.FOR: DT/DL = 0.30

INDICE DE FIGURAS

- Fig. 2.1 - Esquema do escoamento subterrâneo no meio poroso
- Fig. 4.1 - Condições de fronteira do modelo SA2D1
- Fig. 4.2 - Modelo MIXCEL. Processo: Entrada-mistura-saída
- Fig. 4.3 - Modelo MIXCEL. Processo: Entrada-saída-mistura
- Fig. 4.4 - Curvas de penetração obtidas com o modelo MIXCEL
- Fig. 4.5 - Tipos de malha do método das diferenças finitas
- Fig. 4.6 - Evolução do cálculo de uma curva de penetração no modelo KONIK3
- Fig. 4.7 - Evolução de uma partícula no modelo KONIK3
- Fig. 4.8 - Evolução de uma mancha de poluição em torno do escoamento médio
- Fig. 4.9 - Evolução de uma partícula no modelo RANDOM
- Fig. 4.10 - Comparação de resultados do programa BEMDIS.FOR com os de uma solução analítica
- Fig. 4.11 - Método dos elementos de fronteira. Definição do ângulo ϕ
- Fig. 4.12 - Malhas utilizadas para a análise unidimensional
- Fig. 4.13 - Curvas de penetração calculadas pelo programa SA2D1.FOR

- Fig. 4.14 - Comparação de modelos: Teste 1, Ensaio 4
- Fig. 4.15 - Comparação de modelos: Teste 1, Ensaio 5
- Fig. 4.16 - Comparação de modelos: Teste 1, Ensaio 6
- Fig. 4.17 - Comparação de modelos: Teste 1, Ensaio 11
- Fig. 4.18 - Comparação de modelos: Teste 1, Ensaio 3
- Fig. 4.19 - Comparação de modelos: Teste 1, Ensaio 7
- Fig. 4.20 - Teste 2: Evolução no tempo da solução analítica
- Fig. 4.21 - Comparação de modelos: Teste 2, Ensaio 1, 2000 dias
- Fig. 4.22 - Comparação de modelos: Teste 2, Ensaio 1, 6000 dias
- Fig. 4.23 - Comparação de modelos: Teste 2, Ensaio 1, 10000 dias
- Fig. 4.24 - Teste 3, Ensaio 1: Evolução no tempo da solução analítica
- Fig. 4.25 - Comparação de modelos: Teste 3, Ensaio 1, Secção 500m (2000 dias)
- Fig. 4.26 - Comparação de modelos: Teste 3, Ensaio 1, Secção 1500m (6000 dias)
- Fig. 4.27 - Comparação de modelos: Teste 3, Ensaio 1, Secção 2500m (10000 dias)
- Fig. 4.28 - Teste 3, Ensaio 2: Evolução no tempo da solução analítica
- Fig. 4.29 - Comparação de modelos: Teste 3, Ensaio 2, Secção 500m (2000 dias)

- Fig. 4.30 - Comparação de modelos: Teste 3, Ensaio 2, Secção
1500m (6000 dias)
- Fig. 4.31 - Comparação de modelos: Teste 3, Ensaio 2, Secção
2500m (10000 dias)
- Fig. 4.32 - Teste 3, Ensaio 3: Evolução no tempo da solução
analítica
- Fig. 4.33 - Comparação de modelos: Teste 3, Ensaio 3, Secção
500m (2000 dias)
- Fig. 4.34 - Comparação de modelos: Teste 3, Ensaio 3, Secção
1500m (6000 dias)
- Fig. 4.35 - Comparação de modelos: Teste 3, Ensaio 3, Secção
2500m (10000 dias)
- Fig. 4.36 - Comparação de modelos: Teste 4, Ensaio 1
- Fig. 4.37 - Teste 5: Malha tipo rectangular
- Fig. 4.38 - Teste 5: Malha tipo triangular
- Fig. 4.39 - Teste 5, Ensaio 1: Evolução no tempo da solução
analítica
- Fig. 4.40 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 1, 2000 dias,
400m
- Fig. 4.41 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 1, 6000 dias,
1400m
- Fig. 4.42 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 1, 10000
dias, 2400m

- Fig. 4.43 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 1, 10000 dias, 400m
- Fig. 4.44 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 1, 10000 dias, 1400m
- Fig. 4.45 - Teste 5, Ensaio 2: Evolução no tempo da solução analítica
- Fig. 4.46 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 2, 2000 dias, 400m
- Fig. 4.47 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 2, 6000 dias, 1400m
- Fig. 4.48 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 2, 10000 dias, 2400m
- Fig. 4.49 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 2, 10000 dias, 400m
- Fig. 4.50 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 2, 10000 dias, 1400m
- Fig. 4.51 - Teste 5, Ensaio 3: Evolução no tempo da solução analítica
- Fig. 4.52 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 3, 2000 dias, 400m
- Fig. 4.53 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 3, 6000 dias, 1400m
- Fig. 4.54 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 3, 10000 dias, 2400m

- Fig. 4.55 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 3, 10000 dias, 400m
- Fig. 4.56 - Comparação de modelos: Teste 5, Ensaio 3, 10000 dias, 1400m
- Fig. 4.57 - Teste 6: Evolução no tempo da solução analítica
- Fig. 4.58 - Comparação de modelos: Teste 6, Ensaio 1, 2000 dias, 900m
- Fig. 4.59 - Comparação de modelos: Teste 6, Ensaio 1, 6000 dias, 1900m
- Fig. 4.60 - Comparação de modelos: Teste 6, Ensaio 1, 10000 dias, 2900m
- Fig. 4.61 - Teste 7: Condições de fronteira
- Fig. 4.62 - Teste 7: Malha tipo do modelo DISP2
- Fig. 4.63 - Teste 7: Malha tipo dos modelos MIXCEL e DISP3
- Fig. 4.64 - Comparação de modelos: Teste 7, Captação B5
- Fig. 4.65 - Comparação de modelos: Teste 7, Captação B4
- Fig. 4.66 - Comparação de modelos: Teste 7, Espadanal
- Fig. 4.67 - Árvore de Decisão para selecção de modelos No. 1: Indústria e Minas
- Fig. 4.68 - Árvore de Decisão para selecção de modelos No. 2: Aglomerados Populacionais
- Fig. 4.69 - Árvore de Decisão para selecção de modelos No. 3: Agricultura

- Fig. 4.70 - Árvore de Decisão para selecção de modelos No. 4:
Acidentes Ambientais
- Fig. 5.1 - Grupo de ensaio B5. Cortes interpretativos
- Fig. 5.2 - Recta de calibração da Sonda 1
- Fig. 5.3 - Recta de calibração da Sonda 2, com tubo envolvente de PVC
- Fig. 5.4 - Recta de calibração da Sonda 2, sem tubo envolvente do PVC
- Fig. 5.5 - Curva da variação da concentração de NaCl do Ensaio 1
- Fig. 5.6 - Curva da variação da concentração de NaCl do Ensaio 5
- Fig. 5.7 - Curva da variação da concentração de NaCl do Ensaio 2, na captação B5
- Fig. 5.8 - Curva da variação de concentração de NaCl do Ensaio 2, no PC7/2
- Fig. 5.9 - Curva da variação da concentração de NaCl do Ensaio 4
- Fig. 5.10 - Registo obtido durante o Ensaio 3
- Fig. 5.11 - Curva da variação de concentração de NaCl do Ensaio 3
- Fig. 5.12 - Esquema dos volumes de água injectados durante o Ensaio 3
- Fig. 5.13 - Curva da variação da concentração de NaCl do Ensaio 6
- Fig. 5.14 - Curva da variação da concentração de sulfurodamina B do Ensaio 7

- Fig. 5.15 - Comparação das curvas de concentração dos Ensaios 6 e 7
- Fig. 5.16 - Curvas adimensionalizadas dos ensaios de tracadores e de um modelo matemático
- Fig. 5.17 - Curva da variação da concentração no tempo obtida por um modelo matemático (DISP3)
- Fig. 5.18 - Curva da variação da concentração resultante de uma injeção contínua
- Fig. 5.19 - Adaptação da curva integrada da variação da concentração do Ensaio 1 a um papel normal (lei de Gauss)
- Fig. 5.20 - Método gráfico de Beltaos e Day, aplicado aos ensaios 1 e 3
- Fig. 5.21 - Cálculo do tempo médio de percurso do Ensaio 1
- Fig. 5.22 - Método gráfico de Chatwin, aplicado aos Ensaios 1, 2 e 3
- Fig. 5.23 - Adaptação da curva integrada de variação da concentração do Ensaio 2 a um papel normal (lei de Gauss)
- Fig. 5.24 - Cálculo do tempo médio de percurso do Ensaio 2
- Fig. 5.25 - Adaptação da curva integrada da variação da concentração do Ensaio 3 a um papel normal (lei de Gauss)
- Fig. 5.26 - Análise inversa dos resultados obtidos para o Ensaio

Fig. 6.1 - Bacia hidrográfica do rio Maior na secção do Moinho do Nogueira

Fig. 6.2 - Carta hidrogeológica da região de Rio Maior

Fig. 6.3 - Superfície piezométrica anual média do aquífero de Rio Maior (malha do modelo KONIK3)

Fig. 6.4 - Áreas admitidas para depósito de cinzas (malha do modelo DISP4)

Fig. 6.5 - Curvas de concentração esperadas para os Cenários 1, 2 e 3 (Relação DT/DL = 0.10): Programa DISP4.FOR

Fig. 6.6 - Curvas de concentração esperadas para os Cenários 1, 2 e 3 (Relação DT/DL = 0.10): Programa KONIK3.FOR

Fig. 6.7 - Mancha de poluição esperada ao fim de 4000 dias

Fig. 6.8 - Mancha de poluição esperada ao fim de 20000 dias

Fig. 6.9 - Mancha de poluição esperada ao fim de 40000 dias

Fig. 6.10 - Perspectiva tridimensional da mancha de poluição esperada ao fim de 4000 dias

Fig. 6.11 - Perspectiva tridimensional da mancha de poluição esperada ao fim de 20000 dias

Fig. 6.12 - Perspectiva tridimensional da mancha de poluição esperada ao fim de 40000 dias

Fig. 6.13 - Curvas de concentração esperadas para os Cenários 1, 2 e 3 (Relação DT/DL = 0.30). Programa: DISP4.FOR

Fig. 6.14 - Curvas de concentração esperadas para os Cenários 1,
2 e 3 (Relação DT/DL = 0.30). Programa: KONIK3.FOR



INDICE DE ANEXOS

- Anexo 1 - Soluções analíticas das equações diferenciais do transporte de massa
- Anexo 2 - Exemplo de listagens de dados e de resultados dos programas testados
- Anexo 3 - Tabelas de diferenças finitas
- Anexo 4 - Análises químicas da água das Marinhas de Rio Maior e da Captação da Chainca (furo B5)

VOLUME 1

A DISPERSÃO DE POLUENTES

EM

AGUAS SUBTERRANEAS

- . Análise custo-eficácia de modelos matemáticos e ensaios de tracadores para a realização de estudos de impacto ambiental.

1. INTRODUÇÃO

1.1 - Tema do estudo

A água constituiu desde sempre o principal recurso natural de que o Homem dependeu. As grandes civilizações surgiram ao longo dos grandes rios. A distribuição irregular, no tempo e no espaço, dos recursos hídricos, impunha-se então como lei implacável da natureza. O Homem adaptou-se tanto quanto possível e tirou partido, por vezes de forma notável, dos extremos cíclicos dos escoamentos fluviais. Com o tempo procurou controlar e gerir os recursos hídricos. Construiu barragens e canais de transporte de água para abastecimento e irrigação.

O desenvolvimento crescente da economia mundial e do nível de vida das populações e a explosão demográfica, registada principalmente desde o século passado, impôs no entanto uma enorme pressão, por vezes perto da rotura, aos recursos hídricos tradicionalmente explorados. Os superficiais localizados em rios, lagos e albufeiras, por si só, deixaram de satisfazer as necessidades hídricas crescentes. Os recursos subterrâneos, de

captação mais difícil e dispendiosa, só muito recentemente começaram a ser explorados em larga escala. O seu volume, significativamente superior ao dos recursos superficiais, torna-os num ótimo manancial, uma vez conhecidas as leis hidrológicas que os regem. Grande número de regiões em todo o mundo abastece-se hoje maioritariamente com águas subterrâneas.

Tal como aconteceu com os recursos superficiais, começou a observar-se uma degradação progressiva da sua qualidade. De facto além dos rios, dos lagos e dos mares também o solo funcionou desde sempre como receptáculo da maioria dos efluentes líquidos e dos resíduos sólidos provenientes da actividade humana. Ao contrário do que se verificou com as águas superficiais, o problema da poluição das águas subterrâneas, contudo nunca preocupara significativamente os agentes de decisão, quer a nível central quer a nível regional e local. E isso talvez por desconhecimento dos perigos potenciais da poluição das águas subterrâneas. Este tipo de poluição é, no entanto, por várias razões, muito mais grave a médio e a longo prazo, que o das águas superficiais. Primeiro porque as velocidades do escoamento subterrâneo são extremamente menores que a do superficial. O que se passa à superfície num segundo demora, normalmente, um dia ou mais no meio subterrâneo. Assim, só se detecta o problema geralmente demasiado tarde, quando grande parte do meio subterrâneo se encontra já poluído. Segundo porque o meio poroso subterrâneo retém parcialmente os poluentes, libertando-os apenas de um modo muito lento, que dificulta a lavagem completa dos solos. Terceiro porque os volumes afectados são substancialmente maiores.

Tornava-se urgente conhecer os mecanismos que regem os escoamentos subterrâneos. Em relação aos aspectos de quantidade

deram-se já largos passos, sendo o estado actual dos conhecimentos muito vasto. Em relação à qualidade apenas há pouco mais de duas décadas se iniciaram estudos detalhados visando conhecer os fenómenos em causa.

Em Portugal (e excluindo estudos de caracterização hidrogeoquímica e do risco de vulnerabilidade de formações aquíferas interiores e costeiras) não havia qualquer estudo sistemático de engenharia civil que permitisse propor metodologias para quantificação da propagação de poluentes em águas subterrâneas.

O trabalho que ora se apresenta pretende de uma forma simples e, tanto quanto possível completa, iniciar esse estudo. O seu objectivo é a análise de metodologias, quer do ponto de vista matemático (através de modelos matemáticos e de programas de computador) quer do experimental (através de ensaios de traçadores em águas subterrâneas e da sua interpretação), que permitam de uma forma clara e eficaz responder a uma gama vasta de situações reais ou potenciais de poluição de águas subterrâneas em meios porosos, originadas pela indústria, pela agricultura, por efluentes de aglomerados populacionais ou por acidentes ambientais.

1.2 - Estudo desenvolvido

O estudo desenvolvido inclui, além desta Introdução, os seguintes capítulos:

- a) No Capítulo 2 apresenta-se uma descrição geral do problema da poluição das águas subterrâneas e das suas origens. Focam-se os aspectos físicos, químicos e biológicos a que

estão sujeitas as massas poluentes após a sua introdução no meio subterrâneo. Apresentam-se ainda algumas medidas para a protecção e o controle da qualidade das águas subterrâneas.

- b) No Capítulo 3 inicia-se o tratamento matemático do problema da dispersão de poluentes por uma panorâmica geral dos vários tipos de modelos existentes na engenharia dos recursos hídricos, e mais aprofundadamente na hidrologia das águas subterrâneas. Apresentam-se, introdutoriamente, os modelos matemáticos do escoamento subterrâneo, do transporte de massa e de gestão.
- c) No Capítulo 4 apresenta-se um dos temas fundamentais do trabalho: o estudo e desenvolvimento em computador das principais metodologias existentes para o tratamento da equação da convecção-dispersão (transporte de massa) em águas subterrâneas. As áreas cobertas pela pesquisa foram as seguintes: quantificação dos escoamentos subterrâneos uni, bi e tridimensionais, quantificação de condições de fronteira regionais, nomeadamente da recarga de aquíferos, quantificação do transporte de massa uni, bi e tridimensional e do equilíbrio geoquímico de águas subterrâneas e análise de programas para a visualização gráfica de resultados numéricos obtidos por modelos de cálculo automático. Sobre o último grupo elaborou-se um relatório, independente, FERREIRA e CRUZ 1985, que apresenta os programas estudados e facilita a utilização dos programas a qualquer pessoa que tenha acesso ao computador do LNEC.

Desenvolve-se no Capítulo 4 a comparação dos métodos e

dos programas analisados sobre a resolução do problema do transporte de massa. Os métodos estudados foram os seguintes: soluções analíticas, método das células de mistura, método das diferenças finitas, método das características, método do percurso aleatório, método dos elementos finitos e, introdutoriamente, o método dos elementos de fronteira. A análise custo-eficácia desenvolvida abrangeu entre outras as seguintes variáveis: precisão dos resultados, tempo de processamento (CPU), tempo de preparação dos dados e adaptabilidade dos programas a novas situações. A análise efectuada permitiu o traçado de dois quadros e de quatro Árvores de Decisão orientadores da selecção dos métodos e dos programas mais adequados à resolução de problemas neste domínio.

- d) No Capítulo 5 estudam-se e desenvolvem-se as técnicas experimentais necessárias à determinação da variável fundamental para estudos deste tipo: a dispersão longitudinal do meio poroso.

Foram estudadas várias técnicas de injeção e detecção de traçadores utilizando dois piezómetros e uma captação, totalmente penetrantes no aquífero, localizadas no aquífero de Rio Maior.

Os traçadores escolhidos foram o cloreto de sódio e a sulfurodamina B.

Analisaram-se vários métodos directos e inversos para a interpretação dos resultados obtidos e para a extrapolação do valor calculado da dispersão local para o da dispersão regional.

- e) A análise desenvolvida visou o domínio das técnicas

matemáticas e experimentais que permitem o estudo de problemas de poluição de águas subterrâneas em meios porosos. A aplicação destas técnicas é exemplificada no Capítulo 6 com o desenvolvimento de um estudo de impacto ambiental de poluição de águas subterrâneas. A selecção do caso de estudo, o aquífero de Rio Maior, baseou-se no interesse do problema (a exploração futura de um jazigo de lenhites a céu aberto, queima do carvão na central térmica projectada para Rio Maior, e posterior deposição das cinzas no próprio aquífero), na possibilidade de acesso a estudos desenvolvidos pelo LNEC para a região, e ainda na existência de infraestruturas locais de apoio à realização dos ensaios.

Calculou-se a evolução, esperada, da concentração de um poluente de referência na captação que abastece maioritariamente a cidade de Rio Maior. Utilizaram-se para esse estudo dois dos programas analisados no Capítulo 4. Previram-se vários cenários de gestão relacionados com a área de deposição das cinzas e com a impermeabilização subterrânea dos depósitos. A lixiviação das cinzas provocada pela infiltração superficial e pela recarga do aquífero originará uma deterioração progressiva da qualidade das águas subterrâneas. Analisam-se ainda as zonas do aquífero afectadas pelo projecto, de acordo com os cenários considerados.

f) No Capítulo 7 apresenta-se a síntese e as conclusões do estudo e referem-se as áreas de investigação que se pensa ser necessário desenvolver, para um melhor e mais completo domínio dos temas analisados.

2. ASPECTOS BÁSICOS DA POLUIÇÃO DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

2.1 - Introdução

Neste capítulo apresentam-se os aspectos básicos da poluição das águas subterrâneas. O objectivo, além da identificação do problema, é o de relacionar os aspectos analisados nos capítulos seguintes com algumas perspectivas provenientes de outras áreas da engenharia, nomeadamente das engenharias sanitária e ambiental.

2.2 - Definições

WALKER 1969 define poluição de águas subterrâneas como sendo uma diminuição da qualidade da água devida à existência de produtos químicos e de bactérias, ou de calor, num grau que, embora não chegue a constituir um perigo para a saúde pública, afecte prejudicialmente a qualidade da água para uso doméstico, industrial ou agrícola . O termo contaminação é definido como sendo uma diminuição da qualidade da água devida à existência de produtos químicos ou de bactérias num grau tal que constitua um perigo real para a saúde pública, por envenenamento ou propagação de doenças.

Adoptaram-se essas definições neste trabalho. Do ponto de vista da engenharia hidrogeológica, em especial do tratamento matemático da equação do transporte de massa, não se torna imperioso individualizar sempre os dois conceitos. Por esse motivo aparecerão por vezes referidos sem a preocupação de um

vínculo rigoroso às respectivas definições.

2.3 - Identificação do problema

Um material químico ou biológico quando introduzido no meio subterrâneo torna-se num possível agente poluidor das águas subterrâneas. Os materiais introduzidos à superfície, como por exemplo os fertilizantes agrícolas ou os efluentes provenientes do tratamento de águas residuais no solo, ficam primeiro sujeitos à percolação vertical pela zona não saturada do solo e só depois dão entrada na zona saturada. Materiais provenientes de outras actividades podem ser directamente introduzidos na zona saturada. Citam-se, por exemplo, os provenientes dos poços profundos para rejeição de efluentes industriais. Uma vez inseridos no sistema subterrâneo os materiais deslocam-se em suspensão ou em dissolução arrastados pelo escoamento. A rede de fluxo é influenciada pelas características hidrogeológicas regionais e pode sê-lo também pela actividade do homem, por exemplo por exploração ou por recarga de aquíferos, ou ainda por actividades mineiras a céu aberto.

Em FERREIRA 1983a apresenta-se uma visualização do problema da contaminação das águas subterrâneas.

O grau de atenuação do efeito poluente dos materiais englobados no sistema hídrico subterrâneo, após a sua entrada no meio subterrâneo, depende do tipo de contaminante, do tipo de aquífero e do escoamento. Os efeitos que actuam como mecanismos de retenção e atenuação da poluição podem ser divididos em três grupos:

a) Efeitos físicos: convecção, dispersão, difusão, filtração e

decréscimo da actividade radioactiva.

b) Efeitos químicos: precipitação, oxidação - redução, permuta iónica e adsorção.

c) Efeitos biológicos: oxidação - redução e outras transformações.

Não se pode fixar à priori um limite espacial para o desaparecimento dos efeitos nocivos dos poluentes biológicos ou químicos injectados no solo. Esse limite poderá ser calculado pelos modelos matemáticos descritos nos capítulos seguintes. Para uma primeira quantificação das distâncias de contaminação cita-se um esquema da Organização Mundial de Saúde (WAGNER e LANDIX 1960). Os valores, que devem ser tomados apenas como ordem de grandeza, referem-se à zona afectada por poluições de origem bacteriológica e de origem química, provenientes do lançamento de excreta no solo, que atingem o nível freático do aquífero. São aproximadamente iguais a 15 m e a 100 m respectivamente.

2.4 - Aspectos físicos, químicos e biológicos da contaminação das águas subterrâneas

2.4.1 - Generalidades

Como se indicou existem vários mecanismos que influenciam as partículas poluentes assim que atingem o meio subterrâneo.

Do ponto de vista físico poder-se-ão distinguir fundamentalmente duas situações: deslocação do poluente na zona não-saturada e deslocação do poluente na zona saturada do solo.

O movimento através da zona não-saturada é essencialmente

vertical. São as seguintes as mais importantes propriedades hidráulicas que influenciam o movimento das partículas na zona não-saturada do solo:

- a) Condutividade hidráulica (também denominada permeabilidade): maiores condutividades implicam maiores velocidades de percolação.
- b) Teor de humidade do solo: em geral quanto menor for o teor de humidade maior é a rapidez do movimento descendente do poluente. As pressões hídricas negativas (sucções) serão maiores e tenderão a uniformizar mais rapidamente qualquer diferença de teor de humidade do solo.
- c) Percentagem de poros em intercomunicação: quanto maior for essa percentagem mais rapidamente se poderá deslocar o poluente.

Na zona saturada o movimento é essencialmente horizontal. Os estudos que se desenvolvem nos Capítulos 4, 5 e 6 analisam a propagação de poluentes na zona saturada do solo.

2.4.2 - Aspectos físicos

De entre os vários fenómenos físicos a que fica sujeita uma partícula poluente no meio subterrâneo referem-se os seguintes:

- a) Convecção: deslocação em suspensão ou diluição juntamente com a água subterrânea. Depende fundamentalmente da condutividade hidráulica do solo, da cedência específica e do gradiente hidráulico regional.
- b) Dispersão mecânica: uma vez que os canalículos por onde as

partículas se deslocam, no meio poroso subterrâneo, não são paralelos, Fig. 2.1, verifica-se com o escoamento uma dispersão longitudinal e transversal das partículas pelo aquífero. A dispersão mecânica depende do tipo de solo. Como primeira aproximação indica-se que o ângulo constituído pelo percurso das partículas poluentes laterais com a direcção média do escoamento oscila entre 3 e 6 graus.

c) Difusão molecular: devido à agitação browniana das partículas poluentes observa-se uma mistura entre as águas de diferentes densidades do aquífero, poluídas e não poluídas. Este fenómeno, importante na zona não saturada, conduz a uma mistura isotrópica das águas em relação ao escoamento.

Os fenómenos descritos originam a propagação do poluente pelo aquífero.

A variável que se estuda nos capítulos seguintes, denominada dispersão hidrodinâmica ou mais simplesmente apenas dispersão, corresponde à soma do valor da dispersão mecânica com o da difusão molecular. O valor desta última variável é muito reduzido e de pequeno significado prático para os estudos que se desenvolvem.

2.4.3 - Aspectos químicos

Segundo FAO 1979 os principais aspectos químicos que influenciam as partículas poluentes no meio subterrâneo são os seguintes:

a) Reacção de ácidos e bases: a composição das águas subterrâneas é influenciada pelas reacções de ácidos e

bases. O ácido mais importante existente no meio subterrâneo é o H_2CO_3 , formado pela solução de CO_2 em água. As bases mais comuns nas águas subterrâneas são os hidrogenocarbonatos (HCO_3^-) e os carbonatos (CO_3^{--}), devido à larga disseminação de minerais carbonatados, como por exemplo a calcite.

- b) Precipitação-solução: a solubilidade de um composto na água é controlada pela temperatura, pressão, concentração do ião hidrogénio (pH), potencial redox (rH), presença de matéria orgânica, tipo de mineral e concentração relativa de outras substâncias existentes na solução.
- c) Oxidação-redução: o potencial redox (rH) de uma solução é a medida da intensidade relativa das condições de oxidação ou redução da solução. Estas reacções são devidas à permuta de electrões dos compostos existentes na solução líquida.
- d) Volatibilidade: poderá ser eventualmente importante, embora a maioria dos poluentes existentes nas águas subterrâneas não sejam voláteis.

2.4.4 - Aspectos biológicos

As actividades biológicas originam várias situações que influenciam a qualidade das águas subterrâneas. Em primeiro lugar existe o risco de transmissão de organismos patogénicos dos efluentes para o solo e para as águas subterrâneas e finalmente para o homem. Os microrganismos influenciam as reacções de oxidação-redução da matéria orgânica do solo.

A população de microrganismos está concentrada, principalmente nos primeiros 15 cm do solo, os mais ricos em matéria orgânica. O seu número decresce rapidamente em profundidade.

A larga experiência actual no uso de fossas sépticas mostra que o solo actua como protecção, embora muitas vezes apenas parcial, das águas subterrâneas. Biologicamente esta protecção é fornecida pelos organismos que vivem no solo como as bactérias, as algas, os fungos, os protozoários e em geral as plantas. Cada um destes grupos contribui para a redução da poluição orgânica que alcança o solo. No entanto para que este filtro biológico possa actuar convenientemente deve existir em quantidade suficiente oxigénio e luz solar.

A mais séria ameaça ao filtro biológico é constituída pela aplicação ao solo de substâncias tóxicas, tais como pesticidas, materiais pesados e compostos fenólicos. Os excreta contidos nas águas residuais não tratadas são a fonte principal de bactérias patogénicas e de vírus contaminantes da água. Tradicionalmente a metodologia empregada para a detecção de bactérias patogénicas tem sido a análise da presença de microrganismos indicadores. O teste de detecção de bactérias coliformes encontra-se institucionalizado como padrão da qualidade orgânica das águas e como padrão de salubridade, embora os seus resultados possam não corresponder apenas ao das bactérias provenientes dos excreta uma vez que se podem desenvolver também fora do homem.

A maioria dos estudos indica uma rápida mortalidade dos coliformes e de outras bactérias patogénicas que atingem o solo. Por este motivo a poluição orgânica das águas subterrâneas, a longo prazo pode ser considerada, em condições normais, como mínima.

No caso dos vírus não se conhece nenhum teste que venha a ser institucionalizado a curto prazo. Sabe-se ainda muito pouco sobre a sobrevivência dos vírus no meio subterrâneo. A maioria das experiências laboratoriais, já efectuada, indica no entanto que os vírus são removidos das águas subterrâneas por retenção e por adsorção ao fim de distâncias relativamente curtas.

2.5 - Medidas para protecção e controle da qualidade das águas subterrâneas

O desenvolvimento deste tema não está incluído nos objectivos do trabalho que ora se apresenta. Ir-se-á apenas indicar de uma forma introdutória as acções usuais, tendentes a minorar o problema. O tema vem desenvolvido com profundidade em várias publicações, como por exemplo WILLIAMS 1975, FAO 1979, EVERETT 1980, CHERRY 1983, LNEC 1983, SHAREFKIN et al. 1984 e LNEC 1986.

Antes de se iniciar a construção de novos locais para o tratamento de efluentes no solo ou para reservatórios de efluentes líquidos, dever-se-á ter o cuidado de realizar um estudo hidrogeológico da área adjacente, mais ou menos aprofundado conforme os riscos de poluição esperados, a fim de se verificar a possibilidade de contaminação de áreas de captação situadas a jusante. Em FERREIRA 1983a, apresenta-se um método prático para a delimitação de zonas de protecção de captações de águas subterrâneas.

No caso de se observar a contaminação de uma parte do aquífero as medidas de gestão da qualidade das águas subterrâneas a adoptar deverão contribuir para a remoção ou para o isolamento do poluente. É importante ter em conta o efeito que as bombagens

a efectuar no aquífero terão na propagação do poluente. Uma bombagem faz variar o nível piezométrico do aquífero e portanto o gradiente hidráulico, provocando um aumento ou diminuição da velocidade de propagação da água contaminada.

Indicam-se seguidamente algumas técnicas adequadas ao controle da percolação das águas subterrâneas contaminadas:

a) Modificação do regime de bombagem: a contaminação de um aquífero pode ser retardada pela diminuição da exploração das suas reservas hídricas. Este facto é particularmente importante no caso da intrusão marinha em aquíferos costeiros.

Em casos de contaminação isolados poder-se-á eventualmente, como último recurso, mudar a localização das captações, evitando o seu inquinamento.

b) Barreiras de pressão: uma linha de poços de recarga do aquífero produz uma barreira de altas pressões que poderá isolar o aquífero da zona contaminada. Embora este processo seja teoricamente simples envolve avultados investimentos e custos de operação elevados, além de implicar a disponibilidade de grandes volumes de água a injectar.

c) Barreiras de sub-pressão: este tipo de barreira é o inverso do tipo anterior. Uma linha de captações para extracção de água é usada para criar uma sub-pressão entre a zona contaminada e o aquífero. Neste caso bombeia-se uma mistura de água natural e de água contaminada, que deverá ser tratada ou armazenada em local adequado. Embora parte da água contaminada seja extraída, a verdadeira barreira ao

avanco da contaminação pelo aquífero é formada pela linha de sub-pressão. Este método envolvendo custos elevados tem no entanto, a vantagem de não necessitar da existência de reservas hídricas extra. Note-se que parte do volume hídrico do aquífero, ainda não contaminado, será perdido se não for tratado após a extracção, uma vez que vem misturado com água contaminada.

- d) Intercepção e extracção: no caso de pequenas fontes de contaminação a água poluída poderá ser extraída parcialmente do aquífero por captações efectuadas para o efeito.
- e) Barreiras subterrâneas: o objectivo desta técnica é o isolamento da área contaminada do aquífero por barreiras físicas subterrâneas, como por exemplo betuminosas, de plástico, de betão, etc. Os custos poderão ser eventualmente muito elevados e a garantia de estanquicidade não é em geral conseguida.
- f) Processos químicos: este tipo de técnica envolve uma variedade de processos entre os quais se incluem a oxidação, a correcção do pH, a desinfecção e a coagulação química. A coagulação química é usada para aumentar a eficiência dos processos de sedimentação e de filtração.

2.6 - Conclusões

Procurando concluir a introdução efectuada sobre a poluição de águas subterrâneas poder-se-á dizer o seguinte:

- a) É possível quantificar com modelos matemáticos adequados, com

o rigor desejado, os volumes de águas residuais poluídas ou contaminadas, que atravessam o solo e que atingem as reservas hídricas subterrâneas (v. Capítulo 6).

- b) Os volumes acima referidos são geralmente significativos e os riscos de poluição química e de contaminação bacteriológica das águas subterrâneas podem ser muito importantes.
- c) Na zona não saturada do solo a percolação das águas residuais faz-se na vertical. Quanto mais profundo for o nível freático maior protecção haverá para as reservas hídricas subterrâneas.
- d) Na zona saturada do solo o escoamento e o arraste dos poluentes faz-se praticamente na horizontal e depende da condutividade hidráulica do solo e do gradiente hidráulico regional.
- e) O tipo do solo é decisivo para a protecção das águas subterrâneas. Solos mais arenosos e com capacidades de adsorção menores aumentam os riscos de contaminação.
- f) O movimento das águas subterrâneas efectua-se muito lentamente. Tal facto dificulta a previsão e o controle do problema da poluição.
- g) Os materiais poluentes transportados no escoamento subterrâneo estão sujeitos a processos físicos, químicos e biológicos de atenuação.
- h) O principal perigo de deterioração da qualidade das águas subterrâneas relaciona-se com a saúde pública. Do ponto de vista económico a poluição poderá acarretar prejuízos graves à agricultura e à indústria.

i) A mais importante medida a tomar na prevenção da poluição das águas subterrâneas é o controle rigoroso dos volumes de efluentes rejeitados no solo e da eficiência do tratamento sanitário empregado.

3. ESTADO ACTUAL DOS CONHECIMENTOS NA MODELAÇÃO MATEMÁTICA DAS ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

3.1 - Introdução

A revisão bibliográfica que se apresenta neste capítulo, foi efectuada na Universidade Técnica de Berlim (TUB) e no Laboratório Nacional de Engenharia Civil (LNEC) e incidiu sobre as publicações científicas existentes nessa universidade e no LNEC e ainda no material recolhido em diversos cursos e reuniões internacionais, nomeadamente no Curso Internacional sobre Geoquímica e Contaminação de Águas Subterrâneas, realizado na Universidade Autónoma de Madrid, em 1981.

Dessa análise resultou um ficheiro bibliográfico com cerca de 350 fichas comentadas e a apresentação de vários temas de interesse para investigação. Dois desses temas são desenvolvidos nos Capítulos 4 e 5. Os restantes são apresentados no Capítulo 7.

A fim de permitir uma melhor visualização da área abrangida pela revisão bibliográfica que se efectuou, completa-se este capítulo com uma caracterização dos vários tipos de modelos empregados na engenharia de recursos hídricos e com uma breve história da hidrologia das águas subterrâneas.

3.2 - Tipos de modelos empregados na engenharia de recursos hídricos

ACKOFF e SASIENI 1971 definem modelo como sendo uma representação da realidade.

É em geral possível construir-se modelos mais simples que a realidade. Os modelos são usados para prever e explicar fenómenos diversos, com o grau de confiança desejado. A simplicidade que apresentam, em relação à realidade, deve-se ao facto de um pequeno número de variáveis explicar a maior parte de um fenómeno, embora seja necessário um grande número para o descrever com exactidão.

Os modelos podem ser divididos em três grandes grupos: os icónicos, os analógicos e os simbólicos.

Os modelos icónicos representam a realidade através das suas propriedades mais relevantes e em geral a uma escala diferente. Esses modelos assemelham-se assim ao protótipo real que representam mas diferem dele no tamanho. Como exemplo referem-se os modelos reduzidos de órgãos de descarga de barragens (LEMOS E FERREIRA 1978).

Os modelos analógicos utilizam um conjunto de propriedades para representarem outro conjunto de propriedades. Refere-se a utilização de sistemas eléctricos para representar sistemas de abastecimento de água (URISH 1981). Neste caso tira-se partido da semelhança entre as leis eléctricas e hidráulicas que regem os dois fenómenos. Para o estudo do comportamento e visualização de aquíferos utilizam-se também, desde há várias décadas, modelos analógicos. Salientam-se os modelos analógicos da membrana, os de tipo electrolítico e os das células de Hele-Shaw, (WILLIAMS 1982). Estas últimas são constituídas por uma câmara de muito pequena espessura onde está contido um líquido. A câmara é limitada por dois reservatórios. Pode-se assim controlar as

alturas piezométricas do escoamento a montante e a jusante da câmara. A superfície livre do líquido, na câmara, é equivalente à de um escoamento livre num meio poroso, sujeito a alturas piezométricas equivalentes, a montante e a jusante.

Os dois tipos de modelos referidos, os icónicos e os analógicos, com os quais se pode representar fisicamente a realidade, são usualmente designados modelos físicos.

Os modelos simbólicos constituem o terceiro grupo. Usam letras, números ou outro tipo de símbolos para representar variáveis e as suas relações. São em geral, de fácil manipulação experimental. Os modelos simbólicos tomam a forma de relações matemáticas, como por exemplo equações, que reflectem a estrutura da realidade que representam. Por essa razão são usualmente designados modelos matemáticos ou numéricos. É este o tipo de modelo que será estudado em pormenor neste trabalho.

Nos problemas estudados as equações matemáticas que descrevem os fenómenos são equações diferenciais. Dada a dificuldade de resolução deste tipo de equações torna-se necessário geralmente recorrer a métodos de resolução sofisticados, denominados métodos diferenciais, de que são exemplo o método das diferenças finitas e o método dos elementos finitos. Para a aplicação destes métodos o domínio em estudo é discretizado em células ou em elementos de área reduzida. As variáveis a determinar são calculadas apenas em pontos previamente escolhidos, designados por nós. Posteriormente, e sabido o valor que as variáveis em estudo assumem nos nós, é possível determinar o seu valor em qualquer outro ponto de interesse do domínio, através de técnicas de interpolação mais ou menos sofisticadas, de acordo com o grau de precisão desejado. Estes modelos matemáticos são denominados modelos numéricos

diferenciais.

No caso de ser possível determinar uma solução matemática do fenómeno em estudo que não contenha derivadas parciais torna-se possível determinar directamente o valor das variáveis em qualquer ponto do domínio. Um modelo matemático deste tipo domina-se modelo analítico. As situações para as quais se conhecem soluções analíticas são, no entanto, situações muito simples e não traduzem por isso, em geral, convenientemente a realidade.

Existe ainda outro tipo de modelos, os modelos do tipo agregado ou "black-box", que procuram traduzir os fenómenos físicos por leis empíricas ou semi-empíricas, que se baseiam na experiência real ou na experimentação física.

No Capítulo 4 estudam-se vários modelos numéricos de transporte de poluentes em águas subterrâneas. Os resultados são comparados com os de modelos analíticos.

3.3 - Perspectiva histórica da hidrologia das águas subterrâneas

O início do estudo científico da hidrologia das águas subterrâneas remonta ao século XVII com os trabalhos de Mariotte. Esse cientista mostrou, em trabalhos efectuados na região de Paris, que a infiltração natural da água no solo é proporcional à quantidade de precipitação caída, e que a constância do volume descarregado por nascente se deve à existência de extensos reservatórios subterrâneos.

No século passado Darcy demonstrou, em trabalhos efectuados para a municipalidade de Dijon, que a velocidade da água subterrânea é proporcional ao gradiente hidráulico da rede de

fluxo local. Darcy definiu ainda que a constante de proporcionalidade dessa relação é um parâmetro característico do meio poroso, a condutividade hidráulica ou permeabilidade.

Os trabalhos de investigação básica e aplicada apenas começaram a ser mais frequentes no século XX. Merecem especial referencia os de Thiem, Theis, Dupuit, Hantush e Bulton, todos relacionados com a modificação do regime de escoamento natural de aquíferos, devido a extracções de águas subterrâneas por captacões. Os trabalhos diferem no que se refere ao tipo de aquífero e ao regime em que se verifica o movimento das águas subterrâneas.

Presentemente, pode-se dizer que o estudo das águas subterrâneas, no que se refere à sua quantificação por modelos, se encontra numa fase avançada de investigação. Distinguem-se dois tipos de problemas nesta área: (1) os directos, relacionados com a determinação da resposta do aquífero face às interferências exteriores, por exemplo captacões de águas subterrâneas, conhecidos os parâmetros característicos do aquífero (CORREIA 1981) e (2) os denominados por problema inverso, onde se pretende determinar os parâmetros do aquífero conhecida a sua resposta a solicitações exteriores, como por exemplo em ensaios de bombagem (HENRIQUES 1980).

Os trabalhos relacionados com a qualidade das águas subterrâneas e com a sua modelação matemática estão numa fase de investigação mais atrasada que os da quantidade.

Do ponto de vista da engenharia civil, em Portugal, a modelação matemática das águas subterrâneas apenas se iniciou na década passada.

3.4 - Modelação matemática das águas subterrâneas

3.4.1 - Generalidades

Em 1980 foi publicada uma obra fundamental para o estudo da modelação matemática das águas subterrâneas, BACHMAT et al. 1980. Descrevem-se nessa publicação cerca de 250 modelos matemáticos de águas subterrâneas número esse que os autores consideram corresponder a 80% do total de modelos desenvolvidos, nessa data, em todo o mundo sobre a matéria.

Nessa obra os modelos matemáticos de águas subterrâneas são divididos em quatro grandes grupos: os de previsão, os de gestão, os de identificação de parâmetros e os de manipulação de dados. O primeiro grupo é constituído pelos modelos que simulam o comportamento do sistema hídrico subterrâneo quando sujeito a solicitações exteriores. O segundo grupo engloba os modelos de previsão hidrogeológica, que contêm explicitamente processos de gestão. O terceiro grupo é composto por modelos que determinam os parâmetros de entrada necessários aos dois grupos anteriores. Finalmente o quarto grupo é constituído por processos de manipulação dos dados necessários aos modelos anteriormente referidos ou ao tratamento dos resultados desses modelos.

Os modelos de previsão podem ser divididos em quatro sub-grupos: os de escoamento, os de assentamento de terrenos, os de transporte de massa e os de transporte de calor.

Os modelos de escoamento utilizam informações relacionadas com os parâmetros do aquífero, com as condições de fronteira e com as influências exteriores. Resolvem as equações matemáticas necessárias à determinação dos aspectos quantitativos do movimento das águas subterrâneas. Como exemplo citam-se os casos

de rebaixamentos piezométricos motivados por captacões. Este tipo de modelo é o mais utilizado e o que se encontra melhor estudado.

Os modelos de assentamento tratam, de problemas relacionados com a subsidência de terrenos, originados por extracções de águas subterrâneas.

Os modelos de transporte de massa, fundamentais para o presente estudo, tratam dos problemas da qualidade das águas subterrâneas. São usados para prever a concentração de poluentes em aquíferos. Nos poluentes incluem-se entre outros os radioactivos, os efluentes industriais e biológicos, os lixiviados de depósitos de resíduos sólidos e os provenientes de áreas agrícolas. Podem simular ainda problemas de intrusão de água marinha em regiões costeiras. Para representar todos esses fenómenos, extremamente complexos, os modelos incorporam necessariamente aproximações de várias ordens. Este tipo de modelos é mais complicado que os de escoamento. Podem ser divididos em dois grupos: os que estudam o transporte de massa de poluentes não sujeitos a reacções com o solo ou com outros componentes da água subterrânea, designados conservativos e os que estudam as reacções de elementos não - conservativos.

Não será feita, nesta revisão bibliográfica, referência aos modelos desenvolvidos para o cálculo do transporte de calor. São principalmente utilizados para estudos de aproveitamento do potencial geotérmico ou do impacto ambiental de centrais térmicas em zonas estuárias e costeiras.

Os modelos de gestão são desenvolvidos para permitir tomadas de decisão de acordo com os objectivos e as restrições de um projecto em estudo. Os objectivos podem ser, por exemplo, a maximização de benefícios económicos ou do assegurar de

parâmetros de qualidade da água. Os modelos de gestão englobam técnicas de simulação do escoamento e do transporte e técnicas de optimização. Em oposição aos modelos simples de simulação os de simulação-gestão incluem também os aspectos económicos, tecnológicos, políticos e institucionais. Uma das maiores dificuldades de aplicação desses modelos reside na quantificação de alguns dos factores indicados.

Finalmente os modelos referentes à identificação de parâmetros e à manipulação de dados permitem calcular respectivamente alguns parâmetros de aquíferos, usando dados de ensaios de bombagem, e ajuizar as necessidades e volumes de dados a recolher para a fase de simulação do escoamento e do transporte de massa.

3.4.2 - Modelos de escoamento

A modelação matemática de águas subterrâneas começou por se dedicar exclusivamente aos seus aspectos quantitativos, nomeadamente para a determinação de alturas piezométricas, velocidades e caudais de escoamentos subterrâneos, (que servem de dados de entrada para os problemas do transporte de massa). Existem actualmente numerosas publicações sobre este assunto.

A equação diferencial que descreve o escoamento subterrâneo, a três dimensões e em regime variável, é, segundo BEAR 1972, a seguinte:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + R = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (3.1)$$

onde

x_i = coordenadas cartesianas

h = altura piezométrica

K_{ij} = componente do tensor da condutividade hidráulica

R = volume hídrico extraído ou injectado no aquífero, por unidade de volume e de tempo

S_s = coeficiente de armazenamento específico

t = tempo

As dimensões da espessura dos aquíferos, normalmente diminutas em relação às outras duas dimensões, permitem, em geral, a integração da equação 3.1 na dimensão vertical, utilizando as aproximações de Dupuit - Forchheimer. Segundo BEAR 1979, resulta a seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(T_{ij} \frac{\partial \bar{h}}{\partial x_j} \right) + Q = S \frac{\partial \bar{h}}{\partial t} \quad i=1,2 \quad (3.2)$$

onde

\bar{h} = altura piezométrica média

T_{ij} = componente do tensor transmissividade, $T_{ij}=K_{ij}*b$ onde b é a espessura saturada do aquífero

Q = volume hídrico extraído ou injectado na aquífero por unidade de área e de tempo

S = coeficiente de armazenamento, $S = S_s*b$

A resolução destas equações diferenciais, necessária como se verá em 4.3 para a resolução do problema do transporte de massa, pode ser efectuada por vários métodos diferenciais. Os mais conhecidos são o das diferenças finitas (MDF), apresentado por exemplo em BENNETT 1976, e o dos elementos finitos (MEF), apresentados por exemplo em ZIENKIEWICZ 1977.

Referem-se PRICKETT e LONQUIST 1971 e TRESCOTT et al. 1976, como exemplos de aplicação do MDF a problemas de escoamentos subterrâneos. Nessas publicações apresentam-se modelos de fácil aplicação prática, que foram testados com êxito em muitas situações reais. Os modelos destinam-se à simulação de aquíferos porosos, livres, confinados e mistos. Admitem praticamente todas as condições de fronteiras reais, incluindo a evapotranspiração de plantas e solo e a recarga pluvial de aquíferos. Esses modelos foram adaptados ao computador do LNEC, no âmbito do presente estudo.

GUPTA et al. 1975, TRESCOTT 1975 e GUPTA et al. 1985 generalizaram os modelos de escoamento a situações tridimensionais.

WILSON et al. 1979 desenvolvem um modelo tridimensional de elementos finitos que admite recargas provenientes de aquíferos adjacentes, bombagem e recarga por poços, entradas e saídas

hídricas laterais, infiltração induzida e várias outras condições de fronteira. O modelo admite os regimes de escoamento permanente e variável. Este modelo também foi adaptado ao computador do LNEC.

Tem havido larga discussão nos meios científicos sobre as vantagens e inconvenientes da utilização dos vários métodos matemáticos referidos. LÜHR 1972, efectua uma análise comparativa de vários métodos de simulação de escoamentos subterrâneos em regime permanente. Chega á conclusão que o MEF é mais vantajoso que o MDF no caso de aquíferos livres analisados no plano vertical. Em todos os outros casos estudados o MDF é, segundo o autor, preferível. Largo número de outros investigadores salientam, contudo, que a facilidade de tratamento das condições de fronteira e a precisão dos resultados são vantagens decisivas a favor do MEF.

Mais recentemente foi desenvolvido um novo método para a resolução de equações diferenciais, que foi denominado método integral dos elementos de fronteira (MIF), (em inglês boundary integral element method) ou mais simplesmente método dos elementos de fronteira. Para uma introdução a este método, que será desenvolvido no Capítulo 4, indica-se BREBBIA 1978, PORTELA e ROMÃOZINHO 1979, BREBBIA e WALKER 1980 e VEIGA 1985. O MIF é caracterizado por aplicar equações integrais que descrevem nas fronteiras do domínio exactamente o que ocorre no seu interior. Em vez de se discretizar o domínio divide-se a fronteira em elementos, os elementos de fronteira.

Sinteticamente poder-se-ão descrever do seguinte modo as principais vantagens do MIF: (1) facilidade de preparação de dados, sendo apenas necessário fornecer os referentes às

fronteiras e às propriedades regionais; (2) necessidade reduzida de capacidade de armazenamento, permitindo o emprego de computadores de pequena capacidade de memória; (3) redução de problemas tridimensionais a bidimensionais ou mesmo a unidimensionais, pelo recurso às hipóteses de Dupuit-Forschheimer.

Este método foi aplicado a problemas de escoamentos subterrâneos em várias estudos, por exemplo LIGGETT 1977, LIU e LIGGETT 1979, LENNON et al. 1979, LENNON et al. 1980, GOMEZ et al. 1980, LAPE et al. 1980, LAPE et al. 1981 e LIU et al. 1981.

LIGGETT 1977, que calcula a localização da superfície livre de escoamentos em meios porosos em regime permanente e variável, indica como base matemática do MIF a segunda identidade de Green:

$$\int_R (U \nabla^2 V - V \nabla^2 U) dA = \int_S \left(U \frac{\partial V}{\partial n} - V \frac{\partial U}{\partial n} \right) dS \quad (3.3)$$

onde

R = região

S = fronteira

n = vector normal

U = função em estudo

V = função que satisfaz a equação de Laplace:

em problemas bidimensionais: $V = \ln r$; em problemas tridimensionais: $V = 1/r$

r = distância de um ponto arbitrário do domínio a um ponto da fronteira

Deve salientar-se que o MIF apresenta desvantagens de cálculo na resolução de problemas de águas subterrâneas com condutividades hidráulicas variáveis. Uma das soluções para essas dificuldades consiste na divisão do domínio em regiões, de modo a que a condutividade hidráulica seja considerada constante dentro de cada uma delas. Criam-se para esse fim fronteiras artificiais auxiliares.

3.4.3 - Modelos de transporte de massa

Este tema será estudado de forma desenvolvida no Capítulo 4. Neste ponto a apresentação será feita apenas de forma introdutória.

Como foi anteriormente referido, a modelação da qualidade das águas subterrâneas encontra-se numa fase de desenvolvimento menos avançado que a dos modelos de escoamento. No entanto, vários estudos aprofundam já este assunto de modo a tornar possível a sua aplicação a casos reais. As situações estudadas incluem entre outras, problemas de intrusão marinha em aquíferos costeiros (caso de Long Island, Nova York, citado em PINDER 1973), problemas do transporte de resíduos químicos e biológicos, depositados no sub-solo ou à superfície, provenientes da indústria e de aglomerados urbanos (caso de Love Canal, Niagara

Falls, referido em LLAMAS e CUSTODIO 1980 e de aterros sanitários de Madrid, URUA, HERRÁEZ e LLAMAS 1981), de resíduos de experiências laboratoriais de investigação militar (caso de Rocky Mountain Arsenal, Colorado, referido em KONIKOW 1977) e ainda de resíduos agrícolas (fertilizantes) (referido em KONIKOW e BREDEHJEFT 1974 e JAKES e al. 1981).

A equação bidimensional da convecção-dispersão que traduz o transporte de massa para uma dada espécie química foi derivada por REDDEL e SUNADA 1970, BEAR 1972 e BREDEHJEFT e PINDER 1973. Pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (C V_i) - \frac{C'w}{nb} + \sum_{k=1}^S R_k \quad i,j=1,2 \quad (3.4)$$

onde

C = concentração da espécie dissolvida

D_{ij} = tensor dispersão

b = espessura saturada do aquífero

C'w/nb = função de concentração do poluente numa fonte ou sumidouro

R_k = taxa de produção do poluente na reacção k

V_i = velocidade intersticial

n = porosidade

O primeiro termo do segundo membro da equação 3.4 representa a variação da concentração devido à dispersão. O segundo termo descreve os efeitos do transporte convectivo. O terceiro termo representa o efeito de fontes ou sumidouros. O quarto termo descreve reacções químicas várias. Deve ser escrito explicitamente para todas as reacções que afectam o poluente ou a espécie química em estudo. Este termo pode ser analisado por modelos de equilíbrio químico de águas subterrâneas como por exemplo pelo programa WATEQ.FJR, adaptado ao computador do LNEC no âmbito deste estudo. O termo deve ser eliminado da equação no caso do poluente ser do tipo conservativo.

O coeficiente de dispersão, já apresentado em 2.4.2, está relacionado com a velocidade intersticial do escoamento subterrâneo e com a natureza do aquífero, segundo a equação de SCHEIDEGGER 1961:

$$D_{ij} = \alpha_{ijmn} \frac{V_m V_n}{|V|} \quad (3.5)$$

onde

α_{ijmn} = dispersividade do aquífero (L), (variável característica do meio poroso)

V_m e V_n = componentes da velocidade intersticial do escoamento nas direcções m e n, (L/T)

$|V|$ = módulo da velocidade, (L/T).

SCHEIDEGGER 1961 mostra que para um aquífero isotrópico, o tensor dispersividade pode ser definido em função de duas constantes, as dispersividades longitudinal e transversal do meio poroso, α_1 e α_2 respectivamente. Estas dispersividades estão relacionadas com os coeficientes de dispersão longitudinal (DL) e transversal (DT) do aquífero por:

$$\begin{aligned} D_L &= \alpha_1 |V| \\ D_T &= \alpha_2 |V| \end{aligned} \quad (3.6)$$

Substituindo estas igualdades na equação 3.5 e eliminando os termos com valores nulos, as componentes do coeficiente de dispersão para escoamentos bidimensionais em aquíferos isotrópicos podem ser escritas do seguinte modo:

$$D_{xx} = D_L \frac{(V_x)^2}{|V|^2} + D_T \frac{(V_y)^2}{|V|^2} \quad (3.7)$$

$$D_{yy} = D_T \frac{(V_x)^2}{|V|^2} + D_L \frac{(V_y)^2}{|V|^2} \quad (3.8)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (D_L - D_T) \frac{V_x V_y}{|V|^2} \quad (3.9)$$

O estudo dos modelos de transporte de massa e a quantificação da dispersão será feita, em pormenor, nos Capítulos 4, 5 e 6.

3.4.4 - Modelos de gestão

Procurando aumentar a aplicabilidade dos modelos de escoamento e de transporte alguns investigadores estudaram a sua associação a métodos de optimização, nomeadamente à programação linear. Utilizam um método numérico, para a resolução dos problemas de escoamento e do transporte de poluentes, acoplado a modelos de optimização. Os modelos utilizam geralmente a programação linear para a formulação do problema da optimização de uma função objectivo real, sujeita às restrições do problema de gestão em estudo. As variáveis do modelo de optimização podem ser, por exemplo, as taxas de injeção de poluentes em aquíferos, em função dos caudais de entrada e das concentrações dos poluentes, ou a localização de captações de água e depósitos de resíduos sólidos ou de efluentes líquidos. Os objectivos poderão ser a maximização da qualidade da água captada ou o grau de tratamento que os efluentes líquidos deverão sofrer para se poder garantir a qualidade de água desejada.

FUTAGAMI et al. 1976 associaram o MEF à programação linear para o controle da poluição da água. Os resultados do método são comparados com os de soluções analíticas baseadas em séries de Fourier. Segundo os autores a comparação é bem sucedida. Os autores indicam ainda que se podem desenvolver modelos de MEF e de programação não-linear ou de programação inteira. Desenvolveram também um modelo para regimes variáveis.

ELANGO e RAJ 1977 discutem a associação do MEF à programação linear, em problemas de controle da poluição hídrica. Mais tarde, em ELANGO e RAJ 1978, apresentam um problema de determinação de caudais óptimos de bombagem associando o MEF à programação linear.

WILLIS 1979 apresenta um modelo de planeamento dinâmico para a gestão óptima da qualidade da água subterrânea de um sistema regional de aquíferos. O sistema subterrâneo é simultaneamente gerido como fonte de recursos hídricos e como reservatório de águas residuais. O MEF é usado para transformar as equações do escoamento e do transporte de massa do sistema hídrico em sistemas de equações diferenciais, que entram como restrições nas equações do modelo de planeamento. O modelo permite a determinação de (1) os horários de bombagem e de rejeição de efluentes óptimos (taxas e localizações), para satisfazer um objectivo especificado de quantidade e qualidade de água do sistema e (2) as máximas concentrações admitidas nos efluentes rejeitados, sem haver deterioração da qualidade do aquífero.

Problemas de injeção e de qualidade de água surgem, por exemplo, quando é necessário criar uma barreira hídrica à contaminação de aquíferos costeiros por águas marinhas ou quando se torna necessário proceder à recarga de aquíferos.

ELANGO e ROUVÉ 1980 apresentam os resultados de um estudo sistemático da eficiência de um modelo de elementos finitos e de programação linear. O estudo restringe-se contudo a aquíferos confinados, em regime permanente.

Ainda sobre este assunto, associação do MEF à programação linear em águas subterrâneas, citam-se os trabalhos de AGUADO e REMSON 1974 e de AGUADO et al. 1974.

3.5 - Comparação de modelos matemáticos de transporte de massa em águas subterrâneas

Pode observar-se hoje na engenharia civil a existência de uma vasta gama de métodos adequados à resolução dos vários tipos de problemas referidos, nomeadamente escoamentos subterrâneos e transporte de massa.

Observa-se contudo que as instituições de investigação e as empresas de projecto utilizam normalmente programas de cálculo automático desenvolvidos apenas segundo um número restrito de métodos, no máximo dois ou três, usualmente o método das diferenças finitas e mais recentemente o método dos elementos finitos e o das características. A principal preocupação tem sido o aprofundamento de conhecimentos nas áreas que normalmente utilizam, procurando desenvolver novos modelos matemáticos e programas de computador que incluam desenvolvimentos recentes para a resolução das equações diferenciais ou das matrizes de cálculo. Seguindo este processo descaram em geral o desenvolvimento de programas segundo metodologias diferentes. Os inconvenientes desse procedimento resultam da tentativa de aplicação das metodologias a problemas que não se enquadram, perfeitamente, nos pressupostos em que os modelos se baseiam, ou na resolução de problemas "simples" por métodos e modelos "demasiado" sofisticados, diminuindo conseqüentemente a relação custo-eficácia da aplicação.

A tendência actual, recente, da investigação em relação aos modelos de qualidade parece querer ultrapassar esta situação. Procura-se agora obter uma perspectiva geral dos vários tipos de

métodos e modelos desenvolvidos de modo a permitir uma aplicação adequada e eficaz das ferramentas matemáticas e de programação existentes.

Em relação ao cálculo dos escoamentos subterrâneos essa análise começou à mais tempo. LUHR 1972, num trabalho de doutoramento, desenvolve uma análise custo-eficácia para comparação de vários métodos adequados à resolução das equações do escoamento subterrâneo. São comparados modelos analógicos e modelos matemáticos de diferenças finitas e de elementos finitos. As conclusões desse trabalho foram parcialmente apresentadas em 3.4.2.

Em relação ao transporte de poluentes em águas subterrâneas não se conhece a existência de qualquer análise comparativa, completa, das várias metodologias de cálculo da equação da convecção-dispersão, que traduz o transporte de massa. Alguns investigadores têm vindo a debrucar-se sobre a análise (parcial) do tema, nomeadamente para problemas de engenharia de petróleos e do transporte de elementos radioactivos. Refere-se o projecto sueco INTRACDIN (Level 1) onde se comparam modelos matemáticos para a resolução do problema inverso (interpretação de ensaios de traçadores, GOBLET 1984). Algumas conclusões do trabalho "Level 1" serão referidas no Capítulo 4.

Um segundo grupo, americano, desenvolveu também trabalhos nesta área. Os aspectos que estudaram relacionam-se com o desenvolvimento de metodologias para a realização de testes e para a validação de modelos bidimensionais de qualidade de águas subterrâneas (HUYAKORN et al. 1984). Exemplificam a metodologia para um modelo de elementos finitos e para várias soluções analíticas. Referem a existência de três ou quatro grupos de

investigação, americanos, que desenvolvem actualmente estudos nesta área (ainda não publicados).

O desenvolvimento no LNEC (a partir de 1981) de um estudo sobre o transporte de poluentes em águas subterrâneas com a índole teórico-prática e a programação que se apresenta nos Capítulos 4, 5 e 6 acompanha, assim, as mais recentes tendências da investigação neste domínio.

4. ANÁLISE COMPARATIVA DOS PRINCIPAIS MÉTODOS MATEMÁTICOS PARA A RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DO TRANSPORTE DE MASSA EM ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

4.1 - Introdução

Neste capítulo estudam-se os principais métodos matemáticos, adequados à resolução do problema do transporte de poluentes em águas subterrâneas: soluções analíticas, método das células de mistura, método das diferenças finitas, método das características, método do percurso aleatório (random-walk), método dos elementos finitos e método dos elementos de fronteira. Apresenta-se para cada um dos métodos uma descrição geral que inclui o estado actual dos conhecimentos. Não se pretende com as descrições apresentadas fazer uma análise exhaustiva dos vários métodos mas apenas dar uma panorâmica introdutória, que servirá de base à descrição de cada um dos modelos matemáticos seleccionados, com o objectivo de os situar no contexto geral da respectiva metodologia. Uma análise exhaustiva de cada método estaria obviamente deslocada neste trabalho. Citam-se, contudo, algumas publicações que os tratam de forma correcta e pormenorizada.

Submetem-se em seguida os modelos descritos a uma série completa de testes. Analisa-se o efeito da dispersão longitudinal e da velocidade do escoamento na configuração das curvas de penetração do poluente no meio poroso. Igual procedimento se adopta para a dispersão transversal e ainda para um campo de velocidades e de configurações de fundo do aquífero

variáveis. Os teste incluem ensaios que dependem do tipo de condições de fronteira e de condições iniciais, e de factores de degradação do poluente.

O principal objectivo deste Capítulo 4 é o estudo de uma gama suficientemente vasta de métodos com características próprias, que os tornam mais ou menos adequados à resolução de diferentes tipos de situações hidrogeológicas reais. Concluído esse estudo poder-se-á seleccionar criteriosamente, em estudos de investigação aplicada, os métodos de maior eficácia, respondendo economicamente e em tempo útil a qualquer solicitação neste domínio.

A comparação dos modelos baseou-se numa análise custo-eficácia. Dela resultaram quadros com as características e as possibilidades de utilização dos modelos, dois quadros, um objectivo e o outro subjectivo, com o escalonamento dos modelos testados e quatro Árvores de Decisão orientadoras da selecção de modelos a efectuar em situações hidrogeológicas reais.

O estudo desenvolvido permite, segundo PRICKETT 1979 e MERCER e FAUST 1980, evitar o uso incorrecto de modelos (model misuse). Segundo esses autores existem três tipos de erros comuns na utilização de modelos: sofisticação excessiva (overkill), previsão inadequada (inappropriate prediction) e interpretação errónea (misinterpretation). O primeiro uso incorrecto relaciona-se directamente com o objectivo do presente trabalho. Consiste no uso de modelos demasiado sofisticados ou de malhas demasiado discretizadas, excessivos em relação à informação disponível, possivelmente escassa, sobre as características de um aquífero em estudo. Dessa sofisticação excessiva resultam trabalhos e custos adicionais desnecessários

que poderão tornar um projecto financeiramente deficitário. Deve-se assim ter em mente a complexidade do problema, a quantidade de dados disponíveis e os objectivos em análise, e só então determinar a melhor maneira de abordar matematicamente o problema.

A regra geral deve ser o uso de modelos simples e discretizações grosseiras no início de um novo estudo, e apenas após a obtenção dos primeiros resultados e da sua análise o refinamento do tipo de modelo e de discretização, até se atingir o rigor desejado para o estudo.

A equação diferencial que traduz o transporte de poluentes em meios porosos foi já apresentada em 3.4.3. Para um problema bidimensional, num meio homogéneo, a equação é a seguinte:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - V_x \frac{\partial C}{\partial x} - V_y \frac{\partial C}{\partial y} - \lambda C \quad (4.1)$$

onde

C = concentração do poluente

DL = dispersão longitudinal

DT = dispersão transversal

Vx, Vy = velocidades intersticiais segundo as direcções x ou y

λ = coeficiente de decaimento por biodegradação, decaimento radioactivo, etc.

É este o tipo de equação que se pretende resolver. A equação a estudar para cada modelo será apresentada caso a caso.

Segundo HUYAKORN e PINDER 1983, a equação 4.1 é do tipo parabólico. Para o regime contínuo $\partial C / \partial t$ vem igual a zero e a equação é, então, do tipo elíptico. A parcela dispersiva da equação 4.1, que é constituída pelos 1. e 2. termos do 2. membro da equação é do tipo parabólico. O termo convectivo, 3. e 4. termos do 2. membro é do tipo hiperbólico. A dificuldade de resolução da equação 4.1 deve-se à componente hiperbólica, que se torna relevante em problemas com forte componente convectiva. A relação da convecção (velocidade V) com a dispersão (D_L) é normalmente medida pelo número, adimensional, de Peclet (Pe):

$$Pe = \frac{V l}{D_L} \quad (4.2)$$

onde l representa um comprimento característico do aquífero ou da malha de um modelo matemático. Para valores de Pe , aproximadamente, maiores do que 10 (ou do que 50, segundo certos autores) a convecção domina sobre a dispersão e a resolução da equação torna-se, para certos métodos, difícil, como se verá nos testes que se apresentam em 4.3.

4.2 - Descrição dos métodos matemáticos estudados

4.2.1 - Soluções analíticas

4.2.1.1 - Descrição geral

Como se indicou em 3.2 um dos tipos de modelos matemáticos estudados baseia-se nos métodos analíticos. Os principais, segundo HUYAKORN e PINDER 1983, são os seguintes:

- a) Separação de variáveis.
- b) Soluções similares.
- c) Técnicas de variáveis complexas.
- d) Transformadas de Fourier e de Laplace.
- e) Funções de Green.
- f) Perturbações regulares e similares.
- g) Séries de potência.

Para alguns problemas que envolvam equações lineares ou quasi-lineares e domínios simples com geometria regular, é possível obterem-se soluções exactas para equações do tipo da equação 4.1. Isso é normalmente conseguido por separação de variáveis ou por aplicação de transformações que tornem as variáveis separáveis e conduzam a uma solução semelhante. Por vezes a técnica das variáveis complexas, e das funções de Green ou das transformadas de Laplace e de Fourier da equação diferencial, conduzem a uma solução exacta (v. ABRAMOWITZ e STEGUN 1970).

Problemas não lineares, mesmo com geometria regular, têm poucas vezes soluções analíticas. Estas são em geral obtidas pelos métodos das perturbações ou pelas séries de potência. Como as perturbações regulares e singulares são aplicáveis principalmente quando os termos não lineares da equação são

pequenos relativamente aos lineares, a sua utilidade prática é limitada. As séries de potência são mais poderosas e têm sido desenvolvidas com algum êxito. O método é, contudo, relativamente fastidioso porque requer a avaliação de um coeficiente para cada termo da série.

Problemas com domínios irregulares não são em geral tratáveis analiticamente.

A exposição que se acabou de fazer (HUYAKORN e PINDER 1983) pretende mostrar as limitações que envolvem a aplicação deste tipo de métodos a problemas reais. Têm sido no entanto aplicados a problemas simples, como por exemplo em URIA, HERRÁEZ e LLAMAS 1981 onde se apresentam estudos de contaminações provocadas por aterros sanitários.

A grande vantagem das soluções analíticas está relacionada com a possibilidade de aferição dos resultados obtidos por métodos numéricos, em testes de comparação do tipo que se desenvolve em 4.3 (denominado em inglês benchmark techniques).

Como exemplo do desenvolvimento de uma solução analítica para problemas de escoamento subterrâneo referem-se as fórmulas de Theis, desenvolvidas por integração a partir da equação diferencial do escoamento (FERREIRA 1983a). Esse caso corresponde à utilização de curvas tipo para a resolução de equações diferenciais.

Dois outros métodos muito conhecidos são as transformadas de Laplace e as de Fourier. KREYSZIG 1972 desenvolve um estudo sobre transformadas de Laplace para a resolução de equações diferenciais. Dessa publicação cita-se o seguinte: " As transformadas de Laplace são um método poderoso para a resolução de equações diferenciais lineares. A resolução desenvolve-se em

três passos: no primeiro a equação diferencial é transformada numa equação algébrica (equação auxiliar). Esta é resolvida, em seguida, por manipulações algébricas simples. Por último transforma-se de novo a equação auxiliar de modo a tornar-se na solução procurada da equação diferencial original. Deste modo a transformação de Laplace reduz o problema da resolução de uma equação diferencial a um problema algébrico".

TAYLOR 1955 desenvolve uma análise das transformadas de Fourier, incluindo as da equação da difusão. Indica que as transformadas de Fourier são uma ferramenta muito importante para a resolução de certos tipos de equações diferenciais e integrais.

CLEARY e UNGS 1978 apresentam as soluções analíticas que se descrevem no ponto seguinte. Outras publicações apresentam também soluções analíticas para problemas do transporte de poluentes em águas subterrâneas. Citam-se KAMKE 1967, BEAR 1972, FRIED 1975, KREFT e ZUBER 1973, BEAR 1979 e ZUBER 1984. KAMKE 1967 contém uma listagem de mais de 1500 equações diferenciais com as respectivas soluções.

4.2.1.2 - Modelos seleccionados

Foram analisados e adaptados ao computador do LNEC, alguns programas, baseados nos métodos das soluções analíticas, para o estudo do transporte de poluentes em águas subterrâneas. Incluem as seguintes situações:

- a) Unidimensional com condições de fronteira do primeiro tipo.
- b) Unidimensional com condições de fronteira do terceiro tipo.
- c) Bidimensional com injeção segundo uma lei uniforme e

largura finita do domínio.

d) Bidimensional com injeccão segundo uma lei uniforme e largura infinita do domínio.

e) Bidimensional com injeccão segundo uma lei normal e largura infinita do domínio.

f) Tridimensional com injeccão uniforme e domínio com dimensões finitas.

g) Tridimensional com injeccão segundo uma lei normal bivariada e domínio com dimensões infinitas.

As soluções e os programas foram adaptados de CEOTMA 1981, tendo sido originalmente publicadas em CLEARY e UNGS 1978. No Anexo 1 e no desenvolvimento deste ponto apresentam-se as equações diferenciais e as condições de fronteira dos modelos uni e bidimensionais referidos, analisados neste trabalho.

Para os testes que se apresentam em 4.3 usou-se a solução analítica c). O programa designou-se por SA201.FOR. Esta solução analítica, bidimensional, considera a injeccão de um poluente em $x = 0$, com concentração unitária e de largura de aplicação variável segundo y (Fig. 4.1).

A concentração do poluente, na origem, pode ser considerada constante (unitária) ou pode variar segundo uma lei exponencial negativa:

$$C = C_0 e^{-\gamma y} \quad (4.3)$$

onde

γ = taxa de decaimento do poluente na origem

C_0 = concentração inicial do poluente

t = tempo de ensaio, em dias.

O modelo permite ainda a consideração de taxas de decaimento (K), de poluentes não conservativos, que apresentem fenómenos de biodegradação, radioactividade, etc., uma vez inseridos no escoamento. A equação diferencial estudada é a seguinte:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \frac{\partial C}{\partial x} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - KC \quad (4.4)$$

As variáveis têm o significado referido.

As condições de fronteira são as seguintes:

$$C = C_0 e^{-\gamma t} \quad \text{para } x=0 \text{ e } y_1 \gg y \gg y_2$$

$$C = 0 \quad \text{para } x=0 \text{ e restante largura } y$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0 \quad \text{para } y=0$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0 \quad \text{para } y=w \text{ (largura da fonte)}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow 0 \quad \text{para } x \rightarrow \text{infinito}$$

A solução analítica, programada, é a seguinte:

$$\begin{aligned}
 \frac{C(x, y, t)}{C_0} &= e^{-\gamma t} [U(y-y_1) - U(y-y_2)] - \sum_{n=0}^{\infty} L_n \cos(r_n y) \cdot \\
 &\cdot \left[\left[P_n e^{-(r_n^2 D_x + K)t} \left\{ \operatorname{ERFC} \left(\frac{V_x \sqrt{t}}{2 \sqrt{D_x}} - \frac{X}{2 \sqrt{D_x t}} \right) - e^{\frac{X V_x}{D_x}} \operatorname{ERFC} \left(\frac{V_x \sqrt{t}}{2 \sqrt{D_x}} + \frac{X}{2 \sqrt{D_x t}} \right) \right\} + \right. \right. \\
 &+ \left[(K - \gamma) P_n + D_y \frac{r_n}{W} [\operatorname{SIN}(r_n y_2) - \operatorname{SIN}(r_n y_1)] \right] \frac{e^{\frac{V_x X}{2 D_x} - \gamma t}}{(r_n^2 D_y + K - \gamma)} \cdot \left\{ 2 e^{-\frac{X V_x}{2 D_x} +} \right. \\
 &+ e^{\frac{X V_x}{2 D_x} - (r_n^2 D_y + K - \gamma)t} \operatorname{ERFC} \left(\frac{V_x}{2} \sqrt{\frac{t}{D_x}} + \frac{X}{2 \sqrt{t D_x}} \right) - e^{-\frac{X V_x}{2 D_x} - (r_n^2 D_y + K - \gamma)t} \\
 &\operatorname{ERFC} \left(\frac{V_x}{2} \sqrt{\frac{t}{D_x}} - \frac{X}{2 \sqrt{t D_x}} \right) - e^{-\frac{X}{\sqrt{D_x}} \sqrt{\frac{V_x^2}{4 D_x} + r_n^2 D_y + K - \gamma}} \operatorname{ERFC} \left(\frac{X}{2 \sqrt{D_x t}} + \right. \\
 &+ \left. \sqrt{\left(\frac{V_x^2}{4 D_x} + r_n^2 D_y + K - \gamma \right) t} \right) - e^{-\frac{X}{\sqrt{D_x}} \sqrt{\frac{V_x^2}{4 D_x} + r_n^2 D_y + K - \gamma}} \\
 &\left. \left. \operatorname{ERFC} \left(\frac{X}{2 \sqrt{D_x t}} - \sqrt{\left(\frac{V_x^2}{4 D_x} + r_n^2 D_y + K - \gamma \right) t} \right) \right\} \right] \right] \quad (4.5)
 \end{aligned}$$

onde

$$L_n = \begin{cases} 1/2 & \text{se } n=0 \\ 1 & \text{se } n>0 \end{cases}$$

$$P_n = \begin{cases} \frac{y_2 - y_1}{W} & \text{se } n=0 \\ \frac{[\operatorname{SIN}(r_n y_2) - \operatorname{SIN}(r_n y_1)]}{r_n W} & \text{se } n \geq 1 \end{cases}$$

$$r_n = n\pi/W \quad n=0, 1, 2, 3, \dots$$

No Anexo 2 apresenta-se um exemplo de uma listagem de dados, necessários à execução do programa, e de uma listagem com os resultados do programa.

O programa SA2D1.FOR não permite o tratamento, exacto, de testes que incluam injeções instantâneas de poluentes. Resultados aproximados poderão ser obtidos considerando uma taxa elevada de decaimento do poluente na origem (7).

As soluções exactas para esses testes são diferentes da apresentada no programa SA2D1.FOR. BEAR 1979 e FRIED 1975 apresentam as soluções desejadas para uma e para duas dimensões respectivamente. Para uma dimensão a solução é a seguinte:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{\sqrt{4\pi D_L t}} \exp \left[-\frac{(x-vt)^2}{4D_L t} \right] \quad (4.6)$$

com

$C(x, t)$ = concentração no tempo t , à distância x da origem

C_0 = concentração inicial na origem

D_L = dispersão longitudinal

v = velocidade do escoamento

Para duas dimensões a solução é a seguinte:

$$C(x, y, t) = \frac{C_0}{4\pi vt (\alpha_L \alpha_T)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(x-vt)^2}{4\alpha_L vt} - \frac{y^2}{4\alpha_T vt} \right] \quad (4.7)$$

com

$\alpha_L = D_L/V$ (dispersividade longitudinal)

$\alpha_T = D_T/V$ (dispersividade transversal)

y = distância segundo Y

4.2.2 - Método das células de mistura

4.2.2.1 - Descrição geral

Dos modelos matemáticos estudados os que agora se apresentam são os únicos que não se baseiam na resolução directa da equação diferencial do transporte de massa, para a solução do problema da poluição de águas subterrâneas. São os únicos também que não necessitam da consideração da variável dispersão do meio poroso. BEAR 1979 designa-os por modelos de células, única ou múltiplas. Este tipo de modelos inicialmente usado na engenharia química, HIMMELBLAU e BISCHOFF 1968, para o estudo de problemas de transferência de massa foi posteriormente aplicado à engenharia de recursos hídricos. Os estudos de hidrologia e hidrogeologia referentes à caracterização de recursos e de necessidades de água utilizam-nos frequentemente nas análises de balanços hídricos. As equações utilizadas desenvolvem-se a partir da equação da continuidade do sistema. Exemplos de equações deste tipo são desenvolvidas em FERREIRA et al. 1981. A unidade de discretização pode ser a bacia hidrográfica, a bacia

hidrogeológica, sub-bacias em secções de barragens, etc. As unidades do sistema hidrogeológico podem também ser limitadas por fronteiras impermeáveis, por linhas de fluxo e por linhas equipotenciais ou piezométricas. Divide-se assim o domínio em uma ou em mais células, ligadas hidraulicamente entre si, de acordo com os caudais do escoamento subterrâneo. O estado das células, num instante t , pode ser calculado para a variável em estudo, por exemplo a concentração de um poluente, uma vez conhecidas as concentrações, os volumes iniciais e os provenientes das células vizinhas.

Para estudos da qualidade de águas subterrâneas dever-se-á ter em conta, no cálculo do balanço de massa de cada célula, as seguintes componentes:

- a) Massa de poluente transportada na água que entra e na água que sai das células.
- b) Poluentes contidos na recarga natural do aquífero.
- c) Poluentes dissolvidos nas águas de irrigação.
- d) Poluentes provenientes de águas de aterros sanitários, fossas sépticas, tratamento de efluentes no solo, etc.
- e) Poluentes provenientes de recargas artificiais do aquífero.
- f) Poluentes retirados do aquífero por bombagem.
- g) Poluentes retirados do aquífero, por drenagem fluvial, em situações de nível freático elevado.

A divisão das células de mistura é por vezes feita segundo polígonos de Thiessen (LYONS 1976), de modo a atribuir uma área de referência (célula) a cada local (centro do polígono) onde se conhecem as características hidrogeoquímicas importantes do aquífero em estudo. Conseguir-se-á, deste modo, uma melhor caracterização e calibração do modelo.

LLAMAS e SIMPSON 1979 apresentam um modelo tridimensional de células de mistura. O modelo possui duas camadas sobrepostas de células múltiplas, de volumes constantes. O modelo é aplicado ao estudo do transporte de solutos no aquífero terciário detrítico do Tejo, na região de Madrid. Quantificam ainda os tempos de percurso dos poluentes.

LLAMAS e SIMPSON 1980 e LLAMAS e ALFARO 1981 pormenorizam a análise do modelo, tridimensional, anterior e subdividem as células segundo o eixo vertical. Os resultados obtidos são comparados com os de ^{14}C para a calibração da idade média das águas do aquífero.

MERCADO 1976 aplica um modelo deste tipo ao estudo da protecção da qualidade da água do aquífero costeiro de Israel. O modelo inclui (1) a zona superficial do solo, associada à zona de rejeição de efluentes provenientes da actividade humana, (2) a zona não saturada, incluindo a zona de raízes, que motiva alterações químicas nos poluentes e atrasos na chegada dos poluentes à zona saturada e ainda (3) o próprio aquífero, que dilui os poluentes e os transporta para nascentes e outras emergências.

MALOSZEWSKI e ZUBER 1982 aplicam também um modelo de células de mistura aos estudos de águas subterrâneas, realizados com traçadores ambientais, para a determinação do tempo de percurso em sistemas aquíferos (turnover time of groundwater systems).

4.2.2.2 - Modelo seleccionado

O modelo que se estudou foi desenvolvido por CAMPANA 1975 e é apresentado em SIMPSON et al. 1976. Posteriormente foi revisto por LLAMAS e SIMPSON 1979. A designação atribuída ao modelo em inglês é "Finite state mixing cell model". A designação atribuída ao programa adaptado no LNEC é MIXCEL.FOR.

A equação básica do modelo, para cada célula, é obtida da equação da continuidade do sistema: (1) a quantidade de poluente que se encontra na célula no final de uma iteração é igual à quantidade que havia no final da iteração anterior mais (2) a quantidade de poluente que entrou procedente de células vizinhas ou do exterior do sistema, menos (3) a quantidade de poluente que saiu para células vizinhas ou para o exterior do sistema, menos (4) a quantidade de poluente "desintegrado" durante a iteração, ou seja:

$$S(N+1, X) = S(N, X) + BRV(N+1, X) - BRC(N+1, X) - BDV(N+1, X) - BDC(N+1, X) - R(N+1, X) \quad (4.8)$$

onde

- N - iteração ou passo temporal
- X - número da célula
- S(N, X) - massa total de poluente na célula X na iteração N

- BRV(N,X) - volume de água que entra na célula X na iteração N
- BRC(N,X) - concentração de poluente que entra na célula X na iteração N
- BDV(N,X) - volume de água que sai da célula X na iteração N
- BDC(N,X) - concentração do poluente que sai da célula X na iteração N
- R(N,X) - quantidade de poluente que surge ou desaparece da célula X na iteração N, por desintegração, biodegradação, etc.

O único valor desconhecido do segundo membro da equação anterior 4.8 é BDC ou seja a concentração de saída da célula. Esta variável pode ser calculada por dois métodos diferentes. No primeiro método, denominado célula de mistura simples (SMC), supõe-se que o volume da célula se expande durante a iteração de modo a alojar o volume de água que entra (BRV). Em seguida procede-se à fase de mistura e por último a célula contrai-se e descarrega um volume igual ao que entrou durante a iteração. Em resumo o processo é do tipo "entrada-mistura-saída" ou seja (Fig. 4.2):

$$BDC(N+1, X) = \frac{S(N, X) + BRV(X) BRC(N+1, X)}{VOL(X) + BRV(X)} \quad (4.9)$$

onde

$VOL(X)$ = quantidade total de água contida na célula X

No segundo método, denominado célula de mistura modificada (MMC), supõe-se que o volume da célula é constante. Assim a água que entra na célula desloca um volume idêntico, que sai, e só em seguida se dá a mistura. O processo é do tipo "entrada-saída-mistura" ou seja (Fig. 4.3):

$$BDC(N+1, X) = \frac{S(N, X)}{VOL(X)} \quad (4.10)$$

Se o volume de recarga $BRV(X)$, for igual ao volume líquido da célula $VOL(X)$ o fluxo será o de pistão simples. À medida que a relação $BRV(X)/VOL(X)$ diminui o processo afasta-se do fluxo de pistão e aproxima-se do primeiro método (SMC). Na prática $BRV(X)$ é pequeno em comparação com $VOL(X)$ e os dois métodos permitem obter, normalmente, resultados semelhantes.

A "desintegração" RD , considerada no modelo, é a seguinte:

$$S(N+1) = S(N) RD \quad \text{com} \quad (4.11)$$

com

$$RD = \exp(-\ln 2 \text{ DELTA}/T) \quad (4.12)$$

DELTA é o passo temporal da iteração e T é o tempo de semi-desintegração (semi-vida) do poluente.

Como se pode reparar o modelo não inclui explicitamente nenhuma variável do tipo dispersão do meio. Esta variável pode contudo ser simulada no modelo (para comparação dos seus resultados com os obtidos por outros métodos) por variação do volume da célula, VOL(X) e da variável "intercâmbio" transversal entre células. Em termos práticos aumentando VOL(X) e o "intercâmbio" aumenta-se a dispersão longitudinal e transversal. Repare-se contudo que o BRV(X) e o VOL(X) não poderão variar livremente se se pretender considerar um caudal de escoamento subterrâneo determinado, isto é se se quiser impôr uma certa velocidade ao escoamento subterrâneo, quer para ajustamento ao escoamento subterrâneo real quer para comparação de modelos. Neste caso, ter-se-á de entrar em linha de conta com a variável DELTA, passo temporal da iteração.

Analisou-se o ajustamento (unidimensional) dos resultados do programa MIXCEL.FOR aos de uma solução analítica. Na Fig. 4.4 apresentam-se os resultados obtidos para diferentes valores de VOL(X), BRV(X) e DELTA. Repare-se que a variação do BRV(X) e de DELTA, na mesma proporção e mantendo fixo o número de células ou seja VOL(X), não altera praticamente os resultados.

No Anexo 2 apresenta-se um exemplo de uma listagem de dados e de resultados deste programa.

4.2.3 - Método das diferenças finitas

4.2.3.1 - Descrição geral

O método das diferenças finitas (MDF) tem uma vasta bibliografia publicada. Vários trabalhos desenvolvem de uma forma muito completa este assunto. O leitor que pretender aprofundar a introdução que se apresenta poderá fazê-lo em ROSENBERG 1969, AMES 1977, MITCHELL e GRIFFITHS 1980, LAPIDUS e PINDER 1982 e HUYNHORN e PINDER 1983.

O método das diferenças finitas é um método numérico para a resolução de equações diferenciais ordinárias ou parciais. Descreve-se o comportamento físico do sistema em estudo por equações diferenciais que contêm, além dos parâmetros conhecidos, variáveis (incógnitas) cuja quantificação se pretende.

O comportamento das variáveis em análise é quantificado pela resolução das equações diferenciais, depois de consideradas as condições de fronteira.

O domínio do estudo é dividido numa malha, normalmente rectangular. Podem-se considerar dois tipos de malhas: as centradas nas intersecções das linhas limitadoras das células e as centradas no centro das células ("mesh-centered" e "block-centered grids", em inglês), (Fig. 4.5). Os nós localizam a posição onde se pretende calcular os valores das variáveis. Nas malhas centradas nas intersecções das linhas, por exemplo em PRICKETT e LONNQUIST 1971, os nós coincidem com as intersecções. Nas malhas centradas nas células, por exemplo em TRESCOTT, et al. 1976, os nós estão centrados no meio de cada quadrado correspondente às células.

A escolha do tipo de malha depende das condições de fronteira. A malha centrada nas intersecções é conveniente em problemas com variáveis especificadas na fronteira. A malha

centrada nas células é vantajosa quando se conhece o caudal ou o fluxo através da fronteira. Dum ponto de vista prático as diferenças entre os dois tipos de malha são diminutas.

Como se indicou as incógnitas do problema são os valores das variáveis nos nós. As derivadas incluídas nas equações diferenciais tanto no domínio como nas fronteiras são aproximadas por fórmulas, em diferenças finitas. As equações resultantes têm de ser satisfeitas em todos os nós. As condições de fronteira têm de ser satisfeitas nos nós da fronteira. A satisfação global dessas condições origina um sistema de n equações a n incógnitas.

Existem vários métodos de diferenças finitas para o tratamento das equações diferenciais:

a) No método de colocação simples a equação final em diferenças finitas, ou seja a satisfação da equação diferencial, faz-se apenas num nó. As fórmulas que se apresentam no Anexo 3 (TUB 1977) são directamente aplicáveis. Essas fórmulas foram desenvolvidas por diferenciação de polinómios, de grau apropriado, que aproximam a função correspondente à equação diferencial original.

b) No método de colocação múltipla a equação final é satisfeita em alguns ou em todos os nós. Para esse fim desenvolvem-se fórmulas de diferenças finitas especiais, baseadas nas séries de Taylor (truncadas):

$$m_{j+1} = m_j + h \frac{dm_j}{dx} + \frac{1}{2} h^2 \frac{d^2 m_j}{dx^2} + \frac{1}{6} h^3 \frac{d^3 m_j}{dx^3} + \frac{1}{24} h^4 \frac{d^4 m_j}{dx^4} + O(h^5) \quad (4.13)$$

$$m_{j-1} = m_j - h \frac{dm_j}{dx} + \frac{1}{2} h^2 \frac{d^2 m_j}{dx^2} - \frac{1}{6} h^3 \frac{d^3 m_j}{dx^3} + \frac{1}{24} h^4 \frac{d^4 m_j}{dx^4} + O(h^5) \quad (4.14)$$

onde

m_j = variável em análise no nó j

h = espaçamento entre os nós

O = resto

Por manipulação algébrica é possível eliminar alguns termos, desnecessários, destas séries e explicitar o conjunto das derivadas parciais da equação diferencial original em função dos valores das incógnitas nos nós. Para os nós da fronteira procede-se de igual modo, de forma a satisfazer as condições de fronteira.

A equação final, em diferenças finitas, poderá ser ainda deduzida directamente, de um modo mais intuitivo, por análise da equação da continuidade dos fluxos que entram e que saem de uma célula ou de um nó genérico, do domínio. Este método é desenvolvido em PRICKETT e LONNQUIST 1971, para o estudo do escoamento em meios porosos.

A solução do sistema de equações resultante da aplicação do MDF pode ser obtida por métodos directos ou por métodos iterativos. Os primeiros incluem a solução por determinantes,

por eliminação sucessiva das incógnitas e por inversão de matrizes. Os mais conhecidos são os que procedem à eliminação sucessiva de variáveis e à substituição regressiva: métodos de Gauss e de Cholesky.

Os métodos iterativos evitam o armazenamento de grandes matrizes e são por isso aconselhados para a resolução de sistemas com muitas incógnitas. Foram desenvolvidos vários métodos iterativos, dos quais se salientam os seguintes: "overrelaxation", "alternating direction implicit procedure (ADI)", "iterative alternating direction implicit procedure (IADI)" e "strongly implicit procedure (SIP)".

MERCER e FAUST 1980 tecem algumas considerações sobre as vantagens e os inconvenientes destes métodos. HUYAKORN e PINDER 1983 analisam a estabilidade, a consistência e a convergência das aproximações de diferenças finitas.

Como exemplo da aplicação do MDF à resolução de problemas da qualidade de águas subterrâneas em meios porosos não saturados cita-se BRESLER 1973. Os meios porosos saturados foram objecto de um número maior de trabalhos. Referem-se os seguintes: SHAMIR e HARLEMAN 1976, REDDELL e SUNADA 1970, PICKENS e LENNOX 1976, AL-NIAMI e RUSHTON 1978, BAROVIC et al. 1978, KONIKOW e BREDEHJEFT 1978 e PRICKETT et al. 1981.

As várias soluções apresentadas por esses autores têm em vista atenuar os inconvenientes de dois problemas importantes que surgem nos cálculos do método das diferenças finitas: as oscilações numéricas e o amortecimento ou dispersão numérica das soluções. Segundo KÜPPER 1983, as oscilações são resultado de erros de truncamento (espacial) de 2a. ordem nas vizinhanças de gradientes elevados da variável em análise. As oscilações serão

tanto menores quanto maior for a dispersão, DL , e mais refinada for a malha. O amortecimento ou dispersão numérica da frente de poluição é devida a erros de truncamento de 1ª. ordem das aproximações dos termos convectivo e temporal, os quais, proporcionais à segunda derivada equivalem a um segundo coeficiente de dispersão. Desse modo, a solução numérica obtida não corresponde ao problema original mas sim a um problema com um coeficiente de dispersão maior. As oscilações e o amortecimento podem ser atenuados ou agravados de acordo com o modo como se deriva a função (equação diferencial) no nó. De facto a derivada aproximada, em diferenças finitas, da função pode ser calculada pelos seguintes três esquemas: diferenças regressivas (utilizando um nó (genérico) j e o nó anterior $j-1$), centradas ($j+1/2$ e $j-1/2$) e progressivas (j e $j+1$). No caso da equação do transporte os dois primeiros esquemas são, em geral, aplicados às derivadas espaciais. O terceiro é aplicado à derivada temporal.

O amortecimento da solução numérica é um problema clássico das diferenças regressivas. A oscilação da solução numérica é um problema clássico das diferenças centradas.

KUPPER 1983 analisa vários modelos de diferenças finitas propostos para eliminar ou pelo menos para atenuar os problemas de oscilação e amortecimento numérico. Nos pontos seguintes referir-se-ão algumas das suas conclusões.

4.2.3.2 - Modelos seleccionados

Os modelos de diferenças finitas seleccionados tiveram em conta algumas das considerações apresentadas no ponto anterior (oscilações e dispersões numéricas). Deve-se referir que estes problemas se agravam à medida que a componente convectiva,

hiperbólica, da equação diferencial da convecção-dispersão aumenta. Procurou-se assim estudar modelos que se baseassem em métodos capazes de atenuar esses problemas. O primeiro desses métodos, derivado do método das diferenças finitas, será estudado em pormenor no ponto seguinte (4.2.4) - é o método das características, também designado em inglês por "particle-in-a-cell method". No ponto 4.2.5 apresenta-se um (segundo) modelo que se baseia no método das diferenças finitas e no método do percurso aleatório (random-walk).

Os dois modelos seleccionados (4.2.4.2 e 4.2.5.2) resolvem o problema do transporte de massa parcialmente pelo método das diferenças finitas. Vêm descritos em KONIKOW e BREDEHOEFT 1978 e em PRICKETT et al. 1981. Foram introduzidas várias alterações nos programas originais para os adaptar ao computador do LNEC e ainda para permitir a utilização de unidades métricas e a comparação dos seus resultados com os obtidos por outros modelos. Os programas designaram-se neste estudo KONIK3.FOR e RANDOM.FOR respectivamente.

O programa KONIK3.FOR começa por calcular as alturas piezométricas do aquífero. Para isso desenvolve a equação do escoamento subterrâneo, apresentada em 3.4.2, pelo método das diferenças finitas. A equação, bidimensional, em diferenças finitas (implícitas) é a seguinte:

$$\begin{aligned}
 & T_{xx[i-1/2, j]} \left[\frac{h_{i-1, j, k} - h_{i, j, k}}{(\Delta x)^2} \right] + T_{xx[i+1/2, j]} \left[\frac{h_{i+1, j, k} - h_{i, j, k}}{(\Delta x)^2} \right] + \\
 & + T_{yy[i, j-1/2]} \left[\frac{h_{i, j-1, k} - h_{i, j, k}}{(\Delta y)^2} \right] + T_{yy[i, j+1/2]} \left[\frac{h_{i, j+1, k} - h_{i, j, k}}{(\Delta y)^2} \right] = \\
 & = S \left[\frac{h_{i, j, k} - h_{i, j, k-1}}{\Delta t} \right] + \frac{q w(i, j)}{\Delta x \Delta y} \frac{K_z}{m} [H_{s(i, j)} - h_{i, j, k}] \quad (4.15)
 \end{aligned}$$

onde

i, j, k - são índices nas direcções x e y e no tempo

$\Delta x, \Delta y, \Delta t$ - são incrementos nas direcções x e y e no tempo

q_w - é a taxa de injeccção ou extracção no nó (i, j) , em L^3/T

A equacção em diferenças finitas é resolvida numericamente, para cada nó da malha, usando o processo "iterative alternating-direction implicit procedure (ADI)".

Após a definicção da piezometria, para um certo passo de tempo, a velocidade do escoamento subterrâneo é calculada, para cada nó, usando uma forma explícita em diferenças finitas da equacção seguinte:

$$V_i = -\frac{K_{ij}}{\varepsilon} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (4.16)$$

onde

V_i - é a velocidade de percolacção intersticial do escoamento na direcção x_i , L/T

K_{ij} - é a condutividade hidráulica, L/T

ε - é a porosidade efectiva do aquífero (adimensional)

No nó (i,j) a velocidade intersticial na direcção x é assim de:

$$V_{x(i,j)} = \frac{K_{xx(i,j)}}{\epsilon} \frac{h_{i-1,j,k} - h_{i+1,j,k}}{2\Delta x} \quad (4.17)$$

A velocidade na fronteira entre os nós (i,j) e (i+1,j) é calculada do seguinte modo

$$V_{x(i+1/2,j)} = \frac{K_{xx(i+1/2,j)}}{\epsilon} \frac{h_{i,j,k} - h_{i+1,j,k}}{\Delta x} \quad (4.18)$$

Para comparação de modelos (cálculo de tempos de CPU) dividiu-se o programa KONIK3.FOR em dois programas independentes. O programa KONIK1.FOR calcula apenas a piezometria do aquífero e as velocidades, ou seja o que se acabou de apresentar. Esse programa cria um ficheiro de velocidades, que pode ser lido pelo segundo programa, KONIK2.FOR, que só calcula a equação da convecção-dispersão, que se apresenta a seguir e em 4.2.4.

A equação da convecção-dispersão é calculada nesse programa em duas fases. Na primeira a parcela convectiva é calculada pelo método das características. No ponto 4.2.4 justificar-se-á esta escolha.

A parcela correspondente à dispersão, às fontes e sumidouros, e às variações da espessura saturada do aquífero (b) são calculadas por diferenças finitas explícitas da equação seguinte:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{1}{b} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(b D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) + F \quad (4.19)$$

ou seja

$$\Delta C_{i,j,k} = \Delta t \left[\frac{1}{b} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(b D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) + F \right] \quad (4.20)$$

Na prática a concentração $C_{i,j,k}$ no nó (i,j) no final do intervalo do tempo k é calculada do seguinte modo:

$$C_{i,j,k} = C_{i,j,k}^* + \Delta C_{i,j,k} \quad (4.21)$$

onde $C_{i,j,k}^*$ é a concentração no final do intervalo do tempo k devida à convecção e $\Delta C_{i,j,k}$ é a variação da concentração no intervalo de tempo k devida à dispersão, às fontes e sumidouros, e às variações da espessura saturada do aquífero (Fig. 4.6). A resolução do sistema de equações é feita pelo método ADI.

Existe uma versão deste programa que utiliza, em alternativa, o método SIP.

O segundo modelo estudado (programa RANDOM.FOR) vem descrito em PRICKETT, et al. 1981. A solução do escoamento subterrâneo é feita pelo método das diferenças finitas. O estudo do transporte de massa baseia-se no método das características para a parcela convectiva e no método do percurso aleatório para a parcela dispersiva.

As equações de diferenças finitas para o cálculo da piezometria do aquífero são praticamente idênticas às indicadas anteriormente. A única diferença reside no facto deste modelo apresentar os nós nas intersecções da malha enquanto que o anterior os define no centro das células. A equação considerada é a seguinte:

$$T_{i-1,j,2} (h_{i-1,j} - h_{i,j}) / \Delta x^2 + T_{i,j,2} (h_{i+1,j} - h_{i,j}) / \Delta x^2 + T_{i,j,1} (h_{i,j+1} - h_{i,j}) / \Delta y^2 + T_{i,j-1,1} (h_{i,j-1} - h_{i,j}) / \Delta y^2 = S (h_{i,j} - h_{\phi i,j}) / \Delta t + Q_{i,j} / \Delta x \Delta y - Q_n / \Delta x \Delta y \quad (4.22)$$

onde

$T_{i,j,1}$ = transmissividade no volume compreendido entre os nós i,j e $i,j+1$

$T_{i,j,2}$ = idem para os nós i,j e $i+1,j$

$h_{i,j}$ = altura piezométrica no nó i,j no final do incremento temporal

As velocidades são posteriormente calculadas, como no modelo anterior, a meio caminho entre os nós. Estas velocidades são usadas como dados de entrada para um esquema de interpolação

muito elaborado, que se baseia em funções do tipo Chapeau, para o cálculo do vector velocidade associado ao movimento de cada partícula poluente, num espaço contínuo.

A resolução do sistema de equações é feita por um método modificado do ADI.

No Anexo 2 apresenta-se um exemplo com os dados necessários à execução deste modelo.

No ponto 4.2.5 desenvolver-se-á em pormenor a equação do transporte deste modelo, que se baseia no método do percurso aleatório.

4.2.4 - Método das características

4.2.4.1 - Descrição geral

O método das características é particularmente adequado à análise de escoamentos em regime variável, regidos por equações diferenciais do tipo hiperbólico, quando a parcela convectiva é dominante.

KUPPER 1983 apresenta um estudo onde se comparam vários modelos de diferenças finitas, desenvolvidos para eliminar ou atenuar os problemas da oscilação e da dispersão numéricas. Os modelos incluem: (1) um método de transferência de excessos com diferenças regressivas a montante da fonte de dispersão, e diferenças centradas, na frente; (2) um método implícito de diferenças finitas envolvendo coeficientes de ponderação para os termos convectivo e temporal e a aproximação de Crank-Nicolson para o termo dispersivo; (3) um método numérico deduzido a partir do método de Galerkin onde a discretização é obtida por funções

de base do tipo Chapeau (lineares); (4) um esquema de diferenças finitas exacto até à 2a. ordem para os termos convectivo e temporal; (5) aproximações discretizadas exactas até à 4a. ordem em Δt e Δx ; e finalmente (6) o método das características.

As comparações foram efectuadas para vários valores do número de Peclet ($Pe = VL/D$) em situações uni e bidimensionais. As conclusões desse trabalho, (KÜPPER 1983), em relação ao método das características são as seguintes:

- a) "O método das características apresenta resultados muito bons tanto para as experiências unidimensionais como bidimensionais, não oscila nem apresenta dispersão numérica e aumenta a sua eficácia à medida que o número de Peclet aumenta".
- b) "Tendo em vista as conclusões acima (referidas), recomenda-se o método das características para tratar a equação do transporte de massa, mesmo nos casos onde este transporte é acentuadamente dispersivo".

Como se indicou em 4.2.3 ambos os modelos de diferenças finitas seleccionados, KONIK3.FOR e RANDOM.FOR, tratam a parcela convectiva da equação do transporte de massa pelo método das características.

KONIKOW e BREDEHOEFT 1978 salientam ser difícil apresentar uma justificação matemática rigorosa do esquema numérico do método das características apesar de o mesmo ter sido aplicado com êxito a vários problemas reais. A aplicação deste método a problemas de águas subterrâneas foi feito por GARDER et al. 1964, PINDER e COOPER 1970, REDDELL e SUNADA 1970, BREDEHOEFT e PINDER 1973, KONIKOW e BREDEHOEFT 1974, ROBERTSON 1974, ROBSON

1974 e KONIKOW 1977.

Descreve-se em seguida o processo geral para se obter uma equação "característica".

Considere-se a equação quasi-linear, da variável u:

$$a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial t} = c \quad (4.23)$$

onde

x e t são as variáveis espacial e temporal

a, b, e c são funções de x, t, e u

Se b for diferente de zero a equação 4.23 pode ser escrita do seguinte modo:

$$\frac{a}{b} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{c}{b} = 0 \quad (4.24)$$

Das propriedades das derivadas parciais pode escrever-se que

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (4.25)$$

ou ainda que

$$\frac{dx}{dt} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{du}{dt} = 0 \quad (4.26)$$

Subtraindo a equação 4.26 da equação 4.24 obtém-se:

$$\left(\frac{a}{b} - \frac{dx}{dt}\right) \frac{\partial u}{\partial x} - \left(\frac{c}{b} - \frac{du}{dt}\right) = 0 \quad (4.27)$$

Pode observar-se que esta equação se reduz a uma equação diferencial ordinária ao longo da curva definida por:

$$(a/b) - (dx/dt) = 0 \quad (4.28)$$

ou então por

$$dx/dt = a/b$$

Tal curva designa-se curva "característica" ou simplesmente característica. Ao longo dessa curva a equação 4.27 reduz-se a

$$du/dt = c/b \quad (4.29)$$

que pode ser resolvida analiticamente ou por integração numérica.

HUYAKORN e PINDER 1983 desenvolvem o raciocínio anterior para equações hiperbólicas de 2a. ordem.

A diferença das derivadas, em relação ao tempo, du/dt e $\partial u/\partial t$, supondo que u representa a concentração de um poluente (C), é a seguinte: enquanto que $\partial C/\partial t$ traduz a variação da concentração observada num ponto fixo dC/dt representa a variação da concentração quando o ponto de observação acompanha o

escoamento subterrâneo. O primeiro método é usualmente designado euleriano enquanto que o segundo é designado lagrangeano. Se se considerar um referencial de base fixa e um segundo referencial de base móvel, apenas para o cálculo da parcela correspondente à convecção, o processo denomina-se euleriano-lagrangeano.

Se a variável u da equação 4.29 depender das variáveis espaciais x e y , as derivadas destas variáveis em ordem ao tempo correspondem às velocidades V_x e V_y :

$$\frac{dx}{dt} = V_x \quad (4.30)$$

$$\frac{dy}{dt} = V_y \quad (4.31)$$

As derivadas do tipo que se apresentou (du/dt) são denominadas derivadas materiais.

4.2.4.2 - Modelos seleccionados

Como se referiu os programas KONIK3.FOR e RANDOM.FOR, adaptados de KONIKOW e BREDEHOEFT 1978 e de PRICKETT et al. 1981, calculam a parcela convectiva da equação do transporte de massa pelo método das características.

Utilizando as malhas de diferenças finitas o programa KONIK3.FOR procede do seguinte modo:

- 1) Coloca o número de partículas escolhido pelo utilizador (de 4 a 9) em cada célula da área em estudo. A localização de cada partícula é internamente caracterizada pelas suas coordenadas x e y , na malha de diferenças finitas. A concentração inicial atribuída a cada partícula, é igual à concentração inicial associada a cada nó da célula que contém a partícula.
- 2) Em cada passo temporal, as partículas são deslocadas uma distância correspondente ao passo de cálculo e à velocidade do escoamento (Fig. 4.7). A nova posição é calculada pela seguinte fórmula, em diferenças finitas:

$$X_{p,k} = X_{p,k-1} + \delta X_p = X_{p,k-1} + \Delta t V_x [X_{(p,k)}, Y_{(p,k)}] \quad (4.32)$$

$$Y_{p,k} = Y_{p,k-1} + \delta Y_p = Y_{p,k-1} + \Delta t V_y [X_{(p,k)}, Y_{(p,k)}] \quad (4.33)$$

onde

p = identificação da partícula

$\delta X_p, \delta Y_p$ = distância percorrida nas direcções x e y .

As velocidades V_x e V_y são calculadas por interpolação bilinear, com as velocidades dos nós e das fronteiras das células da malha.

- 3) Após o deslocamento de todas as partículas a concentração em cada nó é considerada, temporariamente, igual à média das concentrações das partículas, então, localizadas na célula.

Esta concentração é designada por $C_{i,j,k}$ e corresponde apenas ao transporte por convecção. As restantes parcelas da equação do transporte são calculadas por diferenças finitas, como se indicou em 4.2.3.

O método em que se baseia o programa RANDOM.FOR para o cálculo da parcela convectiva da equação diferencial é semelhante ao descrito anteriormente, embora seja mais sofisticado:

- a) Neste método as partículas não são colocadas inicialmente em cada célula da malha. São geradas por subrotinas apropriadas, apenas, na região originadora da poluição, de acordo com as condições iniciais e de fronteira ou com as fontes localizadas no interior do domínio. As partículas são geradas de um modo aleatório na região originadora da poluição e no intervalo de tempo.
- b) A cada partícula atribui-se uma massa que representa uma fracção de massa total do poluente existente no aquífero.
- c) Para se obter uma boa distribuição de concentrações os autores sugerem que sejam colocadas cerca de 200 partículas em cada célula.
- d) As velocidades das partículas são calculadas de acordo com um esquema muito elaborado, que se baseia em funções de Chapeau, para interpolação das velocidades, em qualquer ponto do domínio, tendo por base as velocidades calculadas entre os nós.

Ambos os programas incluem várias técnicas para a correção da trajetória das partículas que "ultrapassam" fronteiras impermeáveis, para as partículas que devem ser retiradas do aquífero por captações ou fronteiras permeáveis e ainda, no caso do KONIK3.FOR, para geração de novas partículas, localizadas junto a fronteiras impermeáveis, de modo a evitar a existência de células com um número de partículas nulo.

No Anexo 2 apresenta-se um exemplo de uma listagem de dados e de resultados do programa KONIK3.FOR.

4.2.5 - Método do percurso aleatório

4.2.5.1 - Descrição geral

O método do percurso aleatório (random-walk) pode ser aplicado, com muito interesse, ao cálculo da parcela dispersiva da equação da convecção-dispersão. Essa aplicação, como já se referiu anteriormente, vem desenvolvida em PRICKETT et al. 1981.

Considere-se, por exemplo, a injeção instantânea de um poluente num aquífero homogêneo, com velocidade de escoamento constante segundo a direção x . Como se indicou em 4.2.1 a solução analítica para a equação da convecção dispersão desse problema é dado por BEAR 1972:

$$C(x, t) = \frac{1}{(4\pi d_L Vt)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(x - Vt)^2}{4d_L Vt} \right] \quad (4.34)$$

onde

C = concentração

DL = dispersão longitudinal

V = velocidade (intersticial)

dL = dispersividade longitudinal (dL = DL/V)

t = tempo

x = distância segundo a direcção X

A configuração das curvas $C(x',t)$ encontram-se desenhadas na (Fig. 4.8), com $x' = x - Vt$. Trata-se, como se disse em 4.2.4, de um referencial móvel e de uma análise do tipo lagrangeano. Segundo MOOD e GRAYBILL 1963, uma variável aleatória x que segue uma distribuição normal tem a seguinte função densidade de probabilidade $n(x)$:

$$n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} \exp \left[-\frac{(x-u)^2}{2\sigma^2} \right] \quad (4.35)$$

onde

σ = desvio padrão da distribuição

u = média da distribuição

Supondo agora que

$$\sigma = \sqrt{2d_L Vt} \quad (4.36)$$

e que

$$u = Vt$$

verifica-se que as equações (4.35) e (4.36) são idênticas e que portanto

$$n(x) = C(x, t) \quad (4.37)$$

isto é a curva da concentração $C(x, t)$ tem a forma geométrica de uma lei normal.

A solução do problema do transporte de massa segundo este método baseia-se na hipótese de a dispersão num meio poroso poder ser considerada um processo aleatório que tende para uma distribuição normal.

Na Fig. 4.9 visualizam-se os conceitos básicos do método do percurso aleatório. Observa-se que o transporte foi dividido em duas parcelas. A primeira parcela, de ordem convectiva, leva as partículas poluentes a deslocarem-se segundo a linha de fluxo local. A segunda parcela, aleatória, é calculada por funções de probabilidade relacionadas com o percurso convectivo efectuado e com os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal do meio poroso.

No modelo devem ser incluídas suficientes partículas, representativas das partículas poluentes reais, de modo a que as suas localizações à medida que se deslocam, possam descrever adequadamente a distribuição do poluente real.

PRICKETT et al. 1981 referem várias vantagens deste método, para o cálculo da dispersão, em relação ao método das características associado, apenas, ao método diferenças finitas:

- a) No método do percurso aleatório não há equação da dispersão para resolver. Um pequeno número de linhas de programação representa completamente o fenómeno dispersivo.
- b) O movimento das partículas efectua-se num espaço contínuo.
- c) A concentração só necessita de ser calculada onde é necessária e não em toda a malha.
- d) Só se colocam, inicialmente, partículas nas regiões onde existem problemas de qualidade das águas subterrâneas. Não é necessária a colocação de partículas no resto do modelo.
- e) Não se verificam oscilações nem dispersões numéricas na resolução da parcela dispersiva da equação da convecção-dispersão.
- f) São tratados com precisão os problemas de escoamentos divergentes, especialmente na vizinhança de poços de injeção ou de captações.

As desvantagens que se apresentam para o método do percurso aleatório são as seguintes:

- a) Podem-se obter concentrações superiores à concentração inicial, especialmente com malhas pouco refinadas.
- b) O mapa de concentrações pode ter um aspecto visual desagradável, quando o número de partículas é diminuto.
- c) O método pode requerer um número muito elevado de partículas para certos problemas.
- d) É indispensável desenvolver uma análise, crítica, para a

selecção dos resultados, o que restringe a aplicação do método a problemas reais até se possuir uma boa experiência prática com a utilização do modelo.

4.2.5.2 - Modelo seleccionado

O modelo seleccionado, que se supõe ser o único existente sobre este método, é apresentado em PRICKETT et al. 1981. Denominou-se RANDOM.FOR neste trabalho.

Na adaptação ao computador (DEC-10) do LNEC foram substituídas as subrotinas de geração de números aleatórios. Adaptou-se ainda o programa a unidades métricas.

A Fig. 4.9(a) representa uma partícula a ser deslocada, no modelo. Supôs-se que o escoamento se processa segundo x e que apenas há dispersão longitudinal. Durante o intervalo de tempo Δt a partícula é primeiramente deslocada por convecção. Seguidamente uma deslocação aleatória segundo +x ou -x, originada pela dispersão longitudinal coloca a partícula na nova posição. O valor do termo dispersivo é o seguinte:

$$\Delta x_d = \sqrt{2d_L V_x \Delta t} \text{ ANORM}(0) \quad (4.38)$$

onde

ANORM(0) é um número aleatório retirado de uma distribuição normal de números com média zero e desvio padrão unitário

Repetindo o processo para um número N , suficientemente grande, de partículas, com a mesma localização inicial e com o mesmo termo convectivo, pode-se traçar, no final, um mapa com as novas posições das partículas. Estas terão uma função discreta de densidade

$$C(x,t) \rightarrow n(x) \rightarrow \frac{N}{dx} \cdot$$

$$= \frac{N_0}{\sqrt{2\pi} \sqrt{2d_x V_x \Delta t}} \exp \left[-\frac{(x - V_x \Delta t)^2}{4d_x V_x t} \right] \quad (4.39)$$

onde

dx = intervalo no qual se encontram as N partículas

N_0 = número total de partículas na experiência

O cálculo da parcela correspondente à dispersão transversal é feito segundo um esquema equivalente Fig. 4.9(b). A Fig. 4.9(c) mostra o tratamento conjunto das dispersões longitudinal e transversal.

No Anexo 2 apresenta-se um exemplo de uma listagem de dados e de resultados do programa RANDOM.FJR.

4.2.6 - Método dos elementos finitos

4.2.6.1 - Descrição geral

Segundo HUYAKORN e PINDER 1983 o método dos elementos finitos desenvolveu-se inicialmente com contribuições de matemáticos, físicos e engenheiros. A primeira tentativa para resolver uma equação diferencial (elíptica) usando pequenas subregiões interconectadas (piecewise) ficou a dever-se a COURANT 1949. A primeira aplicação, importante, desta técnica a problemas da teoria das estruturas foi feita por TURNER et al. 1956. O nome "método dos elementos finitos" foi sugerido em CLOUGH 1960, num trabalho sobre a teoria das estruturas. Desde então o método teve um rápido desenvolvimento e generalizou-se como ferramenta matemática para a resolução de um largo número de problemas. HUEBNER 1975 apresenta uma perspectiva histórica pormenorizada do método dos elementos finitos.

Os trabalhos de ZIENKIEWICZ et al. 1966 e JAVANDEL e WITHERSPOON 1968 parece terem sido as duas primeiras publicações a descrever o uso de elementos finitos (triangulares) a problemas de escoamento subterrâneo.

A técnica denominada de Galerkin do método dos elementos finitos foi introduzida em problemas de meios subterrâneos, engenharia de petróleos, por PRICE et al. 1968. O objectivo dos autores era o de ultrapassar os problemas geralmente associados ao método das diferenças finitas, em problemas dominados pela parcela convectiva da equação do transporte de massa.

NALLUSWAMI et al. 1972 apresentam um modelo de elementos finitos baseado no método variacional, para o problema do transporte de massa.

PINDER 1973 comenta que o método das diferenças finitas embora tenha sido aplicado, largamente, a vários problemas de engenharia não apresenta, em geral, resultados satisfatórios nos problemas do transporte de massa. O estudo desse autor sobre um

problema de contaminação de águas subterrâneas, por crómio, supõe-se ser o primeiro trabalho de aplicação do método dos elementos finitos (Galerkin) ao problema do transporte de massa (bidimensional, em plano horizontal).

GUPTA et al. 1975 apresentam, num estudo de aplicação, um modelo tridimensional com elementos tetragonais isoparamétricos mistos, que permitem o tratamento simultâneo de aproximações lineares, quadráticas e cúbicas da equação da convecção-dispersão. Apresentam ainda uma nova técnica de organização dos elementos finitos, que permite o tratamento de problemas de grandes dimensões, de aquíferos complexos, em computadores de dimensão média, com custos muito baixos. Espera-se para o final de 1985 a publicação de um novo programa (CFEST) desenvolvido a partir de GUPTA et al. 1975. GUPTA e COLE 1985 apresenta o modelo de escoamento subterrâneo que servirá de base ao modelo de transporte de massa referido.

Dos primeiros anos de aplicação do método dos elementos finitos a problemas de transporte de massa em águas subterrâneas salienta-se o excelente trabalho de NISHI et al. 1976, e, em relação aos aspectos químicos relacionados com a equação da convecção-dispersão, BACK e CHERRY 1976.

Os modelos de elementos finitos, considerados muito mais potentes e flexíveis que os de diferenças finitas, apresentavam na altura da publicação de GUPTA et al. 1975 a desvantagem de necessitarem de memórias de computador muito grandes e de tempos de cálculo muito superiores aos requeridos pelo método das diferenças finitas. Desde então numerosos trabalhos têm sido desenvolvidos para a análise de técnicas matemáticas sofisticadas que permitem atenuar os problemas das oscilações e dispersões

numéricas, já referidos nos pontos anteriores, e ainda diminuir os tempos de cálculo e a necessidade de grandes áreas de memória de computador. Grande parte desses trabalhos têm sido publicados nas principais revistas da especialidade e nas comunicações de várias conferências internacionais sobre elementos finitos, das quais se destacam as denominadas por "Finite Element in Water Resources" iniciadas em 1976 na Universidade de Princeton nos E.U.A. (GRAY et al. 1976) e que se realizaram desde então em 1978 no Imperial College de Londres, R.U., (BREBBIA et al. 1978) em 1980 na Universidade do Mississippi, E.U.A., (WANG et al. 1980) em 1982 na Universidade de Hannover, R.F.A., (HOLTZ et al. 1982), em 1984 na Universidade de Vermont, E.U.A., (LAIBLE et al. 1984), a que se realizará em 1986 em Lisboa, no Laboratório Nacional de Engenharia Civil (nesta conferência dar-se-á ênfase especial ao problema do transporte de massa), e o EUROMECH 143, realizado na Universidade de Delft em 1981 (VERRUIJT e BARRENDIS 1981). O número de comunicações apresentadas nesses encontros é de cerca de 400. Abrangem praticamente todos os aspectos relevantes da teoria e da aplicação prática do método dos elementos finitos e ainda de outros métodos com ele relacionados, nomeadamente os métodos das diferenças finitas, das características e dos elementos de fronteira. As comunicações sobre águas subterrâneas têm tido importância destacada no número total das comunicações publicadas. O problema do transporte de massa tem vindo a aumentar significativamente de interesse, sendo, analisado em capítulo separado desde 1982.

São numerosos os artigos que comparam vários modelos e técnicas de elementos finitos entre si e com outros métodos, principalmente com o método das diferenças finitas. As

comparações feitas não são contudo conclusivas. As várias técnicas empregadas apresentam em geral vantagens de ordem prática, quer quanto à precisão dos resultados quer quanto aos tempos de cálculo, para os problemas tratados. Por exemplo, e ao contrário do que é habitualmente aceite, SPRAGGS 1978, para problemas de descargas térmicas, chega à conclusão que o MDF é mais caro que MEF e que a comparação de resultados indica que a mais simples malha do MEF permite obter resultados mais precisos que a mais sofisticada malha do MDF.

Para a equação da convecção-dispersão EHLIG 1976 compara dois modelos de MDF e três modelos de MEF. Conclui que o MEF é o mais preciso, principalmente com interpolações cúbicas com polinómios de Hermite.

PINDER e FRIND 1972 recomendam o método de Galerkin com elementos isoparamétricos mistos. Concluem que os resultados obtidos são melhores que os do MDF.

HUANG e WU 1976 recomendam para problemas tridimensionais elementos cilíndricos isoparamétricos mistos, como os indicados por GUPTA et al. 1975.

LAM 1976 comparando o MDF e o MEF, para problemas costeiros de convecção-dispersão, conclui que o MEF não é melhor que o MDF.

MERCER e FAUST 1980 recomendam a utilização do MDF para problemas do transporte de poluentes, excepto nas situações de forte componente convectiva, para os quais sugerem o MEF ou o método das características.

HUYAKORN e PINDER 1983 recomendam para problemas de forte componente convectiva o uso de técnicas de aproximação de ponderação progressiva assimétrica ("asymmetric upstream weighting"). Comentam contudo que técnicas deste tipo acarretam problemas de dispersão numérica. Os resultados obtidos deverão

assim, sempre que possível, ser comparados com os de soluções analíticas.

Ainda sobre este assunto, YEH 1984 analisa e compara vários esquemas de ponderação ("orthogonal upstream weighting", "orthogonal weighting", "non-orthogonal upstream weighting", "Galerkin weighting"). Conclui que para situações onde domine a dispersão (Número de Peclet: $Pe = 0,05$) ou em que a dispersão e a convecção sejam equivalentes ($Pe = 1$) os resultados obtidos pelos vários métodos são semelhantes. Para problemas dominados pela convecção ($Pe = 50$) o método "non-orthogonal upstream weighting" é o mais preciso. Os resultados obtidos com os outros métodos são, no entanto, comparáveis. O método de Galerkin foi, para esse estudo comparativo, o que necessitou de um tempo de cálculo (CPU) menor.

Para evitar o problema da dispersão numérica, eventualmente, provocado pelas técnicas "upwinding" MOHSEN 1984 sugere a utilização de elementos "adaptativos". Não seriam assim necessárias técnicas de "up-streaming".

Em relação à integração no tempo, SMITH 1976 desenvolve uma comparação de várias técnicas relacionadas com o MDF, e aplicadas ao MEF (Galerkin). É interessante salientar o seguinte: "comparada com a sofisticação da discretização do MEF no espaço, a simplicidade da discretização no tempo, normalmente usada em problemas de engenharia é, talvez, surpreendente. Os elementos finitos no tempo foram sugeridos há vários anos, mas a ideia parece não ter sido usualmente aplicada. Em vez disso, parece que as técnicas lineares de interpolação no tempo são as mais utilizadas na prática". Da comparação de várias técnicas ("fully implicit", Crank-Nicolson e vários métodos atribuídos a Norsett)

SMITH 1976 conclui que os elementos finitos Galerkin, no espaço, e os métodos de Norsett, no tempo, produzem soluções precisas, com comportamentos previsíveis, para uma larga gama de problemas de dispersão e convecção. O método de Crank-Nicolson comportou-se bem para situações de convecção pura não tendo apresentado dispersão numérica. Verificaram-se no entanto desvios negativos a montante da frente de concentração. Para transportes de massa que incluam a convecção e a dispersão, o comportamento do método de Crank-Nicolson apresentou oscilações numéricas (velocidade/dispersão = 0,1). As soluções por este método, embora assegurem a estabilidade da solução, deverão incluir regras destinadas a um dimensionamento correcto do passo temporal.

CORREIA 1979 descreve um modelo MEF para o cálculo de escoamentos subterrâneos que utiliza o método de Galerkin para a discretização no espaço e no tempo.

Soluções mistas do método dos elementos finitos e do método das diferenças finitas podem ser bastante vantajosas: BABU e PINDER 1984 apresentam um modelo tridimensional de transporte de massa, onde a discretização, no plano horizontal, é feita utilizando o MEF, numa primeira etapa. Numa segunda etapa equaciona-se o problema na dimensão vertical utilizando o MDF. Poupa-se assim consideravelmente, segundo os autores, tanto em memória de computador como em tempo de cálculo.

Referem-se finalmente, para a resolução do problema do transporte de massa, os métodos Eulerianos-Lagrangeanos. Esses métodos usam uma malha de elementos finitos, fixa no espaço, conjuntamente com partículas auxiliares de cálculo, que se movem no campo do escoamento. Trata-se assim de uma associação do MEF

com o método das características, anteriormente referido. NEUMAN 1981 e NEUMAN e SOREK 1982 aplicam esquemas deste tipo a problemas unidimensionais. BAPTISTA et al. 1984 aplicam esse método a problemas bidimensionais. Em ambos os casos se concluiu, como tinha já acontecido em idênticas associações com o método das diferenças finitas, que a precisão dos resultados é muito boa, principalmente quando a convecção é dominante. No estudo da situação unidimensional cita-se, no entanto, que a solução apresenta, por vezes, irregularidades quando a parcela dispersiva se torna dominante.

Para concluir a descrição geral do método dos elementos finitos apresenta-se uma análise sucinta das seguintes técnicas - o método varacional e o método dos resíduos pesados (o método de Galerkin é um caso particular do método dos resíduos pesados). Apresentam-se ainda os vários tipos de elementos de utilização mais habitual em problemas bidimensionais e os tipos de funções de aproximação normalmente empregados.

No cálculo matemático podem-se identificar dois tipos de problemas fundamentais: a integração (por exemplo o cálculo da área localizada sob uma curva) e a diferenciação (cálculo da tangente a uma curva num ponto). Ambos os problemas eram já conhecidos no século XVII. Em 1667 Isaac Barrow descobriu que a integração e a diferenciação são problemas essencialmente inversos um do outro. O método das diferenças finitas, que se apresentou, aproxima as equações diferenciais de um ponto de vista diferencial. O método dos elementos finitos aproxima a equação diferencial de um ponto de vista integral. Assim, com base na descoberta de Isaac Barrow, que constitui o teorema fundamental do cálculo, é de supor que os dois métodos, o MDF e o

MÉF, estejam relacionados e que converjam, embora de modo diverso, para a mesma solução.

O método dos elementos finitos é um método numérico adequado à resolução de equações diferenciais por divisão da região em estudo em pequenas regiões interligadas entre si, denominadas elementos finitos. Tais elementos, que podem ter várias formas, por exemplo triângulos, rectângulos, quadriláteros de lados lineares ou curvos, são agrupados para formar a região em estudo.

A análise de um problema pelo método dos elementos finitos pode ser efectuada do seguinte modo:

- a) O sistema físico é subdividido numa série de elementos finitos interligados entre si por um número finito de pontos, designados nós. Este processo denomina-se discretização. Cada elemento, e cada nó, é numerado de uma forma sequencial de modo a que a diferença numérica existente entre nós adjacentes, ou a diferença numérica existente entre os nós de um mesmo elemento, seja a menor possível.
- b) Desenvolve-se uma expressão matricial relacionada com as variáveis definidas em cada nó. Essa expressão é denominada matriz do elemento ou matriz elementar. Para um problema contínuo a matriz elementar é obtida por uma análise matemática que usa o método variacional ou o método dos resíduos pesados.
- c) As matrizes elementares são agrupadas de modo a formarem um conjunto de equações algébricas que descrevem o sistema global. A montagem das matrizes elementares deve ser feita de modo a assegurar determinadas condições de

compatibilização, em cada nó partilhado por elementos diferentes.

- d) Introduzem-se as condições de fronteira na matriz global do sistema.
- e) Resolve-se a matriz global do sistema. Como se indicou anteriormente existem várias técnicas para a resolução do sistema de equações: técnicas directas (Gauss, Choleski, etc.) e iterativas (ADI, SIP, etc.). Essas técnicas deverão preservar a estrutura simétrica e em banda da matriz global.
- f) Finalmente calculam-se, se necessário, variáveis auxiliares que incluam derivadas dos valores nodais calculados.

No método variacional, também designado método de Rayleigh-Ritz, substitui-se o cálculo da solução da equação diferencial, por um problema variacional equivalente, que consiste na determinação de uma função (desconhecida) que minimiza um integral, sujeito às condições de fronteira do problema. Tal integral é denominado "funcional". As duas formulações, a diferencial e a integral, são equivalentes sendo a solução exacta de uma a solução da outra. Esta equivalência encontra-se demonstrada no cálculo das variações.

O funcional (I) que se pretende analisar pode ter a seguinte expressão, unidimensional, para a região R:

$$I = \int_R F(x, u, du/dx, d^2u/dx^2 \dots) dx \quad (4.39a)$$

A solução aproximada, global, \hat{u} da equação diferencial pode ser aproximada por uma combinação linear de funções independentes (TUB 1977):

$$\hat{u}(x) = \sum_{n=1}^N C_n V_n(x) \quad (4.40)$$

onde

C_n = são coeficientes constantes que representam os valores da função u nos nós

V_n = é uma função simples que satisfaz as condições de fronteira essenciais ou geométricas, definidas na região

N = número de nós da região em estudo

Substituindo a função de aproximação \hat{u} na expressão variacional que traduz o problema e efectuando as integrações necessárias obtém-se uma expressão que depende apenas dos coeficientes C_n :

$$I = I(C_1, \dots, C_N) \quad (4.41)$$

As derivadas de I em relação aos coeficientes C_n apresentam um valor nulo quando o valor do integral for mínimo:

$$\frac{\partial I}{\partial C_n} = 0 \quad n=1, \dots, N \quad (4.42)$$

Deste sistema de equações obtêm-se os N coeficientes C_n , que substituídos na função de aproximação \hat{u} conduzem à solução aproximada pretendida.

Em FERREIRA 1983b apresenta-se um modelo desenvolvido para escoamentos subterrâneos bidimensionais, no plano vertical, pelo método variacional. As variáveis C_n representam nesse estudo as alturas piezométricas nos nós dos elementos. A expressão variacional que se resolve é a seguinte:

$$I = \frac{1}{2} \int_R \left[K_{xx} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + K_{zz} \left(\frac{\partial h}{\partial z} \right)^2 \right] dx dz \quad (4.43)$$

As variáveis têm o significado habitual apresentado no Capítulo 3.

O método dos resíduos pesados constitui o outro método de resolução de equações diferencial por elementos finitos. É actualmente mais aplicado que o método variacional. Não requer o uso de funcionais o que o torna vantajoso uma vez que, em problemas práticos, os princípios variacionais resolutivos nem sempre existem.

Considere-se um problema contínuo numa região R , confinada por uma fronteira B , governado pela seguinte equação diferencial (HUYAKORN e PINDER 1983):

$$L(u) - f = 0 \quad (4.44)$$

A solução aproximada do método dos resíduos pesados é obtida em três etapas:

a) Na primeira aproxima-se a função desconhecida u por uma função de aproximação \hat{u}

$$\hat{u} = \sum_{i=1}^N N_i C_i \quad (4.45)$$

onde

N_i = são funções de forma linearmente independentes

C_i = são coeficientes desconhecidos a determinar

É usual seleccionar as funções de forma de modo a satisfazerem as condições de fronteira essenciais (geométricas).

Uma vez que a função \hat{u} é apenas uma aproximação da função u , a equação diferencial 4.44 não é satisfeita exactamente. Substituindo \hat{u} na equação diferencial obtém-se assim um erro ou resíduo :

$$\varepsilon = L(\hat{u}) - f \quad (4.46)$$

O método dos resíduos pesados procura determinar as incógnitas C_i de tal forma que o erro ε seja o mínimo possível. Isto consegue-se ponderando o integral de ε em toda a região R e em seguida igualando o integral ponderado a zero.

b) A segunda etapa do método consiste na selecção de n funções de ponderação linearmente independentes w_i e na exigência que:

$$\int_R w_i \varepsilon dR = \int_R w_i (L(\hat{u}) - f) dR = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4.47)$$

Satisfazendo esta equação, com a aproximação \hat{u} , obtém-se um sistema de equações com as n incógnitas C_i , $i = 1, 2, \dots, n$

c) A terceira etapa consiste na resolução do sistema de equações em relação a C_i .

Substituindo C_i na função aproximada \hat{u} obtém-se a solução aproximada pretendida para a função inicial u .

Podem-se considerar vários métodos de ponderação dos resíduos. Diferem entre si em relação às funções de ponderação w_i :

a) Método da colocação simples: a função de ponderação é definida num único ponto do domínio.

b) Método da colocação múltipla: idem mas em vários pontos do domínio.

c) Método da colocação em sub-domínio: a função tem um valor constante e é aplicada a um sub-domínio do problema.

d) Método de Galerkin: a função de ponderação é igual à função de forma:

$$w_i = N_i$$

e) Método do erro quadrático (mínimos quadrados): o erro

$$\varepsilon = \int_R r^2 dR \quad (4.48)$$

deve ser mínimo e a função de ponderação é a seguinte:

$$w_i = \frac{\partial r}{\partial C_i} \quad (4.49)$$

Em problemas bidimensionais a forma dos elementos finitos pode ser, como se referiu anteriormente, triangular, rectangular, ou ainda a de quadriláteros irregulares. Os lados dos elementos podem conter apenas dois nós nos vértices, designando-se os elementos lineares, ou possuírem um nó no meio do lado, elementos quadráticos, ou dois nós, elementos cúbicos. A designação corresponde ao tipo de funções de aproximação que o número de nós em cada lado do elemento permite considerar. Podem ser também desenvolvidas malhas de elementos mistos, isto é com um dos lados do elemento por exemplo linear e os outros quadráticos ou cúbicos. Para facilitar a resolução da equação diferencial, podem definir-se coordenadas específicas de cada elemento finito em estudo, as chamadas coordenadas locais ou isoparamétricas. Desse modo podem transformar-se quadriláteros irregulares, em coordenadas globais, em quadrados, nas coordenadas locais. O mesmo se passa no caso dos elementos triangulares. Neste caso normalmente usam-se coordenadas de área.

Para uma análise mais pormenorizada sobre o método dos elementos finitos sugere-se a leitura de ZIENKIEWICZ 1977 e de HUYAKORN e PINDER 1983.

4.2.6.2 - Modelos seleccionados

4.2.6.2.1 - Elementos triangulares lineares

O modelo seleccionado para a resolução do problema do transporte de massa pelo MEF (Galerkin), com elementos triangulares e aproximações lineares, foi o modelo DISPER1 descrito em PAGENKOPF et al. 1976, desenvolvido no Massachusetts Institute of Technology (MIT), dos E.U.A. Este modelo foi seleccionado por se basear nos conceitos mais simples do MEF: elementos finitos triangulares com nós nos vértices, permitindo apenas aproximações do tipo linear. O modelo é bidimensional, integrado na dimensão vertical. As características aparentemente simplificadas deste modelo foram deliberadamente consideradas no seu desenvolvimento, procurando os autores tirar partido da sua simplicidade, para uma redução dos tempos de cálculo em computador. Em certos casos reais essa simplicidade é obtida à custa da precisão dos resultados, nomeadamente nas aproximações admitidas em fronteiras fortemente curvilíneas.

Os dados de entrada necessários à execução do modelo agrupam-se do seguinte modo:

- a) Geometria da região em estudo em termos de uma malha de elementos finitos, incluindo, a profundidade em cada nó.
- b) Dados directos, relações funcionais ou programas auxiliares, para a descrição do campo de velocidades, no tempo, para os valores da dispersão e para os coeficientes de decaimento.
- c) Localização, duração e intensidade de fontes e sumidouros situados em nós, em elementos ou em lados de elementos.
- d) Localização, duração e intensidade de concentrações impostas nos nós (condições de fronteira).

e) Concentrações iniciais em cada nó (condições iniciais).

O utilizador pode escolher as unidades que desejar, desde que as mesmas sejam coerentes em todos os dados de entrada.

O programa inclui uma subrotina para a renumeração, interna, dos nós da malha, caso esta não tenha sido apresentada de início de uma forma optimizada.

No LNEC o programa de computador, deste modelo, designou-se DISP1.FOR.

No Anexo 2 apresenta-se um exemplo de uma listagem de dados e de resultados do programa.

4.2.6.2.2 - Elementos triangulares quadráticos

O modelo seleccionado baseado em elementos triangulares quadráticos vem descrito em CMC 1977 (Computational Mechanics Center da Universidade de Southampton, R.U.) designando-se af DISPER-1. No LNEC este modelo denominou-se DISP2.FOR.

O modelo baseia-se no método dos elementos finitos (Galerkin) com elementos triangulares isoparamétricos, de seis nós. Os elementos podem assim representar fronteiras curvas. A integração no tempo das equações diferenciais é feita pelo método de Crank-Nicolson, o que assegura, segundo os autores, a estabilidade da solução. Apresentam regras para o traçado adequado da malha espacial e do cálculo do passo temporal.

A equação diferencial analisada é a seguinte:

$$\rho C \left\{ h \frac{\partial \theta}{\partial t} + h V_i \frac{\partial \theta}{\partial x_i} = F - ah\theta - \sum Q_j \Delta_j + \right. \\ \left. + \rho C \frac{\partial}{\partial x_i} \left[h D_i \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \right] \right. \quad i=1,2 \quad (4.50)$$

onde

- ρ = densidade do líquido
- C = calor específico (só aplicável a problemas térmicos. Para o transporte de massa $C = 1$)
- h = profundidade
- V_i = velocidade intersticial
- D_i = coeficientes de dispersão
- $\alpha = h\beta$ = coeficiente de decaimento
- ΣQ_j = somatório das fontes pontuais
- F = $\rho f h$ = fontes distribuídas
- θ = concentração ou temperatura

Esta equação é aplicada a problemas integrados na dimensão vertical. Os autores indicam que o programa se encontra completamente testado e foi aplicado com êxito a problemas de engenharia em vários países.

Os dados de entrada do programa são os seguintes:

- a) Título do estudo
- b) Variáveis de controle do programa (número de elementos e nós, condições de fronteira, etc.). Incluem quatro situações calculadas de modo diverso:
 - b1. - campo de velocidades variável no tempo

- b2. - campo de velocidades variável no espaço e constante no tempo
- b3. - cálculo da solução final em regime permanente
- b4. - cálculo da função de corrente
- c) Variáveis caracterizadoras do problema real (decaimentos, fontes superficiais, passo de cálculo, etc.)
- d) Coeficientes de dispersão
- e) Tabela de elementos e nós
- f) Tabela de coordenadas dos nós em x,y
- g) Condições de fronteira do tipo concentração e do tipo fluxo
- h) Campo de velocidades
- i) Sumidouros
- j) Condições iniciais

As variáveis de entrada e os resultados do programa são armazenados durante o cálculo em memória real (core), num único ficheiro, dimensionado no início do programa. O programa possui instruções para verificar o dimensionamento desse ficheiro (array), evitando sobreposições de variáveis.

No Anexo 2 apresenta-se um exemplo de uma listagem de dados e de resultados do programa.

Este programa foi seleccionado por se pensar, de acordo com o que foi descrito em 4.2.6.1, que constitui um bom exemplo de um modelo típico de elementos finitos, que não descarta a precisão dos resultados face ao tempo de cálculo, embora o procure

diminuir.

4.2.6.2.3 - Elementos quadrangulares quadráticos

A partir do modelo apresentado no ponto anterior desenvolveu-se um novo modelo de elementos finitos, quadrangulares quadráticos.

Este tipo de elementos foi empregado com sucesso em CORREIA 1979, para o cálculo de escoamentos subterrâneos, que incluem a piezometria e o campo de velocidades do aquífero, programa ESHQ. Um desenvolvimento desse modelo, elaborado para este trabalho, permite a utilização do programa (ESHQ) para o cálculo do campo de velocidades do programa DISP2.FOR, apresentado no ponto anterior.

A reformulação do programa DISP2.FOR para elementos quadrangulares, que se denominou DISP3.FOR, implicou o desenvolvimento de novas subrotinas para o cálculo das integrações de linha e de área. Utilizaram-se as integrações de Gauss, adequadas a rectângulos, e não as integrações de Hammer, visto serem adequadas a triângulos.

As matrizes elementares são calculadas em coordenadas isoparamétricas.

No Anexo 2 apresenta-se uma listagem dos dados de entrada e dos resultados de um cálculo efectuado com este programa.

A selecção deste tipo de elementos para o programa DISP3.FOR baseou-se nos testes apresentados em CORREIA 1979. Nesse estudo o autor conclui que é excelente a concordância dos resultados numéricos obtidos com o programa ESHQ, em relação aos de soluções analíticas.

4.2.6.2.4 - Elementos triangulares e quadrangulares quadráticos

A fim de permitir uma adaptação mais fácil das malhas de elementos finitos a situações reais, tirando pleno partido das potencialidades dos elementos triangulares e dos elementos quadrangulares quadráticos, desenvolveu-se a partir dos programas DISP2.FOR e DISP3.FOR, apresentados anteriormente, um novo programa, DISP4.FOR, que permite a utilização conjunta dos dois tipos de elementos.

Todos os cálculos se basearam no conjunto das características e nos dados dos programas anteriores. Teve-se no entanto de introduzir dois novos tipos de dados:

- a) Na alínea b) de 4.2.6.2.2 (DISP2.FOR) deve indicar-se o número de triângulos e o número de rectângulos existentes na malha
- b) Entre a alínea d) e a alínea e) do mesmo ponto deve-se introduzir a tabela de elementos triangulares e dos respectivos nós.

No Anexo 2 apresenta-se uma listagem de dados e de resultados de um cálculo efectuado com este programa.

4.2.7 - Método dos elementos de fronteira

4.2.7.1 - Descrição geral

Nas aplicações convencionais do método dos resíduos pesados, por exemplo no método de Galerkin, utilizam-se funções que satisfazem exactamente as condições de fronteira, nas que são apenas aproximadas no domínio. O esquema alterativo que constitui o método dos elementos de fronteira aplica funções que são exactas no domínio mas que apenas satisfazem aproximadamente as condições de fronteira.

Segundo VEIGA 1985 dois dos primeiros trabalhos sobre o método dos elementos de fronteira, também chamado método dos integrais de fronteira (MIF), deveram-se a JASWON e PONTER 1963 e a SYMN 1963. BREBBIA 1978a e BREBBIA e WALKER 1980 indicam, sem citar as referências anteriores, que o MIF foi desenvolvido na Universidade de Southampton na sequência de trabalhos sobre equações integrais clássicas e sobre o método dos elementos finitos.

LIGGETT 1977 aplicou, ao que se supõe pela primeira vez o MIF a problemas de hidrologia subterrânea, para a localização da superfície livre de escomentos em meios porosos. Seguiram-se numerosos trabalhos nesta área dos quais se salientam LIU e LIGGETT 1979, LENNON et al. 1979, LENNON et al. 1980, GOMEZ et al. 1980, LAFE et al. 1980, LAFE et al. 1981 e LIU et al. 1981.

A partir de 1978 realizaram-se várias conferências internacionais sobre este método. Salientam-se as conferências com comunicações editadas por BREBBIA 1978b, BREBBIA 1980, BREBBIA 1981 e BREBBIA 1983, contendo mais de uma centena de artigos sobre MIF. Publicaram-se também vários artigos sobre este método nas conferências internacionais sobre elementos finitos, referidas em 4.2.6.1.

A grande vantagem deste método reside na redução da dimensão do problema, em uma unidade, com a correspondente simplificação de preparação de dados. Salienta-se a relativa facilidade com que o método trata os problemas de fronteiras móveis e de domínios infinitos. No entanto quando se pretende resolver problemas parabólicos ou problemas que envolvam coeficientes variáveis (dispersões, condutividades hidráulicas, etc) como é usual nos problemas de escoamentos e de transporte de massa, em meios porosos, o método perde muito do seu interesse, pois implica a divisão do domínio em zonas ou regiões, que são tratadas separadamente, havendo a necessidade de compatibilização dos resultados nas fronteiras comuns. Várias técnicas têm sido desenvolvidas, procurando ultrapassar este tipo de problemas em águas subterrâneas. Salientam-se as seguintes contribuições: CHENG 1984 e VEIGA 1985 onde se estudam problemas de zonamentos em meios porosos a fim de permitir a análise de escoamentos com condutividades hidráulicas variadas.

Em relação ao problema do transporte de massa, equação da convecção-dispersão, BREBBIA e SKERGET 1984 sugerem esquemas de tratamento do problema, em regime permanente e em regime variável, usando o método dos resíduos pesados para o desenvolvimento das equações integrais no tempo e no espaço. Salientam que se obtêm resultados precisos quando o termo convectivo é tratado da forma que sugerem. Apresentam ainda o estudo de problemas não-lineares. Esses problemas são linearizados usando transformadas de Kirchhoff.

Um modo mais claro e racional de classificar os diferentes métodos numéricos já apresentados e o método dos elementos de fronteira, que agora se apresenta, baseia-se na formulação do método dos resíduos pesados, introduzido em 4.2.6.1.

Suponha-se que se pretende resolver uma função no domínio D , por exemplo a equação de Laplace:

$$\nabla^2 u_0 = 0 \text{ em } D \quad (4.51)$$

onde u_0 representa a solução exacta da equação em D .

As condições de fronteira são:

$$u_0 = \bar{u} \quad \text{em} \quad S_1 \quad (4.52)$$

$$q_0 = \frac{\partial u_0}{\partial n} = \bar{q} \quad \text{em} \quad S_2 \quad (4.53)$$

onde S_1 e S_2 correspondem às fronteiras onde se aplica uma ou outra condição. A solução exacta é substituída por uma função aproximada u que é igual ao produto de funções independentes ϕ_i e coeficientes arbitrários α_i

$$u = \alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2 + \dots \quad (4.54)$$

A substituição de u em 4.51, 4.52 e 4.53 acarreta a introdução de erros nessas equações uma vez que u é apenas uma aproximação da solução exacta u_0 . Obtém-se assim os erros:

$$\varepsilon = \nabla^2 u \neq 0 \text{ em } D \quad (4.55)$$

$$\varepsilon_1 = u - \bar{u} \neq 0 \text{ em } S_1 \quad (4.56)$$

$$\varepsilon_2 = q - \bar{q} \neq 0 \text{ em } S_2 \quad (4.57)$$

$$\text{com } q = \partial u / \partial n \quad (4.58)$$

O objectivo do método dos resíduos pesados é a minimização desses erros, no domínio e nas fronteiras. Os erros serão distribuídos pelo domínio e/ou pelas fronteiras. O modo como essa distribuição se efectua dá origem às várias técnicas de resíduos pesados. Na técnica mais simples (formulações clássicas) satisfazem-se plenamente as condições de fronteira, isto é $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$, e distribuem-se os erros pelo domínio, de acordo com uma função de ponderação w que corresponde ao somatório do produto de funções independentes i por coeficientes arbitrários B_i , como se indicou em 4.2.6.1. Se as funções u e w forem iguais a técnica denomina-se de Galerkin (original). Se u e w forem diferentes pode chegar-se, matematicamente, à conclusão que uma das técnicas obtidas é a das diferenças finitas (BREBBIA e WALKER 1980), sendo as outras a dos mínimos quadrados, a da colocação, etc.

A técnica seguinte, mais elaborada origina as formulações denominadas fracas. Nesta técnica apenas se satisfaz uma das condições de fronteira, isto é $\varepsilon_1 = 0$ ou $\varepsilon_2 = 0$. Se as funções u e w forem iguais a técnica denomina-se Galerkin e constitui a equação base dos elementos finitos (Galerkin). Se u e w forem diferentes obtêm-se as restantes técnicas de elementos finitos.

Essas equações são obtidas a partir da integração por partes da equação geral dos resíduos pesados.

Finalmente a terceira técnica origina as formulações de fronteira. Nesta técnica não se satisfazem nenhuma das condições de fronteira e portanto $\varepsilon_1 \neq 0$ e $\varepsilon_2 \neq 0$. Integra-se por partes a equação geral dos resíduos pesados de modo a transferir completamente as derivadas da função de erro E do domínio para a função de peso w . As condições de admissibilidade da função w são tais que conduzem ao anulamento do integral do domínio, da equação dos resíduos pesados (o integral de área), ou reduzem o referido integral a um valor pontual, obtendo-se a equação integral de fronteira.

Se u e w forem iguais o método denomina-se de Trefftz. Se forem diferentes obtém-se o método dos elementos de fronteira.

Segundo VEIGA 1936 a equação de partida do MIF, por exemplo para a equação de Poisson ($\nabla^2 \phi = g$) é a seguinte:

$$\int_D (\nabla^2 w) u \, dV + \int_S \frac{\partial u}{\partial n} w \, dS - \int_S u \frac{\partial w}{\partial n} \, dS = \int_D g w \, dV \quad (4.59)$$

no domínio D , com condições de fronteira mistas $\phi = u$ em S_1 e $(\partial \phi / \partial n) = q$ em S_2 .

Escolhendo para função de peso w a solução fundamental da equação de Laplace num domínio infinito, isto é, a solução da equação

$$\nabla^2 w + \Delta^i = 0 \quad \text{em } D_\infty \quad (4.60)$$

onde Δ^i é a função de Dirac no ponto de aplicação i do domínio, virá, tendo em conta as propriedades de Δ^i , a expressão

$$\alpha_i u_i = \int_S w \frac{\partial u}{\partial n} dS - \int_S u \frac{\partial w}{\partial n} dS + \int_D g w dV \quad (4.61)$$

que permite calcular o valor de u num ponto i interior do domínio D , ou sobre a fronteira, conhecidos os valores de u e de $\partial u / \partial n$ na fronteira desse domínio.

A solução fundamental de 4.60, em duas dimensões, é a seguinte:

$$w = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{1}{r} \quad (4.62)$$

w = representa o potencial criado num ponto genérico j do plano pela colocação duma carga pontual unitária positiva no ponto i ;

r = representa a distância do ponto de observação j ao ponto i .

α_i toma o valor 1 para pontos localizados no interior do domínio D , $1/2$ para pontos localizados sobre a fronteira e 0 (zero) para pontos exteriores ao domínio.

A equação 4.61 pode ser resolvida numericamente discretizando a fronteira em $n = n_1 + n_2$ elementos, sendo n_1 o número de elementos localizados em S_1 e n_2 o número de elementos localizados em S_2 .

Os elementos podem ser (1) constantes, considerando-se u e

$\partial u/\partial n$ constantes no elemento, possuindo apenas um nó no meio do elemento, (2) lineares, com dois nós nos vértices sendo a variação de u e de $\partial u/\partial n$ linear ao longo do elemento e (3) quadráticos com dois nós nos vértices e um nó no centro, sendo a variação de u e de $\partial u/\partial n$ quadrática. As funções de interpolação ou de forma são consideradas em termos de variáveis locais. O integral

$$\int_D g w dV \quad (4.63)$$

é calculado dividindo o domínio em m células e efectuando a integração por exemplo por quadraturas de Gauss, em coordenadas de área. Vem assim para a equação, nos pontos de fronteira

$$\frac{1}{2} u_i + \sum_{k=1}^n \hat{H}_{ik} u_k = \sum_{k=1}^n G_{ik} q_k + \sum_{l=1}^m P_{il} \quad (4.64)$$

com

$$\hat{H}_{ik} = \int_{\delta_{sk}} \hat{q}(i, k) ds \quad \text{com} \quad \hat{q} = \frac{\partial w}{\partial n} \quad (\delta_{sk}: \text{elemento } k) \quad (4.65)$$

$$G_{ik} = \int_{\delta_{sk}} w(i, k) ds \quad (4.66)$$

$$P_{il} = \int_{D_l} g(l) w(i, l) dV \quad (4.67)$$

ou em forma matricial

$$\underline{H} \underline{u} = \underline{G} \underline{q} + \underline{p} \quad (4.68)$$

que pode ser reduzida à forma canónica

$$\underline{A} \underline{x} = \underline{b} \quad (4.69)$$

pela troca de colunas \underline{G} e \underline{H} , de modo a juntar no 2.º membro de 4.68 todas as incógnitas.

Resolvido o sistema obtêm-se os valores de u e de q nos pontos de fronteira onde não eram ainda conhecidos.

Esta rápida descrição foi apresentada para elementos constantes, que serão usados no programa seleccionado no ponto seguinte. Para as aproximações lineares e quadráticas proceder-se-ia de igual modo, adequando as funções de forma N_i .

Conhecidos os valores de u e de $\partial u / \partial n = q$ nos n pontos fronteiros pode-se calcular o valor da função num ponto interior do domínio pela seguinte equação:

$$u_i = \int_S q w \, ds - \int_S u \hat{q} \, ds + \int_D g w \, dV \quad (4.70)$$

Para uma análise pormenorizada dos desenvolvimentos apresentados sugere-se a leitura de PORTELA e ROMÃOZINHO 1979, BREBBIA e WALKER 1980 ou VEIGA 1985.

Como se indicou BREBBIA e SKERGET 1984 aplicam o MIF a problemas de convecção-dispersão. Incluem problemas dependentes do tempo, assumindo que as velocidades do escoamento (subterrâneo) V_x e V_y variam não só dentro de cada elemento mas também dentro de cada passo temporal de acordo com funções de interpolação ϕ , para o espaço, e ψ , para o tempo. Empregando elementos quadráticos no espaço e lineares no tempo comparam os resultados obtidos com os de soluções analíticas e com os obtidos pelo MEF. Os resultados são muito bons, especialmente quando se usam malhas de elementos de fronteira refinadas. Os autores não referem os tempos de cálculo necessários à execução de cada programa.

4.2.7.2 - Modelo seleccionado

Embora o método dos elementos de fronteira apresente notáveis vantagens em diversas áreas da engenharia civil, nomeadamente na mecânica estrutural, na hidráulica dos escoamentos em superfície livre, no estudo de problemas com fronteiras móveis e em problemas com domínios infinitos, não se apresenta tão aliciante nos problemas reais do transporte de poluentes em águas subterrâneas. Em problemas hidrogeológicos reais as situações condicionantes são muito variadas: existência de captações para abastecimento, rejeição localizada de efluentes (originados pela indústria, aglomerados urbanos, etc.) ou ainda em superfície (agricultura, bacias de infiltração, aterros sanitários, etc.), existência de poluentes com características de decaimento (bio-degradação, adsorção pelo solo, etc.) e infiltração superficial proveniente da recarga pluvial e fluvial ou de formações geológicas confinantes. Na prática

(hidrogeológica) o problema apresenta-se, em geral, de tal forma diversificado que requer a divisão do domínio em zonas com características idênticas, que apresentam no entanto descontinuidades localizadas, como por exemplo captações de águas subterrâneas. Perde-se assim a grande vantagem do método dos elementos de fronteira e deixa-se de poder caracterizar na fronteira "exactamente" o que se passa no domínio. Evidentemente poder-se-ia discretizar o domínio em zonas homogêneas como o fez, para a condutividade, CHENG 1984. Haveria no entanto que compatibilizar os resultados nas várias fronteiras internas o que acarretaria custos de computação agravados. O trabalho, recente, de BREBBIA e SHERGET 1984 embora avançando significativamente no MIF, limita-se a situações teóricas simples que consideram apenas a dispersão e a convecção, tendo de recorrer a transformadas de Kirchhoff para a linearização das equações, no caso da dispersão, por exemplo depender da função potencial.

As características gerais do MIF, por si só, não parecem pois adequadas à resolução de problemas reais do transporte de massa em águas subterrâneas. A sua associação ao método dos elementos finitos, procurando tirar vantagens de ambos os métodos, foi já sugerida há algum tempo, nomeadamente por ZIENKIEWICZ 1977 e ZIENKIEWICZ et al. 1977.

Apesar das considerações acabadas de fazer não se descurou neste trabalho o teste de um programa MIF.

Apresenta-se em seguida a abordagem que permitiu o desenvolvimento de um programa (BEMDIS.FOR) simples e eficaz, desenvolvido de modo a reduzir o tempo de cálculo em computador, mas que permite, mesmo assim, a obtenção de resultados com precisão semelhante à dos programas baseados nos restantes

métodos. Na Fig. 4.10 apresenta-se uma comparação dos resultados obtidos com o programa BEMDIS.FOR, desenvolvido fundamentalmente na Universidade do Minho no âmbito do estudo VEIGA 1986, e ainda no LNEC, no âmbito deste trabalho, com uma solução analítica. O exemplo que se apresenta refere-se a um problema unidimensional com uma condição de fronteira constante e unitária a montante, com uma velocidade de escoamento de 1m/dia, e com uma dispersão (longitudinal) de 4,5m²/dia. A solução apresentada corresponde ao tempo de ensaio de 1000 dias. A precisão obtida foi considerada muito boa. O programa foi incluído nos vários ensaios do Teste 1, que se apresentam em 4.3.2.1.

A resolução da equação da convecção-dispersão foi dividida, no programa BEMDIS.FOR, em duas partes. Na primeira parte procede-se ao cálculo da convecção considerando que o ponto de concentração igual a 0,50 se desloca à velocidade intersticial média do escoamento. O procedimento adoptado corresponde ao descrito em FRIED 1975 e em BEAR 1979, para um cálculo, semelhante, de soluções analíticas.

Para o cálculo da dispersão transformou-se a equação de convecção-dispersão, no referencial fixo (x,y)

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} = \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial t} \quad \text{em } D \quad (4.71)$$

na equação da dispersão

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x'^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y'^2} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (4.72)$$

no referencial móvel que acompanha o ponto médio (0,50) da frente de convecção. Matematicamente o raciocínio desenvolve-se da forma que se descreve a seguir, (usando a terminologia de 4.7.2.1), considerando as condições de fronteira seguintes:

$$\begin{aligned} C(x, y, 0) &= C_0 \quad \text{em } D, t=0 \\ C(x, y, t) &= C_1 \quad \text{em } S_1, t>0 \\ \frac{\partial C}{\partial n}(x, y, t) &= 0 \quad \text{em } S_2, t>0 \end{aligned}$$

Admitindo que

$$\frac{\partial x}{\partial t} = a \quad (\text{velocidade } V_x)$$

e

$$\frac{\partial y}{\partial t} = b \quad (\text{velocidade } V_y)$$

são constantes em todo o domínio, fez-se a seguinte mudança de variáveis:

$$\begin{aligned} x' &= x - at \longrightarrow x = x' + at' \\ y' &= y - bt \longrightarrow y = y' + bt' \\ t' &= t \quad \longrightarrow t = t' \end{aligned}$$

Notando que

$$C(x(x', t'), y(y', t'), t(t'))$$

vem:

$$\frac{\partial C}{\partial x'} = \frac{\partial C}{\partial x} \wedge \frac{\partial C}{\partial y'} = \frac{\partial C}{\partial y} \wedge D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x'^2} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \wedge D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y'^2} = D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \quad (4.73)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t'} &= \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t'} + \frac{\partial C}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t'} + \frac{\partial C}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial t'} = \\ &= \frac{\partial C}{\partial x} a + \frac{\partial C}{\partial y} b + \frac{\partial C}{\partial t} \end{aligned} \quad (4.74)$$

Substituindo em 4.71 vem finalmente:

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x'^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y'^2} = \frac{\partial C}{\partial t'} \quad (4.75)$$

O problema reduz-se assim à resolução da equação de Fourier com as condições seguintes:

$$\chi \nabla^2 u = \frac{\partial u}{\partial t} \quad \text{em } D, \text{ para } t > 0 \quad (4.76)$$

$$u(x, 0) = u_0 \quad \text{em } D, \text{ para } t = 0 \quad (4.77)$$

$$u(x, t) = \bar{u} \quad \text{em } S_1, \text{ para } t > 0 \quad (4.78)$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}(x, t) = \bar{q} \quad \text{em } S_2, \text{ para } t > 0 \quad (4.79)$$

χ representa a dispersão do aquífero, u representa uma concentração especificada em S_1 e q um fluxo especificado em S_2 .

Usando diferenças finitas no tempo

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta t} \quad (i=0, 1, \dots) \quad (4.80)$$

a equação 4.80 reduz-se à equação de Helmholtz, em cada iteração. Assim com $t \in [0, st]$ e $M \in [u_0, u_1]$ e fazendo

$$\alpha^2 = \frac{1}{\chi \Delta t} \quad (4.81)$$

vem para a primeira iteração

$$\nabla^2 u - \alpha^2 u = \alpha^2 (-u_0) \quad \text{em } D \quad (4.82)$$

A solução fundamental é a função de Green que satisfaz a equação:

$$\nabla^2 w - \alpha^2 w = \Delta(\underline{x}' \underline{x}) \quad \text{em } D_\alpha \quad (4.83)$$

onde Δ é a função de Dirac, \underline{x}' o ponto de colocação da carga unitária e \underline{x} o ponto de observação do potencial criado.

VEIGA 1985 apresenta a solução fundamental da equação 4.83:

$$w(r) = -\frac{1}{2\pi} K_0(\alpha r) \quad (4.84)$$

sendo

$$r = \|\underline{x}' - \underline{x}\| \quad \text{a distância entre os pontos } \underline{x}' \text{ e } \underline{x}$$

e

K_0 a função de Bessel modificada de ordem zero de 2a.

espécie (ABRAMOWITZ e STEGUN 1970).

A equação integral a que se chega para este problema é, para os pontos de fronteira, a seguinte:

$$u(x') = \frac{\alpha}{\pi} \int_S u K_1(\alpha r) \cos \varphi ds + \frac{1}{\pi} \int_S K_0(\alpha r) \frac{\partial u}{\partial n} ds + \frac{\alpha^2}{\pi} \int_V u_0 K_0(\alpha r) dV \quad (4.85)$$

onde

$K_1(\alpha r)$ é a função de Bessel modificada de 1a. ordem e 2a. espécie. φ é o ângulo efectuado entre a recta que une (x', y') e a normal à fronteira (Fig. 4.11).

Discretizando a fronteira em $n = n_1 + n_2$ elementos constantes e o domínio em m células triangulares, e considerando que u e $q = \partial u / \partial n$ são constantes em cada segmento e referidas ao nó (ponto de observação em j) obtém-se (VEIGA 1985):

$$x_i = \frac{1}{\pi} \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^n q_j K_0(\alpha r_{ij}) \Delta S_j + \frac{\alpha}{\pi} \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^n u_j K_1(\alpha r_{ij}) \cos \varphi_{ij} \Delta S_j + \frac{1}{\pi} q_i \int_i K_0(\alpha r) ds + \frac{\alpha}{\pi} u_i \int_i K_1(\alpha r) \cos \varphi ds + \frac{\alpha^2}{\pi} \sum_{l=1}^m \int_{V_l} u_0(l) K_0(\alpha r_{il}) dV_l \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (4.86)$$

Considerando finalmente que

$$\beta = \frac{\alpha \Delta S_i}{4} \text{ e } d_k \text{ e } C_u \text{ são os seguintes:}$$

k	Cu	dk
0	2,000	0,8456
1	0,6667	0,5041
2	0,1000	0,1123

obtém-se o seguinte sistema de equações, descrito em forma matricial:

$$[K] \{q\} + [J] \{u\} = \{F\} \quad (4.87)$$

onde

$$K_{ii} = \frac{2}{\alpha\pi} \left\{ \sum_{k=0}^L (d_k - C_k \ln \beta) \beta^{2k+1} \right\} \quad (4.88)$$

$$K_{ij} = \frac{1}{\pi} K_0(\alpha r_{ij}) \Delta s_j \quad (4.89)$$

$$J_{ii} = 1 \quad (4.90)$$

$$J_{ij} = -\frac{\alpha}{\pi} K_1(\alpha r_{ij}) \cos \varphi_{ij} \Delta s_j \quad (4.91)$$

$$F_i = -\frac{\alpha^2}{\pi} \sum_{l=1}^m \iint_{\Delta V_l} u_0(l) K_0(\alpha r_{il}) ds_l \quad (4.92)$$

A dispersão calculada de acordo com a metodologia que se acaba de expôr foi considerada aplicada ao ponto de concentração 0,50, que acompanha o escoamento médio. A curva de dispersão para os pontos localizados a montante do ponto de concentração 0,50 foi

considerada simétrica e complementar, para a unidade, em relação à curva calculada pelo programa.

No Anexo 2 apresenta-se um exemplo de uma listagem contendo os dados necessários à execução do programa e uma listagem de resultados.

4.3 - Testes desenvolvidos para comparação de modelos

4.3.1 - Introdução

Os testes que se desenvolvem têm por objectivo a análise dos diferentes modelos apresentados no ponto anterior. O objectivo último dessa análise consistiu na comparação dos modelos de modo a permitir uma selecção posterior, tanto quanto possível clara e imediata, de um ou de mais modelos adequados à resolução de problemas reais de poluição de águas subterrâneas e a possibilitar a indicação do programa recomendado, em função do tipo de fonte de poluição real (indústria, agricultura, etc.), do tipo de poluente em estudo (conservativo, biodegradável, etc.), dos condicionalismos físicos (velocidades de escoamento, dispersão do aquífero, etc) e dos condicionalismos de projecto (custos, prazos, precisão dos resultados e carência de dados).

A perspectiva adoptada permite obter uma panorâmica geral que realça as vantagens e as limitações de cada modelo, não privilegiando nenhum deles em particular. Compara-se em pé de igualdade cada modelo com os restantes.

A comparação final dos modelos é feita de uma perspectiva custo-eficácia. Foram seleccionadas as oito variáveis consideradas mais relevantes para a comparação pretendida.

Apresenta-se um quadro com os valores reais (objectivos) resultantes da comparação efectuada e outro onde se ponderam subjectivamente as variáveis consideradas mais importantes, para estudos hidrogeológicos reais. Deste último quadro obtém-se uma classificação final (subjectiva) dos vários modelos testados.

O trabalho básico de comparação foi dividido em sete testes e em dezasseis ensaios. Cada teste corresponde a um conjunto de características físicas bem definido: situações unidimensionais e bidimensionais, condições de fronteira diferentes, por exemplo injeções de poluentes constantes no tempo ou instantâneas, tipo de poluente conservativo ou com decaimento no solo, e ainda profundidades do aquífero constantes ou variáveis.

Dentro de cada teste procedeu-se, em vários ensaios, à análise das diferentes configurações das manchas de poluição provocadas por condições hidrogeológicas diversas: velocidades de escoamento (V) e dispersão do aquífero (DL). Como se indicou em 4.1 estas duas variáveis juntamente com a distância percorrida pela mancha de poluição (l) podem-se considerar interrelacionadas, permitindo definir o número adimensional de Peclet:

$$Pe = \frac{Vl}{D_L}$$

As curvas de penetração da poluição no aquífero são, teoricamente, iguais para iguais valores do número de Peclet. Por exemplo, para a mesma secção de um aquífero unidimensional (fictício) a curva de penetração da poluição, esperada, deverá ser a mesma para as duas situações seguintes:

(1) $V_x = 0,5 \text{ m/dia}$

$$DL = 5 \text{ m}^2 / \text{dia}$$

ao fim de um tempo de ensaio, por exemplo, de 1000 dias e

$$(2) \quad Vx = 5 \text{ m/dia}$$

$$DL = 50 \text{ m}^2 / \text{dia}$$

ao fim de um tempo de ensaio de 100 dias.

Tanto para a situação (1) como para a situação (2) ao fim, respectivamente, de 1000 dias e de 100 dias a frente de concentração, ou mais precisamente, o ponto com concentração equivalente a 50% da concentração de injeção (constante e situada na origem do eixo das abcissas) localizar-se-á aproximadamente, sobre a mesma secção, sendo as duas curvas de penetração iguais.

Pode-se assim, no Teste 1, fixar uma das duas variáveis referidas, a velocidade de escoamento (V), variando a dispersão do aquífero (DL).

No Teste 1 analisa-se o comportamento dos vários modelos, em situação unidimensional, para uma injeção contínua do poluente a montante, sujeitos a uma variação do número de Peclet, isto é em termos do estudo desenvolvido, a uma variação da dispersão longitudinal, fixada a velocidade do escoamento. Como se verificará as situações extremas de convecção dominante e de dispersão dominante são as mais interessantes para a caracterização do comportamento dos modelos.

No Teste 2, analisa-se o efeito do decaimento no solo do poluente, considerado conservativo no Teste 1. Mantêm-se todas as restantes condições do Teste 1.

No Teste 3 analisa-se o efeito de injeções instantâneas (em vez das injeções constantes consideradas no Teste 1). Mantêm-se todas as restantes condições do Teste 1.

No Teste 4 analisa-se o efeito do decaimento do poluente no solo para injeções instantâneas. Mantêm-se todas as restantes condições do Teste 3.

Nos Testes 5, 6, e 7 analisam-se situações bidimensionais. Nos Testes 5 e 6 estuda-se o efeito da dispersão transversal na configuração da mancha de poluição provocada por uma fonte de poluição "pontual" situada a montante de um aquífero-canal rectangular. No Teste 5 a injeção do poluente é contínua. No Teste 6 a injeção é instantânea. Finalmente no Teste 7 analisa-se o comportamento dos vários modelos numa situação hidrogeológica real, a do aquífero das areias brancas de Rio Maior, estudado em pormenor no Capítulo 6. O problema de poluição considerado, embora fisicamente possível, não corresponde a qualquer situação actual de poluição. Pretendeu-se apenas analisar o comportamento dos modelos e a precisão dos resultados em três locais (captacões) do aquífero. Analisaram-se os tempos de computador dispendidos pelos modelos e as suas capacidades de adaptação a fronteiras reais e a profundidades e velocidades variáveis de local para local.

O Teste 7 permitiu a validação da selecção dos modelos recomendados pela análise custo-eficácia, para o estudo que se desenvolve no Capítulo 6.

A análise da precisão dos resultados dos modelos foi, sempre que possível, feita por comparação com soluções analíticas (exactas), consideradas de referência.

Desenvolveu-se um programa de computador que permitiu o tabelamento dos resultados obtidos e a análise dos erros de cada

modelo em relação à solução de referência.

A análise visual dos resultados pode ser feita num número considerável de figuras que apresentam além dos valores calculados pelos modelos, interpolações, por vezes, desenhadas manualmente, para o tracado final de cada curva. Esta técnica manual, embora mais trabalhosa que o recurso a funções de interpolação automáticas (curve-fitting), permitiu a consideração e análise de todos os valores calculados pelos programas, bem como das suas derivadas, de um ponto de vista estritamente de engenharia civil, sem a necessidade de abstracção de erros e de oscilações provenientes dos programas de interpolação.

Na parte final, do capítulo, além dos quadros com os valores objectivos e subjectivos resultantes da análise custo-eficácia desenvolvida, apresentam-se quatro Árvores de Decisão que permitem a selecção expedita dos modelos estudados, para a resolução de estudos práticos de poluição de águas subterrâneas, originada pela "Indústria e Minas" (Árvore de Decisão no. 1), "Aglomerados Populacionais" (Árvore de Decisão no. 2), "Agricultura" (Árvore de Decisão no. 3) e "Acidentes Ambientais" (Árvore de Decisão no. 4).

4.3.2 - Análise de problemas unidimensionais

4.3.2.1 - Introdução

O objectivo da análise de problemas unidimensionais que se apresenta é o estudo do comportamento dos vários modelos para diferentes relações entre a velocidade de escoamento e a dispersão longitudinal do meio poroso. Estudaram-se situações de injeção do poluente contínuas e instantâneas, para poluentes

conservativos e com decaimento no solo. Fixaram-se três secções do "aquífero-canal" para comparação dos modelos.

Note-se que o que se pretendeu não foi caracterizar a precisão dos resultados obtidos por cada modelo em relação a uma solução exacta. Essa comparação foi já efectuada pelos autores dos modelos durante a sua programação. O que se pretende neste capítulo é analisar o comportamento relativo dos vários modelos entre si.

Por esse motivo as malhas que se apresentam para cada modelo, são as malhas que satisfazem os objectivos da comparação que se pretende e que satisfazem conjuntamente as restrições mínimas recomendadas por cada autor dos modelos, para a obtenção de resultados satisfatórios.

O refinamento de uma malha acarretará, até certo ponto, uma melhoria dos resultados do modelo, no entanto, à custa de outras variáveis, seleccionadas para comparação dos modelos, como por exemplo o tempo de CPU ou o tempo de preparação dos dados.

Não se variou a malha, nem o passo de cálculo nos dados dos programas, à medida que o número de Peclet varia, tornando-se mais favorável para uns modelos e mais desfavorável para outros. O que se pretendeu observar foi a fiabilidade dos resultados que se podem obter em situações reais, quando as condições hidrogeológicas variam fortemente.

O raciocínio exposto não acarretou, aparentemente, prejuízos significativos aos resultados dos modelos uma vez que cada um deles, e em mais do que um ensaio (como se verá em 4.4) mostrou ser o modelo que apresentava resultados mais precisos.

O programa KONIK3.FOR corrige automaticamente o passo temporal, caso o introduzido com os dados seja excessivo. Outros programas não apresentam restrições desse tipo (SA2D1.FOR e

BEMDIS.FOR).

Como se indicou anteriormente o ajustamento dos resultados do programa MIXCEL.FOR às variáveis dispersão longitudinal e velocidade do escoamento é feito pelo dimensionamento das células e do passo temporal de cálculo. Essas variáveis não podem ser assim arbitrárias. Procurou-se no entanto dimensionar as células e os passos de cálculo de modo a se obterem resultados nas secções calculadas para os outros programas.

Por sugestão dos autores algumas malhas foram divididas segundo a dimensão transversal ao escoamento. Pretende-se deste modo uniformizar os valores transversais evitando a propagação dos erros numéricos de cálculo, e ainda possibilitar o cálculo dos resultados no eixo longitudinal do canal. Estão neste caso os programas KONIK3.FOR, RANDOM.FOR e DISP1.FOR.

As velocidades e dispersões transversais, foram consideradas nulas. No caso dos programas DISP1.FOR, DISP2.FOR e DISP3.FOR o valor da dispersão transversal foi considerado 1/10 do valor da dispersão longitudinal, a fim de evitar instabilidades numéricas de cálculo. As soluções exactas (SA2D1.FOR) são iguais num e noutro caso.

O canal estudado tem um comprimento de 3500 m. A largura considerada foi de 100 m. A introdução dessa largura é necessária uma vez que os modelos estão programados para a análise de situações bidimensionais. No entanto como a condição de fronteira se considerou distribuída uniformemente em toda a largura de montante do aquífero, o seu valor não afecta o da solução final, uma vez salvaguardadas as regras que relacionam o espaçamento transversal y com o longitudinal x .

Na Fig. 4.12 apresentam-se as várias malhas utilizadas para a análise unidimensional que se desenvolve nos Teste 1, 2, 3 e 4.

4.3.2.2 - Injecção contínua

A injecção contínua de um poluente conservativo foi analisada no Teste 1.

Numa primeira fase seleccionaram-se para análise doze ensaios com valores diferentes da velocidade de escoamento e da dispersão longitudinal. Procurou atribuir-se a cada par de valores velocidade-dispersão, que caracterizam um ensaio, valores hidrogeologicamente aceitáveis, embora em certos casos extremos. Analisaram-se as curvas de penetração obtidas para esses ensaios com os modelos SA2D1.FOR e KONIK3.FOR. As curvas que se apresentam na Fig. 4.13 foram calculadas pelo modelo SA2D1.FOR para a secção longitudinal situada a 1500 m do local de injecção do poluente.

Os vários ensaios seleccionados para a primeira fase da análise têm as características apresentadas no Quadro 4.1.

Os números de Peclet das secções analisadas situam-se entre 12500 e 0 (zero), respectivamente para a secção 2500 m do canal no Ensaio 1 e para os Ensaios 10, 11 e 12, que apresentam uma velocidade nula.

As velocidades analisadas foram as seguintes: 2,50, 0,25, 0,025 e 0,00 m/dia. As dispersões longitudinais analisadas foram as seguintes: 50,0, 5,0 e 0,5 m²/dia (e implicitamente 0,05 m²/dia no Ensaio 1 e 500 m²/dia no Ensaio 9, com $V = 0,25$ m/dia). As soluções exactas de algumas combinações desses valores são iguais. Como se referiu a caracterização da curva de penetração pode-se fazer pelo número adimensional de Peclet, numa dada secção do canal. Ensaios com números de Peclet iguais devem apresentar soluções iguais. Pôde-se assim reduzir o número de ensaios a efectuar. Como os resultados de alguns

modelos apresentam por vezes erros numéricos de cálculo analisaram-se três situações diferentes que possuem os mesmos números de Peclet (Ensaio 3, 5 e 7).

Os ensaios efectuados para o Teste 1 foram os seguintes:

Ensaio 4 :

$Dx = 0,5 \text{ m}^2/\text{dia}$
 $Vx = 0,25 \text{ m}/\text{dia}$
 $Pe = 250$ na secção 500 m
 $Pe = 750$ na secção 1500 m
 $Pe = 1250$ na secção 2500 m
 Pe da malha dos modelos
($x = 125 \text{ m}$) = 62,50 (valor que se considera "alto")

Ensaio 5 :

$Dx = 5,0 \text{ m}^2/\text{dia}$
 $Vx = 0,25 \text{ m}/\text{dia}$
 $Pe = 25$ na secção 500 m
 $Pe = 75$ na secção 1500 m
 $Pe = 125$ na secção 2500 m
 Pe da malha dos modelos
($x = 125 \text{ m}$) = 6,25 (valor "médio")

Ensaio 6 :

$Dx = 50,0 \text{ m}^2/\text{dia}$
 $Vx = 0,25 \text{ m}/\text{dia}$
 $Pe = 2,5$ na secção 500 m

Pe = 7,5 na secção 1500 m
Pe = 12,5 na secção 2500 m
Pe da malha dos modelos
(x = 125 m) = 0,625 (valor "baixo")

Ensaio 11 :

Dx = 5,0 m²/dia
Vx = 0,0 m/dia
Pe = 0,0 em todas as secções

e ainda, para comparação com o Ensaio 5, os ensaios seguintes:

Ensaio 3 :

Dx = 0,5 m²/dia
Vx = 0,025 m/dia
Pe iguais aos do Ensaio 5

Ensaio 7 :

Dx = 50,0 m²/dia
Vx = 2,5 m/dia
Pe iguais aos do Ensaio 5

Não se realizaram os Ensaio 1 e 9 por se considerar que não correspondem a situações hidrogeológicas reais.

Como se pode verificar fixou-se a velocidade do escoamento igual a 0,25 m/dia. Esse valor é da ordem de grandeza de alguns valores de velocidades de escoamento de aquíferos reais. Procedendo-se deste modo pôde-se analisar explicitamente o efeito

da variação da dispersão longitudinal do meio poroso na configuração das curvas de penetração do poluente no aquífero. Os valores da dispersão admitidos para o Teste 1 correspondem a 1/10, 1 e 10 vezes o valor médio, regional, da dispersão longitudinal calculada no Capítulo 5 (para o estudo que se apresenta no Capítulo 6).

As curvas de penetração que se observaram no Teste 1 podem ser consideradas equivalentes às curvas que se obteriam ao longo duma linha de fluxo de um aquífero real, confinado lateralmente.

No Teste 1 considerou-se como condição de fronteira de montante uma concentração constante igual a 100, como condição de jusante a derivada espacial da concentração nula e como condições iniciais concentrações nulas em todo o domínio. Essas condições, para a solução analítica (SA2D1.FOR), são as seguintes:

$$C_0 = 100 \text{ para } x=0 \text{ e } 0 \leq y \leq 100 \text{ m}$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0 \text{ para } y=0 \text{ e } y=100 \text{ m}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0 \text{ para } x = +\infty$$

$$C = 0 \text{ para } t = 0$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0 \text{ para } x = +\infty$$

$$C = 0 \text{ para } t = 0$$

O passo temporal de cálculo (Δt) considerado foi de 400 dias. Esse valor satisfaz as condições impostas para o passo de cálculo dos modelos. Os valores calculados pelos programas foram comparados para três secções longitudinais 500, 1500 e 2500 m. As curvas de penetração centram-se nessas secções, para escoamentos com velocidades de 0,25 m/dia, respectivamente ao fim

de 2000, 6000 e 10000 dias de ensaio.

Para o Ensaio 3 a velocidade considerada foi de 2,50 m/dia sendo os tempos de ensaio, correspondentes às secções referidas de 200, 600 e 1000 dias.

Para o Ensaio 7 a velocidade considerada foi de 0,025 m/dia sendo os tempos de ensaio analisados de 20000, 60000 e 100000 dias.

No Ensaio 11 a velocidade admitida é nula. Para este ensaio, especialmente efectuado para analisar o comportamento do modelo BEMDIS.FOR, que calcula a parcela dispersiva da equação da convecção-dispersão pelo método dos elementos de fronteira, admitiu-se uma dispersão de 5,0 m²/dia e tempos de ensaio de 2000, 6000 e 10000 dias. A condição admitida para o Ensaio 11, velocidade nula, corresponde em hidrogeologia a uma situação teórica sem interesse prático. Por essa razão grande número dos modelos estudados não estão aptos a analisá-la, sem alterações. Apenas os programas SA2D1.FOR, DISP1.FOR e BEMDIS.FOR são capazes de efectuar o cálculo sem alterações.

Os resultados calculados pelos modelos foram sintetizados em quadros especialmente programados para a comparação custo-eficácia que se apresenta em 4.4. Além do valor obtido para cada secção múltipla de 125 m apresentam também os erros de cada resultado em relação à solução analítica (exacta) calculada pelo programa SA2D1.FOR. Apresenta-se ainda em cada quadro, e para cada programa, uma análise dos erros da curva de penetração, discretizada nos valores calculados para as secções múltiplas de 125 m, que incluem o somatório dos erros absolutos, a média dos erros nas secções múltiplas de 125 m (que equivale ao erro relativo médio (percentual) na secção em estudo, uma vez que a

concentração inicial de referência é igual a 100) e o desvio padrão dos erros, que traduz a variação do erro calculado de secção para secção e que é particularmente interessante para a análise do programa RANDJM.FOR.

Nos Quadros 4.2, 4.3 e 4.4 sintetizam-se os resultados do Ensaio 4 para as três secções estudadas 500, 1500 e 2500 m respectivamente. Os Quadros 4.5 a 4.19 apresentam os resultados dos Ensaio 5, 6 e 11 e ainda os dos Ensaio 3 e 7, para comparação com os do Ensaio 5.

Os resultados dos ensaios foram tracados em figuras preparadas de modo a facilitar a comparação visual. Os valores calculados, nas abcissas múltiplas de 125 m, são identificados por círculos ou triângulos. A restante curva foi interpolada manualmente de modo a ser considerada na análise apenas o ponto de vista da engenharia civil, e evitar erros numéricos de interpolação

Os resultados obtidos apresentam-se nas Figs. 4.14 a 4.19.

Uma primeira análise dos quadros e das figuras permite concluir que a parcela convectiva se encontra, em geral, bem caracterizada, correspondendo as abcissas das secções em estudo (500, 1500 e 2500 m) aproximadamente, e tanto mais quando menor for a dispersão e maior for o tempo de ensaio, à concentração média da curva (50%). A pequena diferença observada corresponde à contribuição da parcela dispersiva para o avanço da curva de penetração do poluente pelo aquífero. Note-se que o modelo BEMDIS.FOR não considera essa contribuição. Originam-se por esse motivo erros acrescidos em relação aos do próprio método dos elementos de fronteira. À medida que a dispersão aumenta, o programa torna-se menos adequado para a análise global do

problema. Saliente-se, no entanto, o excelente comportamento do modelo BEMDIS.FOR, no Ensaio 4, onde se verifica uma situação de convecção dominante e onde é esse o modelo que apresenta resultados mais precisos.

Em relação aos programas de elementos finitos nota-se uma quebra de precisão à medida que a parcela convectiva aumenta. Saliente-se, no entanto, o comportamento excelente do modelo DISP3.FOR, que, por exemplo, para o Ensaio 5 com 10000 dias de ensaio apresenta uma curva praticamente exacta.

O passo de cálculo do modelo DISP1.FOR foi reduzido para metade, 200 dias, com o objectivo de melhorar os resultados. Os resultados obtidos foram contudo praticamente iguais aos inicialmente calculados com $t = 400$ dias.

Em relação aos programas de diferenças finitas, que incluem parcelas convectivas tratadas pelo método das características, observa-se uma nítida melhoria de precisão à medida que a componente convectiva se torna predominante. O comportamento dos programas KONIK3.FOR e RANDOM.FOR, com especial relevo para este último, é relativamente deficiente quando a parcela dispersiva se torna dominante, tal como NEUMAN e SOREK 1982 haviam referido para o comportamento do método das características em situações unidimensionais.

O modelo MIXCEL.FOR não poderá ser analisado de uma perspectiva semelhante à dos restantes modelos, uma vez que não utiliza, directamente, a equação da convecção-dispersão e não inclui portanto nenhum coeficiente de dispersão como os restantes modelos. A sua inclusão neste estudo é no entanto importante pois, como se verá em 4.4, esse programa é excepcionalmente rápido. Um pouco de experiência na utilização desse programa permite o ajustamento dos seus resultados aos de uma solução

exacta, por variação do volume das células e do passo de cálculo.

Uma análise pormenorizada dos erros absolutos referidos anteriormente, para cada programa, transcende os objectivos deste trabalho. Existem várias publicações que aprofundam, do ponto de vista matemático, este assunto para o caso dos elementos finitos e das diferenças finitas. Tecem-se, no entanto, seguidamente algumas considerações sobre esse assunto.

Como se indicou em 4.2.6.1 os resultados que se obtêm pelo método dos elementos finitos, para situações de convecção dominante vêm afectados de uma parcela dispersiva numérica que, na prática, corresponde a uma sobrevalorização do coeficiente de dispersão, que resulta dos gradientes elevados de concentração em locais onde a malha não é suficientemente discretizada. Verifica-se também, nesses casos, o aparecimento de oscilações numéricas, que originam concentrações superiores à máxima fisicamente possível ou ainda concentrações negativas. Numerosas técnicas foram investigadas procurando ultrapassar essas situações para casos mais ou menos particulares. No caso do método das diferenças finitas a razão principal dos erros é normalmente atribuída à truncatura das séries de Taylor, da qual se calculam as expressões em diferenças finitas das equações diferenciais. Os gradientes de concentração elevados introduzem também os mesmos erros referidos para os elementos finitos.

A análise de erros de modelos baseados no método dos elementos de fronteira encontra-se numa fase de menor desenvolvimento. Existem trabalhos de investigação em curso sobre este assunto.

Os resultados dos Ensaio 3 e 7 permitem observar o comportamento dos modelos em situações equivalentes às do Ensaio 5, quanto ao número de Peclet.

Os resultados obtidos pelos Ensaio 3, 5 e 7 são iguais para os seguintes modelos: MIXCEL.FOR, DISP2.FOR, DISP3.FOR e BEMDIS.FOR.

Os resultados são, porém, ligeiramente diferentes para os modelos: KONIK3.FOR e DISP1.FOR.

Como é natural os resultados do programa RANDOM.FOR são diferentes uma vez que são obtidos por geração de números aleatórios. A forma da curva é no entanto semelhante. No Quadro 4.20 apresentam-se os resultados obtidos para várias execuções do programa RANDOM.FOR, efectuadas com os mesmos dados.

Quanto ao Ensaio 11, pode verificar-se que o comportamento do programa BEMDIS.FOR, para o cálculo da dispersão pelo método dos elementos de fronteira, não é completamente satisfatório. Tal resultado pode ser contudo justificável uma vez que o programa apenas admite elementos constantes em vez de elementos lineares ou quadráticos, mais precisos (e dispendiosos quanto ao tempo de cálculo). Saliencia-se que um dos objectivos pretendidos para esse programa era o cálculo do menor valor possível de CPU, para a sua execução. Na literatura, referida em 4.2.7.1, apresentam-se numerosos exemplos de programas baseados no método dos elementos de fronteira com os quais se obtiveram resultados excelentes.

4.3.2.3 - Injecção contínua com decaimento

Para o desenvolvimento do Teste 2 que analisa o comportamento dos modelos numa situação de decaimento do poluente no solo, com concentração de injeção constante no tempo e igual a 100 (como no Teste 1) consideram-se os valores da velocidade e da dispersão do Ensaio 5 do Teste 1:

Teste 2 - Ensaio 1(único):

$$V_x = 0,25 \text{ m/dia}$$

$$D_x = 5,0 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$P_e = 25 \quad \text{para a secção 500 m}$$

$$P_e = 75 \quad \text{para a secção 1500 m}$$

$$P_e = 125 \quad \text{para a secção 2500 m}$$

$$P_e \text{ da malha dos modelos} = 6,25 \quad (\text{valor "médio"})$$

O coeficiente de decaimento escolhido foi de

$$D_c = 0,0010$$

que corresponde a uma semi-vida do poluente de

$$S_v = 1000 \text{ dias}$$

Sendo a concentração inicial $C_0 = 100$ esta condição de fronteira pode ser representada do seguinte modo, para o tempo t :

$$-(D_c)t$$

$$C = C_0 e$$

Os resultados obtidos no Teste 2 apresentam-se nos Quadros 4.21 a 4.23 e nas Figs. 4.20 a 4.23.

Como se indicou anteriormente o programa BEMDIS.FOR apenas foi incluído no Teste 1. O programa KONIK3.FOR foi desenvolvido para poluentes conservativos, pelo que também não aparece nos quadros deste teste.

Continua a observar-se um excelente comportamento do programa DISP3.FOR seguido de perto pelos restantes programas de elementos finitos. O programa RANDOM.FOR apresenta um comportamento deficiente em comparação com os restantes programas.

Neste teste e no Teste 4 desenvolve-se uma análise introdutória do problema dos poluentes não conservativos. Esse estudo não é contudo, um objectivo deste trabalho. Não quer isto dizer que o problema do decaimento de um poluente no solo seja um problema secundário. Em diversas áreas da engenharia sanitária e ambiental os problemas de decaimento, como por exemplo a biodegradação, a radioactividade, as reacções químicas entre poluentes e entre estes e o solo, podem assumir papel de relevo no transporte e atenuação do efeito dos poluentes.

Um tema diferente é o da adsorção de um poluente pelo solo. Esse assunto será estudado no Capítulo 5.

4.3.2.4 - Injecção instantânea

No Teste 3 procede-se à análise do comportamento dos modelos sujeitos a uma injecção instantânea de um poluente, com uma concentração inicial igual a 100.

No Teste 3 repetem-se as características dos Ensaios 4, 5 e 6 do Teste 1:

Teste 3 - Ensaio 1:

Vx = 0,25 m/dia
Dx = 5,0 m²/dia
Pe = 25 para a secção 1000 m
Pe = 75 para a secção 2000 m
Pe = 125 para a secção 3000 m
Pe da malha dos modelos = 6,25 (valor
"médio")

Ensaio 2:

Vx = 0,25 m/dia
Dx = 0,50 m²/dia
Pe = 250 para a secção 1000 m
Pe = 750 para a secção 2000 m
Pe = 1250 para a secção 3000 m
Pe da malha dos modelos = 62,50 (valor
"alto")

Ensaio 3:

Vx = 0,25 m/dia
Dx = 50,0 m²/dia
Pe = 4,23 para a secção 1000 m
Pe = 9,30 para a secção 2000 m
Pe = 14,42 para a secção 3000 m
Pe da malha dos modelos = 0,625 (valor
"baixo")

Como se pode observar pela localização das secções estudadas o poluente não foi injectado na origem do eixo das abcissas mas na secção localizada a 500 m. Mantiveram-se os tempos de ensaio do Teste 1, respectivamente 2000, 6000 e 10000 dias.

Neste teste observam-se dificuldades de cálculo superiores às do Teste 1 uma vez que se impõem gradientes de concentrações iniciais muito elevados, para malhas pouco discretizadas. Numa situação real a malha deveria ser significativamente mais refinada no local de injeção de modo a se poder evitar o aparecimento de oscilações numéricas, nomeadamente nos programas baseados no método dos elementos finitos e no método das diferenças finitas.

O programa SA2D1.FOR deixa neste teste de ser uma solução exacta. Tal deve-se ao facto desse programa apenas considerar taxas de decaimento exponenciais na origem. Assim a injeção instantânea, que se estuda neste Teste 3, apenas pode ser aproximada por esse programa de uma forma rudimentar.

A solução analítica de referência foi apresentada em 4.2.1.2.

Nos Quadros 4.24 a 4.32 e nas Figs. 4.24 a 4.35 apresentam-se os resultados obtidos para os Ensaios 1, 2 e 3 do Teste 3.

O comportamento dos programas de elementos finitos é bastante satisfatório nos Ensaios 1 e 3. De novo sobressai o bom comportamento do programa DISP3.FOR seguido muito de perto pelo programa DISP2.FOR. No Ensaio 2, de carácter convectivo dominante, o comportamento dos programas de elementos finitos piora francamente na primeira secção (tempo de ensaio 2000 dias) melhorando para as restantes secções, nomeadamente no caso do

programa DISP3.FOR.

O comportamento dos programas de diferenças finitas é semelhante ao comportamento dos programas de elementos finitos. Salienta-se o bom comportamento do programa KONIK3.FOR, no Ensaio 1, e do programa RANDOM.FOR, no Ensaio 2, de convecção dominante. Repare-se na excelente adaptação do programa MIXCEL.FOR ao Ensaio 2, sendo o programa que apresenta resultados mais precisos nesse ensaio.

Quanto ao programa SA2D1.FOR só pode ser considerado neste Teste como aproximação rudimentar. Apenas no Ensaio 1 se obtêm resultados aceitáveis, embora sempre piores que os dos outros modelos.

4.3.2.5 - Injeção instantânea com decaimento

No Teste 4 repetem-se as considerações feitas e os dados apresentados no Teste 2. Agora no entanto a situação de base corresponde ao problema da injeção instantânea analisado no Teste 3. Os valores considerados são os seguintes:

Teste 4 - Ensaio 1(único):

$$V_x = 0,25 \text{ m/dia}$$

$$D_x = 5,0 \text{ m/dia}$$

$$P_e = 25 \text{ para a secção 1000 m}$$

$$P_e = 75 \text{ para a secção 2000 m}$$

$$P_e = 125 \text{ para a secção 3000 m}$$

$$P_e \text{ da malha dos modelos} = 6,25 \text{ (valor "médio")}$$

Não se tomou conhecimento na literatura da especialidade com nenhuma solução analítica para situações do tipo da ensaiada neste teste. Por essa razão os resultados obtidos não foram incluídos na análise custo-eficácia que se desenvolve em 4.4.

Os resultados do programa DISP3.FOR serviram de referência para a comparação de resultados, devido ao bom comportamento demonstrado nos testes anteriores.

Os resultados obtidos são apresentados nos Quadros 4.33, 4.34 e 4.35 e na Fig. 4.36.

Os restantes programas de elementos finitos apresentam comportamentos muito bons, especialmente o programa DISP2.FOR.

O programa RANDOM.FOR não se comportou bem sendo, o que mais se afastou dos resultados de referência.

Salienta-se que o programa MIXCEL.FOR e principalmente o programa SA2D1.FOR, que como se indicou no Teste 3 apenas admite uma aproximação rudimentar das condições de injeção instantânea, se comportaram relativamente bem.

O programa KONIK3.FOR, como se referiu no Teste 2, apenas admite poluentes conservativos. Por essa razão não foi incluído neste teste.

4.3.3 - Análise de problemas bidimensionais

4.3.3.1 - Introdução

Realizaram-se três testes sobre situações bidimensionais: o Teste 5, o Teste 6 e o Teste 7.

Os Testes 5 e 6 destinaram-se à análise do comportamento dos modelos em relação à variável dispersão transversal. O domínio

considerado foi o de um "aquífero-canal" rectangular de 1000 m de largura e 3000 m de comprimento, dividido numa malha de 100 m de largura segundo o eixo das ordenadas (y) e 200 m de comprimento segundo o eixo das abcissas (x), Figs. 4.37 e 4.38.

As condições de fronteira consideradas foram uma injeção contínua centrada no lado menor do rectângulo, a montante do escoamento, com uma largura de 100 m, Teste 5, e uma injeção instantânea também centrada a meio da largura do canal mas situada a 400 m da fronteira de montante, Teste 6.

A dispersão longitudinal admitida foi a do Ensaio 5 do Teste 1, $DL = 5 \text{ m}^2/\text{dia}$, que, como se referiu, corresponde à da situação real estudada no Capítulo 6. A velocidade longitudinal admitida para o escoamento foi também a do Ensaio 5, $V_x = 0,25 \text{ m}/\text{dia}$. O número de Peclet da malha dos modelos (longitudinal) é igual a 10 (valor médio). Admitiu-se que a velocidade transversal do escoamento, segundo o eixo das ordenadas, é nula. Deste modo pode observar-se o comportamento da variável dispersão transversal, sem necessidade de abstrair o efeito de qualquer outra variável hidrogeológica. As fronteiras correspondentes aos lados maiores do rectângulo foram consideradas fronteiras (naturais) impermeáveis, constituindo linhas de fluxo do escoamento.

O Teste 7 completa a análise do comportamento dos diversos modelos seleccionados. A realização deste teste teve dois objectivos principais. O primeiro relaciona-se com a introdução de velocidades variáveis segundo os eixos x e y e a introdução de fronteiras irregulares. O segundo objectivo prende-se com o desejo de analisar o comportamento dos vários modelos numa situação hidrogeológica real, embora simplificada, do ponto de

vista da poluição. Os valores das variáveis hidrogeológicas necessárias para a realização dos testes foram retirados do estudo que se desenvolve no Capítulo 6. O desenvolvimento do Teste 7 é importante para a confirmação dos modelos seleccionados para o estudo do Capítulo 6 pela análise custo-eficácia desenvolvida em 4.4.

As condições impostas ao Teste 7 permitem ainda a análise do comportamento dos modelos em situações limites, quanto à utilização de malhas pouco refinadas.

4.3.3.2 - Domínio rectangular

4.3.3.2.1 - Injecção contínua

No Teste 5 desenvolve-se a análise do comportamento dos vários modelos em relação à variável dispersão transversal. As condições de fronteira impostas ao "aquifero-canal" rectangular foram as seguintes (Figs. 4.37 e 4.38):

$$\begin{aligned} C &= 100 && \text{para } x = 0 && \text{e } 450 \text{ m} \leq y \leq 550 \text{ m} \\ C &= 0 && \text{para } x = 0 && \text{e qualquer outro } y \\ C &= 0 && \text{para } t = 0 \end{aligned}$$

As variáveis hidrogeológicas consideradas para o Teste 5 foram as seguintes:

Ensaio 1:

$$Dx = 5,00 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$Dy = 0,50 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$Vx = 0,25 \text{ m}/\text{dia}$$

$$Vy = 0,00 \text{ m}/\text{dia}$$

Ensaio 2:

$$Dx = 5,00 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$Dy = 1,00 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$Vx = 0,25 \text{ m}/\text{dia}$$

$$Vy = 0,00 \text{ m}/\text{dia}$$

Ensaio 3:

$$Dx = 5,00 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$Dy = 5,00 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$Vx = 0,25 \text{ m}/\text{dia}$$

$$Vy = 0,00 \text{ m}/\text{dia}$$

As relações analisadas dispersão transversal (Dy)/dispersão longitudinal (Dx) foram as seguintes:

Ensaio 1: $Dy/Dx = 0,10$

$$(Dx/Dy = 10,0)$$

Ensaio 2: $Dy/Dx = 0,20$

$$(Dx/Dy = 5,0)$$

Ensaio 3: $D_x/D_y = 1,00$

($D_x/D_y = 1,00$)

A análise foi efectuada para os tempos de ensaio dos testes unidimensionais: 2000, 6000 e 10000 dias. Os resultados foram comparados em três secções transversais, localizadas a 400, 1400 e 2400 m da fronteira de montante. Para a primeira secção analisaram-se os resultados ao fim de 2000 e 10000 dias de ensaio. Para a segunda secção ao fim de 6000 e 10000 dias de ensaio. Para a terceira secção ao fim de 10000 dias de ensaio. Para cada um dos três ensaios referidos obteve-se cinco grupos de resultados, comparáveis entre si:

- a) tempo de ensaio: 2000 dias
secção transversal: 400 m
- b) tempo de ensaio: 6000 dias
secção transversal: 1400 m
- c) tempo de ensaio: 10000 dias
secção transversal: 2400 m
- d) tempo de ensaio: 10000 dias
secção transversal: 400 m
- e) tempo de ensaio: 10000 dias
secção transversal: 1400 m

Os resultados vêm tabelados nos Quadros 4.36 a 4.40 para o Ensaio 1, 4.41 a 4.45 para o Ensaio 2 e 4.46 a 4.50 para o Ensaio 3.

A análise visual, comparativa, dos resultados pode ser feita nas Figs. 4.39 a 4.56. As funções de interpolação, do terceiro grau, ensaiadas originaram oscilações numéricas desprovidas de significado físico. A fim de evitar erros no traçado manual das curvas de concentração ao longo de cada secção transversal, optou-se por interpolações lineares, entre os valores calculados pelos modelos. As curvas reais seguem uma lei (aproximadamente) normal. A interpolação serve para facilitar a identificação dos resultados dos programas. Tomando em consideração que a comparação deve ser feita, fundamentalmente, em relação aos valores calculados nos nós pode-se ainda comparar as formas e as áreas das várias figuras e avaliar o afastamento de cada figura em relação à figura de referência (solução analítica).

Os tempos de cálculo necessários à execução de cada programa são substancialmente superiores aos observados nos testes unidimensionais. Limitou-se o refinamento transversal da malha do programa DISP3.FOR de modo a se obter um tempo de cálculo sensivelmente semelhante ao do programa DISP2.FOR. Pretendia-se verificar a precisão dos resultados do programa DISP3.FOR, o mais preciso nos testes unidimensionais, quando se impõe um tempo de cálculo menor. Como se indicou na introdução, 4.3.1, não se pretende com estes testes avaliar a exactidão dos resultados de cada programa em relação a uma solução analítica, mas sim testá-los comparativamente uns em relação aos outros. (Um refinamento transversal da malha do programa DISP3.FOR melhoraria naturalmente a precisão dos seus resultados). Os tempos de cálculo (CPU) dos programas DISP2.FOR e DISP3.FOR foram assim,

para cada ensaio, sensivelmente semelhantes, respectivamente: a 1 h, 19 min e 46,11 segundos e 1 h, 13 min e 57,84 segundos. A malha do programa DISP2.FOR possui 651 nós o que corresponde a mais 150 nós do que a malha do programa DISP3.FOR, que é constituída por 501 nós.

O comportamento de qualquer desses programas não se revelou tão satisfatório em relação à solução analítica (SA2D1.FOR) como nos testes unidimensionais. Em relação ao somatório dos erros absolutos e apesar das limitações impostas ao programa DISP3.FOR no que se refere ao refinamento da malha, verificou-se que em quatro das 15 situações analisadas os resultados desse programa são mais precisos que os do DISP2.FOR.

Outra análise com interesse, ainda sobre o programa DISP3.FOR, corresponde à comparação dos valores máximos da concentração para cada caso, em relação ao valor máximo de ensaio da solução analítica. O programa é o mais preciso em cinco das 15 situações analisadas.

Observando a configuração das curvas dos resultados do programa DISP3.FOR, pode-se concluir que as deficiências verificadas no Teste 5 se devem a oscilações numéricas (transversais) dos pontos de ordenadas situadas imediatamente antes e imediatamente depois da correspondente à concentração transversal máxima. O refinamento transversal da malha resolve o problema referido, no entanto com custos agravados de tempo de cálculo.

Quanto ao comportamento do programa DISP2.FOR verifica-se em todos os ensaios um achatamento significativo da curva de concentrações em relação ao valor máximo da solução analítica. As curvas de concentrações transversais desse programa não são

simétricas ao contrário do que exigiriam as condições de fronteira.

O programa DISP1.FOR, cuja malha apenas possuiu 176 nós, é neste teste o melhor programa de elementos finitos. Apresenta contudo resultados piores que os dos programas de diferenças finitas. A diferença entre os valores máximos que calcula e os da solução analítica são normalmente reduzidos. As curvas transversais correspondem a uma dispersão transversal superior à dada, situação essa que piora à medida que a relação entre a dispersão transversal e a dispersão longitudinal diminui.

Os dois programas de diferenças finitas, RANDOM.FOR e KONIK3.FOR são, neste teste, inequivocamente mais precisos do que qualquer outro, com especial relevo para o RANDOM.FOR que das 15 situações analisadas é o mais preciso em 11 e o segundo mais preciso em duas situações. O programa KONIK3.FOR é mais preciso em duas situações e o segundo mais preciso em sete. O valor de relação entre a dispersão transversal e a dispersão longitudinal não afecta praticamente a precisão dos resultados obtidos por estes modelos.

As curvas do programa KONIK3.FOR são simétricas. As curvas do programa RANDOM.FOR dependem, naturalmente, dos valores gerados por simulação.

Em relação ao programa MIXCEL.FOR salienta-se o seu comportamento irregular. É o programa mais preciso em duas situações e é o menos preciso em quatro. De qualquer forma e atendendo à simplicidade deste modelo, que não inclui coeficientes de dispersão nem transversal nem longitudinal, realça-se o comportamento globalmente satisfatório neste teste.

Tal como acontece nos testes unidimensionais o ajustamento dos resultados do programa MIXCEL.FOR em relação aos resultados da solução analítica resulta de múltiplas tentativas em que se altera o valor da variável "intercâmbio" entre as células. Pretende-se com o Teste 5 mostrar que a experiência de utilização do programa MIXCEL.FOR permite a obtenção de soluções relativamente aceitáveis, mesmo quando os dados hidrogeológicos disponíveis, nomeadamente no que se refere às variáveis dispersão longitudinal e transversal são escassos. O reduzido tempo de CPU necessário à execução do programa, e a possibilidade de obtenção de resultados em situações de carência de dados são as vantagens mais importantes desse modelo.

4.3.3.2.2 - Injecção instantânea

A análise do comportamento dos modelos quando sujeitos a uma injecção instantânea, numa situação bidimensional, é tratada no Teste 6. Realizou-se apenas um ensaio neste teste, com as características seguintes:

Teste 6 - Ensaio 1(único):

$$D_x = 5,00 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$D_y = 0,50 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$V_x = 0,25 \text{ m}/\text{dia}$$

$$V_y = 0,00 \text{ m}/\text{dia}$$

Estas características são equivalentes às do Ensaio 1 do Teste 5.

O comportamento dos modelos foi observado para os três tempos de ensaio habituais, 2000, 6000 e 10000 dias, em secções situadas, aproximadamente, a 500, 1500, e 2500 m do local de injeção ou seja, aproximadamente, a 900, 1900, e 2900 m da origem, uma vez que, como se indicou em 4.3.3.1, a injeção se realizou para $x = 400$ m.

Os resultados obtidos com os modelos foram comparados nas secções (transversais) onde se observa o valor máximo longitudinal, calculado por cada programa, em cada tempo de ensaio. A comparação não tem assim obrigatoriamente lugar nas secções transversais situadas a 900, 1900, e 2900 m da origem, mas em secções vizinhas, que variam de programa para programa. Pretendeu-se deste modo analisar apenas a variação transversal de concentração, não incluindo qualquer componente de erro devido à propagação longitudinal da mancha de poluição pelo canal.

Como se indicou para os Testes 2 e 4, o programa SA2D1.FOR não permite uma análise exacta de uma injeção instantânea pois apenas considera um coeficiente de decaimento do poluente na origem. Os resultados dos modelos, incluindo os resultados aproximados do programa SA2D1.FOR, foram comparados com os da solução analítica apresentada em 4.2.1.2, para o Teste 6.

Nos Quadros 4.51, 4.52 e 4.53 e nas Figs. 4.57 a 4.60 apresentam-se os resultados obtidos para este teste.

Analisando os resultados salienta-se o comportamento muito bom do programa DISP3.FOR, que melhora significativamente em relação ao Teste 5. Verifica-se uma pequena oscilação numérica na primeira secção. O programa DISP2.FOR apresenta resultados bons, excepto na primeira secção analisada, situada mais perto do local de injeção.

O programa DISP1.FOR comporta-se pior do que no Teste 5

apresentando uma forte dispersão numérica transversal. Relativamente aos outros dois programas de elementos finitos os resultados obtidos pelo programa, DISP1.FOR são, neste teste, os menos precisos.

Os programas de diferenças finitas RANDOM.FOR e KONIK3.FOR pioram em relação ao Teste 5 e relativamente aos outros programas, nomeadamente no que se refere ao programa RANDOM.FOR.

O programa MIXCEL.FOR apresenta uma curva francamente mais aberta do que a da solução analítica, sendo em precisão o pior de todos os programas no Teste 6.

O programa SA2D1.FOR apresenta um bom comportamento relativamente aos outros programas. É o segundo melhor programa em precisão, logo depois do DISP3.FOR.

4.3.3.3 - Domínio bidimensional irregular

O comportamento dos modelos foi analisado para um situação hidrológica real no Teste 7, Fig. 6.3. As velocidades segundo os eixos x e y e as alturas piezométricas do aquífero foram calculadas de acordo com a malha de cada programa. As isolinhas das velocidades do escoamento, das profundidades do aquífero, das superfícies freática e piezométrica do aquífero e todas as variáveis necessárias à realização dos testes foram calculadas no estudo que se apresenta no Capítulo 6.

Procedeu-se à análise vectorial do campo das velocidades para a decomposição da velocidade do escoamento segundo as direcções x e y, nos nós e nas células das malhas dos vários modelos. Para os objectivos do Teste 7 não se considera necessária a apresentação desses cálculos neste ponto.

As condições de fronteira referentes ao estudo do transporte de poluentes do Teste 7 foram as seguintes (Fig. 4.61):

a) Fronteira de montante, A - B

$$C = 0$$

b) Condição de fronteira interior na região a b c d

$$C = 100$$

c) Condições iniciais em todo o domínio

$$C = 0$$

Neste teste inclui-se o programa descrito em 4.2.6.2.4, DISP4.FOR, que permite a utilização simultânea de triângulos e de rectângulos quadráticos, utilizando o método dos elementos finitos. Esse programa permite tirar partido, simultaneamente, das vantagens dos programas DISP2.FOR e DISP3.FOR.

As malhas dos vários programas foram desenhadas em condições limites de não refinamento, principalmente no caso dos programas baseados no método dos elementos finitos. Procurou desse modo observar-se o efeito das oscilações numéricas. O número de Peclet da malha dos modelos é variável mas apresenta valores normalmente elevados ($Pe > 50$) e alguns valores médios ($Pe = 10$).

Foram seleccionados três locais do aquífero que permitem a obtenção de curvas de características diferentes, da evolução da concentração do poluente no tempo. Os locais designaram-se por "Captacão-85", "Captacão-84" e "Espadanal" (Fig. 4.62).

No Capítulo 6 estuda-se em pormenor a evolução da concentração de um poluente na Captacão-85 do aquífero de Rio

Maior, que abastece maioritariamente a cidade. O aquífero foi sujeito a um conjunto de nove cenários de exploração do empreendimento projectado para exploração das lenhites locais e para produção de energia eléctrica. É assim, importante observar o comportamento dos vários modelos neste teste de modo a confirmar a selecção de modelos que se desenvolve em 4.4.

As condições de fronteira a que os modelos foram sujeitos não permite a aplicação do programa SA2D1.FOR, ou a de qualquer outra solução analítica.

O programa escolhido para referência foi o programa DISP2.FOR. O andamento das curvas de concentração no tempo obtidas para as três diferentes secções por este programa mostraram uma evolução e estabilização plausíveis. Não se observaram neste programa oscilações numéricas, até ao tempo de ensaio limite de 20000 dias.

A malha do programa DISP2.FOR é constituída por 299 nós e 134 elementos, Fig. 4.62.

A malha do programa DISP4.FOR (Fig. 6.4) é constituída por 70 elementos, sendo 6 triangulares e os restantes rectangulares, e 235 nós. Como no Teste 5 pretendeu-se que os tempos de cálculo dos programas com elementos triangulares (DISP2.FOR) e rectangulares (DISP4.FOR, neste teste) fossem da mesma ordem de grandeza. Com a malha escolhida o tempo de cálculo do programa DISP2.FOR foi de 1 hora, 9 minutos e 6,96 segundos e o do programa DISP4.FOR foi de 1 hora, 8 minutos e 20,03 segundos.

Como se pode verificar, observando a malha do programa DISP4.FOR, Fig. 6.4, apenas se colocaram seis triângulos em regiões fronteiricas, onde se adaptam melhor que os rectângulos. Toda a restante malha é rectangular. Esta malha é assim

essencialmente uma malha de elementos rectangulares que poderia ter sido analisada pelo programa DISP3.FOR.

Para estudar o efeito que a discretização da malha tem no comportamento do programa DISP3.FOR e no tempo de cálculo (porque como se disse a malha do programa DISP4.FOR é essencialmente uma malha rectangular) reduziu-se significativamente o números de elementos e de nós do programa DISP3.FOR, no Teste 7. Esta é constituída por apenas 180 nós e 49 elementos, Fig. 4.63. O tempo de cálculo foi assim reduzido para 23 minutos e 46,89 segundos.

As malhas dos programas RANDOM.FOR e KONIK3.FOR foram desenhadas com espaçamentos segundo x e segundo y de 250 m, Fig. 6.3.

A malha do programa MIXCEL.FOR foi considerada idêntica à do programa DISP3.FOR, Fig. 4.63.

As características hidrogeológicas do Teste 7 são as seguintes:

Teste 7:

$$D_x = 5,00 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$D_y = 0,50 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$V_x = \text{variável de } 0,517 \text{ a } -0,062 \text{ m}/\text{dia}$$

$$V_y = \text{variável de } 0,036 \text{ a } -0,800 \text{ m}/\text{dia}$$

$$k \quad (\text{condutividade hidráulica}) = 8 \text{ m}/\text{dia}$$

$$\phi_e \quad (\text{porosidade eficaz}) = 0,10$$

$$h \quad (\text{altura piezométrica}) = \text{variável de } 100,0 \text{ a } 7,70 \text{ m}$$

O passo de cálculo considerado foi de 50 dias.

Os resultados calculados pelos programas foram tabelados, de 2000 em 2000 dias, nos Quadros 4.54, 4.55 e 4.56 respectivamente para a "Captaco-85", para a "Captaco-84" e para o "Espadanal".

Analisando os resultados para a Captaco-85, Quadro 4.54, em relao ao programa de referncia DISP2.FOR, verifica-se que o programa mais preciso  o DISP4.FOR, seguido dos programas DISP3.FOR, RANDOM.FOR, MIXCEL.FOR e DISP1.FOR. Na Fig. 4.64 pode observar-se o andamento dos resultados.

Salienta-se a relativa disperso dos resultados bem como a defasagem no incio da subida das concentraes. Tal facto pode ser atribuído ao reduzido refinamento das malhas. Os valores mais afastados do comportamento geral para 20000 dias de ensaio so os dos programas MIXCEL.FOR e DISP1.FOR.

Em relao aos tempos de clculo as variaes tambm so significativas:

MIXCEL.FOR =	17,27 seg.
KONIK3.FOR =	3 min, 22,73 seg.
DISP1.FOR =	5 min, 53,35 seg.
DISP3.FOR =	23 min, 46,89 seg.
RANDOM.FOR =	44 min, 17,07 seg.
DISP4.FOR =	1 hora, 8 min, 20,03 seg.
DISP2.FOR =	1 hora, 9 min, 6,96 seg.

Em relao à seco "Captaco-84" verifica-se o seguinte escalonamento crescente do somatrio de erros em relao aos valores do programa DISP2.FOR: KONIK3.FOR, DISP1.FOR, DISP4.FOR, RANDOM.FOR, DISP3.FOR e MIXCEL.FOR. No Quadro 4.55 e na Fig. 4.65 apresentam-se os resultados obtidos para a seco "Captaco-84". Com exceo do programa DISP3.FOR que

estabiliza, a um nível muito baixo, e do programa DISP4.FOR (equivalente ao programa DISP3.FOR mas com um refinamento de malha diferente), que a partir de 14000 dias apresenta um crescimento anômalo da concentração, os restantes programas estabilizam em valores relativamente semelhantes. Os resultados do programa DISP4.FOR mostram a necessidade de um maior refinamento da malha, pelo menos nessa região. Uma redução do passo de cálculo, para metade, e a introdução de dupla precisão nas variáveis desse programa não resolveram a situação.

Finalmente, para a secção do "Espadanal", o escalonamento decrescente em precisão de resultados, dos programas, em relação ao programa DISP2.FOR, foi o seguinte: DISP4.FOR, KONIK3.FOR, RANDOM.FOR, DISP1.FOR, DISP3.FOR e MIXCEL.FOR. No Quadro 4.56 e na Fig. 4.66 apresentam-se os resultados obtidos para a secção do "Espadanal". Para esta secção os programas DISP3.FOR e MIXCEL.FOR estabilizaram em valores muito baixos. O programa DISP1.FOR estabiliza em valores excessivos.

Os restantes programas apresentam comportamentos semelhantes e aceitáveis.

Da análise desenvolvida no Teste 7 pode-se concluir, para a escolha dos programas a incluir no estudo do Capítulo 6, (Captação-85), o seguinte:

- a) Dos programas testados o que se mostrou mais preciso em relação ao DISP2.FOR foi o programa DISP4.FOR (exceptuando a secção "Captação-84"). Esse programa permite, caso se deseje, o tratamento de malhas iguais às do programa DISP2.FOR, aliando as suas características às desse programa.

- b) O programa que se revelou mais económico com comportamento e precisão aceitáveis, foi o programa KONIK3.FOR.
- c) Os programas DISP1.FOR, RANDOM.FOR e MIXCEL.FOR revelaram comportamentos oscilatórios ou anómalos.

As conclusões do Teste 7, baseados nos resultados obtidos nas três secções analisadas dão uma ideia geral do comportamento dos modelos estudados em situações hidrogeológicas reais.

Salienta-se, para concluir, a importância fundamental que o refinamento das malhas dos programas, nomeadamente dos programas baseados no método dos elementos finitos, tem na precisão dos resultados obtidos.

4.4 - Análise custo-eficácia dos modelos estudados

4.4.1 - Introdução

A análise custo-eficácia é um método, desenvolvido no âmbito da investigação operacional, que se destina à determinação da alternativa mais adequada à resolução de um problema. O processo de decisão baseia-se numa ponderação sistemática das várias soluções alternativas do problema.

Segundo LÜHR 1972 a aplicação da análise custo-eficácia a um problema concreto é possível desde que as seguintes três condições sejam satisfeitas:

1. Os objectivos da análise devem ser facilmente reconhecíveis e formuláveis.
2. Devem existir alternativas para a resolução do

problema.

3. As restrições que limitam o problema devem ser conhecidas.

Para cada problema a análise e classificação das alternativas resulta dos critérios de análise e ponderação mais relevantes para o problema, que se dividem em pontos de vista de custos e pontos de vista de eficácia.

A componente dos custos compreende os aspectos do problema que se podem quantificar em termos de unidades monetárias, por exemplo os custos de construção de uma barragem, os custos de tempo de computador ou os custos de mão-de-obra para a obtenção dos dados de um problema.

A componente eficácia é constituída pelos aspectos que são mensuráveis mas não se podem quantificar em unidades monetárias e ainda pelos aspectos que não são mensuráveis. Esses dois aspectos são quantificados em unidades próprias. Como exemplo deste tipo de aspectos referem-se os relacionados com a satisfação do bem estar e da qualidade de vida das populações, ou com a satisfação das necessidades dos utentes de determinado sistema de transportes ou de um sistema de abastecimento de água. Podem ainda incluir-se neste grupo os aspectos relacionados com a flexibilidade de aplicação de um modelo de cálculo.

Com a consideração da componente eficácia, a análise custo-eficácia ultrapassa, como ferramenta de cálculo, a tradicional análise custos-benefícios. Esta pode-se considerar um caso particular daquela.

A transparência dos critérios de selecção, ponderação e esclarecimento dos resultados obtidos é fundamental para uma análise custo-eficácia que se pretenda com interesse. KAZANOSWKI 1968 apresenta um conjunto de regras destinadas à resolução correcta da análise custo-eficácia.

Indicam-se em seguida as referidas regras, exemplificadas para o problema que se pretende resolver:

1. Descrição do problema e do objectivo a atingir.

(Comparação de modelos matemáticos para a resolução de problemas de transporte de poluentes em águas subterrâneas).

2. Determinação dos critérios ou aspectos mais relevantes para o objectivo em vista.

(Precisão dos resultados dos modelos, custos de computador, adaptabilidade dos modelos a situações reais, etc.).

3. Desenvolvimento de soluções alternativas.

(Soluções analíticas, método das características, método dos elementos finitos, etc.).

4. Desenvolvimento de um modelo de comparação de alternativas.

Este modelo incluiu as variáveis quantificáveis em unidades monetárias e as que o são apenas em outras unidades apropriadas.

(Somatório de erros dos resultados de um modelo em relação a uma solução analítica, somatório dos tempos de CPU, número de possibilidades de cálculo incluídas nos programas, etc.).

5. A análise deve ser feita de um ponto de vista de custos

máximos ou de uma dada eficácia imposta.

(São analisadas quatro situações diferentes que incluem ambos os aspectos: precisão dos resultados, custos de execução dos modelos, prazos de execução e carências de dados).

6. Aplicação do modelo de decisão a cada solução alternativa.
(Realização dos Testes e Ensaios descritos em 4.3).
7. Cálculo de uma matriz de classificação de resultados para cada critério de análise e para cada solução alternativa.
(A apresentar em 4.4.3, matriz objectiva).
8. Análise da matriz calculada em 7 e determinação da alternativa mais adequada à resolução do problema.
(A apresentar em 4.4.3, matriz subjectiva e escalonamento dos modelos).
9. Aplicação de uma análise de sensibilidade ao estudo realizado em 8.
(Desenharam-se quatro Árvores de Decisão que incluem os aspectos referidos em 5.).
10. Documentação do processo de decisão de modo a clarificar os resultados alcançados pela análise custo-eficácia desenvolvida.
(Procurar-se-á ter presente este aspecto na redacção dos pontos que se seguem).

É necessário referir que todo o processo apresenta uma forte componente subjectiva tanto na selecção dos aspectos considerados mais relevantes como na ponderação relativa desses mesmos

aspectos. Não se procurou, deliberadamente, aliviar essa componente subjectiva. Apresentam-se no entanto todos os passos (objectivos) intermédios de modo a possibilitar uma análise rápida que possa vir a ser desenvolvida pelo leitor interessado na resolução do problema por qualquer outra via.

Apresenta-se também um conjunto de quatro Árvores de Decisão relacionadas com áreas distintas da engenharia civil e ambiental (desenvolvida de acordo com as perspectivas apresentadas no Capítulo 2) que servem de base à selecção de métodos e modelos, para a resolução de situações hidrogeológicas reais de poluição de águas subterrâneas.

Apresenta-se em seguida uma breve descrição da evolução do estado dos conhecimentos da análise custo-eficácia.

A análise custo-eficácia desenvolveu-se na década de 1960, segundo SEILER 1969, impulsionada pelo Departamento de Defesa dos E.U.A. Desde logo se tornou numa imposição contratual desse Departamento.

A partir dessa década surgiram variadíssimas aplicações em áreas civis, nomeadamente na medicina e na engenharia de transportes.

Na pesquisa bibliográfica levada a cabo no LNEC, sobre este tema, às bases de dados Pascal e Water Resources Abstracts obtiveram-se referências de uma centena de trabalhos publicados nos últimos dez anos. Os domínios de aplicação da análise custo-eficácia observados na pesquisa efectuada, estendem-se às seguintes áreas (mencionadas por ordem decrescente do número de trabalhos citados): tratamento de águas residuais e de abastecimento, transportes urbanos e aéreos e vias de comunicações em geral, qualidade de águas fluviais e lacustres,

medicina e radiologia, gestão de recursos hídricos e poupança de água, aquacultura, agricultura e sivicultura, salinidade e utilização de pesticidas, indústria, erosão e sedimentologia, ruído, eutrofização, engenharia costeira, economia, e estudos de impacto ambiental.

Dos investigadores que mais trabalho desenvolveram neste domínio destaca-se Richard de Neufville, do Massachusetts Institute of Technology (MIT), dos E.U.A. Desse autor citam-se as seguintes referências: NEUFVILLE e STAFFORD 1968, NEUFVILLE 1970, NEUFVILLE e MIERZEJEWSKI 1972, e NEUFVILLE e MARKS 1974.

Uma introdução teórica à análise custo-eficácia é apresentada em SEILER 1969.

A aplicação desta técnica a problemas de águas subterrâneas é feita de uma forma clara em LÜHR 1972. Nesse trabalho comparam-se vários modelos analógicos e matemáticos para a resolução do problema do escoamento de águas subterrâneas, em regime permanente, sujeito a recarga fluvial. Estudam-se 24 casos teóricos uni, bi e tridimensionais de aquíferos freáticos e confinados, isotrópicos e anisotrópicos, sujeitos a infiltração fluvial, proveniente de rios com e sem leitos semipermeáveis.

Nos pontos seguintes desenvolve-se uma análise custo-eficácia para a selecção dos modelos matemáticos mais adequados à resolução de problemas de poluição de águas subterrâneas, originados pela "Indústria e Minas", "Aglomerados Populacionais", "Agricultura" e "Acidentes Ambientais", para poluentes conservativos e não conservativos, sujeitos a condicionalismos físicos (hidrogeológicos) e a restrições de projecto.

4.4.2 - Descrição dos critérios de avaliação

Como se indicou no ponto anterior, um dos passos fundamentais para o estabelecimento do modelo de comparação (regra no. 2 de Kazanosuki) relaciona-se com a selecção dos critérios ou aspectos que se considerem mais relevantes para a resolução do problema em estudo. Os critérios, que se seleccionam, e o seu número devem descrever de uma forma completa o problema. Os aspectos que se consideraram mais importantes para o presente estudo foram os seguintes:

- A. Precisão dos resultados do modelo.
- B. Tempo de CPU necessário à execução do programa.
- C. Potencialidades dos programas para aplicação a situações reais.
- D. Tempo de preparação de dados.
- E. Ocupação de memória de computador com o programa e com os dados.
- F. Facilidade de visualização dos resultados.
- G. Ocupação da área do sistema com os ficheiros do programa, dados e resultados.
- H. Cálculos auxiliares e autocontrolo do programa.

O primeiro critério (A) "Precisão dos resultados do modelo" será considerado, em 4.4.3, como o critério mais importante. É particularmente relevante precisar o que se pretende caracterizar com este critério. Como se indicou repetidamente em 4.3, não se

pretendeu neste trabalho aferir cada modelo com as soluções exactas, em cada ensaio efectuado. Essas comparações foram já efectuadas em trabalhos anteriores, ou podê-lo-ão ser sem dificuldades de maior. O refinamento das malhas dos programas e dos tempos de cálculo acarretaria um aumento da precisão dos resultados, pelo menos, até certo ponto. Um estudo desse tipo poderá ser facilmente desenvolvido com base nos resultados que se apresentaram anteriormente, em especial para os programas DISP3.FOR e DISP4.FOR, efectuados também com esse objectivo. De certo modo as conclusões dum estudo deste tipo foram já parcialmente extraídas dos resultados apresentados anteriormente para os dois programas.

O que se pretende avaliar neste primeiro critério é a precisão relativa dos resultados dos programas quando comparados entre si, obtidos para situações equivalentes de refinamento de malhas, e naturalmente a sua configuração particular em cada ensaio, incluindo as oscilações e dispersões numéricas. Cumprindo as regras mínimas para o traçado das malhas, sugeridas pelos autores e pela literatura, procurou analisar-se o comportamento de cada programa sujeito a variações significativas do número de Peclet, à variação da relação dispersão longitudinal/dispersão transversal, à existência de condições de fronteira constantes ou instantâneas e ao decaimento ou conservação do poluente no solo. As variáveis referidas foram isoladas em cada ensaio de modo a evitar sobreposições de efeitos.

Deste modo embora se tenha dado a cada programa uma malha adequada à situação média analisada (todos os programas em mais de uma situação revelaram ser o programa mais preciso) observou-se o comportamento dos programas em termos de precisão

de resultados quando a situação ensaiada se afastava desse valor médio. Tais situações são características de problemas hidrogeológicos reais, em regime variável, para as quais não se refinam as malhas, de cada vez que a situação se torna mais desfavorável. Se tal fosse realizado sê-lo-ia à custa da eficácia global do sistema.

O critério (A) "Precisão dos resultados" deve ser incluído nos aspectos relacionados com a eficácia. Estabeleceu-se uma ordenação decrescente dos programas para cada teste, ensaio e situação. O programa mais preciso para cada caso foi considerado o que apresenta o menor somatório de erros absolutos, em relação à solução analítica (exacta).

Esses valores foram já apresentados em Quadros apropriados, em 4.3. A análise desses Quadros permite o preenchimento do Quadro 4.57 relativo aos Testes 1, 2 e 3, para os quais se conhecem soluções exactas. O Teste 4 será analisado separadamente.

Ao programa mais preciso, em cada caso, atribuiu-se a classificação 1. Ao segundo mais preciso atribuiu-se a classificação 2, e assim sucessivamente. Para cada ensaio, procedeu-se ao somatório dos erros absolutos de todos os casos analisados, programa a programa.

A classificação final de cada teste resultou da análise da classificação individual de cada ensaio. A classificação do teste é assim ao contrário da classificação de cada ensaio, uma classificação subjectiva. Atribui-se igual peso à classificação individual de cada ensaio. O programa mais preciso para cada teste foi considerado o programa cujo somatório de classificações individuais, nos ensaios, foi o mais baixo.

A classificação correspondente ao conjunto dos testes unidimensionais foi efectuada segundo um procedimento idêntico. Incluíram-se apenas os Teste 1 e 3, que analisam todos os programas seleccionados, à excepção do BEMDIS.FOR, como foi referido em 4.2.7.1.

Em relação aos Testes 5 e 6, que analisam situações bidimensionais, procedeu-se de modo equivalente. Os resultados dessa análise sintetizam-se no Quadro 4.58. Nesse Quadro apresenta-se ainda a síntese da classificação final correspondente ao conjunto dos Testes uni e bidimensionais 1, 3, 5 e 6.

Com base nos pressupostos que se apresentaram é o seguinte o ordenamento (decrecente) dos vários modelos, quanto ao critério (A) "Precisão dos resultados do modelo":

- 1o. - SA2D1.FOR (solução exacta)
- 2o. - DISP3.FOR
- 3o. - KONIK3.FOR
- 4o. - RANDOM.FOR
- 5o. - DISP2.FOR
- 6o. - DISP1.FOR
- 7o. - MIXCEL.FOR

O ordenamento relativo do programa BEMDIS.FOR no teste em que foi incluído (Teste 1) é apresentado no Quadro 4.57 (2a. posição global).

Nos Quadros 4.59 e 4.60 apresentam-se os resultados dos Testes 4 e 7, respectivamente. Nesses testes não se compararam os resultados dos programas com os de soluções analíticas. No

primeiro caso porque não se identificou nenhuma solução exacta; no segundo caso porque a solução exacta não existe. Os programas utilizados, para comparação de resultados foram o DISP3.FOR, no Teste 4, e o DISP2.FOR, no Teste 7. Os resultados foram analisados em 4.3.2.5 e 4.3.3.3. Nos Quadros 4.59 e 4.60 apresenta-se a classificação relativa dos programas, de acordo com o procedimento adoptado para os restantes testes.

O segundo critério para a análise dos programas foi o (B) "Tempo de CPU necessário à execução dos programas". No Quadro 4.61 apresenta-se o tempo de CPU necessário à execução de cada programa, para cada ensaio. A classificação ordenada dos programas baseou-se no tempo de CPU necessário à execução de todos os ensaios. Por ordem crescente de (B) "Tempo de CPU necessário à execução dos programas" o ordenamento dos programas foi o seguinte:

- 1o. - KONIK3.FOR
- 2o. - MIXCEL.FOR
- 3o. - DISP1.FOR
- 4o. - RANDOM.FOR
- 5o. - SA2D1.FOR
- 6o. - DISP2.FOR
- 7o. - DISP3.FOR

O programa DISP4.FOR permite a utilização simultânea dos elementos constituintes das malhas dos programas DISP2.FOR e DISP3.FOR. O tempo de cálculo deverá assim ser semelhante ao desses programas. A sua classificação relativa deve situar-se entre a 6a. e a 7a. posições.

O programa BEMDIS.FOR foi analisado apenas no Teste 1.

Nesse teste a sua posição relativa quanto ao critério (B) "Tempo de CPU" foi a seguinte (ordenamento crescente com o tempo de cálculo utilizado):

- 1o. - MIXCEL.FOR
- 2o. - KONIK3.FOR
- 3o. - DISP1.FOR
- 4o. - BEMDIS.FOR
- 5o. - DISP2.FOR
- 6o. - RANDOM.FOR
- 7o. - DISP3.FOR
- 8o. - SA2D1.FOR

O tempo de cálculo do programa BEMDIS.FOR, como se pode observar no Quadro 4.61, situa-se muito perto do programa DISP1.FOR.

O terceiro critério (C) relaciona-se com as "Potencialidades dos programas para aplicação a situações reais". No Quadro 4.62 sintetizam-se os métodos de cálculo utilizados pelos programas, os seus objectivos de cálculo e as suas potencialidades de cálculo. Em relação ao "Número de potencialidades de cálculo" (C) o escalonamento decrescente dos programas é o seguinte:

- 1o. - DISP4.FOR
- 2o. - DISP3.FOR
- 3o. - DISP2.FOR
- 4o. - MIXCEL.FOR
- 5o. - DISP1.FOR
- 6o. - RANDOM.FOR

- 7o. - KONIK3.FOR
- 8o. - SA2D1.FOR
- 9o. - BEMDIS.FOR

O escalonamento relativo dos programas DISP4.FOR, DISP3.FOR e DISP2.FOR foi baseado nas seguintes considerações: a) o programa DISP4.FOR permite o tratamento simultâneo de malhas triangulares e rectangulares; b) o programa DISP3.FOR permite basicamente o tratamento de malhas rectangulares mas admite a consideração de elementos triangulares com oito nós; c) o programa DISP2.FOR permite apenas a consideração de malhas triangulares.

O critério (D) "Tempo de preparação dos dados necessários à execução dos programas" baseou-se na experiência obtida com a realização dos testes. O escalonamento dos programas, crescente com o tempo necessário para a preparação dos dados, sua introdução e correção em computador é o seguinte:

- 1o. - SA2D1.FOR
- 2o. - BEMDIS.FOR
- 3o. - KONIK3.FOR
- 4o. - RANDOM.FOR
- 5o. - DISP1.FOR
- 6o. - DISP3.FOR
- 7o. - DISP4.FOR
- 8o. - DISP2.FOR
- 9o. - MIXCEL.FOR

Considerou-se que o tempo de preparação dos dados se refere exclusivamente aos dados necessários para a execução do programa

e que se dispõe à partida de todos os dados caracterizadores do problema hidrogeológico em estudo, como por exemplo o campo de velocidades do escoamento, a piezometria do aquífero, as cotas de fundo do aquífero, etc.

O critério (E) "Ocupação de memória de computador com o programa e os dados" pretende caracterizar as possibilidades de tratamento de problemas complexos em computador. O tratamento de um problema real por determinado programa exige a discretização do aquífero numa malha constituída por um número considerável de elementos e nós. Se o volume de dados a armazenar, matrizes com as variáveis de cálculo e resultados, for superior à capacidade de memória (virtual) do computador então mesmo que o programa seja o mais adequado à resolução do problema não será possível a sua execução.

A classificação dos programas baseou-se na experiência adquirida com os Testes 1 e 5 e no dimensionamento de base admitido para determinados programas, segundo sugestão dos autores (RANDOM.FOR e KONIK3.FOR). A classificação ordenada por necessidade crescente de memória (virtual) de computador é a seguinte:

- 1o. - SA2D1.FOR
- 2o. - BEMDIS.FOR
- 3o. - DISP1.FOR
- 4o. - DISP3.FOR
- 5o. - DISP4.FOR
- 6o. - RANDOM.FOR
- 7o. - KONIK3.FOR
- 8o. - DISP2.FOR

O ordenamento dos programas DISP3.FOR, DISP4.FOR, RANDOM.FOR, KONIK3.FOR é de certo modo subjectivo. O dimensionamento dos programas de diferenças finitas é normalmente menos pesado em termos de ocupação de memória de computador que os programas de elementos finitos, segundo LÜHR 1972. Essa diferença de ocupação de memória aumenta ainda e acentuadamente à medida que o número de nós de uma malha aumenta. No caso dos dois programas de diferenças finitas, testados, o dimensionamento vem definido pelos autores e requer uma capacidade de memória relativamente grande. A razão desse dimensionamento considerável, relaciona-se com a necessidade de memorização de cada partícula, destinada ao cálculo da convecção pelo método das características. No caso do programas DISP2.FOR, DISP3.FOR e DISP4.FOR são definidas regras para o dimensionamento económico dos programas, que pode assim variar facilmente de problema para problema.

O critério (F) "Facilidade de visualização dos resultados" baseou-se também na experiência adquirida nos testes efectuados. Mais uma vez o critério é subjectivo e deverá ser analisado em termos de eficácia de acordo com os procedimentos anteriormente descritos. Alguns programas apresentam os resultados em termos de coordenadas, como por exemplo o programa SA2D1.FOR, o que facilita a leitura. Outros, como por exemplo os programas de elementos finitos ou o programa MIXCEL.FOR apenas apresentam os resultados em nós ou células, obrigando à consulta de tabelas de correspondência dos nós ou das células com as suas coordenadas. Os programas KONIK3.FOR e RANDOM.FOR permitem uma visualização directa dos resultados, nas células da malha, apresentados de uma

forma clara. O programa KONIK3.FOR permite ainda a indicação do local onde se pretende a visualização das curvas de concentração dos poluentes no tempo, o que facilita a análise e comparação de resultados.

O escalonamento decrescente dos programas, para este critério (F) "Facilidade de visualização dos resultados", é o seguinte:

- 1o. - SA2D1.FOR
- 2o. - KONIK3.FOR
- 3o. - RANDOM.FOR
- 4o. - DISP1.FOR
- 5o. - MIXCEL.FOR
- 6o. - BEMDIS.FOR
- 7o. - DISP2.FOR, DISP3.FOR, DISP4.FOR

O critério (G) "Ocupação da área do sistema com o ficheiro do programa, dados e resultados" pretende caracterizar o número de blocos dos ficheiros necessários para guardar o programa, dados e resultados. Estes últimos podem provocar situações mais ou menos incómodas se o número de blocos que ocupam for relativamente grande. Nesse caso obrigam a uma gestão cuidada das áreas de trabalho ou à saída imediata dos resultados, ainda não visualizados, como no caso de corridas em "batch".

O escalonamento dos programas foi feito por análise do somatório do número de blocos de dados e resultados de um teste de referência. Os resultados para o critério (G), por ordem crescente de área do sistema ocupada, foram os seguintes:

- 1o. - SA2D1.FOR

- 2o. - DISP2.FOR
- 3o. - DISP3.FOR
- 4o. - BEMDIS.FOR
- 5o. - DISP4.FOR
- 6o. - RANDOM.FOR
- 7o. - KONIK3.FOR
- 8o. - MIXCEL.FOR
- 9o. - DISP1.FOR

Finalmente o critério (H) "Cálculos auxiliares e autocontrole do programa" permite caracterizar os programas quanto à possibilidade da sua aplicação a situações reais, onde se torne necessário proceder à realização de cálculos auxiliares para a quantificação de variáveis e/ou para a correção de dados deficientemente calculados, como por exemplo o passo de cálculo do programa, ou ainda a indicação de erros de dados.

O ordenamento dos programas segundo o critério (H) "Cálculos auxiliares e autocontrole do programa", mais uma vez subjectivo, baseou-se na experiência adquirida nos teste efectuados. Por ordem decrescente, os programas ficaram ordenados do seguinte modo:

- 1o. - KONIK3.FOR
- 2o. - RANDOM.FOR
- 3o. - DISP1.FOR
- 4o. - DISP1.FOR, DISP3.FOR, DISP4.FOR
- 7o. - MIXCEL.FOR
- 8o. - SAZD1.FOR, BEMDIS.FOR

No Quadro 4.63 sintetizam-se os ordenamentos apresentados anteriormente, para cada um dos oito critérios seleccionados.

4.4.3 - Comparação de modelos

A comparação dos modelos corresponde à 8a. regra de KAZANOSWIKI 1968: Análise da matriz de classificação de resultados (para cada critério de análise e para cada solução alternativa) e determinação da alternativa mais adequada à resolução do problema.

A análise que se pretende desenvolver efectuar-se-á segundo duas vias diferentes. A primeira corresponde à análise objectiva do Quadro 4.63 apresentado no ponto anterior. Esse Quadro por si só constitui uma base de selecção de modelos e, mais geralmente, de métodos matemáticos para a resolução de problemas do transporte de poluentes em águas subterrâneas. A condição necessária para essa selecção é constituída pela definição, clara, de qual dos oito critérios ou combinação de critérios é considerado o mais importante para o problema real que se pretende estudar. Suponha-se o seguinte exemplo: um problema de poluição deve ser estudado do modo mais económico possível. Para a selecção do programa mais adequado, sujeito a essa restrição de projecto (por exemplo verbas limitadas para um estudo de poluição solicitado por uma autarquia local), deve ter-se em conta os critérios (B) e (D) relacionados com os custos de computador e de mão-de-obra para a preparação dos dados. Neste caso a análise do Quadro 4.63 deverá ser restringida aos critérios (B) e (D). Facilmente se poderá concluir que o programa KONIK3.FOR é o mais adequado. Em segundo lugar aparecerá o programa SA2D1.FOR (exclui-se desta análise o programa BEMDIS.FOR pelas razões

apresentadas em 4.2.7, embora tenha o mesmo número de "pontos" que o programa SA2D1.FOR).

Feitas estas considerações, a análise do Quadro 4.63 e a sua aplicação a problemas reais fica à disposição do leitor.

A segunda via de análise corresponde à interpretação do Quadro 4.63 por ponderação dos critérios que se pensa serem os mais importantes para a análise geral de problemas do transporte de poluentes em águas subterrâneas. Naturalmente que esta segunda via é subjectiva e depende da conjuntura técnico-económica do momento da análise.

Admitindo a consideração da componente subjectiva pode-se então passar à fase de selecção dos critérios mais "importantes". Dos oito critérios seleccionados foram considerados três como os mais importantes:

- A. Precisão dos resultados dos modelos
- B. Custo de execução dos programas em computador.
- C. Potencialidades de cálculo dos programas para aplicação a situações reais.

Os restantes critérios foram considerados em igualdade de importância relativa.

Os três critérios mais relevantes foram ponderados do seguinte modo:

- . Critério (A) - "Precisão dos resultados": coeficiente de ponderação = 5.
- . Critério (B) - "Custo de execução em computador": coeficiente de ponderação = 3.

. Critério (C) - "Potencialidades de cálculo": coeficiente de ponderação = 3.

Para os restantes critérios o coeficiente de ponderação foi considerado = 1.

Note-se que se se admitir, como se fez no exemplo de análise do Quadro 4.63, que os custos de execução de um programa se devem atribuir conjuntamente aos critérios (B) e (D), o coeficiente de ponderação dos critérios "custos" será $3+1 = 4$.

No entanto pensa-se que o critério (D) é de menor importância, para o cálculo de custos, que o critério (B), pelo menos com base na experiência adquirida no LNEC.

No Quadro 4.64 apresenta-se para os vários critérios e programas, uma nova tabela de classificações (absolutas), de acordo com os critérios de ponderação referidos. Nas pontuações atribuídas aos programas considerou-se que o melhor programa receberia a classificação de 9 pontos. O segundo melhor programa receberia a classificação de 8 pontos e assim sucessivamente. Essas pontuações foram em seguida multiplicadas pelos coeficientes de ponderação atrás referidos.

Analisando as classificações ponderada atribuídas a cada programa, para cada um dos critérios, chegou-se a uma classificação final (subjectiva) dos vários programas. No Quadro 4.64 calcula-se a seguinte classificação final:

- 1o. - SA2D1.FOR
- 2o. - KONIK3.FOR
- 3o. - DISP4.FOR
- 4o. - DISP3.FOR

(5o. - BEMDIS.FOR)

6o. - RANDOM.FOR

7o. - DISP1.FOR

8o. - DISP2.FOR

9o. - MIXCEL.FOR

Deve referir-se que a classificação dada ao programa DISP4.FOR se baseia nas suas características semelhantes, embora mais flexíveis, que as do programa DISP3.FOR (analisado nos Teste 1, 2, 3, 4, 5 e 6, que serviram de base à análise custo-eficácia desenvolvida).

A classificação relativa do programa BEMDIS.FOR baseia-se nos resultados do Teste 1, nas potencialidades do método dos elementos de fronteira e nas limitações que se referiram para este método, quando aplicado a estudos do transporte de poluentes em águas subterrâneas. Deve no entanto entender-se esta classificação, relativa, apenas como uma "impressão subjectiva" de ordenamento desse programa uma vez que o mesmo não foi sujeito aos restantes testes.

As conclusões da análise desenvolvida e da experiência adquirida, são as seguintes:

1. A análise preliminar de um novo estudo do transporte de poluentes em águas subterrâneas deverá ser efectuada com o programa SA2D1.FOR, ou com qualquer dos restantes seis programas baseados em soluções analíticas (equivalentes ao SA2D1.FOR e existentes no LNEC) adequados à resolução de situações uni, bi e tridimensionais.
2. Conhecido o comportamento, simplificado, das situações

hidrogeológica e do transporte de poluentes, adquirido com os programas referidos em 1., o programa mais adequado para o aprofundamento dos conhecimentos e a introdução dos vários condicionalismos físicos (hidrogeológicos), é o programa KONIK3.FOR. A excelente relação custo/eficácia deste programa destaca-o de todos os restantes modelos, para esta segunda fase dos estudos.

3. A análise complementar do problema, caso seja necessária, incluindo o tratamento pormenorizado das condições de fronteira (fronteiras curvilíneas) pode ser efectuada pelo programa DISP4.FOR. A malha desse programa dever-se-á basear fundamentalmente em elementos rectangulares.
4. Situações de elevada componente radial poderão ser estudadas eficazmente pelo programa RANDOM.FOR. Este programa adequa-se ainda ao estudo de situações fortemente convectivas com decaimento dos poluentes no solo, que não possam ser estudados com o programa KONIK3.FOR.
5. A utilização do programa DISP1.FOR é aconselhável quando se pretenderem obter respostas com custos de projecto limitados e quando o programa KONIK3.FOR não for aplicável.
6. O programa MIXCEL.FOR é especialmente adequado a situações em que não se possuam dados hidrogeológicos suficientes, em particular quando não for conhecida a dispersão longitudinal do aquífero.
7. O programa BEMDIS.FOR mostrou que o método dos elementos de fronteira pode ser interessante para a resolução de situações hidrogeológicas, predominantemente, homogéneas.

(Seria interessante incluir nesse programa o tratamento da parcela convectiva da equação do transporte pelo método dos elementos de fronteira).

A análise que se efectuou do ponto de vista objectivo (Quadro 4.63) e subjectivo (Quadro 4.64) permite, ao leitor, o tracado da sua própria via de selecção do modelo mais adequado em cada situação, face aos condicionalismos físicos e económicos do problema que pretende estudar. Não se pretende por essa razão efectuar qualquer análise de sensibilidade dos resultados apresentados. Tal estudo é facilmente realizável pelos métodos usuais da análise de sistemas, variando os coeficientes de ponderação e verificando se as conclusões apresentadas se mantêm. No entanto mais importante que a consideração desse tipo de análise, que não incluiria a análise de todas as soluções alternativas para estudos desse tipo, face aos condicionalismos de projecto reais, considerou-se a abordagem do problema do ponto de vista da elaboração de Árvores de Decisão. Tal estudo desenvolve-se no ponto seguinte.

4.4.4 - Selecção de modelos para a realização de estudos de impacto ambiental

Para concluir o Capítulo 4 desenvolvem-se neste ponto, quatro Árvores de Decisão que permitem a selecção de métodos e programas para a resolução eficaz de problemas de transporte de poluentes em águas subterrâneas.

Os problemas reais de poluição de águas subterrâneas foram considerados originados por uma das quatro seguintes áreas da engenharia:

- A. Indústria e Minas
- B. Aglomerados Populacionais
- C. Agricultura
- D. Acidentes Ambientais

As origens da poluição foram divididas de acordo com as fontes de poluição mais usuais.

Os poluentes foram classificados em conservativos e não-conservativos (biodegradáveis, radioactivos, etc.).

Os condicionalismos físicos (hidrogeológicos) foram caracterizados pelo número de Peclet que relaciona a velocidade do escoamento subterrâneo, com a dispersão do aquífero. Consideraram-se ainda as situações de forte componente radial.

Os condicionalismos ou restrições de projecto foram reunidos em quatro grandes grupos : precisão dos resultados, custo do projecto, prazo de execução do projecto e estudos com carência de dados hidrogeológicos, nomeadamente da dispersão longitudinal.

Situações com características mistas implicam escolhas mais restritivas, que deverão ser analisadas caso a caso. Se não for clara a escolha, dever-se-á proceder à análise do Quadros 4.63 e 4.64, apresentados em 4.4.3.

Com base nos critérios expostos e na análise custo-eficácia desenvolvida traçaram-se as Árvores de Decisão seguintes:

- . Árvore de Decisão
no. 1: Indústria e Minas (Fig. 4.67)
- . Árvore de Decisão
no. 2: Aglomerados Populacionais (Fig. 4.68)

- . Árvore de Decisão
no. 3: Agricultura (Fig. 4.69)
- . Árvore de Decisão
no. 4: Acidentes Ambientais (Fig. 4.70)

A análise das Árvores de Decisão permite a sistematização dos programas recomendados em treze grupos diferentes, cada um constituído pelos quatro condicionalismos de projecto considerados: precisão de resultados ("Precisão"), custo de projecto ("Custos"), prazo de execução do estudo ("Prazo") e carência de dados ("Dados").

Os quatro primeiros grupos aplicam-se às Árvores de Decisão 1, 2 e 4 (Indústria e Minas, Aglomerados Populacionais e Acidentes Ambientais).

Grupo A: Aplicável a poluentes conservativos e a situações com números de Peclet (admitidos para o traçado das malhas dos modelos) altos ($Pe > 50$) ou médios ($Pe = 10$), com injeções contínuas.

Condicionalismos de projecto e programas recomendados (omite-se para facilitar a leitura, a indicação da extensão, no nome do programa):

"Precisão" : DISP4(.FDR)

"Custos" : KONIK3/SA2D1

"Prazo" : SA2D1/KONIK3

"Dados" : MIXCEL

Grupo B: Poluente conservativo ou com decaimento. Número de Peclet baixo ($Pe < 1$). Injeção contínua.

"Precisão" : DISP4

"Custos" : DISP1/SA2D1

"Prazo" : SA2D1/DISP1

"Dados" : MIXCEL

Grupo C: Escoamento fortemente radial. Injeção contínua.

Para todos os casos : RANDOM

Grupo D: Poluente com decaimento. Número de Peclet médio. Injeção contínua.

"Precisão" : DISP4

"Custos" : DISP1/SA2D1

"Prazo" : SA2D1/RANDOM

"Dados" : MIXCEL

O grupo E aplica-se apenas à Árvore de Decisão no. 2 (Aglomerados Populacionais).

Grupo E: Poluente biodegradável. Habitacões dispersas. Injeção contínua.

"Custos" : SA2D1

"Dados" : MIXCEL

Os grupos F, G, H, I aplicam-se apenas à Árvore de Decisão no. 3 (Agricultura).

Grupo F: Poluente conservativo. Número de Peclet alto ou médio.
Aplicação regional contínua do poluente.

"Precisão" : DISP4

"Custos" : KONIK3

"Prazo" : KONIK3

"Dados" : MIXCEL

Grupo G: Poluente conservativo. Número de Peclet baixo.
Aplicação regional do poluente contínua.

"Precisão" : DISP4

"Custos" : DISP1

"Prazo" : KONIK3

"Dados" : MIXCEL

Grupo H: Poluente com decaimento. Número de Peclet alto.
Aplicação regional do poluente contínua.

"Precisão" : DISP4

"Custos" : DISP1

"Prazo" : RANDOM

"Dados" : MIXCEL

Grupo I: Poluente com decaimento. Número de Peclet médio ou baixo. Aplicação regional do poluente contínua.

"Precisão" : DISP4

"Custos" : DISP1

"Prazo" : DISP1/RANDOM

"Dados" : MIXCEL

Os grupos J, K, L e M aplicam-se apenas à Árvore de Decisão no. 4 (Acidentes Ambientais).

Grupo J: Poluentes conservativos. Número de Peclet alto ou médio. Injeção instantânea do poluente.

"Precisão" : DISP4

"Custos" : KONIK3/SA201

"Prazo" : KONIK3/SA201

"Dados" : MIXCEL

Grupo K: Poluente conservativo. Número de Peclet baixo. Injeção instantânea do poluente.

"Precisão" : DISP4

"Custos" : DISP1

"Prazo" : RANDOM/SA201

"Dados" : MIXCEL

Grupo L: Poluente com decaimento. Número de Peclet alto.
Injecção instantânea.

"Precisão" : DISP4

"Custos" : RANDOM/DISP1

"Prazo" : SA2D1/RANDOM

"Dados" : MIXCEL

Grupo M: Poluente com decaimento. Número de Peclet médio ou
baixo. Injecção instantânea.

"Precisão" : DISP4

"Custos" : DISP1

"Prazo" : SA2D1

"Dados" : MIXCEL

O programa recomendado para a obtenção de resultados com elevada precisão foi considerado em todos os casos o programa DISP4.FOR. Deve notar-se que o número de Peclet relativo à malha do programa DISP4.FOR (e em geral à de um programa de elementos finitos), cuja distância deve corresponder ao espaçamento máximo da malha, deve ter um valor baixo, igual a 4, segundo HUYAKORN e PINDER 1983, (no máximo 10). No caso de tal não ser possível por sobrecarga excessiva da memória do computador ou do tempo de cálculo (custos do projecto) pode considerar-se, eventualmente, a substituição do programa DISP4.FOR pelo programa KONIK3.FOR, nas Árvores de Decisão apresentadas. (Encontra-se em fase de

conclusão uma actualização do programa KONIK3.FOR para o tratamento matemático de poluentes não conservativos. Esta actualização reforçará, naturalmente, as conclusões muito favoráveis anteriormente apresentadas para o programa KONIK3.FOR).

Para todas as situações com carências de dados, nomeadamente no que se refere à dispersão longitudinal do aquífero, recomendou-se o modelo MIXCEL.FOR.

A apresentação anterior dos treze grupos de programas destina-se à esquematização das situações físicas e de projecto incluídas nas Árvores de Decisão. Deste modo facultar-se ao leitor a possibilidade de extrapolar o raciocínio desenvolvido a qualquer outra situação originada por uma fonte de poluição não explicitada em qualquer das Árvores que se apresentaram (o raciocínio que serviu de base à selecção de cada grupo baseia-se nas conclusões da análise custo-eficácia desenvolvida no ponto anterior).

A inclusão nas Árvores de Decisão dos "Métodos matemáticos adequados à resolução dos problemas" permite extrapolar, com as devidas reservas, as conclusões obtidas, com os programas testados, para programas equivalentes baseados nos mesmos métodos matemáticos.

5. ENSAIOS DE TRACADORES E SUA INTERPRETAÇÃO PARA A DETERMINAÇÃO DA DISPERSÃO LONGITUDINAL DE AQUÍFEROS

5.1 - Introdução

Neste capítulo apresenta-se um tema fundamental para o desenvolvimento de estudos de poluição de águas subterrâneas: a realização de ensaios de tracadores e a sua interpretação para a determinação da dispersão longitudinal de aquíferos.

O primeiro tema fundamental para o desenvolvimento dos estudos de poluição de águas subterrâneas, a modelação matemática da equação do transporte de massa, foi já analisado no Capítulo 4.

A quantificação da dispersão longitudinal é necessária para a resolução da equação do transporte de massa. Todos os métodos apresentados no Capítulo 4, à excepção do método das células de mistura (programa MIXCEL.FOR), requerem uma quantificação rigorosa da dispersão longitudinal.

A importância do valor da dispersão longitudinal na configuração das curvas de penetração de poluentes em meios porosos foi já analisada no Capítulo 4.

A análise bibliográfica efectuada, permitiu observar a grande disparidade dos valores apresentados na literatura da especialidade para a dispersão dos meios porosos. Agravando esta situação verifica-se que as escalas dos ensaios afectam significativamente os valores da dispersão longitudinal. Os ensaios laboratoriais descritos na literatura quantificam as dispersões longitudinais em duas ou três ordens de grandeza

inferiores às observadas em aquíferos reais.

Tornava-se assim fundamental analisar e desenvolver metodologias experimentais que permitissem a realização de ensaios de traçadores em águas subterrâneas, evitando o exclusivo recurso à bibliografia internacional para a quantificação (aproximada) dos valores da dispersão longitudinal a utilizar em estudos de aquíferos nacionais.

O desenvolvimento do tema inicia-se, por uma descrição dos métodos experimentais mais utilizados para a realização de ensaios de traçadores. Descreve-se o efeito da escala dos ensaios nos resultados que se obtêm para a dispersão do meio poroso, os tipos de traçadores mais utilizados em águas subterrâneas, várias situações hidrogeológicas susceptíveis de análise, a aparelhagem utilizada e a que se construiu para este estudo.

Parte deste capítulo será dedicada à apresentação dos ensaios experimentais realizados no aquífero de Rio Maior. Utilizaram-se para o efeito diversas soluções de cloreto de sódio e uma solução de sulfurodamina B. Para a realização dos ensaios utilizaram-se, em conjunto e em separado, dois piezómetros da Electricidade de Portugal, E.P., e uma captação da Câmara Municipal de Rio Maior (CMRM).

A determinação da dispersão longitudinal do aquífero foi efectuada a partir das curvas experimentais de concentração no tempo. Descrevem-se os vários métodos directos e inversos utilizados.

Apresentam-se por último os métodos que permitem a extrapolação do valor da dispersão longitudinal, calculada à escala local dos ensaios (25 m), para um valor à escala do

aquífero (4 km).

Os valores calculados foram comparados com os que se apresentam na literatura da especialidade para ensaios e estudos semelhantes aos que se desenvolveram.

No Capítulo 6 apresenta-se um estudo de impacto ambiental desenvolvido para o aquífero de Rio Maior, que se baseia nos valores da dispersão longitudinal calculados neste capítulo.

5.2 - Descrição de métodos experimentais adequados à realização de ensaios de traçadores

5.2.1 - Tipo e escala dos ensaios

A apresentação que se desenvolve sobre o tipo e a escala dos ensaios de traçadores em águas subterrâneas, bem como a dos pontos 5.2.2 e 5.2.3, sobre várias situações hidrogeológicas apresentadas na literatura da especialidade e sobre os diferentes tipos de traçadores utilizados em águas subterrâneas, não deve ser considerada exaustiva. A finalidade dessas apresentações é apenas a de situar os estudos que se desenvolveram num contexto mais vasto que inclua os estudos hidrogeológicos realizados noutros países. Indicam-se as referências bibliográficas mais relevantes, que permitem um aprofundamento dos conhecimentos em áreas não abrangidas por este trabalho.

FRIED 1975 classifica os ensaios de campo em quatro grupos, que correspondem às escalas usuais dos problemas de poluição. Essas escalas referem-se à distância média de percurso do poluente desde a fonte de poluição:

- . Escala local: entre 2 e 4 metros.
- . Escala global I: entre 4 e 20 metros.
- . Escala global II: entre 20 e 100 metros.
- . Escala regional: mais de 100 metros (usualmente vários quilômetros)

Nos testes que se apresentam em 5.4, as escalas utilizadas correspondem à local, à global I e à global II. Em 5.6 extrapolam-se os valores da dispersão longitudinal calculados, para uma escala regional adequada aos estudos que se desenvolvem no Capítulo 6.

GOBLET 1984 analisa, introdutoriamente, o efeito de escala nos resultados dos ensaios de traçadores. Ao contrário do que se supôs durante muitos anos a dispersividade de um aquífero (quociente entre a dispersão e a velocidade do escoamento) não é uma variável constante, intrínseca do meio poroso. Ensaio experimentais recentes mostraram claramente que a dispersividade é função da distância de percurso dos poluentes. Uma experiência de 1 metro, por exemplo, permite a obtenção de valores da dispersividade da ordem de 1 centímetro. Um ensaio de 10 a 100 metros origina valores da ordem de 1 metro. Poluições regionais da ordem de quilômetros podem evidenciar dispersividades da ordem das centenas de metros. Esta disparidade de valores está relacionada com a escala das heterogeneidades relevantes para o transporte dos traçadores e dos poluentes.

Estudos recentes, DIEULIN 1981, mostraram que, para um dado grau de heterogeneidade natural de um aquífero, a dispersividade cresce com a distância. Algumas análises teóricas mais recentes, GELHAR e AXNESS 1983, MOLZ et al. 1983, DAGAN 1984, GUVEN et al.

1984, sugerem que a dispersividade, após uma fase transitória caracterizada pelo seu aumento, tende para um valor assintótico, depois de uma distância de percurso dos poluentes equivalente a algumas vezes a dimensão das heterogeneidades do meio poroso. No ponto 5.6 aprofunda-se este tema, relacionando o valor assintótico da dispersividade (macrodispersividade) com a variabilidade da condutividade hidráulica do aquífero.

Para a realização dos ensaios de traçadores desenvolveram-se em diversos países métodos experimentais sofisticados, tanto de laboratório como de campo. Sugere-se a leitura de HARLEMAN e RUMER 1963, FRIED 1975, UNESCO 1980, LALLEMAND-BARRES et al. 1981, GSF 1982 e IAEA 1984.

FRIED 1975 refere técnicas e métodos experimentais em função das escalas de ensaio anteriormente referidas:

- . Escala local : Método do furo (de captação) único com injeção instantânea.
- . Escala global I : Método dos furos (de captação e de observação) múltiplos com injeção forçada ou com injeção à velocidade do escoamento subterrâneo.
- . Escala global II: Método do furo (de captação) simples com análise da variação da resistividade do aquífero, por técnicas geofísicas.
- . Escala regional : Utilização de traçadores ambientais ou poluentes já existentes no aquífero.

No método do furo de captação único com injeção instantânea, usado para a escala local (até 4 m), enche-se inicialmente a captação, que deve ser totalmente penetrante no aquífero, com um líquido traçador, bombeando a água limpa no cimo da captação e injectando o traçador no fundo. Seguidamente o líquido é forçado a penetrar no aquífero por água limpa que se injecta na captação. Por último bombeia-se a água do aquífero, e regista-se a variação da concentração, a uma dada profundidade, ao longo do tempo. A operação é repetida para os níveis e para os estratos do aquífero que se pretendem estudar.

A captação, segundo FRIED 1975, deve obedecer ao seguinte conjunto de normas:

- . deve ser totalmente penetrante no aquífero,
- . deve ser crepinada (> 20%) em toda a profundidade,
- . deve ser revestido por uma rede de nylon com uma malha de 0,5 a 1 mm,
- . não deve existir qualquer revestimento de gravilha que deforme a informação do ensaio.

O cumprimento rigoroso dessas regras pode tornar inviável, em termos práticos, o estudo de aquíferos, com piezómetros e captações já existentes. Torna-se importante nesses casos analisar pormenorizadamente os volumes do traçador injectado e os volumes de água do aquífero que se contamina e posteriormente se extrai. Maiores volumes tendem a atenuar os efeitos das normas não cumpridas.

Em 5.4.1.1 apresenta-se uma variante desta técnica,

desenvolvida neste estudo.

No método dos furos de captação e de observação múltiplos, escala global I (4 a 20 m), a injeção pode efectuar-se por dois métodos distintos. Injeção contínua ou injeção durante um tempo limitado (step injection). No primeiro caso pode observar-se a variação da concentração em todos os poços de observação situados em torno da captação. No segundo caso a velocidade de injeção deixa de ser preponderante em relação à velocidade de escoamento natural do aquífero e a mancha de poluição é observável apenas nos furos situados a jusante da captação. Em 5.4.1.2 e 5.4.1.3 apresentam-se duas variantes desta técnica.

LALLEMAND-BARRES et al. 1981 apresenta uma técnica de captações múltiplas paralelas onde se estabelece um escoamento com um gradiente adequado ao ensaio, por bombagem da água do aquífero, a jusante da zona de ensaio, e injeção da água bombeada a montante. As linhas de corrente do escoamento subterrâneo são assim paralelas.

No método da captação simples para a escala global II (20 a 100 m) FRIED 1975 sugere a utilização de soluções de cloreto de sódio (NaCl) como elemento traçador. O NaCl tem boas propriedades eléctricas e é barato. A solução é injectada com um caudal constante na captação. A jusante, a uma distância suficientemente grande para permitir a exclusão do efeito radial provocado no escoamento pela injeção do traçador, procede-se à medição da resistividade eléctrica do sub-solo, por técnicas geofísicas, numa malha regular adequada à escala do ensaio. Para verificação dos resultados da resistividade, deve proceder-se à realização periódica de sondagens eléctricas, em piezómetros

localizados na zona de ensaio, e à medição do potencial eléctrico da mesma zona.

O estado inicial da área de ensaio deve ser previamente conhecido devendo-se para isso realizar as medições anteriormente indicadas em toda a área de ensaio.

Para a escala regional (mais de 100 m), FRIED 1975 recomenda a utilização de radioisótopos naturais ou semi-artificiais como o trítio, originados pelos ensaios atómicos das décadas de 40 e 50, ou ainda artificiais, provenientes de aterros sanitários e depósitos de efluentes industriais localizados no aquífero. Numerosos trabalhos desenvolvem estudos sobre este tema para a escala regional. As publicações seguintes aprofundam o estudo de técnicas de observação e instrumentação de águas subterrâneas, indispensáveis à realização de estudos regionais: EVERETT 1980, UNESCO 1980 e UNESCO 1983.

5.2.2 - Situações hidrogeológicas

Os estudos que se desenvolvem neste capítulo têm por objectivo a quantificação das variáveis necessárias à resolução de um estudo de poluição no aquífero das areias brancas de Rio Maior (Capítulo 6). As condicionantes hidrogeológicas locais permitem considerar, em termos práticos, o meio poroso das areias brancas formado por um único estrato sedimentológico.

Outras situações hidrogeológicas reais requerem a consideração de vários estratos sedimentológicos, com características diferentes quanto à condutividade hidráulica, velocidade do escoamento, dispersividade, etc. Nessas situações a análise torna-se mais complexa. Os testes referidos

anteriormente devem então ser realizados em cada estrato com interesse para o problema. A validade da integração vertical admitida nos modelos bidimensionais do Capítulo 4 deve ser, nesses casos, analisada em pormenor. Situações de franca estratificação requerem o recurso a modelos tridimensionais. Existem no LNEC modelos tridimensionais para o cálculo do escoamento subterrâneo e da qualidade da água, recolhidos durante este estudo.

As metodologias para a análise de estratos diferenciados vêm descritas, por exemplo, em FRIED 1975 e em UNESCO 1980.

O tratamento das heterogeneidades, horizontais, dum aquífero pode ser facilmente efectuado pelos modelos matemáticos do Capítulo 4, após uma análise pormenorizada das características geológicas do aquífero e após a realização de ensaios de traçadores sempre que as características regionais variem de forma importante.

Outras situações hidrogeológicas importantes, apresentadas na literatura da especialidade, referem-se aos problemas de poluição de águas subterrâneas em meios fracturados, fissurados e cárnicos. A análise dessas situações transcende o objectivo deste trabalho. Referem-se os estudos de NERETNIEKS 1984, MALOSZEWSKI e ZUBER 1984 e BEHRENS e SEILER 1982a, respectivamente sobre cada uma das situações referidas. UNESCO 1980 apresenta uma série de artigos sobre estudos que incluem esse tipo de situações. Um dos métodos a que se recorre, nas publicações referidas para o estudo dessas situações hidrogeológicas corresponde ao cálculo de coeficientes de dispersão equivalentes a meios porosos fictícios.

Outra situação hidrogeológica diferente da desenvolvida neste trabalho e que pode ser fundamental para o tratamento de alguns problemas reais corresponde a escoamentos de poluentes não miscíveis. As situações analisadas neste trabalho pressupõem que as águas poluídas e as do aquífero tenham a mesma densidade e viscosidade e que os poluentes sejam totalmente solúveis. Esta é a situação típica de um grande número de poluentes conservativos ou com decaimento. Alguns fenómenos hidrogeológicos importantes não podem contudo ser incluídos nos estudos e soluções deste trabalho. São eles, os fenómenos de poluição em meios não-saturados, os problemas de intrusão marinha e a contaminação de águas subterrâneas por petróleo. BEAR 1972, SÁ DA COSTA e WILSON 1979 e HUYAKORN e PINDER 1983 referem-se, respectivamente, a cada um desses fenómenos.

5.2.3 - Tipos de traçadores

Os traçadores adequados aos estudos de recursos hídricos dividem-se em três grandes grupos: os radioactivos, os fluorescentes e os traçadores químicos com boas propriedades eléctricas (condutimétricos).

O primeiro grupo, traçadores radioactivos, não será ensaiado neste trabalho. Para estudos regionais utilizam-se, para datação de águas subterrâneas, traçadores radioactivos naturais como o ^3H , o ^{14}C , o ^{39}Ar e o ^{85}Kr . Estes isótopos e as técnicas para a sua medição são estudados em GSF 1982, em particular em EICHINGER et al. 1982.

o segundo grupo de traçadores, os fluorescentes, são estudados, por exemplo, em SMART e LAIDLAW 1977, em LALLEMAND-BARRES 1981 e em BEHRENS 1982. Nesses estudos são comparados uma dezena de traçadores diferentes: eosina, uranina (ou fluoresceína), amidorodamina G, fotina CU, lissamina FF, piramina, rodamina B, rodamina WT, sulforodamina B, amino-ácido G e iodeto de sódio. Embora este tipo de traçadores seja muito utilizado em estudos de recursos hídricos, hidráulica fluvial, sanitária e de estuários, não o tem sido em estudos de transporte de poluentes em meios porosos. O principal problema relaciona-se com a adsorção do traçador pelo meio poroso. Essa adsorção tem a característica de uma permuta iônica reversível, principalmente em relação aos cátions, (BEHRENS 1982).

O anião uranina é o que apresenta melhor comportamento quanto à adsorção. O anião eosina, embora apresente um comportamento pior que o da uranina, é também pouco adsorvido. No extremo da escala, situa-se a rodamina B, que é muitíssimo adsorvida. A amidorodamina G e a sulforodamina B situam-se a meio caminho das duas situações anteriores. Segundo SMART e LAIDLAW 1977 a sulforodamina B apresenta uma adsorção duas vezes superior à da rodamina WT. Por ordem crescente de adsorção, os traçadores, segundo os estudos desses autores para a caulinite, são os seguintes: piramina, amino-ácido G, fotina CU, fluoresceína, lissamina FF e rodamina B. A percentagem da fluorescência inicial, observada nesses estudos foi para os três últimos traçadores da lista 70, 50 e 1%. LALLEMAND-BARRES et al. 1981 indicam que nos estudos que desenvolveram a rodamina WT e a uranina apresentam comportamentos de adsorção semelhantes.

Quanto ao problema da toxicidade a rodamina WT, a fluoresceína e a fotina CU apresentam níveis de toxicidade baixos. A rodamina B

a a sulforodamina B apresentam níveis ligeiramente superiores. Os Serviços Geológicos dos Estados Unidos preconizam concentrações máximas destes traçadores de 10 microgramas por litro.

O custo destes traçadores é muito elevado. (A sulforodamina B custava no início de 1985 cerca de 7000 Esc. por kg).

Os problemas de adsorção destes traçadores e o seu custo não os tornam adequados aos estudos de águas subterrâneas em meios porosos. No entanto, e para o desenvolvimento de metodologias experimentais, realizou-se um ensaio de injeção de sulforodamina B no aquífero de Rio Maior. Os resultados serão apresentados em 5.4.2. A escolha deste traçador deveu-se às suas características médias de adsorção e à experiência do LNEC na utilização deste tipo de traçador.

Quanto ao terceiro grupo de traçadores químicos KLOTZ 1982a estuda em pormenor quanto à adsorção, os seguintes:



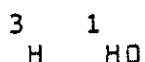
LALLEMAND-BARRE 1981 estuda o iodeto de sódio e FRIED 1975 refere-se ao cloreto de sódio e ao brometo de sódio.

KLOTZ 1982a caracteriza claramente os traçadores hidrogeológicos que se devem utilizar neste tipo de estudo:

- Devem ter um comportamento idêntico ao da água subterrânea.
- Não se devem deixar fixar no meio poroso através de adsorções reversíveis ou irreversíveis e/ou através de processos físicos, químicos ou biológicos.

- Não devem alterar as características físicas da água subterrânea.
- Devem ter uma vida suficientemente longa.
- Devem ser facilmente detectáveis.

Os traçadores que se comportam como a água designaram-se traçadores ideais. Como exemplo cita-se o trício, como



Dos estudos de KLOTZ 1982a, para areias quartezíferas, concluiu-se, para a determinação de parâmetros de aquíferos, que os melhores traçadores são o 51Cr , 82Br^- , 131I^- , Na^+ , Cl^- e o NO_3^- , além da eosina e da uranina já referidos anteriormente.

O Na^+ e o Cl^- apresentam características excelentes sendo o seu coeficiente de retardamento igual ao de um traçador ideal (o coeficiente de retardamento é o quociente entre a velocidade real do escoamento e a velocidade do traçador), sendo a adsorção nula.

Devido (1) às excelentes propriedades eléctricas do NaCl , que facilitam a detecção e a sua quantificação por variação da resistividade eléctrica da água, (2) ao seu baixo custo, (3) à sua não toxicidade e (4) ao seu elevado grau de solubilidade (mais de 300 gramas por litro às temperaturas usuais da água subterrânea), as soluções de cloreto de sódio constituem traçadores ideais para os ensaios de águas subterrâneas.

O NaCl foi o principal traçador utilizado nos ensaios efectuados no aquífero de Rio Maior.

No caso de Rio Maior existe ainda uma vantagem considerável que favorece a selecção do cloreto de sódio como traçador. Trata-se da existência, a poucos quilómetros do local de ensaio, das Marinhas de Rio Maior. O escoamento subterrâneo local

lixívia os depósitos de sal gema aí existentes enriquecendo-se em cloreto de sódio. Essas águas são posteriormente bombeadas do sub-solo com concentrações da ordem dos 150 a 200 gramas por litro e armazenadas em depósitos superficiais antes de serem conduzidas para as salinas. Essas soluções salgadas foram postas à disposição do LNEC, para os ensaios de tracadores realizados.

5.3 - Equipamento utilizado nos ensaios

O equipamento, fixo, utilizado para a realização dos ensaios de tracadores foi constituído pela estação de bombagem de águas subterrâneas da Chainça, instalada sobre um furo de 10" de diâmetro, designado em RODRIGUES e OLIVEIRA 1980 por B5 (actualmente propriedade da Câmara Municipal de Rio Maior, CMRM) e por dois piezómetros de 1 1/2" de diâmetro cada, denominados PC7/2 e PC8 (propriedade da EDP, Electricidade de Portugal, E.P.).

Os piezómetros localizam-se radialmente em relação à captação, distando o PC7/2 15 m e o PC8 40 m. A captação e os piezómetros foram executados em 1979 (A.CAVACO 1979) para estudos do LNEC, solicitados pela EDP.

O furo da captação B5, totalmente penetrante no aquífero, Fig. 5.1 (retirada de RODRIGUES e OLIVEIRA 1980), tem uma profundidade de 77 m, tendo o revestimento sido crepinado entre as profundidades 23 m e 70 m. A 30 m de profundidade está colocada uma bomba GRUNDFUS SP70-10, de 40 Cv de potência, que extrai um caudal de 30 m³/h, a uma pressão média de 9 kg/cm². A tubagem da captação ramifica-se à saída da estação de bombagem à cota de 58 m. O troço maior da conduta, conduz a água bombeada

até ao reservatório do Via-Vai situado (em linha recta) a cerca de 2,5 km da captação. É constituído por dois depósitos de 1000 m³ cada, situados à cota de 146 m. A outra ramificação da conduta conduz a água captada directamente até à rede de distribuição da cidade de Rio Maior.

Os dois piezómetros totalmente penetrantes no aquífero foram construídos em PVC e são protegidos à superfície por um tubo metálico de 20,5 cm de diâmetro, provido de uma tampa com fechadura. O PC7/2 tem uma profundidade de 70,8 m. A zona de ralos tem um comprimento de 39 m e começa a 30 m de profundidade. O PC8 tem uma profundidade de 78,6 m. A zona de ralos tem 53 m de comprimento e começa a 25 m de profundidade.

Os piezómetros possuem um pequeno filtro envolvente de areia grosseira de 2 a 3 mm de diâmetro.

Na zona do aquífero, afectado pelo cone de depressão da captação, encontram-se localizados mais dois piezómetros. O primeiro, denomina-se PC9 e situa-se no alinhamento do PC7/2 e do PC8, a 80 m da captação. O segundo denomina-se PC10 e situa-se numa direcção aproximadamente perpendicular à do alinhamento dos restantes piezómetros, a uma distância de 33 m da captação.

O equipamento, móvel, necessário à realização dos ensaios foi quase todo trazido do LNEC. É o seguinte:

a) Localizado na estação de bombagem:

- a1 - 1 registador contínuo de dois canais, com 5 rolos de papel de 20 m.
- a2 - 1 amplificador de sinal de dois canais.
- a3 - 2 caixas conversoras de sinal eléctrico.
- a4 - 4 cabos eléctricos, com as respectivas fichas (DIN) de

ligação.

- a5 - 1 depósito de 15 l.
- a6 - 1 sonda condutimétrica com cabo eléctrico de 10 m (Sonda 1).
- a7 - 4 tubagens de 1/4" e 1" e 1 união metálica de 1".
- a8 - 1 bomba doseadora SODI PD150-b de 10 l/h.
- a9 - 72 garrafas, escuras, de 0,2 l cada.
- a10 - 2 bidões de 200 l cada.
- a11 - 3 bidões de 150 l cada (da CMRM).

b) Equipamento localizado no PC7/2 e/ou no PC8.

- b1 - 1 depósito de fibrocimento de 1000 l.
- b2 - 1 copo de perspex de 55 cm de altura e 11 cm de diâmetro, com união metálica de 1 1/2", para ligação ao piezómetro.
- b3 - 1 sonda condutimétrica com cabo de 50 m (Sonda 2).
- b4 - 1 tubo de plástico de 1/4" com 50 m.
- b5 - 1 cavalete de 50 cm de altura (da CMRM) para suporte do depósito de fibrocimento.
- b6 - 1 mangueira de 1" com 45 m de comprimento.
- b7 - 1 mangueira de 2" com 2 m de comprimento.
- b8 - 3 depósitos de 15 l.
- b9 - 4 garrafas de 1,5 l e 3 garrações de 5 l, para recolha de amostras de água.

c) Equipamento localizado do LNEC:

- c1 - 1 fluorímetro TURNER Designs, modelo 10-005 R.
- c2 - equipamento diverso necessário para a calibração das sondas condutimétricas e do fluorímetro.

O equipamento a2, a3, a6 e b3 foi projectado e construído, para este estudo, no Centro de Projecto e Construção de Equipamento, do LNEC (CPCE). A gama de valores para os quais a aparelhagem foi projectada baseou-se nos valores esperados para as concentrações, condutividades eléctricas e sinais eléctricos dos ensaios com soluções de cloreto de sódio, a realizar no aquífero.

A calibração das sondas condutimétricas foi efectuada de acordo com a experiência do CPCE. As soluções utilizadas de cloreto de sódio de 70 a 400 mg/l, para calibração das sondas, foram preparadas no Núcleo de Química do LNEC.

As sondas foram calibradas de modo a reproduzir as condições de ensaio observadas nos piezómetros (Sonda 2) e no depósito de 15 l (Sonda 1).

A calibração obtida, utilizando a aparelhagem indicada, é independente da temperatura de ensaio. Para confirmação foram efectuados ensaios de calibração com temperaturas que variaram entre os 15.C e os 30.C

Nas Figs. 5.2, 5.3 e 5.4 apresentam-se as rectas de calibração das Sondas 1 e 2. A Sonda 2 foi calibrada com e sem um tubo envolvente de PVC, que simula o efeito da tubagem dos piezómetros PC7/2 e PC8. Em termos práticos os resultados obtidos são equivalentes.

O equipamento b2 foi construído no Departamento de Hidráulica do LNEC.

5.4 - Descrição dos ensaios efectuados

5.4.1 - Ensaios com soluções de cloreto de sódio

5.4.1.1 - Introdução

Utilizando o equipamento descrito em 5.3 realizaram-se seis ensaios com soluções de cloreto de sódio. Os objectivos a atingir com os seis ensaios eram os seguintes:

- a) Obtenção de curvas de concentração de NaCl, em função do tempo de ensaio, para determinação da dispersividade longitudinal do aquífero das areias brancas de Rio Maior.
- b) Análise de sensibilidade das curvas de concentração obtidas para situações hidrogeológicas semelhantes, variando a concentração de NaCl da água injectada.
- c) Análise do efeito de escala nos resultados dos ensaios.
- d) Análise do efeito da variação da velocidade do escoamento nos resultados dos ensaios.
- e) Análise de mudanças hidrogeológicas naturais e artificiais nos resultados dos ensaios.
- f) Análise comparativa das curvas de concentração no tempo, obtidas pela injeção simultânea de dois traçadores diferentes, um conservativo e outro sujeito a adsorção reversível.

O primeiro objectivo destinava-se à obtenção dos dados necessários à realização dos estudos que se apresentam no Capítulo 6.

Os restantes objectivos destinavam-se à obtenção de conhecimentos experimentais que possibilitassem a realização de ensaios em aquíferos com situações diferentes das que se

verificam em Rio Maior.

Para esse fim desenvolveu-se também um método de ensaio, expedito, que utiliza apenas um piezómetro e que será apresentado em 5.4.1.3 e em 5.4.2.

As soluções de cloreto de sódio foram obtidas por dissolução de amostras de água salgada, captadas nas Marinhas de Rio Maior, com água subterrânea captada no local dos ensaios.

No Anexo 4 apresentam-se os resultados das análises químicas das águas utilizadas: uma captada no B5 e outra nas Marinhas de Rio Maior.

Recorrendo a CUSTODIO e LLAMAS 1976 e considerando a concentração média de Cl^- da água das Marinhas igual a 152,24 g/l, obtem-se para concentração equivalente de Na^+ (se todo o Cl^- da amostra estiver ligado ao Na^+) um teor de 98,96 g/l, sendo a concentração final de NaCl de 251,24 g/l.

A concentração de resíduo dissolvido fixo obtido para a amostra foi de 250,4 g/l. Para o resíduo dissolvido seco o valor obtido foi de 252,1 g/l. Qualquer destes valores é semelhante ao apresentado anteriormente.

O valor adoptado para a concentração de cloreto de sódio da água das Marinhas foi o calculado (pelo primeiro método): 251,24 g/l. Os outros compostos químicos existentes na água das Marinhas têm uma concentração insignificante em relação à de NaCl , pelo que na prática a suposição feita é adequada ao tipo de ensaios e ao valor dos erros admitidos na análise.

Para a água subterrânea, captada no B5, o teor de cloretos obtido foi de 62,7 mg/l. Seguindo o raciocínio apresentado para o primeiro cálculo, segundo CUSTODIO e LLAMAS 1976, obtém-se um teor de NaCl de 136,1 mg/l.

Os ensaios corresponderam em todos os casos à injeção de 1 m³ de solução traçadora. As concentrações da solução variaram no entanto em alguns ensaios.

Nos Ensaios 1 e 2 dissolveram-se 200 l de água das Marinhas em 800 l de água do 85. A concentração final da solução é a seguinte:

$$C_1 = C_2 = \frac{1}{1000 \text{ l}} (200 \text{ l} \times 251,24 \text{ g/l} + 800 \text{ l} \times 0,136 \text{ g/l}) = 50,36 \text{ g/l}$$

No Ensaio 4 dissolveu-se 90 l de água das Marinhas em 910 l de água do 85:

$$C_4 = \frac{1}{1000 \text{ l}} (90 \text{ l} \times 251,24 \text{ g/l} + 910 \text{ l} \times 0,136 \text{ g/l}) = 22,74 \text{ g/l}$$

No Ensaio 5 dissolveu-se 70 l de água das Marinhas em 930 l de água do 85:

$$C_5 = \frac{1}{1000 \text{ l}} (70 \text{ l} \times 251,24 \text{ g/l} + 930 \text{ l} \times 0,136 \text{ g/l}) = 17,71 \text{ g/l}$$

Finalmente nos Ensaios 3 e 6 dissolveu-se apenas 3 l de água das Marinhas em 997 l de água do 85:

$$C_3 = C_6 = \frac{1}{1000 \text{ l}} (3 \text{ l} \times 251,24 \text{ g/l} + 997 \text{ l} \times 0,136 \text{ g/l}) = 0,890 \text{ g/l}$$

A solução traçadora foi armazenada, no início de cada

ensaio, num depósito de 1000 l colocado 0,5 m acima no nível do solo. A solução foi em seguida injectada no piezómetro PC7/2 (ou no piezómetro PC8) por intermédio de um sifão, de acordo com as metodologias que se descrevem a seguir.

5.4.1.2 - Utilização de dois piezómetros

Nos Ensaios 1 e 5 utilizaram-se os piezómetros PC7/2 e PC8. O primeiro serviu para a injeção da solução traçadora e o segundo para a observação da concentração. Os dois piezómetros distam entre si 25 m. Segundo FRIED 1975 esse valor permite classificar os Ensaios 1 e 5 na escala global II (20 a 100 m), embora muito perto da escala global I (4 a 20 m).

A captação B5, em funcionamento, permite uma redução do tempo de ensaio, uma vez que o gradiente hidráulico do escoamento, no cone de depressão estabelecido pela captação, é superior ao do escoamento regional. Além disso impõe-se com o funcionamento da captação, a passagem da mesma linha de fluxo pelos dois piezómetros, uma vez que se localizam, em relação à captação, sobre o mesmo raio.

Antes da realização do ensaio efectuou-se uma experiência para determinar a taxa de adsorção de água pelos piezómetros. Para isso enroscou-se o copo de perspex, referido em 5.3, na boca de cada piezómetro e injectou-se com auxílio de uma mangueira um caudal de água, crescente, até se verificar uma estabilização do nível da água no copo. Seguidamente quantificou-se o caudal pelo método volumétrico. O caudal de adsorção foi de, aproximadamente, 0,83 l/s, ou seja 3 m³/hora. A injeção de 1 m³ de traçador demora assim cerca de 20 min em cada ensaio.

A realização do Ensaio 1 iniciou-se com a observação dos níveis piezométricos locais. Com a bomba parada os níveis piezométricos (profundidade da superfície líquida em relação à boca do piezômetro) eram os seguintes:

PC7/2 - 2,10 m

PC8 - 2,05 m

PC9 - 2,025 m

(As bocas dos piezômetros localizam-se aproximadamente à mesma cota topográfica).

Com a bomba em funcionamento e o cone de depressão estabilizado os níveis piezométricos observados no início do Ensaio 1, foram os seguintes:

PC7/2 - 4,48 m

PC8 - 3,71 m

PC9 - 3,10 m

O gradiente hidráulico médio é neste caso de:

$$i = \frac{4,50 \text{ m} - 3,70 \text{ m}}{25 \text{ m}} = 0,032$$

Considerando, segundo RODRIGUES 1981, uma porosidade eficaz (ϕ_e) de 11% e uma condutividade hidráulica (K) de 8 m/dia, a velocidade intersticial do escoamento deve ser de:

$$V = \frac{K i}{\phi_e} = \frac{8 \times 0,032}{0,11} = 2,33 \text{ m/dia}$$

Como a distância (D) entre os dois piezómetros é de 25 m o tempo de ensaio necessário para a passagem do pico de concentração deve ser de:

$$t = \frac{D}{V} = \frac{25 \text{ m}}{2,33 \text{ m/dia}} = 10,74 \text{ dias}$$

Admitindo para o cálculo anterior um valor da porosidade total igual a 30% (arredondou-se o valor apresentado em RODRIGUES 1981 de 31%), em vez do da porosidade eficaz, obtêm-se os seguintes valores:

para a velocidade média do escoamento 0,85 m/dia;

para a duração de ensaio (passagem do pico de concentração) 29.3 dias.

A velocidade real deve, no entanto, ser um pouco diferente das indicadas uma vez que o gradiente vai aumentando do PC8 para o PC7/2. De facto o escoamento no cone de depressão (de geratriz parabólica) não é uniforme mas acelerado.

O Ensaio 1 iniciou-se no dia 30 de Outubro de 1984 e prolongou-se até ao dia 12 de Dezembro seguinte.

Injectou-se, no piezómetro PC8, no dia 30.10.84, 1000 l de solução traçadora de cloreto de sódio com uma concentração de 50,4 g/l, durante 21,5 min.

A solução passou do depósito para o copo de perspex, enroscado ao piezómetro, por intermédio de um sifão calibrado para escoar um caudal semelhante ao correspondente à taxa de adsorção máxima do piezómetro, anteriormente referida (3 m³/hora).

No piezómetro PC7/2 foi instalado, à profundidade de 35

metros uma sonda condutimétrica (Sonda 2), ligada ao registador contínuo por cabos eléctricos que passam primeiro por uma caixa conversora de sinal e depois pelo amplificador de sinal. Todos os aparelhos foram calibrados no local de acordo com os critérios utilizados para a calibração efectuada no LNEC.

Fez-se uma análise da variação da concentração com a profundidade a que estava colocada a célula condutimétrica no piezómetro. Concluiu-se que a variação da concentração não varia significativamente para profundidades situadas entre os 35 e os 47,5 m.

A Sonda 2 foi colocada à profundidade de 35 m, que corresponde a cerca de metade da espessura saturada do aquífero.

Na Fig. 5.5 apresenta-se a curva da variação da concentração de NaCl com o tempo, no Ensaio 1.

Não foi possível obter resultados entre o 18. e o 21. dias de ensaio, por avaria no registador (quebra do papel de registo). A curva interpolada para esse intervalo de tempo é assim apenas estimada.

O Ensaio 1 foi considerado concluído, ao fim de 31 dias de ensaio, em 12 de Dezembro de 1984. Pode verificar-se pelas datas apresentadas para o início e para o fim do ensaio, 30.10.84 e 12.12.84, que o número de dias de ensaio é inferior ao tempo real decorrido. Tal facto deve-se ao sistema de abastecimento de água da cidade de Rio Maior. Como se referiu anteriormente a tubagem da captação bifurca-se à saída da estação de bombagem indo um troço abastecer directamente a cidade enquanto que o outro conduz a água captada ao reservatório do Via-Vai. O caudal captado no B5 é superior às necessidades de abastecimento da cidade. Deste modo o reservatório vai-se enchendo até atingir um nível limite para o qual se verifica o fecho da conduta, por uma válvula de

flutuador. Na estação de bombagem existe um pressostato regulado para desligar a bomba a partir de uma pressão pré-estabelecida de 9,5 kg/cm². Essa pressão é ultrapassada com o fecho da conduta no reservatório do Via-Vai. A bomba permanece então desligada, em média, durante 8 horas, iniciando automaticamente a bombagem em seguida. Durante esse tempo o abastecimento da cidade provoca o esvaziamento parcial dos depósitos do Via-Vai. Além disso sempre que se verifique uma interrupção de corrente eléctrica, o que foi frequente em Rio Maior durante o Outono e o Inverno de 1984/85, a bomba pára, só reiniciando o funcionamento, automaticamente, após as 8 horas de intervalo referidas, ou então por comando manual.

Para ultrapassar as interrupções de bombagem, que afectam os níveis piezométricos no PC7/2 e no PC8 impuseram-se "consumos" de água (fictícios) da cidade de Rio Maior, por descargas directas para o rio Maior, evitando o enchimento total dos depósitos do Via-Vai.

Para os ensaios de duração mais reduzida que a dos Ensaios 1 e 5, as observações do nível de água nos depósitos do Via-Vai e as descargas de água para o rio, por manobra de válvulas, tiveram êxito, não se registando interrupções de bombagem. Para os Ensaios 1 e 5 mais longos, não foi possível ultrapassar totalmente as situações de paragem da bomba, mesmo contando com a colaboração de trabalhadores da Câmara Municipal. Apenas se conseguiu que nos períodos mais importantes dos ensaios não se registassem as paragens. (O problema principal reside no risco de ruptura do abastecimento de água ao Hospital da Cidade, por esgotamento dos depósitos do Via-Vai, ou por falta de pressão na rede).

Para a análise dos registos teve assim de se entrar em linha

de conta com os tempos de paragens da bomba. A velocidade natural do escoamento subterrâneo do aquífero na área da captação (B5) é reduzida. A velocidade de Darcy, considerando uma condutividade hidráulica de 8 m/dia, é de 7 cm/dia. Considerando uma porosidade total de 30% a velocidade intersticial é 0,23 m/dia.

As linhas de corrente do escoamento natural fazem um ângulo de 33 graus com as linhas de corrente do escoamento natural. A mancha de poluição desloca-se assim, durante cada paragem da bomba, levemente para fora do eixo radial de análise, sendo posteriormente reaproximada durante o funcionamento seguinte da bomba.

Descontaram-se os tempos de paragem da bomba para o traçado da curva da Fig. 5.5.

A variação máxima de concentração de cloreto de sódio observada durante o ensaio foi de 19 mg/l. Como a concentração inicial do traçador era de 50,36 g/l verificou-se uma redução da concentração de 2650 vezes. Não se incluiu o efeito da variação da viscosidade da água de injeção, fortemente salgada (50,36 g/l), na variação da permeabilidade de Darcy do aquífero. A variação da viscosidade da água salgada de injeção (CUSTODIO e LLAMAS 1976), em relação à água doce é igual a um aumento da viscosidade da água doce por redução de apenas três graus centígrados na temperatura ambiente do ensaio (17,5 C). Considerou-se que o erro introduzido não afecta, em termos práticos, os resultados. O traçador não poderá, no entanto, no início do ensaio, ser considerado como um traçador ideal.

As condições gerais do Ensaio 1 foram repetidas em 12 de Dezembro de 1984. A repetição foi designada por Ensaio 5.

A concentração de NaCl da água injectada foi reduzida neste ensaio para 17,71 g/l ou seja 2,84 vezes menos do que a do Ensaio 1. Se as condições se mantivessem rigorosamente iguais seria de esperar uma variação de concentrações no Ensaio 5 de $19,0/2,84$ g/l ou seja 6,69 mg/l.

No dia 12.12.84 injectaram-se 70 l de água das Marinhas diluídos em 930 l de água captada pelo B5, no PC8. A concentração da injeção foi de 17,71 g/l. O Ensaio 5 prolongou-se até ao dia 16.2.85.

Na Fig. 5.6 apresenta-se a curva de concentração, registada ao longo do Ensaio 5.

Continuaram a registar-se as situações de paragem da bomba. Verificou-se uma subida dos níveis piezométricos naturais do aquífero devido à recarga originada pela precipitação registada desde o início do ano hidrológico de 1984/85.

Em 18.2.85, pouco depois do final do Ensaio 5, os níveis piezométricos, com a bomba em funcionamento eram os seguintes:

PC7/2 : 3,18 m

PC8 : 2,34 m

Com a bomba parada os níveis piezométricos naturais do aquífero, em 20.2.85, eram os seguintes:

PC7/2 : 0,84 m

PC8 : 0,83 m

Torna-se difícil comparar os resultados dos Ensaio 1 e 5,

uma vez que as condições hidrogeológicas naturais variaram.

Entre o 19. e o 28. dia do Ensaio 5 conseguiu evitar-se as paragens da bomba. Os resultados são assim "rigorosos" para este período de tempo. Para os restantes dias de ensaio descontou-se o tempo de paragem.

Analisando a Fig. 5.6 observou-se um pico, relativo, de concentração precisamente para a duração de ensaio 24,5 dias, tal como se observara no Ensaio 1. As oscilações "instantâneas" (Fig. 5.10) que se observaram no tracado obtido com o registador são máximos para o dia 24,5 o que de acordo com o observado nos registos contínuos dos restantes ensaios corresponde à passagem da frente de poluição (NaCl).

A diferença de concentração observada entre o 19. dia e o dia 24,5 corresponde a 7,58 mg/l, valor aproximado dos 6,68 mg/l esperados por relação directa com o Ensaio 1 (tendo em atenção a diferença de concentrações das soluções injectadas no PC8).

A partir do 26. dia do Ensaio 5 observa-se um aumento gradual de concentração, que culmina no 35. dia. Essa curva, Fig. 5.6 (curva hipotética), deve corresponder à passagem de uma mancha de poluição provocada por lixiviação dos solos, resultante da recarga pluvial do Outono de 84 e do Inverno de 85. A diferença de concentrações observada na curva entre os dias 28 e 35 e entre os dias 35 e 48, de cerca de 14 mg/l, ou ainda entre os dias 8 e 35 de 21,3 mg/l, (superior inclusivé à do Ensaio 1) é demasiado elevada para, face à experiência obtida com o Ensaio 1, poder ser atribuída à injeção do tracador. Não se observaram também nesses trocos do ensaio as oscilações instantâneas máximas do registo que correspondem a passagem do pico.

A redução da concentração de injeção do Ensaio 1 para o Ensaio 5 não parece ser pois aconselhável, uma vez que dificulta

a eliminação de efeitos secundários que nada têm a ver com os resultados dos ensaios.

A principal vantagem da técnica apresentada para os Ensaios 1 e 5 residiu na obtenção de uma curva de concentrações de NaCl (Ensaio 1) que se considera fundamental para a determinação da dispersividade longitudinal do aquífero.

As desvantagens desta técnica de ensaio são as seguintes:

- a) A duração de ensaio é relativamente longa (1,5 a 2 meses).
- b) As concentrações iniciais do traçador (NaCl) têm de ser muito elevadas ($C > 50$ g/l).
- c) As velocidades do escoamento não são uniformes mas crescentes, o que dificulta a análise dos resultados.

5.4.1.3 - Utilização de um piezómetro e da captação B5

A realização dos Ensaios 2 e 4 seguiu uma técnica de ensaio idêntica à dos Ensaios 1 e 5, descritos no ponto anterior. A diferença entre os dois grupos de ensaios reside apenas nos furos utilizados. Nos ensaios 1 e 5 o furo de injeção foi o piezómetro PC8 e o de observação o PC7/2. Nos Ensaios 2 e 4 o furo de injeção foi o piezómetro PC7/2 e o de observação a captação B5. A distância dos Ensaios 2 e 4 é a distância que separa o piezómetro PC7/2 da captação B5, igual a 15 m.

Neste grupo de ensaios, de duração mais reduzida que os anteriores, foi possível evitar as paragens da bomba.

O Ensaio 2 iniciou-se no dia 30.10.84 e prolongou-se até ao dia 6.11.85.

No dia 30.10.84 injectaram-se no PC7/2 1000 l de solução traçadora contendo um teor de cloreto de sódio de 50,36 g/l, provenientes da diluição de 200 l de água das Marinhas em 800 l de água do B5. A concentração da injeção é assim idêntica à do Ensaio 1. A duração da injeção foi de 26 min.

Os níveis freáticos observados no início do Ensaio 2 foram os seguintes (profundidade da água em relação às bocas do piezómetro e da captação, situadas, no mesmo plano horizontal):

PC7/2 : 4,48 m

B5 :10,15 m

No final do Ensaio 2 os níveis piezométricos observados foram os seguintes (dia 5.11.84):

PC7/2 : 4,65 m (5,27 m em 3.11.84)

B5 :10,41 m

Como se indicou a bombagem efectuou-se continuamente durante todo o Ensaio 2.

Admitindo que o regime observado durante o ensaio foi um regime permanente, isto é que o caudal captado não provoca o rebaixamento dos níveis piezométricos locais, já estabilizados, mas provém exclusivamente das reservas do aquífero fora do cone de depressão da captação, poder-se-á aplicar a equação de Thiem para o cálculo aproximado do tempo de ensaio. Dividindo a distância de ensaio, 15 m, em troços de 1,0 m, considerando que o

caudal da captação é de 80 m³/h, que a porosidade é de 30%, que a condutividade hidráulica é de 8 m/dia e que a espessura média saturada do aquífero é de 60 m, obtém-se, para a passagem do pico de concentração, um tempo da ordem dos 6,6 dias. Se se considerar que o valor da porosidade é de 11% (porosidade eficaz) obtém-se um tempo de ensaio de 2,4 dias. O tempo real de ensaio deve ter um valor intermédio, entre os dois valores apresentados.

Na Fig. 5.7 apresenta-se a curva da variação da concentração no tempo do Ensaio 2. Essa curva foi obtida a partir dos valores traçados, continuamente, no aparelho registador.

A sonda condutimétrica utilizada para este ensaio foi a Sonda 1. Essa sonda foi imersa num depósito de 15 litros, alimentado continuamente com água captada pela bomba. Simultaneamente descarregava-se um caudal equivalente, de modo a manter constante o nível de água no depósito. Do mesmo modo que para a Sonda 1, utilizada no Ensaio 1, os cabos eléctricos da Sonda 2 conduzem o sinal eléctrico primeiro a uma caixa conversora, em seguida ao amplificador de sinal e só depois ao aparelho registador. O canal de registo, diferente do canal do Ensaio 1, que decorria simultaneamente, foi calibrado para o Ensaio 2 de acordo com o procedimento seguido no LNEC para a obtenção das curvas de calibração da Sonda 2.

Repare-se que o caudal bombeado em B5 é muito superior ao que provém apenas da zona de injeção, PC7/2. Haverá assim uma diluição importante da solução traçadora, que atinge a captação atenuando fortemente o pico de concentração. Por outro lado e ao contrário dos Ensaio 1 e 5, a velocidade do Ensaio 2 é fortemente crescente havendo uma grande distorção da mancha poluente, solicitada de forma crescente à medida que se aproxima

da captação.

As linhas de fluxo são fortemente radiais, dificultando a análise da curva de concentrações, a efectuar em 5.5.

Por esses motivos não se atribuiu relevo especial a este tipo de testes. É no entanto interessante analisar os resultados, e compará-los com os do Ensaio 1 uma vez que em estudos futuros poderão surgir situações que apenas possam vir a ser quantificáveis com ensaios deste tipo.

Embora a distância de ensaio, 15 m, seja inferior à do Ensaio 1, 25 m, a atenuação do pico da curva de concentrações é 4,6 vezes maior do que a do Ensaio 1, sendo agora de 12260 vezes.

A diferença máxima de concentrações medida no Ensaio 2 foi de apenas 4,10 mg/l. Note-se que a solução injectada tinha uma concentração de 50360 mg/l. Um valor tão reduzido, de diferença de concentrações, não permite identificar com segurança a curva de concentrações tracada. Note-se, a propósito, que se verifica na parte final da curva do Ensaio 2, Fig. 5.7, uma "irregularidade", provavelmente devida a fenómenos independentes do próprio ensaio.

O pico de concentrações verificou-se aos 3,75 dias situando-se entre os dois valores calculados anteriormente, 2,4 dias (para a porosidade eficaz) e 6,6 dias (para a porosidade total).

Na Fig. 5.8 apresenta-se a curva decrescente de concentrações registada na Sonda 2, introduzida no piezómetro PC7/2 após a injeção da solução tracadora. Essa curva corresponde à passagem da mancha de poluição, inicialmente concêntrica com o piezómetro, que se localizava para montante do piezómetro (em relação à captação). O valor excessivamente

elevado da concentração da mancha de poluição, em relação à gama dos valores calibrados para a Sonda 2, impediu o registo da curva até cerca de 19 horas após o início do Ensaio 2.

A curva da Fig. 5.8 é particularmente útil para o cálculo da taxa de decaimento da mancha poluente, essencial para a utilização do programa SA1D1.FDR, no ponto 5.5.2.

As condições do Ensaio 2 foram repetidas em 12.12.84, no Ensaio 4. Alterou-se no entanto a concentração inicial do poluente (NaCl) injectado. Diluíram-se 90 l de água das Marinhas em 910 l de água do B5, obtendo-se uma concentração final de 22,71 g/l. A solução foi injectada no PC7/2 em 12.12.84, durante 21 min. O ensaio prolongou-se por cinco dias.

A relação voltagem/concentração do aparelho registador foi aumentada de modo a compensar a diminuição do teor em NaCl na solução injectada. As oscilações instantâneas do registo aumentaram conseqüentemente na mesma proporção.

Na Fig. 5.9 apresentam-se os resultados do Ensaio 4. Como se pode observar o baixo teor de cloretos da solução injectada em relação ao Ensaio 2, impede a detecção da passagem da mancha poluente, prejudicada por fenómenos secundários que nada têm a ver com o ensaio. A Fig. 5.9 não permite assim tirar qualquer conclusão em relação aos resultados do Ensaio 2. Note-se que a proporção das concentrações de injeção dos Ensaios 2 e 4 implicaria que a diferença de concentrações esperadas para este Ensaio fosse de apenas 1,85 mg/l. Esse valor, comparado com o da concentração da solução injectada de 22710 mg/l mostra a grande dificuldade de análise dos resultados de ensaios deste tipo.

Na Fig. 5.9 desenharam-se três curvas diferentes. A curva A corresponde à dos valores registados no ensaio. A curva B

representa, à escala do ensaio, os resultados do Ensaio 2. Finalmente a curva C corresponde à tentativa de impor uma curva semelhante à do Ensaio 2, com um tempo de passagem do pico igual, 3,75 dias. O tracado desta última curva só tem sentido depois da apresentação das reservas anteriormente feitas ao Ensaio 4.

A utilização, exclusiva, de condições hidrogeológicas semelhantes às do Ensaio 2 e 4, para a quantificação da dispersividade de aquíferos, deve ser feita com bastantes reservas. Em primeiro lugar porque o tracador deixa, pelo menos no início, de se comportar como um tracador ideal, devido ao enorme teor de cloretos ($C \gg 50$ g/l) necessário para permitir a obtenção de diferenças de concentrações apreciáveis na curva de registo. Em segundo lugar porque as características de captação implicam uma enorme diluição da mancha poluente (NaCl) em relação à água captada.

5.4.1.4 - Utilização de um único piezómetro

Para a realização dos Ensaios 3 e 6, com soluções de NaCl (e do Ensaio 7 com uma solução de sulforodamina B, descrita em 5.4.2) desenvolveu-se uma técnica de injeção e de observação que utiliza apenas um piezómetro. Nos ensaios realizados o piezómetro utilizado foi o PC7/2.

O método desenvolvido consiste no seguinte:

- a) Injeção de 1 m³ de água, limpa, do aquífero.
- b) Injeção de 1 m³ de água com tracador.
- c) Injeção de 1 m³ de água, limpa, do aquífero.

O passo a) só se torna necessário se o piezómetro não tiver sido previamente lavado, para evitar o aparecimento de efeitos secundários provocados por sujidade ou ainda se a água do aquífero se encontrar "suja" devido a ensaios anteriores. Esse era o caso do Ensaio 3.

O Ensaio 3 iniciou-se em 3.11.84 e prolongou-se por dois dias. Durante esse período evitaram-se paragens da bomba, mantendo-se constante a velocidade do escoamento durante todo o ensaio. Em 3.11.84 injectou-se no PC7/2 1000 l de água do B5 (com uma mangueira) durante 15 min. Imediatamente em seguida procedeu-se à injeção da solução tracadora armazenada no depósito, com o auxílio de um sifão. A concentração da solução 890 mg/l, resultou da diluição de 3 l de água das Marinhas em 997 l de água do B5. O tempo de injeção durou 20 min. Imediatamente em seguida procedeu-se à injeção de mais 1000 l de água do B5 (com a mangueira) durante 15 min. O caudal da mangueira fora aferido previamente, pelo método volumétrico.

A profundidade do nível piezométrico observada no PC7/2 foi de 5,27 m e na captação B5 foi de 10,17 m. Repare-se que no início da realização do Ensaio 3 estava a decorrer o Ensaio 2, há 4 dias, tendo sido já detectado o pico da curva de concentrações desse ensaio, na Sonda 1, localizada na captação B5. Qualquer efeito do Ensaio 3 situar-se-ia fora dos registos do Ensaio 2.

Nas Figs. 5.10 e 5.11 apresentam-se respectivamente o registo obtido directamente do aparelho registador e a curva média interpolada. A profundidade a que a Sonda 2 estava colocada no PC7/2 era de 35 m.

O pico de concentração registado foi de 371,31 mg/l, sendo a diferença de concentrações do Ensaio 3 de 188,79 mg/l. A

passagem do pico ocorreu ao fim de 8,35 horas de ensaio.

As Figs. 5.10 e 5.11 apresentam as configurações clássicas da passagem de uma mancha de poluição proveniente de uma injeção instantânea. Apenas se nota um efeito secundário de sobre-elevação da concentração por volta de um dia de ensaio, eventualmente devido à mistura da primeira água injectada com a segunda, contendo o traçador, ou devido à existência do filtro de areias grosseiras que envolve o piezómetro. A determinação do espaço percorrido pela coroa circular do poluente após a 2ª. injeção da água limpa não é exacta. De facto o cálculo dos raios da Fig. 5.12 deve basear-se nos valores da porosidade total das areias do aquífero ou da porosidade eficaz ou então num valor intermédio. Dificultando este cálculo deve ainda notar-se que, envolvendo o piezómetro, existe um filtro de areias grosseiras de 2 a 3 mm de diâmetro enquanto que as areias do aquífero têm diâmetros de 0,5 a 1 mm. A espessura do filtro deve ser pequena (3 cm). No entanto a sua existência dificulta naturalmente a análise dos resultados. Admitindo uma porosidade total para as areias brancas do aquífero de 31% (RODRIGUES 1981), uma zona de ralos no piezómetro de 18,0 m (A.CAVACO 1979) e um diâmetro de 1 1/2" efectuaram-se os seguintes cálculos:

a) Espessura da 1ª. coroa circular, contendo 1 m³ de água limpa (último volume de água injectado no ensaio):

$$R_2 = 22,64 \text{ cm}$$

$$R_1 = 1,91 \text{ cm (raio do piezómetro)}$$

$$R_2 - R_1 = 22,64 \text{ cm} - 1,91 \text{ cm} = 20,73 \text{ cm}$$

No início do registo o piezómetro encontrava-se cheio com

água desta última injeção.

b) Espessura da 2a. coroa circular, contendo 1 m³ de água com traçador:

$$R3 = 32,92 \text{ cm}$$

$$R2 = 22,64 \text{ cm}$$

$$R3-R2 = 10,28 \text{ cm}$$

$$\text{Raio médio da mancha de poluição} = 27,78 \text{ cm}$$

c) Espessura da 3a. coroa circular, contendo 1 m³ de água limpa (primeira água injectada):

$$R4 = 40,68 \text{ cm}$$

$$R3 = 32,92 \text{ cm}$$

$$R4-R3 = 7,75 \text{ cm}$$

O pico de concentração deverá percorrer assim uma distância, aproximada, de afastamento de 0,25 m, e de retorno ao piezómetro de outros 0,25 m ou seja um total de 0,50 m.

Deve no entanto notar-se que a velocidade de injeção é substancialmente superior à do escoamento do aquífero. Como a variável dispersão é igual ao produto da dispersividade do aquífero pela velocidade do escoamento e como esta é de facto, durante a injeção, muito superior à do escoamento do aquífero a curva de concentrações obtida deve corresponder ou a uma velocidade de ensaio maior ou a uma distância de ensaio (fictícia) maior considerando-se neste caso que a velocidade do escoamento durante a fase de injeção é igual à do aquífero.

Admitindo que a distância média a percorrer pelo pico de concentrações no meio poroso, durante a injeção, é igual ao raio médio do percurso menos o raio do piezômetro, obtém-se para velocidade do escoamento aparente de ensaio o seguinte valor:

$$V_p = \frac{\text{dist}}{\text{tempo}} = \frac{(0,25 - 0,019) \text{ m}}{\frac{8,50 \text{ h}}{24 \text{ h}}} = 0,65 \text{ m/dia}$$

O tempo conjunto de injeção do metro cúbico da solução traçadora e do (último) metro cúbico de água limpa foi de 35 min. Durante esse tempo o escoamento subterrâneo percorreu para jusante uma distância de:

$$d_1 = \frac{0,65 \times 35}{60 \times 24} = 2 \text{ cm}$$

A distância final percorrida pela mancha de poluição para montante do piezômetro deve ser então de:

$$d_2 = 25 \text{ cm} - d_1 = 23 \text{ cm}$$

A velocidade de injeção correspondente será assim de:

$$V_i = \frac{0,23 \text{ m}}{35 \text{ min}} = 60 \text{ min} \times 24 \text{ h} = 9,46 \text{ m/dia}$$

A razão entre a velocidade de injeção e a velocidade do pico é a seguinte:

$$r = \frac{V_i}{V_p} = \frac{9,46}{0,65} = 14,55$$

A velocidade média do ensaio é então a seguinte:

$$V_m = \frac{14,55 \times 9,46 + 1 \times 0,65}{14,55 + 1} = 8,89 \text{ m/dia}$$

O aumento da dispersão devido à velocidade de injeção deve assim ser de:

$$A = \frac{8,89}{0,65} = 13,68$$

A curva de concentração da Fig. 5.11 corresponde, segundo o raciocínio desenvolvido, à curva que se obteria com um escoamento que tivesse uma velocidade 13,68 vezes superior à do escoamento natural do aquífero, para uma distância de ensaio de 0,25 m ou então à curva que se obteria para a velocidade do escoamento natural mas com uma distância de ensaio (de) de:

$$d_e = 13,68 \times 0,25 \text{ m} = 3,42 \text{ m}$$

O valor da distância de ensaio estaria assim incluído na escala local ($2 \leq d \leq 4$ m) da classificação de FRIED 1975. No ponto 5.5.2 analisar-se-á a hipótese desenvolvida por comparação dos resultados obtidos com os de ensaios semelhantes.

Em 17.2.85 repetiu-se o Ensaio 3. O novo ensaio designou-se Ensaio 6. Realizou-se simultaneamente com o Ensaio 7, correspondente à injeção de uma solução de sulforodamina B (v. 5.4.2).

No Ensaio 6 não se realizou a primeira operação de injeção de 1 m³ de água limpa. Pretendia-se esclarecer a anomalia observada na curva do Ensaio 3 ao fim de 1 dia de ensaio.

A concentração da solução de injeção no Ensaio 6, igual à do Ensaio 3, foi de 890 mg/l. Resultou da diluição de 3 l de água das Marinhas em 997 l de água do B5.

A sonda foi colocada a 33,5 m, em vez dos 35 m do Ensaio 3. Pretendia-se analisar o efeito das zonas crepinada e localmente não crepinada do piezómetro na configuração das curvas da variação da concentração.

Os níveis piezométricos observados em 17.2.85 estavam mais elevados que os observados em 3.11.84. O nível do PC7/2 passou de 5,27 m, em 3.11.84, para 5,05 m, em 17.2.85.

Os níveis observados foram os seguintes:

	17.2.85	18.2.85	19.2.85
PC8 :	2,25 m	2,335 m	
PC7/2 :	3,05 m	3,18 m	3,21 m
B5 :	8,88 m	8,93 m	9,02 m

O gradiente hidráulico calculado entre o PC7/2 e o B5 é ligeiramente superior, em Fevereiro de 85 (0,389), ao de Novembro de 84 (0,379). O tempo de injeção foi substancialmente maior no Ensaio 6 do que no Ensaio 3. A solução de 1 m³ de traçador demorou 28 min a ser absorvida pelo piezómetro e a de 1 m³ de água limpa demorou 20 min. No total o tempo de injeção foi de 48 min, no Ensaio 6, e de 35 min no Ensaio 3.

Na Fig. 5.13 apresenta-se a curva de concentrações obtida

para o Ensaio 6. Repare-se que o tempo de passagem do pico (5 horas) é menor do que no Ensaio 3 (8,45 horas). Tal facto pode dever-se a três causas:

- a) Diferença de condições hidrogeológicas, implicando uma maior velocidade do escoamento.
- b) Profundidade diferente de colocação da sonda no piezómetro, situada agora na zona crepinada do piezómetro, não havendo necessidade de deslocação vertical da solução traçadora no piezómetro, até atingir a sonda.
- c) Diferença dos tempos de injeção.

A diferença de concentrações registada no Ensaio 6 é semelhante à do Ensaio 3: 186,1 mg/l e 188,8 mg/l respectivamente.

A configuração das duas curvas e os resultados calculados para a dispersão em 5.5.1 são semelhantes e da mesma ordem de grandeza, para os dois ensaios.

No Ensaio 6 verifica-se também uma descontinuidade na curva de concentrações. Neste caso ao fim de 15 horas de ensaio. Um segundo troço com anomalias (29 horas de ensaio) deveu-se a uma interferência registada no amplificador de sinal.

As vantagens deste tipo de ensaios (Ensaios 3 e 6) podem ser resumidas do seguinte modo:

- a) A técnica é de realização simples.
- b) O equipamento fixo necessário à realização do ensaio é constituído apenas por um furo de observação (a existência

de alguma captação vizinha serve apenas para diminuir o tempo de ensaio).

- c) O tempo de ensaio é muito reduzido.
- d) O ensaio é independente da direção natural do escoamento do aquífero.
- e) A concentração de cloreto de sódio na solução de injeção é muito baixa podendo o traçador (NaCl) ser considerado como traçador ideal.
- f) As curvas obtidas nos ensaios são muito perfeitas permitindo um bom tratamento posterior. O amortecimento do pico da curva em relação à concentração de injeção é muito baixo (aprox. 4,7 vezes).

As desvantagens deste tipo de ensaios são as seguintes:

- a) A existência de filtros envolventes nos piezômetros distorce a informação que se regista.
- b) A escala dos ensaios é local sendo a parcela do aquífero abrangida pelo ensaio extremamente reduzida.
- c) Os resultados do ensaio podem ser muito sensíveis a variações de condições hidrogeológicas, tempos de injeção, posicionamento das sondas no piezómetro, etc.

5.4.2 - Ensaio simultâneo de cloreto de sódio e de sulforodamina B

Como se referiu em 5.4.1.4 simultâneamente com o Ensaio 6 realizou-se um ensaio com uma soluçãõ de sulforodamina B. Este ensaio designou-se por Ensaio 7.

Os Ensaio 6 e 7 tinham por objectivo comparar o comportamento de dois traçadores diferentes sendo um considerado um traçador conservativo ideal, o NaCl, e o outro apresentando características importantes de adsorçãõ iônica reversível, a sulforodamina B (v. 5.2.3).

Em 17.2.85 injectaram-se (simultâneamente com o NaCl do Ensaio 6) 250 mg de sulforodamina B, diluïdos em 1000 l de água. A concentraçãõ de sulforodamina B não deveria exceder por razões de toxicidade (seguranca sanitária) 10 ppb na captaçãõ B5. Como a concentraçãõ injectada de 250 ppb seria de acordo com a experiênciã adquirida no Ensaio 2 diluïdo mais de 10000 vezes até chegar ao B5 o problema de toxicidade não se colocava.

Seguidamente foram injectados 1000 l de água, limpa, como foi referido no Ensaio 6.

Instalou-se entãõ no piezõmetro uma tubagem de 1/4" à profundidade de 33,0 m ligada a uma bomba doseadora SODI PD150-B de 10 l/h, que captou continuamente durante os 4 dias de ensaio.

O Ensaio 7 prolongou-se do dia 17.2.85 até ao dia 21.2.85. Durante as primeiras 51 horas de ensaio foram recolhidas, hora a hora, amostras de 200 cm³ cada (em garrafas escuras) captadas pela bomba doseadora. As amostras depois de etiquetadas com o número da amostra e a hora da colheita foram armazenadas em local escuro.

A partir da 51a. hora foram recolhidas mais 7 amostras durante os dois últimos dias de ensaio. Durante esse período ocorreu uma paragem da bomba. Descontou-se o tempo de paragem do tempo real de ensaio. Descontou-se também o tempo de percurso da

água nas tubagens da bomba doseadora. A cada amostra foi descontado um tempo de percurso calculado em 15 minutos.

As amostras foram posteriormente analisadas, em 20.2.85, no fluorímetro TURNER instalado no LNEC, de acordo com as especificações do fabricante.

Na Fig. 5.14 apresenta-se a curva da variação da concentração, com o tempo de ensaio. Os valores da concentração vêm expressos em ppb. A concentração inicial de injeção foi de 250 ppb. O valor máximo registado foi de 35 ppb. Observa-se assim uma redução ou amortecimento do pico de 7,14 vezes em relação à concentração de injeção. Note-se que no Ensaio 6 a redução foi de:

$$R_6 = \frac{C_i}{C_p} = \frac{890 \text{ mg/l}}{186,1 \text{ mg/l}} = 4,78$$

O amortecimento do valor do pico da curva da sulforodamina B em relação ao valor do pico da curva de NaCl é de (Fig. 5.15):

$$A = \frac{R_6 - R_7}{R_7} = \frac{4,78 - 7,14}{7,14} 100\% = -33\%$$

Observa-se ainda, comparando as duas curvas, que a sulforodamina B é parcialmente adsorvida pelo meio poroso, sendo posteriormente lixiviada lentamente pelo escoamento subterrâneo (adsorção iónica reversível).

Verifica-se também nesta curva a descontinuidade observada nas curvas dos Ensaios 3 e 6. No Ensaio 7 a "anomalia" verifica-se entre a 16a. hora de ensaio e a 28a. hora.

É interessante verificar que o pico das curvas dos Ensaios 6 e 7 ocorre ao mesmo tempo, isto é ao fim de 5 horas de ensaio. A adsorção pelo meio poroso não alterou, portanto, essa característica.

Nos pontos 5.5.2 e 5.5.4 determinar-se-ão alguns parâmetros de transporte e o factor de retardamento, com os resultados do Ensaio 7.

O ensaio de sulforodamina B permite concluir o seguinte:

- a) A técnica de ensaio é simples desde que exista um fluorímetro, calibrado para os ensaios, à disposição do utilizador.
- b) As curvas obtidas são muito precisas.
- c) O tempo de percurso do pico de concentração é igual ao do pico de um traçador conservativo (NaCl).
- d) Observa-se um amortecimento do pico significativo (33%) das curvas de concentração em relação à dos traçadores conservativos e uma lixiviação lenta do traçador adsorvido pelo meio poroso (adsorção iónica reversível). A sulforodamina B não deve ser, por esses motivos, empregada para a determinação de parâmetros de aquíferos, que se destinem a ser aplicados ao cálculo do transporte de elementos conservativos.

Em 5.5.2 e em 5.5.4 tirar-se-ão outras conclusões dos resultados do Ensaio 7.

5.5 - Interpretação dos resultados dos ensaios de traçadores

5.5.1 - Introdução

O objectivo principal da interpretação dos resultados dos ensaios de traçadores é a obtenção do valor da dispersividade longitudinal à escala dos ensaios (até 25 m), para o aquífero das areias brancas de Rio Maior.

Serão analisados diversos métodos de cálculo da dispersividade, que se baseiam na semelhança existente entre as curvas de concentração do traçador no tempo e as curvas da lei normal (ou de Gauss), em função respectivamente da dispersividade do meio poroso e do desvio padrão da lei normal.

Os métodos serão aplicados à curva de concentrações do Ensaio 1. Esse ensaio, como se referiu em 5.4.1.2, abrange, de entre os vários ensaios realizados, a maior extensão do aquífero e apresenta uma curva adequada à utilização dos vários métodos.

Dos restantes ensaios de NaCl serão seleccionados para análise os que oferecem garantias de corresponderem, de facto, à experiência efectuada e que não sofram, portanto, de interferências de factores externos secundários. Estão neste caso os Ensaios 2, 3 e 6 que, com o Ensaio 1, abrangem todas as distâncias ensaiadas.

Calculado o valor da variável dispersividade longitudinal, será aplicado o método inverso aos resultados do Ensaio 1 para testar a validade desse valor. Serão seleccionados dois programas de computador, baseados em métodos matemáticos diferentes. Analisar-se-á então o ajustamento das curvas calculadas à curva experimental.

Serão também analisados os resultados do Ensaio 7, cujo traçador é a sulforodamina B, a fim de os comparar com os valores obtidos pelo Ensaio 6, realizado com NaCl.

Termina-se esta introdução com uma nova apresentação das curvas da variação da concentração no tempo, descritas em 5.4.1 e 5.4.2, que permite obter uma visão geral dos resultados que se irão analisar em pormenor nos pontos seguintes.

As curvas da variação da concentração no tempo, podem ser comparadas entre si desde que sejam adimensionalizadas em relação à respectiva concentração máxima e ao tempo de ensaio. BELTAOS e DAY 1978 sugerem a seguinte expressão:

$$C/C_p = f [(t-t_1) / \Delta t] \quad (5.1)$$

onde

C = concentração no instante t

C_p = concentração do pico

t = tempo de ensaio

t₁ = tempo da 1.ª passagem de C = 0,5 C_p

t₂ = tempo da 2.ª passagem de C = 0,5 C_p

$\Delta t = t_1 - t_2$

Em ordenadas indicar-se-á a variável C/C_p e em abcissas $t-t_1/\Delta t$.

Na Fig. 5.16 apresentam-se as curvas adimensionalizadas de todos os ensaios efectuados. Como se pode verificar, os trocos de montante dos vários ensaios de NaCl apresentam características semelhantes, situando-se os picos relativamente próximos. A média do tempo (adimensionalizado) dos picos dos seis ensaios de NaCl é de 0,40. O valor do tempo (adimensionalizado) obtido com

um modelo de elementos finitos (DISP3.FDR), considerando a dispersividade longitudinal e a velocidade do escoamento equivalentes às do Ensaio 1 (5.5.3) foi de 0,47, situando-se entre os picos das curvas dos Ensaio 1 e 4. Os trocos de jusante apresentam comportamentos mais diferenciados, tal como seria de esperar de acordo com o que se realçou em 5.4.1.

Repare-se que todas as curvas, segundo este método, devem passar pelos seguintes pontos:

$$a) C/C_p=0,5 \text{ e } \frac{t-t_1}{\Delta t}=0,0$$

$$b) C/C_p=0,5 \text{ e } \frac{t-t_1}{\Delta t}=1,0$$

O comportamento da curva do Ensaio 7, realizado com sulforodamina B é nitidamente diferente do comportamento das restantes curvas. O troco de montante é mais inclinado, a ocorrência do pico efectua-se mais cedo e o decaimento é, até ao segundo ponto fixo de passagem (ponto b)), mais acentuado.

5.5.2 - Análise directa dos resultados dos ensaios

O objectivo da análise que se efectua em seguida é o da determinação da dispersividade longitudinal do aquífero das areias brancas de Rio Maior, com base nos resultados obtidos para os Ensaio 1, 2, 3 e 6. Os resultados que se consideram fundamentais para essa análise são os do Ensaio 1. Note-se que os resultados desse ensaio resultam de uma experiência efectuada num campo de velocidades radial. A dispersividade que se obterá será assim a dispersividade radial. Tal facto não levanta problemas uma vez que FRIED 1975, citando HOOPES e HARLEMAN 1967,

indica que o valor da dispersividade longitudinal, que se pretende calcular, é igual ao da dispersividade radial.

A segunda consideração que deve ser feita é a seguinte: toda a análise efectuada bem como a que se desenvolveu no Capítulo 4 segue o desenvolvimento teórico de TAYLOR 1955 e ARIS 1956 sobre a análise da dispersão em tubagens com escoamentos uniformes. Esses autores indicam que a concentração média numa secção segue uma lei de Fick, que se traduz pela equação diferencial do transporte de massa apresentada nos Capítulos 3 e 4. A solução dessa equação para o caso da injeção instantânea dum poluente, como nos ensaios experimentais realizados em Rio Maior, segue a seguinte lei:

$$\bar{C} = \frac{M}{A (4\pi Dt)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(x - Vt)^2}{4Dt} \right] \quad (5.2)$$

onde

- \bar{C} = concentração média na secção genérica x
- x = distância em relação ao local de injeção
- M = massa do poluente injectado
- A = área da secção
- V = velocidade média do escoamento
- t = tempo de ensaio desde a injeção
- D = coeficiente de dispersão

Esta fórmula foi apresentada para as soluções analíticas

descritas no Capítulo 4. Indica que a concentração $C(x)$ tem uma forma semelhante à de uma distribuição do tipo normal, isto é as curvas de concentrações e a lei normal têm formas geométricas semelhantes, embora o significado de cada uma seja diverso.

Com base nesta semelhança desenvolveram-se vários métodos de cálculo da dispersão longitudinal. Deve notar-se, no entanto, que a teoria de Taylor levante alguns problemas e que é posta actualmente em causa por vários autores. O principal problema reside nas diferenças de configuração existentes entre as curvas experimentais (reais) e as curvas obtidas com base na teoria de Taylor. Na Fig. 5.17 apresenta-se um exemplo destas curvas, obtida por um modelo de elementos finitos (DISP3.FOR). Uma sobreposição desta curva depois de adimensionalizada com a curva equivalente do Ensaio 1, Fig. 5.16, revela uma razoável coincidência até ao tempo adimensionalizado 1,167 correspondente a 28 dias de ensaio. No ponto 5.5.3 apresentar-se-á uma outra figura contendo essas duas curvas. Os troços restantes das curvas afastam-se bastante decaindo, no modelo, muito mais rapidamente do que nos resultados do ensaio.

De acordo com os resultados obtidos neste capítulo e para os estudos a desenvolver no Capítulo 6, a teoria de Taylor fornece resultados perfeitamente aceitáveis.

Deve ainda fazer-se uma terceira e última consideração. Trata-se da dificuldade de quantificação das velocidades intersticiais dos poluentes, dissolvidos na água subterrânea, quando inseridos no escoamento subterrâneo. Ao contrário dos outros ramos da hidrologia, na hidrogeologia a medição das velocidades intersticiais não pode ser efectuada directamente. Tem assim de se recorrer a modelos de cálculo. O problema fundamental reside na dificuldade de quantificar o espaço livre

existente entre os grãos do meio poroso, que servirão de passagem ao escoamento subterrâneo, Fig. 2.1. Diversos autores consideram que a velocidade aparente do escoamento (VD) dada pela lei de Darcy ($V_D = -ki$) deve ser dividida pela porosidade total (ϕ). Outros no entanto consideram que nem todos os vazios se encontram livres para percolação e que uma fracção da água retida pelo meio poroso (retenção específica) impede a livre circulação da água subterrânea. Por esse motivo sugerem que a velocidade de Darcy seja dividida pela porosidade eficaz ou cedência específica (S_y). O valor real deve ser um valor intermédio entre os dois referidos, como se verificará adiante.

Considerando que o cone de depressão provocado por uma captação se encontra estabilizado e que o escoamento natural é diminuto comparado com o provocado pela captação, FRIED 1975 sugere para cálculo da velocidade do escoamento a equação correspondente ao caudal que passa pela superfície cilíndrica concêntrica com a captação:

$$V = \frac{Q}{2\pi r b \phi_u} \text{ m}^3/\text{dia} \quad (5.2a)$$

onde

Q = caudal da bomba (m³/dia)

r = raio ou distância à captação (m)

b = espessura saturada do aquífero (m)

ϕ_u = porosidade útil para o escoamento

Os valores limites de ϕ_u calculados por RODRIGUES e OLIVEIRA 1980 para o aquífero são os seguintes:

porosidade total = 31%

e porosidade específica = 11%

Adoptando um valor médio $\phi_u = 20\%$, considerando que o caudal da captação é de 1920 m³/dia (80 m³/hora) e que a espessura média saturada (aquífero livre) é de 72,5 m obtém-se para a velocidade média do Ensaio 1 o valor 0,83 m/dia.

A profundidade do nível piezométrico no PC7/2 é, no Ensaio 1, de 4,48 m e no PC8 é de 3,73 m. Admitindo que a condutividade hidráulica é de 5,7 m/dia, que a porosidade útil é de 20% e que a distância entre o PC7/2 e o PC8 é de 25 m obtém-se segundo a lei de Darcy, uma velocidade intersticial de:

$$V = Ki = K \frac{h_1 - h_2}{\Delta l} \times \frac{1}{\phi} \quad (5.3)$$
$$= 5,57 \frac{4,48 - 3,71}{25 \times 0,20} = 0,86 \text{ m/dia}$$

A curvatura da superfície piezométrica do aquífero (cone de depressão) entre os piezômetros PC7/2 e PC8, mesmo em situação de bombagem, é diminuta. Considerar-se-á que a velocidade é constante em todo o percurso.

Observe-se no entanto que a ocorrência do pico de concentrações da curva do Ensaio 1 (Fig. 5.5) se verifica ao fim de 24,5 dias. A velocidade do ensaio deveria assim ser de (FRIED 1975):

$$V = \frac{25 \text{ m}}{24,5 \text{ dia}} = 1,02 \text{ m/dia}$$

A média das velocidades teóricas calculadas anteriormente

(com uma porosidade de 20%), igual a 0,845 m/dia e a velocidade real do pico de concentrações de 1,02 m/dia implicaria uma correção do valor da porosidade útil para $\phi_u = 16,57\%$, de modo a que o valor da média das velocidades teóricas fosse igual ao valor da velocidade real. Alguns autores, como BELTAOS e DAY 1978, indicam que a velocidade do pico não deve ser considerada igual à velocidade do escoamento real. Esta deve antes ser considerada igual à velocidade correspondente ao centro da gravidade da curva de concentrações. Como este está mais deslocado no tempo, isto é surge mais tarde na curva de concentrações no tempo, a velocidade real, deve ser um pouco mais baixa do que a do pico (uma vez que para a mesma distância se considerou um tempo de percurso maior). No decorrer da análise será feita referência ao cálculo da velocidade do Ensaio 1, por este método.

Para os Ensaios 3, 6 e 7 o cálculo da velocidade é mais problemático uma vez que não se conhece a distância percorrida pela mancha do poluente injectado. Pelo método de FRIED 1975 os valores calculados seriam os seguintes, em função do valor admitido para a porosidade:

$$\phi = 30\% \rightarrow V_r = 0,94 \text{ m/dia}$$

$$\phi = 20\% \rightarrow V_r = 1,40 \text{ m/dia}$$

$$\phi = 11\% \rightarrow V_r = 2,55 \text{ m/dia}$$

Para o Ensaio 2 os problemas residem na forte curvatura da superfície piezométrica, devido à proximidade da captação, e ao facto de não ser conhecido o valor da perda de carga à entrada da tubagem da captação B5.

Os valores calculados pelo método de FRIED 1975 variam

conforme o passo de cálculo que se utiliza para o cálculo da velocidade média. Assim com $\phi=20\%$ obtêm-se:

Passo = 1 m	--->	V = 4,66 m/dia
Passo = 0,5 m	--->	V = 5,61 m/dia
Passo = 0,25 m	--->	V = 6,58 m/dia

No decorrer dos cálculos da dispersividade longitudinal, será quantificada a velocidade intersticial dos escoamentos.

Passar-se-á agora ao cálculo da dispersividade longitudinal do aquífero utilizando os resultados do Ensaio 1.

Os métodos de cálculo podem ser classificados em três grupos:

- a) Utilização de expressões baseadas na teoria de Taylor e na semelhança das curvas de concentração com as curvas da lei normal.
- b) Utilização de curvas-tipo calculadas por modelos matemáticos e determinação dos parâmetros do aquífero após o ajustamento da curva experimental a uma curva-tipo.
- c) Utilização do método da tentativa e erro por aplicação de um ou mais modelos matemáticos. Variam-se os parâmetros de entrada do modelo (dispersividades, etc.) até se obter um bom ajustamento dos resultados calculados aos da curva experimental.

Neste trabalho optou-se fundamentalmente pela análise do primeiro grupo (a). Para esse fim escolheram-se seis técnicas diferentes. Cinco delas baseiam-se no chamado método dos momentos. A sexta reformula a equação 5.2 de modo a permitir a realização de um método gráfico.

O valor calculado para a dispersividade foi em seguida sujeito a confirmação, no ponto 5.5.4, segundo as técnicas do grupo c).

Os valores calculados foram também comparados com os valores que se apresentam na literatura da especialidade.

As técnicas do grupo b) são constituídas pela análise de resultados discretizados obtidos por determinado modelo de cálculo. Para estudos práticos, que se desejem expeditos, é aconselhável o seu uso. Curvas deste tipo, traçadas por exemplo por SAUTY 1977, são reproduzidas em UNESCO 1980.

As várias técnicas de aplicação do método dos momentos vêm descritas em FRIED 1975, BELTADS e DAY 1978, KREFT e ZUBER 1978 e NERETNIEKS 1984.

KREFT e ZUBER 1978 sugerem a aplicação de várias técnicas para o método dos momentos, em função do modo de injeção e de detecção do traçador. Além do tipo de condição de fronteira (injeção contínua ou instantânea) interessa-lhes saber se a concentração é injectada e/ou detectada no "fluido residente" ou no "fluxo de fluido". É um problema semelhante ao que se passa com a definição das condições de fronteira em termos de concentrações ou em termos de fluxos. Na análise que se efectuou os resultados obtidos são idênticos. Não se adiantará mais nada sobre o assunto.

Os momentos de uma curva de concentrações no tempo são definidos do seguinte modo:

$$M_{n,t} = \int_0^{\infty} t^n C(x,t) dt \quad (5.4)$$

$$m_{n,t} = \frac{M_{n,t}}{M_{0,t}} \quad (5.5)$$

$$\mu_{n,t} = \frac{\int_0^{\infty} (t - m_{1,t})^n C(x,t) dt}{M_{0,t}} \quad (5.6)$$

onde

n - é a ordem dos momentos $M_{n,t}$ e $m_{n,t}$ e dos momentos centrados $\mu_{n,t}$

Os momentos das curvas de concentração no espaço são definidos de igual modo, substituindo a variável tempo (t) pela variável espaço (x). A integração passa no entanto a ser de menos infinito a mais infinito, para meios infinitos, ou de 0 a mais infinito para meios "semi-infinitos".

KREFT e ZUBER 1978 apresentam equações que relacionam os vários momentos. O momento de 1a. ordem (média) e o momento centrado de 2a. ordem (variância) estão relacionados com as variáveis hidrogeológicas, velocidade do escoamento (V), dispersão longitudinal (DL) e espaço x (ou tempo t como se viu atrás) do seguinte modo:

$$m_{1,t} = \frac{x}{V} \left(1 + 2 \frac{DL}{Vx} \right) \quad (5.7)$$

$$\mu_{2,t} = \left(\frac{x}{V}\right)^2 \left[2 \frac{D_L}{Vx} + 8 \left(\frac{D_L}{Vx}\right)^2 \right] \quad (5.8)$$

(Esta expressão corresponde a uma injeção e detecção do traçador em termos de concentração residente no fluido).

A análise das curvas de concentração com as expressões anteriores e a resolução do respectivo sistema de equações permite determinar tanto a velocidade real do escoamento como a dispersão longitudinal do meio poroso. As integrações foram efectuadas por um método numérico, usando três pontos de apoio (TUB 1977).

Os resultados obtidos, para o Ensaio 1, por este método são os seguintes:

$$m_{1,t} = 25,15 \quad \text{dia}$$

$$\mu_{2,t} = 6,716 \quad \text{dia}^2$$

$$V = 1,005 \quad \text{m/dia}$$

$$DL = 0,133 \quad \text{m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = DL/V = 0,133 \quad \text{m}$$

A variável α_L é a dispersividade longitudinal do meio poroso.

Refere-se que a velocidade intersticial do escoamento é de acordo com este método, igual a 1,005 m/dia. As velocidades teóricas calculadas anteriormente são de 0,86 m/dia e 0,83 m/dia. A velocidade do pico da curva de concentrações é de 1,02 m/dia.

Para NERETNIEKS 1984 as expressões dos momentos são as seguintes:

$$\bar{t} = \frac{1}{C_0} \int_0^x C(t) t dt \text{ (tempo médio de percurso)} \quad (5.9)$$

$$\sigma_t^2 = \frac{1}{C_0} \int_0^\infty C(t) (t - \bar{t})^2 dt \quad (5.10)$$

C_0 é a concentração inicial do poluente.

A dispersão longitudinal é calculada do seguinte modo:

$$D_L = \frac{\sigma_t^2}{t^2} \cdot \frac{1}{2} \bar{V}_x \quad (5.11)$$

A velocidade média \bar{V} é igual a:

$$\bar{V} = \frac{d}{t} \quad (5.12)$$

onde d é a distância de ensaio

Os valores obtidos por este método são os seguintes:

$$\begin{aligned} \bar{t} &= 25,15 \text{ dias} \\ \sigma_t^2 &= 6,7162 \\ \bar{V} &= \frac{d}{t} = \frac{25}{25,15} = 0,99 \text{ m/dia} \\ D_L &= 0,1314 \text{ m}^2/\text{dia} \end{aligned}$$

$$\alpha_L = D_L/V = 0,133 \text{ m}$$

valores praticamente idênticos aos calculados pelo método anterior.

FRIED 1975 apresenta várias expressões para o cálculo, simplificado, da dispersividade longitudinal, baseado nas curvas de concentração no espaço. A solução analítica para uma injeção unitária durante o intervalo de tempo t_0 é a seguinte:

$$C = (2\pi)^{-1/2} \int_{\frac{x-Vt}{\sqrt{2Dt}}}^{\frac{x-V(t-t_0)}{\sqrt{2D(t-t_0)}}} \exp(-\eta^2/2) d\eta \quad (5.13)$$

onde

η = variável de cálculo (tempo)

Calcula-se o C máximo, no espaço igualando a zero a derivada de C, em ordem ao espaço. Para tempos significativamente longos (regime assintótico) e pequenas distâncias longitudinais da frente de concentração a variável D é fundamentalmente uma função da velocidade do traçador:

$$D = [x^2 - V^2 t_m (t_m - t_0)] / [2 (t_m - t_0)] \quad (5.14)$$

onde

x = abscissa do ponto de medida

t_m = tempo de ocorrência do pico

t₀ = tempo de injeção

V = velocidade do escoamento

Considerando a velocidade (V) igual a 1,0 m/dia, t₀ = 20 min e t_m = 24,5 dias obtêm-se os seguintes valores:

$$DL = 0,51 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = 0,51 \text{ m}$$

FRIED 1975 analisa ainda o efeito de injeções contínuas. Neste caso as curvas de concentrações que se obtêm são semelhantes às da Fig 5.18. As expressões que deriva baseiam-se na semelhança das curvas de concentração no espaço (ou concentração no tempo) com as curvas da lei normal. Define uma zona de transição da mancha de poluição (l) como sendo o dobro da distância correspondente ao desvio padrão da distribuição normal, situando metade, ou seja σ , para cada lado da média. Considera ainda que a média (m) e o desvio padrão (σ) estão relacionados com a curva de concentração por:

$$m = Vt \quad (5.15)$$

$$\sigma = (2D_L t)^{1/2} \quad (5.16)$$

Assim e devido às propriedades da lei normal reduzida

$$N(1) = 0,8413$$

$$N(-1) = 0,1587$$

$$e = 2 \sigma = x_{0,16} - x_{0,84} = 2(2DLt)^{1/2} \quad (5.17)$$

sendo $x_{0,16}$ igual à distância onde se verifica a concentração $C/C_0 = 0,16$ e identicamente para $x_{0,84}$ e $C/C_0 = 0,84$.

A dispersão será assim dada por:

$$D_L = (x_{0,16} - x_{0,84})^2 / (8t) \quad (5.18)$$

Neste trabalho analisam-se curvas de concentração no tempo. Para estes casos FRIED 1975 apresenta a expressão seguinte:

$$D_L = \frac{1}{8} \left[(x - V t_{0,16}) / (t_{0,16})^{1/2} - (x - V t_{0,84}) / (t_{0,84})^{1/2} \right]^2 \quad (5.19)$$

onde $t_{0,16}$ e $t_{0,84}$ têm o mesmo significado, no eixo dos tempos que $x_{0,16}$ e $x_{0,84}$ no eixo das distâncias.

Para se poder utilizar a expressão anterior desenvolveu-se um novo cálculo neste estudo. Integrou-se e adimensionalizou-se a curva de concentrações dos ensaios, de modo a obter no limite uma concentração integrada unitária (tal como na função cumulativa de probabilidades da lei normal). Em seguida desenharam-se os pontos calculados no papel (da lei) normal. Na Fig. 5.19 apresentam-se os resultados obtidos para o Ensaio 1.

Como se pode verificar não há apenas uma lei normal que se ajuste globalmente à curva de concentrações, como sugeriria a teoria de Taylor, mas sim duas: uma aproximadamente até ao pico (24,5 dias) e outra a partir daí. Torna-se assim difícil encontrar um valor único para a dispersão logitudinal. Considerando uma velocidade de escoamento (V) de 1 m/dia e uma distância de ensaio (x) de 25 m obtêm-se os seguintes valores, a partir da Fig. 5.19 e da expressão 5.19:

Curva A:	Curva B:
$t_{0,16} = 22,9$ dias	$(t_{0,16} = 20,55$ dias)
$(t_{0,84} = 26,4$ dias)	$t_{0,84} = 27,9$ dias

Considerando apenas a curva A:

$$DL = 0,063 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = 0,063 \text{ m}$$

Considerando apenas a curva B:

$$DL = 0,293 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = 0,293 \text{ m}$$

Considerando $t_{0,16}$ da curva A e $t_{0,84}$ da curva B:

$$DL = 0,122 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = 0,122 \text{ m}$$

Considerando a média dos valores da curva A e da curva B:

$$DL = 0,178 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = 0,178 \text{ m}$$

BELTAOS e DAY 1978 sugerem uma técnica diferente para a aplicação do método dos momentos. O pressuposto teórico desse método baseia-se no crescimento da variância (temporal) σ_t^2 (variância essa que os autores não explicam mas que se irá considerar correspondente ao "alargamento" da curva das concentrações, com a correspondente diminuição do valor da concentração do pico). Os autores apresentam a seguinte expressão:

$$\frac{V^3}{2} \frac{d\bar{\sigma}_t^2}{dx} = D \quad (5.20)$$

onde

V é a velocidade média do escoamento e D a dispersão do meio.

Sugerem ainda que a velocidade média seja obtida do seguinte modo:

$$V = (d\bar{t}/dx)^{-1} \quad (5.21)$$

ou

$$V = (dt_m/dx)^{-1} \quad (5.22)$$

onde \bar{t} e t_m são dados por

$$\bar{t} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \bar{C} t \, dt}{\int_{-\infty}^{\infty} \bar{C} \, dt} \quad (5.23)$$

$$t_m = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \bar{C} \, dt}{\int_{-\infty}^{\infty} (\bar{C}/t) \, dt} \quad (5.24)$$

sendo

\bar{C} a concentração média numa dada secção.

Para a aplicação do método representa-se num gráfico em ordenadas a "variância média" da curva de concentrações $\bar{\sigma}_t^2$ numa secção do ensaio, indicando-se em abcissas o valor da distância de ensaio (x) para o qual se obteve a curva. Em seguida procura-se ajustar uma linha recta aos últimos pontos (x, σ_t^2) do gráfico. Os pontos com menores valores de x poderão ser desprezados. Calculando o valor da inclinação da recta e o valor da velocidade real do escoamento, pelas equações 5.21 ou 5.22, obtém-se, da equação 5.20, o valor da dispersão.

Este método foi aplicado aos resultados obtidos para os Ensaios 1 e 3. Possuindo-se apenas dois pares de valores (Ensaio 1 e 3) toda a análise desenvolvida é extremamente precária. Pretendeu-se, contudo, apenas exemplificar a utilização do método.

Uma das dificuldades surgidas na aplicação desta técnica foi a quantificação de um valor médio para as velocidades dos Ensaio 1 e 3. A velocidade média admitida foi de 1 m/dia (idêntica à do Ensaio 6). O Ensaio 2, que possui uma velocidade muito superior à dos outros dois ensaios, não pôde ser analisado por este método.

Para a aplicação do método tornou-se ainda necessário efectuar o cálculo de algumas variáveis do Ensaio 3. O método dos momentos, proposto por KREFT e ZUBER 1978, permite obter o seguinte valor para a "variância" $\bar{\sigma}_t^2$:

$$\mu_{2,t} = 0,12663$$

$$\bar{\sigma}_t^2 = (\mu_{2,t})^2 = 0,016$$

A distância (x) do Ensaio 3 é, como se viu em 5.4.1.4, de difícil quantificação. Ir-se-á considerar que x tem um valor duplo do afastamento provocado pela injeção (ida e volta do poluente em relação ao piezómetro PC7/2).

$$x_{3;1} = 2 * 0,25 \text{ m} = 0,5 \text{ m}$$

e que se pode também considerar como tendo o valor calculado em 5.4.1.4, correspondente à dispersão introduzida pela velocidade de injeção:

$$x_{3;2} = 3,42 \text{ m}$$

De um ou de outro modo os valores finais, calculados pelo método de BELTAOS e DAY 1978, não são muito diferentes. De facto

$$(D)_1 = \frac{V^3}{2} \frac{\sigma_{r1}^2 - \sigma_{r2}^2}{x_1 - x_{3,1}} \quad (5.25)$$

$$= \frac{1^3}{2} \frac{45,109 - 0,016}{25 - 0,5} = 0,920 \text{ m}^2/\text{dia}$$

ou

$$(D)_2 = \frac{V^3}{2} \frac{\sigma_{r1}^2 - \sigma_{r2}^2}{x_1 - x_{3,2}} \quad (5.26)$$

$$= \frac{1^3}{2} \frac{45,109 - 0,016}{25 - 3,42} = 1,045 \text{ m}^2/\text{dia}$$

Os valores do Ensaio 1 foram calculados pelo método de KREFT e ZUBER 1978.

Na Fig. 5.20 apresenta-se o gráfico do método de BELTAOS e

DAY 1978 para as duas distâncias calculadas para o Ensaio 3.

Como se pode reparar os valores da dispersão que se calcularam por este método (para os Ensaio 1 e 3) são superiores aos calculados anteriormente, mas são ainda da mesma ordem de grandeza. As dispersividades são as seguintes:

$$(\alpha)_1 = \frac{(D)_1}{V} = \frac{0,920 \text{ m}^2/\text{dia}}{1 \text{ m}/\text{dia}} = 0,920 \text{ m}$$

$$(\alpha)_2 = \frac{(D)_2}{V} = \frac{1,045 \text{ m}^2/\text{dia}}{1 \text{ m}/\text{dia}} = 1,045 \text{ m}$$

Apresenta-se finalmente o método sugerido por CHATWIN 1971. Rearranjando a equação 5.2 e usando logaritmos Chatwin chegou à seguinte expressão:

$$\left[t \ln \frac{\bar{C}'(t)^{1/2}}{\bar{C} t^{1/2}} \right]^{1/2} = \frac{x}{2D^{1/2}} - \frac{Vt}{2D^{1/2}} \quad (5.27)$$

onde

$t' = x/V$ e \bar{C}' é o valor de \bar{C} para o tempo $t = t'$.

A velocidade média do escoamento pode-se calcular graficamente pelo método de CHATWIN 1971. Na Fig. 5.21 apresentam-se as curvas que permitem calcular o tempo médio de percurso e a velocidade do escoamento. Desenhando num gráfico o primeiro membro da equação (5.27) em ordenadas e o tempo t em abcissas deve poder ajustar-se uma recta, pelo menos aos pontos de ordenadas positivas.

Na Fig. 5.22 apresenta-se o gráfico calculado para o Ensaio

1. O primeiro troço de ordenadas negativas, e os seguintes, reflectem a assimetria da curva das concentrações e demonstram a dificuldade, segundo BELTAOS e DAY 1978 que aplicam CHATWIN 1971, da teoria de Taylor se ajustar perfeitamente aos resultados experimentais.

A inclinação da recta (i) pode ser usada para o cálculo do valor da dispersão. Os valores obtidos para o Ensaio 1 foram os seguintes:

$$i = \text{Inclinação de recta} = -\frac{1,53 - 0,87}{23,5 - 22} = -0,440$$

$$i = -\frac{V}{2\sqrt{D}} \quad \text{ou} \quad D = \left(-\frac{V}{2i}\right)^2 \quad (5.28)$$

$$D = \left(-\frac{1}{2(0,44)}\right)^2 = 1,291 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha = \frac{D}{V} = \frac{1,291}{1,0} = 1,291 \text{ m}$$

Este valor da dispersividade é sensivelmente superior aos valores calculados pelos métodos dos momentos, aplicados às curvas da variação da concentração no tempo.

BELTAOS e DAY 1978 indicam que é vulgar a obtenção de valores diferentes da dispersividade calculados por métodos de análise semelhantes aplicados a resultados experimentais. Tal facto reflecte a dificuldade da teoria de Taylor descrever adequadamente os processos observados.

Em síntese, para o Ensaio 1, os valores da dispersividade longitudinal obtidos pelos métodos descritos para o aquífero das areias brancas de Rio Maior, são os seguintes:

- a) Método dos momentos aplicado à curva da concentração no tempo:

a1. Método de KREFT e ZUBER 1973:

$$\alpha_L = 0,133 \text{ m}$$

a2. Método de NERETNIEKS 1984:

$$\alpha_L = 0,133 \text{ m}$$

b) Métodos simplificados de FRIED 1975, obtidos por várias análises da curva da variação da concentração no tempo:

b.1 Equação 5.14

$$\alpha_L = 0,510 \text{ m}$$

b.2 Equação 5.19 aplicada ao método desenvolvido neste estudo, Fig. 5.19:

b.2a. Só curva A: $\alpha_L = 0,063 \text{ m}$

b.2b. Só curva B: $\alpha_L = 0,293 \text{ m}$

b.2c. Curvas A e B: $\alpha_L = 0,122 \text{ m}$

b.2d. Média das curvas A e B: $\alpha_L = 0,178 \text{ m}$

c) Método dos momentos aplicado à evolução da dispersão no espaço por BELTAOS e DAY 1978 (com as reservas atrás referidas):

c1. Para uma distância do Ensaio 3 igual a 0,50 m:

$$\alpha_L = 0,920 \text{ m}$$

c1. Para uma distância do Ensaio 3 igual a 3,42 m:

$$\alpha_L = 1,045 \text{ m}$$

d) Método de CHATWIN 1971 resultante da adaptação da equação 5.2

$$\alpha_L = 0,291 \text{ m}$$

Na sequência da análise efectuada, considerou-se para o ponto 5.6 e para o Capítulo 6 que a dispersividade longitudinal das areias brancas de Rio Maior na escala global II (FRIED 1975, distância do Ensaio 1: 25 m), pode ser obtida por média aritmética dos seguintes valores indicados: a1 ou a2, b1, b2c e d. O valor da dispersividade longitudinal é igual a:

$$\alpha_L = 0,514 \text{ m}$$

Se se considerarem todos os valores obtidos por exemplo a1, a2, b1, b2c, c1, e d, o valor médio da dispersividade longitudinal não se altera, em termos práticos:

$$\alpha_L = 0,518 \text{ m}$$

Substituindo c1 por c2 o valor que se obtém para a dispersividade é de:

$$\alpha_L = 0,539 \text{ m}$$

valor que não difere também, na prática, dos anteriores.

Serão também aplicados alguns dos métodos descritos anteriormente aos restantes ensaios de NaCl, com os quais se obtiveram resultados considerados correspondentes às injeções de traçador efectuadas (Ensaio 2, 3 e 6). O objectivo da análise é o de relacionar os valores calculados para as dispersividades destes ensaios com os obtidos para as curvas de concentração do Ensaio 1.

O método dos momentos de KREFT e ZUBER 1978 foi aplicado à curva de concentrações do Ensaio 2. Os valores obtidos são os seguintes:

$$x = 15 \text{ m}$$

$$m_{1,t} = 4,495 \text{ dias}$$

$$\mu_{2,t} = 1,367 \text{ dias}^2$$

$$V_L = 3,56 \text{ m/dia}$$

$$D_L = 1,806 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = \frac{D_L}{V_L} = 0,508 \text{ m}$$

Repare-se que o valor calculado para a dispersividade é superior ao calculado para o Ensaio 1 ($\alpha_L = 0,133 \text{ m}$), embora a distância do Ensaio 2 (15 m) seja inferior à do Ensaio 1 (25 m). A razão desta "anomalia" poderá eventualmente ser imputada à aceleração das partículas poluentes uma vez que a velocidade do escoamento aumenta significativamente em direcção à captação. A curva de concentrações aparece assim mais "aberta", o que se traduz numa dispersão superior à real.

A aplicação do método dos momentos proposto por NERETNIEKS 1984 permitiu a obtenção de resultados semelhantes aos anteriores:

$$V_L = 3,34 \text{ m/dia}$$

$$D_L = 1,694 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = 0,507 \text{ m}$$

Na Fig. 5.23 apresenta-se a adaptação proposta ao método de FRIED 1975, equação 5.19, resultante da integração da curva da concentração no tempo do Ensaio 2. De novo se pode verificar que não existe uma lei normal única que se adapte aos resultados do ensaio, mas sim duas leis. A primeira ajusta-se ao troço inicial da curva de concentrações, até à abcissa do pico, e a segunda adapta-se aos restantes pontos. Os valores calculados são os seguintes:

a) CURVA A:

$$x = 15 \text{ m}$$

$$\mu_{0,50} \text{ (valor médio do tempo)} = 4,14 \text{ dias}$$

$$V_m \text{ (velocidade média do escoamento)} = 15 \text{ m}/4,14 \text{ dias} = 3,9 \text{ m/dia}$$

$$\sigma_A = \frac{x_{0,84} - x_{0,16}}{2} = \frac{4,89 - 3,36}{2} = 0,75$$

$$D_L = 1,03 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = \frac{1,03}{3,9} = 0,26 \text{ m}$$

b) CURVA B:

$$x = 15 \text{ m}$$

$$\mu_{0,50} = 4,34 \text{ dias}$$

$$\sigma_B = \frac{5,74 - 2,94}{2} = 1,40$$

$$V_m = \frac{15}{4,34} = 3,46 \text{ m/dia}$$

$$D_L = 3,31 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = \frac{3,31}{3,46} = 0,957 \text{ m}$$

c) CURVA A: para $x_{0,16}$ e CURVA B para $x_{0,84}$

$$x_{0,16} = 3,36$$

$$x_{0,84} = 5,74$$

$$V_m = (3,46 + 3,9)/2 = 3,68 \text{ m/dia}$$

$$D_L = 2,408 \text{ m/dia}$$

$$\alpha_L = \frac{2,408}{3,68} = 0,654 \text{ m}$$

d) Média dos resultados da análise das curvas A e B:

$$\begin{aligned}V_m &= 3,68 \text{ m/dia} \\D_L &= 2,245 \text{ m}^2/\text{dia} \\ \alpha_L &= 0,610 \text{ m}\end{aligned}$$

Os valores calculados em c) e d) não se afastam significativamente dos valores calculados pelos métodos anteriores.

O método de CHATWIN 1978 não pode ser aplicado aos resultados do Ensaio 2, nem para o cálculo correcto da velocidade (Fig. 5.24), por ser difícil a quantificação do seu valor, nem para o cálculo da dispersividade uma vez que se não consegue traçar pelos vários pontos do gráfico a recta na qual o método se baseia (Fig. 5.22).

O método de BELTAOS e DAY 1978 não foi também aplicado uma vez que a velocidade do escoamento do Ensaio 2 é substancialmente diferente da velocidade dos restantes métodos.

Nos Ensaios 3 e 6 a análise torna-se menos clara, devido à dificuldade de definir a distância de ensaio, como se indicou anteriormente.

A análise que pareceu mais correcta consiste no cálculo dos momentos da curva de concentração, utilizando uma distância de ensaio correspondente apenas ao retorno da mancha de poluição, para o piezómetro, depois de concluídas as injeções do traçador e da água "limpa", ou seja, o valor calculado em 5.4.1.4 (deduzido do raio do piezómetro):

$$x = 0,22 \text{ m}$$

No cálculo da dispersividade entrar-se-á em consideração com

o facto da velocidade de injeção ser substancialmente maior do que a do escoamento. Em 5.4.1.4 calculou-se a velocidade equivalente de ensaio, 13,68 vezes superior à da velocidade natural do escoamento.

Os valores obtidos pelo método dos momentos de KREFT e ZUBER 1978 foram os seguintes:

$$m_{1,t} = 0,6160$$

$$\mu_{2,t} = 0,1266$$

$$V_L = 0,4853 \text{ dias}$$

$$D_L = 0,019 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = \frac{0,019 \text{ m}^2/\text{dia}}{0,4853 \text{ m}/\text{dia}} = 0,0392 \text{ m} = 3,92 \text{ cm}$$

$$\alpha_{L_c} = \frac{\alpha_L}{13,68} = \frac{3,92}{13,68} \text{ cm} = 0,29 \text{ cm}$$

O valor da dispersividade longitudinal (corrigida) α_{Lc} correspondente a uma distância de 0,22 m e à velocidade de injeção no aquífero corrigida deveria, assim, ser de 0,29 cm. É interessante observar que KLOTZ 1982b apresenta um valor praticamente igual, 0,30 cm, para dispersividades calculadas laboratorialmente com areias e distâncias de ensaio semelhantes. Desprezando o efeito da velocidade de injeção o valor da dispersividade longitudinal seria de 3,92 cm.

Deve notar-se que o filtro de areias grosseiras (2 a 3 mm de diâmetro) que envolve o piezómetro influencia o valor calculado para a dispersividade, uma vez que as areias do aquífero são mais finas (0,5 a 1 mm). Segundo KLOTZ 1982b a dispersividade

calculada deve ser um pouco superior à real. A pequena espessura do filtro não deve contudo afectar significativamente os resultados.

O método dos momentos aplicado segundo a técnica de NERETNIEKS 1984 permitiu obter os seguintes valores:

$$V_a = 0,36 \text{ m/dia}$$

$$DL = 0,0132 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = 0,0367 \text{ m} = 3,67 \text{ cm}$$

$$\alpha_{L_c} = \frac{0,0367}{13,60} = 0,0027 \text{ m} = 0,27 \text{ cm}$$

Os valores são semelhantes aos calculados pelo método de KREFT e ZUBER 1978.

Segundo o método de FRIED 1975, adaptado neste trabalho, obteve-se, após integração da curva das concentrações, do Ensaio 3, a Fig. 5.25. De novo se repara a existência de duas leis normais ajustando-se uma ao troço ascendente da curva de concentrações e outra ao troço descendente. Utilizando, simultaneamente, os valores da curva A para a obtenção do valor correspondente à "probabilidade" de não excedência de 0,16 e à curva B para o valor de 0,84, como se fez para os Ensaios 1 e 2, obtiveram-se os seguintes resultados:

$$x_{0,16} = 0,31$$

$$x_{0,84} = 93,75$$

$$V_p = 0,22 \text{ m} \times \frac{24 \text{ h}}{8,45 \text{ h}} = 0,625 \text{ m/dia}$$

$$D_L = 0,0226 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = \frac{D_L}{V_p} = 0,0361 \text{ m} = 3,61 \text{ cm}$$

$$\alpha_L = \frac{3,6}{13,68} = 0,26 \text{ cm}$$

Estes valores são muito semelhantes aos calculados anteriormente.

Analisa-se em seguida, os resultados do Ensaio 6 pelo método dos momentos. Saliencia-se que o Ensaio 3 se realizou em Novembro e que o Ensaio 6 se realizou em Fevereiro (ambos no mesmo ano hidrológico de 1984/85), sendo diferente a piezometria em ambos os casos, como se viu em 5.4.1.4. A posição da sonda condutimétrica também variou passando de 35 m de profundidade para 33,5 m. O tempo de injeção do Ensaio 6 foi mais longo que o do Ensaio 3, passando de 35 min para 48 min. A relação entre a velocidade, corrigida, do Ensaio 6 e a velocidade do escoamento natural do aquífero deve ser assim inferior à verificada no Ensaio 3. Os valores calculados para a distância (x) do Ensaio 6 e para o factor multiplicativo da velocidade (R), por um processo equivalente ao descrito em 5.4.1.4, foram os seguintes:

$$x = 0,21 \text{ m}$$

$$R = 5,57$$

O tempo de ocorrência do pico da curva de concentrações do Ensaio 6 verificou-se ao fim de 5 horas de ensaio. A velocidade do escoamento, considerando esse tempo de ocorrência e uma distância percorrida de 0,21 m, é assim de:

$$V_p = \frac{0,21 \text{ m}}{\frac{5 \text{ h}}{24 \text{ h}}} = 1,01 \text{ m/dia}$$

Os valores obtidos para o Ensaio 6 pelo método dos momentos, de KREFT e ZUBER 1978, foram os seguintes:

$$\begin{aligned} m_{1,t} &= 0,40445 \\ \mu_{2,t} &= 0,08126 \\ x &= 0,21 \text{ m} \\ V_L &= 0,8166 \text{ m/dia} \\ D_L &= 0,0491 \text{ m}^2/\text{dia} \\ \alpha_L &= \frac{0,0491}{0,8166} = 0,060 \text{ m} = 6,0 \text{ cm} \\ \alpha_{L_c} &= \frac{0,060 \text{ m}}{5,57} = 0,0108 \text{ m} = 1,08 \text{ cm} \end{aligned}$$

Os valores obtidos pelo método dos momentos de NERETNIEKS 1984 foram os seguintes:

$$\begin{aligned} \bar{V}_a &= 0,519 \text{ m/dia} \\ D_L &= 0,027 \text{ m}^2/\text{dia} \\ \alpha_L &= \frac{D_L}{\bar{V}_a} = \frac{0,027}{0,519} \text{ m} = 0,052 \text{ m} = 5,2 \text{ cm} \\ \alpha_{L_c} &= \frac{\alpha_L}{5,57} = 0,0093 = 0,93 \text{ cm} \end{aligned}$$

Os valores obtidos para a dispersividade do Ensaio 6 embora em circunstâncias diferentes, devido à piezometria se ter alterado e à sonda condutimétrica ter passado da profundidade 35 m (zona localmente não crepinada do piezômetro, no Ensaio 3) para a profundidade 33,5 m (zona crepinada do piezômetro, no Ensaio 6) são da mesma ordem de grandeza. Repare-se na semelhança

existente entre as dispersividades não corrigidas:

Ensaio 3:

Método de Kreft e Zuber : 3,7 cm

Método de Neretnieks : 3,6 cm

Ensaio 6:

Método de Kreft e Zuber : 6,0 cm

Método de Neretnieks : 5,2 cm

Para as dispersividades corrigidas os valores são os seguintes:

Ensaio 3:

Método de Kreft e Zuber : 0,27 cm

Método de Neretnieks : 0,26 cm

Ensaio 6:

Método de Kreft e Zuber : 1,08 cm

Método de Neretnieks : 0,93 cm

Este facto leva a supor que o efeito da injeção do traçador na configuração final da curva de concentrações não deve ter um peso tão relevante como se imaginou em 5.4.1.4. Se tal for o caso a percolação do traçador no aquífero durante a injeção deve

efectuarse segundo um deslocamento de pistão permanecendo as frentes das várias coroas circulares resultantes das injeções de líquidos de qualidades diferentes, Fig. 5.12, praticamente inalteradas.

Note-se que o raciocínio seguido para a determinação dos raios médios das várias coroas circulares, para montante do piezómetro, e a redução dos mesmos devido ao escoamento natural do aquífero, permanece válido qualquer que seja o processo de deslocamento das frentes durante a injeção do traçador.

No ponto 5.5.4 analisar-se-ão os resultados do Ensaio 7.

5.5.3 - Análise inversa dos resultados dos ensaios

A análise que se desenvolve neste ponto corresponde ao terceiro método (c), referido em 5.5.2, para a determinação da dispersividade longitudinal de aquíferos. Trata-se do problema inverso ou método da tentativa e erro. Seleccionado um ou mais modelos matemáticos, e os respectivos programas de computador, varia-se o valor da dispersividade longitudinal, introduzido como dado, até se obter um bom ajustamento entre os resultados calculados pelos modelos e os das curvas experimentais. Na sequência do ponto anterior (5.5.2) esta análise encontra-se facilitada uma vez que se conhece já o valor (aproximado) da dispersividade longitudinal.

Os programas seleccionados para a análise inversa foram o DISP3.FOR e o SA1D1.FOR. Este último (v. Anexo 1) é uma versão unidimensional do modelo subjacente ao programa SA2D1.FOR, mais eficiente para estudos deste tipo. A selecção destes dois programas baseou-se no bom comportamento dos respectivos métodos

quanto à precisão de resultados, observado nos Testes 1 e 2 do Capítulo 4.

A malha do Teste 1 (adaptada à escala do Ensaio (de tracadores) 1) desenvolvida para o programa DISP3.FOR foi testada sem êxito. O número de elementos (7) e de nós (38) era manifestamente insuficiente. Obtiveram-se por esse motivo oscilações numéricas importantes, desprovidas de significado físico. Efectuaram-se posteriormente diversos refinamentos da malha, seguindo as regras indicadas no Capítulo 4. Obtiveram-se resultados muito bons para uma malha de espaçamento variável de elemento para elemento, mais refinada (distâncias reais de 5 cm) na zona corresponde à injeção do tracador. O número de elementos (rectangulares quadráticos) desta última malha foi de 60, o número de nós foi de 303 e o passo de cálculo considerado foi de 0,1 dias. O tempo de CPU necessário à execução do programa, para 350 passos de cálculo (ensaio até 35 dias), foi de 51 minutos e 15,99 segundos. A curva de concentrações obtida é apresentada na Fig. 5.17.

As variáveis consideradas para a execução do programa DISP3.FOR foram as seguintes:

$$V_x = 1,025 \text{ m/dia}$$

$$D_x = 0,13 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_x = 0,13 \text{ m}$$

$$D_y = 0,013 \text{ m}^2/\text{dia}$$

Os valores acima considerados baseiam-se na análise efectuada para o Ensaio 1, em 5.5.2, pelo método dos momentos de KREFT e

ZUBER 1978 e de NERETNIEKS 1984.

Antes de se apresentar a figura que contém os resultados do ajustamento do programa DISP3.FOR ir-se-á descrever a metodologia desenvolvida para a análise inversa efectuada segundo o programa SA1D1.FOR. Os resultados de ambos os programas serão então comparados em conjunto com os resultados experimentais.

A execução do programa SA1D1.FOR é extremamente mais rápida do que a do DISP3.FOR, necessitando apenas de 0,64 segundos de CPU para o cálculo de concentrações diárias, entre o 17. e 40. dias de ensaio. No entanto este programa não permite o tratamento imediato dos resultados do Ensaio 1 uma vez que não tem a possibilidade de considerar injeções instantâneas mas apenas injeções contínuas. Houve assim necessidade de se recorrer a uma das características mais versáteis do programa SA1D1.FOR (quanto à definição das condições de fronteira) que corresponde à possibilidade de considerar uma taxa de decaimento (exponencial) do poluente na origem.

A taxa de decaimento é calculada pela seguinte fórmula:

$$\gamma = -\frac{\ln \frac{C_c}{C_0}}{t} \quad (5.29)$$

onde

C_0 = concentração de injeção

C = concentração no instante t

Para a obtenção da taxa de decaimento recorreu-se à curva observada no piezómetro PC7/2 para o Ensaio 2, Fig. 5.8.

Seleccionou-se um ponto médio da curva para a determinação de C e de t:

$$t = 52 \text{ horas} = 2,17 \text{ dias}$$

$$C = 344 \text{ mg/l}$$

Para C_0 considerou-se a concentração de injeção do Ensaio 2:

$$C_0 = 50400 \text{ mg/l}$$

A taxa (aproximada) de decaimento terá assim um valor (calculado como ordem de grandeza) de:

$$\gamma = -\frac{\ln \frac{C}{C_0}}{t} = -\frac{\ln \frac{344}{50400}}{2,17} = -2,30$$

As restantes variáveis hidrogeológicas foram consideradas iguais às do programa DISP3.FOR:

$$V_x = 1,025 \text{ m/dia}$$

$$D_x = 0,13 \text{ m}^2/\text{dia}$$

Na Fig. 26 apresentam-se os resultados experimentais do Ensaio 1 bem como os resultados obtidos com os programas DISP3.FOR e SA1D1.FOR. Para comparação das curvas adimensionalizaram-se as concentrações em relação às respectivas concentrações de pico.

Note-se que, por deficiência técnica do aparelho registador, se não obtiveram resultados experimentais entre os dias 18 e 21,5 de ensaio. A curva apresentada é a previamente interpolada em

5.4.1.2, Fig. 5.5. Os resultados do ajustamento foram considerados plenamente satisfatórios. Não foram assim repetidas mais execuções dos programas, para valores diferentes da variável dispersividade longitudinal.

O valor da dispersividade longitudinal obtida em 5.5.1 (no exemplo segundo o método dos momentos) parece assim adequar-se à configuração das curvas de concentração experimentais, validando em termos práticos a utilização dos modelos matemáticos baseados na teoria de Taylor (apresentados no Capítulo 4) para a realização de estudos de impacto ambiental de poluição de águas subterrâneas, pelo menos para circunstâncias hidrogeológicas semelhantes às do aquífero das areias brancas de Rio Maior. A teoria de Taylor não se ajusta no entanto rigorosamente, como se viu em 5.5.2, aos resultados experimentais obtidos nos ensaios.

5.5.4 - Análise das variáveis de transporte do ensaio realizado com sulforodamina B

O estudo de poluentes não conservativos não constitui um dos objectivos básicos deste trabalho. Não se descurou no entanto uma análise introdutória ao tema, desenvolvida do seguinte modo:

- 1) Seleccção e teste de programas de computador que permitem o tratamento de poluentes sujeitos a fenómenos de decaimento (Teste 2 do Capítulo 4) como por exemplo decaimento radioactivo, poluentes biodegradáveis e decaimento de bactérias e vírus.
- 2) Estudo de reacções químicas com recurso a um programa para o cálculo do equilíbrio geoquímico de águas

subterrâneas (WATEQ.FOR).

- 3) Realização de um ensaio com um traçador fluorescente sujeito a adsorção (reversível) pelo meio poroso (Ensaio 7).

O ensaio referido, Ensaio 7, foi descrito em 5.4.2. A análise dos resultados desse ensaio efectuar-se-á neste ponto.

Não se pretende associar o traçador sulforodamina B a qualquer poluente não conservativo potencialmente existente em estudos de impacto ambiental de poluição de águas subterrâneas. O traçador a seleccionar para esses estudos deveria ter as duas características seguintes:

- a) Ter propriedades de permuta com o solo tão parecidas quanto possível com as do poluente.
- b) Não ser um produto poluente.

Analisando do ponto de vista inverso dir-se-á que o comportamento da sulforodamina B só poderá ser associado ao de um poluente ambiental após uma análise química comparativa da validade da hipótese a).

O cálculo da dispersividade longitudinal com base nos resultados do Ensaio 7, Fig. 5.14, foram desenvolvidos pelo método dos momentos. Os resultados obtidos são os seguintes:

Método de KREFT e ZUBER 1978:

$$x=0,21\text{ m}$$

$$m_{1,r}=1,11717$$

$$\mu_{2,t} = 0,81167$$

$$V_L = 0,341 \text{ m/dia}$$

$$D_L = 0,0292 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = \frac{0,0292}{0,341} \text{ m} = 0,0856 \text{ m} = 8,56 \text{ cm}$$

$$\alpha_{L_c} = \frac{0,0856}{5,57} = 0,0154 \text{ m} = 1,54 \text{ cm}$$

Método de NERETNIEKS 1984:

$$x = 0,21 \text{ m}$$

$$m_{1,t} = 1,11717$$

$$\mu_{2,t} = 0,81167$$

$$V = \frac{x}{m_{1,t}} = \frac{0,21}{1,11717} \text{ m/dia} = 0,188 \text{ m/dia}$$

$$D_L = \frac{\mu_{2,t}}{(m_{1,t})^2} \cdot \frac{1}{2} Vx$$
$$= \frac{0,81167}{(1,11717)^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot 0,188 \cdot 0,21 = 0,0128 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = \frac{0,0128}{0,188} \text{ m} = 0,0683 \text{ m} = 6,83 \text{ cm}$$

$$\alpha_{L_c} = \frac{0,0683}{5,57} \text{ m} = 0,0123 \text{ m} = 1,23 \text{ cm}$$

Os valores correspondentes do Ensaio 6, realizado com NaCl simultâneamente com o Ensaio 7, são os seguintes (5.5.2):

Método de KREFT e ZUBER 1978:

$$x = 0,21 \text{ m}$$

$$m_{1,t} = 0,40445$$

$$\mu_{2,t} = 0,08126$$

$$V_L = 0,8166 \text{ m/dia}$$

$$D_L = 0,0491 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = 0,060 \text{ m} = 6,0 \text{ cm}$$

$$\alpha_{L,t} = \frac{0,060}{5,57} \text{ m} = 0,0108 \text{ m} = 1,08 \text{ cm}$$

Método de NERETNIEKS 1984:

$$x = 0,21 \text{ m}$$

$$m_{1,t} = 0,40445$$

$$\mu_{2,t} = 0,08126$$

$$V = 0,519 \text{ m/dia}$$

$$D_L = 0,027 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$\alpha_L = 0,052 \text{ m} = 5,2 \text{ cm}$$

$$\alpha_{L,t} = \frac{0,052}{5,57} = 0,0093 \text{ m} = 0,93 \text{ cm}$$

Os valores obtidos para o Ensaio 7 são mais elevados que os obtidos para o Ensaio 6, na proporção seguinte:

Método de Kreft e Zuber:

$$\alpha_L: C_1 = \frac{8,56 - 6,00}{6,00} \times 100\% = 42,7\%$$

$$\alpha_L: C_2 = 42,6\%$$

Método de Neretnieks:

$$\alpha_L: C_3 = 31,3\%$$

$$\alpha_L: C_4 = 32,3\%$$

onde

α_L = dispersividade longitudinal calculada para a distância de ensaio de 0,21 m.

α_{Lc} = dispersividade longitudinal corrigida calculada para a distância de ensaio fictícia de $5,57 \cdot 0,21$ m.

Em termos de valores médios da dispersividade longitudinal obtém-se um valor 42,7% superior do Ensaio 7 em relação ao Ensaio 6, no método de Kreft e Zuber, e 31,8% no método de Neretnieks. Com base nesses valores obtém-se um valor global médio mais elevado de 37,3% para a dispersividade longitudinal calculada pelo Ensaio 7 (sulforodamina B) em relação ao valor calculado pelo Ensaio 6 (NaCl).

Os valores obtidos para a velocidade do escoamento nos dois ensaios são substancialmente diferentes:

Ensaio 7:

Método de Kreft e Zuber:

$$V = 0,341 \text{ m/dia}$$

Método de Neretnieks:

$$V = 0,138 \text{ m/dia}$$

Ensaio 6:

Método de Kreft e Zuber:

$$V = 0,817 \text{ m/dia}$$

Método de Neretnieks:

$$V = 0,519 \text{ m/dia}$$

A relação das velocidades, do Ensaio 7 face ao Ensaio 6, é a seguinte:

Método de Kreft e Zuber:

$$C_1 = \frac{0,341 - 0,8160}{0,8166} \times 100\% = -58,2\%$$

Método de Neretnieks:

$$C_2 = -63,8\%$$

Obtém-se assim um valor médio de -61,0%, ou seja a velocidade do escoamento calculada com os resultados do Ensaio 7 (sulforodamina B) é em média 61,0% inferior à velocidade calculada com os resultados do Ensaio 6 (NaCl).

Em KLOTZ 1982b apresenta-se um método diferente de relacionar as velocidades do escoamento. Um traçador ideal segundo esse autor deve ter um factor de retardamento (RD) de 1,0. O factor de retardamento é definido como a relação entre a velocidade real do escoamento (V_a) e a velocidade aparente do traçador (V_t)

$$R_D = \frac{V_a}{V_t} \quad (5.30)$$

As velocidades são calculadas pela velocidade do centro de gravidade da curva de concentração no tempo. O centro de gravidade, no eixo dos tempos (T), é dado pela variável $m_{1,t}$ do método dos momentos:

$$T = m_{1,t} = \frac{\int_0^{\infty} t C(x, t) dt}{\int_0^{\infty} C(x, t) dt} \quad (5.31)$$

V é igual a

$$V = \frac{x}{T} \quad (5.32)$$

sendo x a distância percorrida pelo poluente no ensaio.

Para o NaCl obteve-se:

$$T = 0,4045 \text{ dias}$$

Para a sulforodamina B obteve-se:

$$T = 1,11717 \text{ dias}$$

KLOTZ 1982a analisou o Cl⁻ e o Na⁺ e verificou que ambos os elementos se comportam como traçadores ideais, apresentando factores de retardamento unitários. Os valores calculados para a sulforodamina B podem assim ser comparados com os obtidos com o

NaCl. O factor de retardamento da sulforodamina B é, no Ensaio 7, o seguinte:

$$R_D = \frac{V_r}{V_t} = \frac{\frac{x}{t_r}}{\frac{x}{t_t}} = \frac{t_t}{t_r} = \frac{1,11717}{0,4045} = 2,76$$

Este valor é semelhante aos valores tabelados em KLOTZ 1982a.

Uma outra variável apresentada em KLOTZ 1982a é denominada coeficiente de distribuição, K_D . Caracteriza a adsorção reversível. Para o Cl^- e o Na^+ os valores experimentais obtidos por esse autor foram de 0,00, o que também caracteriza os traçadores como traçadores ideais. K_D está relacionado com o factor de retardamento R_D pela seguinte expressão:

$$R_D = 1 + \frac{\gamma}{n} K_D \quad (5.33)$$

onde

γ = massa volúmica aparente do meio poroso

n = porosidade total

Considerando para γ um valor de 1,81 g/cm³ e para n um valor de 31% (RODRIGUES 1981) vem para K_D

$$K_D = \frac{n}{\gamma} (R_D - 1) = \frac{0,31}{1,81} (2,76 - 1) = 0,30 \quad (5.34)$$

Como se indicou, alguns dos programas apresentados no

Capítulo 4 permitem a inclusão de variáveis de transporte e de decaimento semelhantes ao factor de retardamento. Refere-se como exemplo o programa RANDOM.FOR.

O estudo do problema das permutas físico-químicas e do transporte de poluentes em aquíferos vem desenvolvido em LALLEMAND-BARRES et al. 1981. Nesse trabalho estudam-se várias leis de permuta e desenvolve-se a análise de um modelo matemático que permite o traçado de ábacos adimensionais que evidenciam a influência dos parâmetros do transporte de poluentes. As curvas que melhor se ajustam ao comportamento obtido para o NaCl e para a sulforodamina B, nos Ensaio 6 e 7, vêm representadas numa figura correspondente a "permutas lineares com cinemática linear" sendo os valores mais ajustáveis a esta análise os que correspondem ao produto unitário das variáveis C_a e N_e , por exemplo $C_a = 1,0$ e $N_e = 1,0$ ou $C_a = 0,5$ e $N_e = 2,0$ ou ainda $C_a = 2,0$ e $N_e = 0,5$. As variáveis C_a e N_e caracterizam respectivamente a capacidade de retenção do meio poroso e N_e o número de permutas entre o meio poroso e o meio líquido. Os autores apresentam ainda um sistema de duas equações diferenciais que permite resolver o problema do transporte. Uma das equações apresentadas é a equação da convecção-dispersão para a fase líquida, estudada no Capítulo 4. A outra equação representa a variação da concentração do poluente na fase sólida.

A modelação matemática do transporte de poluentes em águas subterrâneas, em regime variável, incluindo as componentes de adsorção vem também desenvolvida em FLUHLER e JURY 1983. Descrevem-se nessa publicação três modelos de diferenças finitas adequados ao estudo de problemas deste tipo.

5.6 - Extrapolação da dispersividade longitudinal para uma escala regional

A dispersividade longitudinal foi durante algum tempo considerada uma característica intrínseca do meio poroso, independente da distância percorrida pelo poluente.

O desenvolvimento das técnicas experimentais de injeção e detecção de traçadores, permitiu observar que o efeito de escala influi significativamente nos valores observados.

A comparação dos valores experimentais com os valores calculados a partir de situações hidrogeológicas reais permitiu também observar as enormes diferenças, de algumas ordens de grandeza, existentes entre os dois valores. GOBLET 1984, por exemplo, indica que as experiências de traçadores com distâncias de percurso da ordem de 1 m permitem obter dispersividades de 1 cm. Experiências entre 10 e 100 m fornecem valores da ordem de 1 m. Poluições regionais de quilómetros mostram dispersividades por vezes da ordem das centenas de metros.

Neste ponto analisa-se a extrapolação dos valores calculados em 5.5.2 com base nos resultados experimentais, para uma escala regional, de modo a permitir o desenvolvimento do estudo do Capítulo 6.

É importante ter uma noção geral dos valores apresentados para a dispersividade longitudinal na literatura da especialidade. Relembrem-se, para efeitos de comparação, os valores calculados em 5.5 para os Ensaios 1, 2 e 6.

No Ensaio 1, com uma distância de ensaio de 25 m, os valores da dispersividade longitudinal obtidos pelos vários métodos de cálculo situaram-se entre os seguintes valores:

$$0,133 \text{ m} < \alpha_L < 1,291 \text{ m}$$

Calculou-se um valor médio de 0,514 m para a dispersividade longitudinal.

No Ensaio 2, com uma distância de ensaio de 15 m, os valores obtidos situaram-se entre os seguintes:

$$0,507 \text{ m} < \alpha_L < 0,654 \text{ m}$$

Saliente-se no entanto as reservas que se apresentaram, em 5.5.2, ao cálculo destes valores, devido à velocidade do escoamento ser fortemente crescente neste ensaio.

Finalmente nos Ensaios 3 e 6, com distâncias de ensaio de cerca de 0,25 m, os resultados médios obtidos foram os seguintes:

$$\text{Ensaio 3: } \alpha_L = 3,7 \text{ cm}$$

$$\text{Ensaio 6: } \alpha_L = 5,2 \text{ cm}$$

Com as correções indicadas em 5.5.2, motivadas pelas elevadas velocidades de injeção, as dispersividades calculadas foram as seguintes:

$$\text{Ensaio 3: } \alpha_L = 0,27 \text{ cm}$$

$$\text{Ensaio 6: } \alpha_L = 1,01 \text{ cm}$$

Na pesquisa bibliográfica efectuada observou-se uma elevada "dispersão" de valores de dispersividades, apresentadas para meios porosos.

Em UNESCO 1980 apresentam-se resultados de vários estudos de injeções de traçadores em meios porosos, para o cálculo de dispersividades, que permitiram obter resultados situados entre os seguintes valores:

$$0,08 \text{ m} < \alpha_L < 15,2 \text{ m}$$

Os valores das dispersividades aplicadas para a modelação de zonas contaminadas em meios porosos, apresentados nessa publicação, situam-se entre os seguintes:

$$12 \text{ m} < \alpha_L < 61 \text{ m}$$

ZUBER 1984 refere um ensaio experimental realizado com captações situadas a 8 m de distância. Os resultados a que chegou, em função dos métodos de análise das curvas de concentração utilizados, situaram-se entre os seguintes valores:

$$0,12 \text{ m} < \alpha_L < 0,50 \text{ m}$$

Para estudos de poluições regionais ZUBER 1984 refere os seguintes valores limites de dispersividades longitudinais regionais:

$$20 \text{ m} < \alpha_L < 55 \text{ m}$$

FRIED 1975 refere-se também a vários estudos de contaminação de águas subterrâneas. Apresenta valores situados entre os seguintes:

$$4,25 \text{ m} < \alpha_L < 15 \text{ m}$$

SEILER e ALEXANDER 1982 (referindo-se a estudos sobre bactérias em águas subterrâneas) indicam, para traçadores conservativos, dispersividades situadas entre os seguintes valores:

$$1,5 \text{ m} < \alpha_L < 3 \text{ m}$$

Em ensaios experimentais efectuados à escala de 1 m, KLOTZ 1982b apresenta valores de dispersividades longitudinais de:

$$\alpha_L = 0,33 \text{ cm}$$

DROST et al. 1982 apresentam valores para distâncias de ensaio de 0,5 m de aproximadamente:

$$\alpha_L = 0,6 \text{ cm}$$

BEHRENS e SEILER 1982b apresentam resultados experimentais de dispersividades longitudinais para distâncias que variam entre 4 m e 1000 m de:

$$1 \text{ m} < \alpha_L < 50 \text{ m}$$

TROISI et al. 1984 apresentam um estudo experimental a partir do qual chegam a um valor da dispersividade de:

$$\alpha_L = 2,3 \text{ m}$$

MOLZ et al. 1983 desenvolvem um estudo teórico sobre o efeito da escala de ensaio no valor da dispersividade. Referem valores de dispersividades longitudinais de:

$$\alpha_L = 49,5 \text{ m}$$

Considerando valores de dispersividades transversais iguais a 1/20 dos valores das dispersividades longitudinais chegam a valores teóricos de dispersividades longitudinais mais elevados:

$$\alpha_L = 90,0 \text{ m}$$

Os valores calculados em 5.5.2 inserem-se bem na gama dos valores das dispersividades acabadas de citar. Consideram-se assim validados pela análise comparativa efectuada os valores das dispersividades longitudinais calculadas para o aquífero das areias brancas de Rio Maior, para as escalas de 0,25, 15 e 25 m.

Em seguida ir-se-á extrapolar o valor (médio) obtido para a dispersividade longitudinal do Ensaio 1, na distância de 25 m, igual a

$$\alpha_L = 0,514 \text{ m}$$

para uma escala regional (4 km).

A bibliografia sobre o assunto é reduzida e recente. Foram analisados os seguintes publicações: BEHRENS e SEILER 1982b, DROST et al. 1982, DAGAN 1982a, DAGAN 1982b, MOLZ et al. 1983,

SHATTACHARYA e GUPTA 1983, GELHAR e AXNESS 1983, DAGAN 1984 e GUVEN et al. 1984.

Os métodos apresentados por esses autores agrupam-se em três classes diferentes:

- a) Leis experimentais: com base em ensaios experimentais propõem leis para a extrapolação de valores da dispersividade local.
- b) Análise estocástica: analisando as condutividades hidráulicas do aquífero extrapolam os valores da dispersividade local, pressupondo que a variação da condutividade influencia os valores da dispersividade.
- c) Análise da dispersividade transversal vertical: analisando a condutividade hidráulica vertical, associam-na à dispersividade vertical e extrapolam-na para uma dispersividade longitudinal regional.

O método experimental a) foi desenvolvido por BEHRENS e SEILER 1982b e é aplicado a meios porosos (areias), semelhantes ao de Rio Maior, por DROST e al. 1982.

Baseando-se numa análise experimental os autores propõem a seguinte lei:

$$\alpha_L = C_1 L^{C_2} \text{ (m)} \quad (5.35)$$

onde α_L é a dispersividade longitudinal, L é a distância de ensaio em m, e C_1 e C_2 são duas constantes experimentais. Os

estudos desses autores permitiram concluir que a variável C_2 é praticamente contante e igual a 0,72. A variável C_1 é função das características do meio poroso e deve ser obtida experimentalmente.

Utilizando os resultados do Ensaio 1 e considerando uma distância de ensaio, correspondente ao comprimento das linhas de fluxo médias, desde a fronteira de montante do aquífero até à captação B5, de 4 km, obtêm-se os seguintes resultados:

Ensaio 1:

Distância de ensaio: = 25 m

Dispersividade longitudinal = 0,514 m

$$\alpha_L = C_1 L^{0.72} \quad (5.36)$$

$$C_1 = \frac{\alpha_L}{L^{0.72}} = \frac{0,514}{25^{0.72}} = 0,05063$$

Para $L = 4000$ m vem então

$$\begin{aligned} \alpha_L &= 0,05063 \cdot 4000^{0.72} \text{ m} \\ &= 19,86 \text{ m} \end{aligned}$$

Considerando uma velocidade média do escoamento de 0,25 m/dia obtém-se para a dispersão regional o seguinte valor:

$$DL = \alpha_L V = 19,86 * 0,25 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$= 4,96 \text{ m}^2/\text{dia}$$

O método b) é abordado, de forma diversa, por DAGAN 1982b e 1984 e por GELHAR e AXNESS 1983.

A variação da condutividade hidráulica (K) do aquífero é considerada função do vector de posição (x):

$$Y=f(x)=\ln (K(x)) \quad (5.37)$$

$f(x)$ é expresso em termos do seu valor médio $\bar{f}(x)$ e de uma perturbação $f'(x)$:

$$f(x)=\bar{f}(x)+f'(x) \quad (5.38)$$

Considera-se ainda que a (esperança matemática) $E [f'(x)] = 0$ e que $f(x)$ é um campo aleatório tridimensional, estatisticamente homogéneo, caracterizado pela função covariância R (MOOD e GRAYSILL 1963). GELHAR e AXNESS 1983 e DAGAN 1984 chegam, a partir desses pressupostos, a expressões complexas, diferentes, que permitem obter resultados semelhantes para as dispersividades regionais.

A expressão final (não apresentada explicitamente pelos autores) é a seguinte:

$$\alpha_L = \sigma_y^2 l_y \quad (5.39)$$

onde ly é a escala linear integral de Y' , sendo Y' a diferença entre cada valor Y da equação 5.37 e a média de todos os valores de Y em análise. σ_y^2 é a variância de todos os valores de Y em análise.

A complexidade dos desenvolvimentos matemáticos apresentados pelos autores não permite a sua apresentação, de modo simplificado, neste ponto. Sugere-se ao leitor interessado a consulta dos artigos referidos.

Para o desenvolvimento do método utilizaram-se os valores das condutividades hidráulicas apresentadas em RODRIGUES e OLIVEIRA 1980 e RODRIGUES 1981 para o aquífero das areias brancas de Rio Maior, calculados a partir de ensaios de bombagem efectuados nas captações locais denominadas B3, B4 e B5. Os resultados apresentados são os seguintes:

B3:

$$KB3 = 4,76 \text{ m/dia}$$

B4:

$$KB4 = 5,4 \text{ m/dia}$$

B5:

$$KB5 = 5,7 \text{ m/dia} \quad \text{ou}$$

$$KB5 = 8,0 \text{ m/dia}$$

Os dois valores apresentados para a captação B5 foram calculados de modo diferente. No primeiro caso considerou-se que o aquífero é livre (em B5) e que a espessura saturada é de 75 m.

No segundo caso considerou-se que existe uma camada semiconfinante, local, superior e que a espessura saturada do aquífero das areias brancas é de apenas 50 m. Para a análise que se segue consideraram-se em separado as duas hipóteses.

As distâncias que separam as captações são as seguintes:

$$d1 = 33-34 = 1855 \text{ m}$$

$$d2 = 33-85 = 2745 \text{ m}$$

$$d3 = 34-85 = 1810 \text{ m}$$

Os logaritmos das condutividades hidráulicas, (para a segunda hipótese de K85), são os seguintes:

$$B3: \quad Y1 = \ln(4,76) = 1,56$$

$$B4: \quad Y2 = \ln(5,4) = 1,69$$

$$B5: \quad Y3 = \ln(8,0) = 2,08$$

A média dos valores de Y é de

$$m_y = 1,78$$

A variância dos mesmos valores é de

$$\sigma_y^2 = 0,073$$

As diferenças de Y' entre cada valor de Y e a média m_y são de:

$$Y' = Y - m_y$$

$$Y'_{B3} = -0,22$$

$$Y'_{B4} = -0,09$$

$$Y'_{B5} = 0,30$$

A função de covariância R toma os seguintes valores:

$$R_{B4-B5} (1810) = 0,027$$

$$R_{B3-B4} (1855) = 0,0198$$

$$R_{B3-B5} (2745) = 0,066$$

O valor das escalas lineares integrais de Y' são dados por:

$$ly = \frac{d}{\ln(R)} \quad (5.40)$$

onde

d é a distância que separa as captações

R é a função covariância

Vem então

$$ly_1 = \frac{1855}{\ln(0,0198)} = 472,96 \text{ m}$$

$$ly_2 = \frac{2745}{\ln(0,066)} = 1009,90 \text{ m}$$

$$ly_3 = \frac{1810}{\ln(0,027)} = 501,12 \text{ m}$$

A média dos valores de ly é de 661,3 m. O valor da dispersividade longitudinal regional é assim de:

$$\begin{aligned} \alpha_L &= \sigma_y^2 ly & (5.41) \\ &= 0,073 \times 661,3 \text{ m} \\ &= 48,3 \text{ m} \end{aligned}$$

Considerando a velocidade do escoamento subterrâneo V igual a 0,25 m/dia, a dispersão longitudinal do aquífero é de:

$$\begin{aligned} D_L &= \alpha_L V \\ &= 48,3 \times 0,25 \text{ m}^2/\text{dia} \\ &= 12,1 \text{ m}^2/\text{dia} \end{aligned}$$

Utilizando o segundo valor calculado para a condutividade hidráulica da captação B5:

$$KB5 = 5,7 \text{ m/dia}$$

O valor da dispersividade regional calculado é de apenas:

$$\alpha_L = 3,45 \text{ m}$$

e o valor da dispersão regional, para a mesma velocidade de escoamento 0,25 m/dia, é neste caso de:

$$\begin{aligned} DL &= 3,45 \times 0,25 \text{ m}^2/\text{dia} \\ &= 0,86 \text{ m}^2/\text{dia} \end{aligned}$$

Deve salientar-se que a disparidade dos valores calculados se deve ao número exíguo de locais do aquífero onde se conhece a condutividade hidráulica K. Incertezas do tipo da que se apontou ficariam diluídas no tratamento matemático se o número de variáveis em análise fosse adequado. Aliás com apenas três locais de ensaio é natural que todo o cálculo deva ser apenas considerado como rudimentarmente aproximado e sem um significado estatístico correcto. Repare-se que se extraíram médias e variâncias, das grandezas em análise, com apenas três valores. Por esse motivo qualquer pequena alteração de um dos valores, por exemplo a condutividade hidráulica na captação 85, afecta imediatamente e de modo significativo os valores calculados. No caso do aquífero das areias brancas de Rio Maior a análise poderá mesmo assim ter algum significado devido à grande homogeneidade do aquífero.

Os valores das dispersividades regionais calculados pelo método proposto por DAGAN 1984 e pelo método proposto por GELHAR e AXNESS 1983 são iguais.

A análise pelo método c) (segundo MOLZ et al. 1983 e GUVEN et al. 1984) não foi possível por desconhecimento do perfil vertical de condutividades e do valor da dispersividade transversal do aquífero de Rio Maior. As suposições efectuadas (perfil parabólico e $\alpha_T/\alpha_L = 0,10$) não permitiram a obtenção de valores de dispersividades regionais superiores às dos ensaios, mesmo para distâncias de 4 km. O valor obtido para essa distância foi de:

$$\alpha_L = 2,60 \text{ m}$$

Considerando uma velocidade média do escoamento subterrâneo (V) do aquífero de Rio Maior de 0,25 m/dia a dispersão longitudinal regional seria (apenas) de:

$$DL = \alpha_L V = 2,60 * 0,25 = 0,65 \text{ m}^2/\text{dia}$$

Os valores anteriormente calculados pelos dois primeiros métodos são os seguintes:

a) Método experimental:

$$\alpha_L = 19,86 \text{ m}$$

$$DL = 4,96 \text{ m}$$

b) Método estocástico:

b1. Condutividade hidráulica no 85 = 8,0 m/dia

$$\alpha_L = 48,30 \text{ m}$$

$$DL = 12,08 \text{ m}$$

b2. Condutividade hidráulica no 85 = 5,7 m/dia

$$\alpha_L = 3,45 \text{ m}$$

$$DL = 0,86 \text{ m}^2/\text{dia}$$

b3. Valores médios:

$$\alpha_L = 25,88 \text{ m}$$

$$DL = 6,47 \text{ m}$$

Devido à carência de dados os resultados obtidos pelo método b) apenas servem para efectuar uma primeira comparação com os obtidos pelo método a).

Os resultados que se consideraram adequados para a análise que se desenvolve no Capítulo 6 são os seguintes:

1. Os obtidos pelo método de cálculo a):

$$\alpha_L = 19,86 \text{ m} \approx 20,0 \text{ m}$$

$$DL = 4,96 \text{ m}^2/\text{dia} \approx 5,0 \text{ m}^2/\text{dia}$$

2. Um valor duplo do anterior, admitido como limite superior (equivalente ao obtido pelo método b1):

$$\alpha_L = 2 * 20,0 \text{ m} = 40,0 \text{ m}$$

Repare-se finalmente que o primeiro valor calculado para a dispersividade regional do aquífero de Rio Maior (que se considera o mais representativo) se situa na gama dos valores apresentados em UNESCO 1980:

$$12 \text{ m} < \alpha_L = 20,0 \text{ m} < 61 \text{ m}$$

e em ZUBER 1984:

$$20 \text{ m} < \alpha_L = 20,0 \text{ m} < 55 \text{ m}$$

sendo o segundo valor aproximadamente igual à média dos valores limites apresentados nessas publicações.

O efeito da variável dispersividade transversal, não quantificada nos ensaios de tracadores realizados em Rio Maior, será analisado no ponto 6.4.5.

6. DESENVOLVIMENTO DE UM ESTUDO DE POLUIÇÃO DE ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

6.1 - Introdução

O objectivo deste capítulo é expor uma aplicação dos métodos matemáticos e experimentais descritos nos Capítulos 4 e 5. A aplicação será exemplificada pelo estudo de uma situação potencial de poluição de águas subterrâneas.

Não se pretendeu resolver qualquer caso real de poluição mas sim aplicar as metodologias descritas a uma situação hidrogeológica real. Ir-se-ão definir cenários de poluição de águas subterrâneas com características reais. Os resultados que se obtiverem, serão os esperados, se as decisões que vierem a ser tomadas superiormente, forem semelhantes às consideradas para os cenários idealizados. A análise desses resultados permite obter uma visão aproximada dos efeitos (nocivos) de impacto ambiental esperados, simplificando naturalmente as tomadas de decisão e permitindo uma gestão futura, do empreendimento, mais realista.

Sendo o objectivo do capítulo a exemplificação de metodologias, não se teve uma preocupação excessiva com o refinamento da malha dos modelos matemáticos, no sentido de se obterem os resultados mais precisos. Isso sobrecarregaria desnecessariamente os custos do estudo. O desenvolvimento de um estudo (mais) rigoroso não oferece dificuldades significativas, após a realização da presente tese.

Estudos práticos deste tipo eram ainda inéditos em Portugal. A nível internacional têm vindo a assumir crescente importância. Efectuou-se, uma análise bibliográfica dos trabalhos desenvolvidos recentemente em diversas áreas da engenharia, sobre a poluição das águas subterrâneas. Além das referências citadas nos capítulos anteriores, nomeadamente FRIED 1975 e UNESCO 1980, salientam-se as seguintes:

- a) Colectâneas gerais: EVERETT 1980 e CIHS 1981.
- b) Estudos relacionados com a engenharia sanitária de aglomerados populacionais: NILSSON e ENGLÖV 1979, BAEDECKER e BACK 1979, LEWIS et al. 1982, FINNEMORE e HANTZSCHE 1983, ERDOGAN e NEUFELD 1983, BEDINT et al. 1983 e WARD 1985.
- c) Estudos relacionados com a indústria e minas: WILLIAMS 1975, GOODMAN e CHADWICK 1978, JENKINS e SCHJODTZ HANSEN 1983, VALKOVIC 1983, DIERSCH e KADEN 1984.
- d) Estudos com interesse para a agricultura e para a gestão de recursos hídricos: KABATA-PENDIAS e PENDIAS 1984 e KADEN et al. 1985a.

Os estudos referidos permitem a consideração de situações específicas não incluídas no exemplo que se apresenta neste capítulo, mas que poderão ser importantes para a resolução de estudos a desenvolver no futuro.

6.2 - Seleccção do estudo a desenvolver

Para a selecção do estudo que se desenvolve nos pontos seguintes efectuou-se uma análise de regiões nacionais com problemas de poluição de águas subterrâneas, actuais ou potenciais. Dos casos analisados salientam-se os seguintes:

- a) Aquifero de Rio Maior: exploração dos jazigos de lenhites para queima na central térmica projectada para Rio Maior, e deposição posterior de cinzas em áreas (esgotadas) da mina. (Problema potencial).
- b) Aquifero da Ria de Aveiro: poluição industrial provocada pela rejeição de efluentes industriais tóxicos em valas e esteiros, não revestidos, na região de Estarreja. (Problema actual).
- c) Caldas de S. Jorge (Vila da Feira): poluição industrial provocada pela rejeição de efluentes industriais tóxicos originados por fábrica de brinquedos que utilizam o processo de cromagem e niquelagem. (Problema actual).
- d) Águas subterrâneas salinizadas a nordeste de Portimão. Fenómeno provocado por lixiviação de depósitos naturais de sal-gema. (Situação natural).
- e) Contaminação de águas subterrâneas provocadas por aterros sanitários nos conselhos do Seixal e de Sines. (Problema actual).

De entre os casos citados destaca-se, com características ímpares, para o desenvolvimento dos estudos que se apresentam nos Capítulos 5 e 6, o do aquífero de Rio Maior. Os principais motivos que levaram à sua selecção foram os seguintes:

- a) Existência de um conjunto importante de captações e de piezómetros, totalmente penetrantes no aquífero, construídos para a realização de estudos de investigação aplicada.
- b) Existência de um projecto nacional de grandes dimensões, ainda não concretizado, com interferência na quantidade e na qualidade dos recursos hídricos subterrâneos regionais.
- c) Existência de vários estudos referentes à caracterização geológica, hidrológica e hidrogeológica do aquífero.
- d) Interesse no estudo e colaboração em equipamento e pessoal, em Rio Maior, por parte das entidades responsáveis pelo empreendimento e pelo abastecimento de água à cidade (EDP e Câmara Municipal de Rio Maior)
- e) Existência de um aquífero poroso com características importantes de homogeneidade e de dimensões apreciáveis.

Em relação aos restantes casos analisados a situação era francamente mais desfavorável.

Para o caso b) o problema principal relacionava-se com a falta de dados hidrogeológicos, o que dificultaria o cálculo

correcto do campo de velocidades do escoamento subterrâneo. Tal estudo encontra-se actualmente em realização por docentes da Universidade de Aveiro. Será inserido, em 1986, no programa do convénio existente entre o LNEC e essa Universidade.

Em relação ao caso c) a situação é semelhante à anterior, apresentando-se agravada pelo facto do meio subterrâneo ser fracturado, possuindo numerosas descontinuidades. A camada porosa é muito reduzida, o que dificultaria significativamente a realização do estudo que se pretendia desenvolver.

O caso d) adequa-se mais à realização de estudos sobre o equilíbrio geoquímico de águas subterrâneas, por se tratar de um caso de deterioração natural da qualidade das águas subterrâneas. Poderia, no entanto, ter sido estudado pelos métodos expostos.

Os casos referidos em e) além de apresentarem os problemas do caso b) só foram conhecidos relativamente tarde. Os estudos parecem no entanto interessantes e de realização possível.

No ponto seguinte apresenta-se a caracterização geral do aquífero de Rio Maior e do seu problema de poluição.

6.3 - Caracterização geral do aquífero de Rio Maior e do seu problema de poluição de águas subterrâneas

O "Empreendimento de Rio Maior", da Electricidade de Portugal, E.P., consiste fundamentalmente na exploração em mina a céu aberto dos jazigos de lenhites existentes na região de Rio Maior, para queima do carvão extraído na central térmica projectada também para Rio Maior. O empreendimento envolvendo um elevado investimento favorece a utilização dos recursos mineiros nacionais, durante 25 ou 50 anos em função da taxa de exploração das lenhites. Foram realizados vários estudos sectoriais

necessários à concretização do projecto. O LNEC foi contactado pela EDP para o desenvolvimento de estudos geotécnicos, hidrogeológicos e hidrológicos das bacia hidrográfica do rio Maior, principalmente das zonas abrangidas pelos jazigos de lenhites e das zonas vizinhas. Foram publicados pelo LNEC os seguintes relatórios:

- . Estudos hidrogeológicos: RODRIGUES e OLIVEIRA 1978, RODRIGUES e OLIVEIRA 1980 e RODRIGUES 1981.
- . Modelação matemática do escoamento subterrâneo: CORREIA 1981.
- . Estudos hidrológicos: ABECASIS 1978 e FERREIRA 1982b.
- . Estudos geotécnicos: RODRIGUES E CORREIA 1981.

A.CAVACO 1979 descreve as sondagens e os furos de captação e de observação, necessários ao desenvolvimento dos estudos apresentados nesses relatórios.

Os relatórios descrevem em pormenor o aquífero das areias brancas de Rio Maior e o aquitardo constituído pelo complexo carbonífero-diatomítico que contém os jazigos de lenhites. Quantificam as piezometrias regionais e o escoamento subterrâneo e caracterizam as fronteiras hidrogeológicas.

Não será necessário descrever em pormenor as características do aquífero. Apresentar-se-ão apenas as características consideradas de maior relevo para os estudos do transporte de poluentes que se desenvolve.

Na Fig. 6.1, retirada de ABECASIS 1978, apresenta-se a bacia hidrográfica do rio Maior, numa secção do rio localizada 3 km a jusante da cidade de Rio Maior (secção do Moinho do Nogueira). Nessa figura apresenta-se a topografia, a hidrografia, as falhas geológicas, a zona de calcários da serra dos Candeeiros, a zona de lenhites e a zona das Marinhas (referida no Capítulo 5 para a captação de águas salgadas para os ensaios de tracadores).

Na Fig. 6.2, retirada de RODRIGUES e OLIVEIRA 1978, apresenta-se a carta hidrogeológica, da região de Rio Maior. A área com interesse para o estudo que se desenvolveu inclui as zonas com "cobertura semi-permeável capacitativa sobre o aquífero semi-cativo" que corresponde ao complexo carbonífero-diatomítico que contém os jazigos de lenhites, e ainda a zona com o "aquífero com toalha livre (zona de alimentação)", incluindo o "aquífero dependente da linha de água e em continuidade com o aquífero encaixante". A área do estudo é confinada pelo "limite de alimentação contínuo ou descontínuo em condição de fluxo de um aquífero livre por um macico semi-permeável com carga superior", que corresponde (parcialmente) ao aquífero livre das areias brancas (cauliníferas), estudado no Capítulo 5. Este aquífero estende-se por baixo do complexo cativo, tendo nessa zona uma possança média pouco variável, de aproximadamente, 100 m.

O aquífero das areias brancas, que têm uma dimensão média de 0,5 a 1 mm de diâmetro, encontra-se semi-confinado junto ao rio Maior por uma camada de argilas, situada a uns 25 m da superfície. Essa zona é no entanto de pequena importância para o estudo. As condutividades hidráulicas do aquífero das areias brancas são de 4,76 m/dia na parte NW da bacia, de 5,4 m/dia na parte SE e de 5,7 ou de 8,0 m/dia junto ao rio Maior (zona da captação B5). A diferença existente entre estes dois últimos

valores depende de se considerar ou não a existência da camada semi-confinante das argilas. RODRIGUES 1981 indica que o valor da condutividade hidráulica, desta última zona, se deve situar entre 5,7 e 6 m/dia, sendo a transmissividade de 400 m²/dia. O coeficiente de armazenamento dessa zona é de $S = 0,83 \times 10^{-3}$ e o da zona confinada pelo complexo carbonífero-diatomítico é de $1,2 \times 10^{-3}$.

A porosidade total do aquífero das areias brancas é de 31%, a retenção específica é de 20% e a cedência específica é de 11%. RODRIGUES 1981 considera ainda a existência de uma fracção silto-argilosa que pode influir no "comportamento hidrogeológico dos materiais".

Expõem-se em seguida os problemas potenciais de poluição do aquífero das areias brancas e o da eventual contaminação da captação B5, que abastece, maioritariamente, a cidade de Rio Maior.

O complexo carbonífero-diatomítico será explorado por uma mina a céu aberto, para extracção de lenhites. Durante a exploração da mina serão rebaixados os níveis piezométricos das zonas de escavação e das zonas adjacentes. Parte dos volumes bombeados servirão para arrefecimento do equipamento da central térmica, projectada para Rio Maior, onde serão queimadas as lenhites extraídas. Os volumes de água proveniente das bombagens, incluindo os volumes rejeitados pela central serão descarregados no rio Maior.

As cinzas produzidas pela central térmica e parte dos estéréis provenientes da exploração serão posteriormente depositados em áreas esgotadas da mina. Esta hipótese constituirá a base dos cenários estudados no ponto seguinte.

Salienta-se que a decisão de deposição das cinzas nas áreas esgotadas da mina ou em áreas vizinhas não foi comunicada oficialmente ao LNEC pela EDP. Os cenários que se apresentam são hipóteses de trabalho, que podem vir a ser concretizadas no futuro, caso as entidades responsáveis pelo empreendimento tomem decisões nesse sentido. Nesse caso um primeiro factor de poluição das águas subterrâneas será originado pela lixiviação das cinzas, motivado por infiltração pluvial, seguida da recarga profunda do aquífero. A quantificação desses valores é apresentada em FERREIRA 1982b.

Repare-se que o rebaixamento dos níveis piezométricos durante a fase de exploração da mina impedirá o arraste dos produtos lixiviados das cinzas pelo aquífero, uma vez que estes mesmo percolando pelo aquífero cativo (subjacente à mina) são captados em seguida. Provoca-se no entanto uma degradação assentuada da qualidade das águas subterrâneas, dessas zonas do aquífero, durante o período de exploração da mina.

Após o esgotamento das reservas carboníferas a situação inverte-se, passando a haver simultaneamente com a lixiviação das cinzas escoamento subterrâneo dos poluentes pelo aquífero, uma vez que se deixaram de efectuar captações de águas subterrâneas para o rebaixamento dos níveis piezométricos.

Um outro fenómeno que preocupa os técnicos de empreendimentos (internacionais) semelhantes ao de Rio Maior refere-se à infiltração de águas ácidas, provenientes da drenagem das minas.

O tratamento desses assuntos vem desenvolvido em LUCKNER et al. 1985, KADEN et al. 1985a, KADEN et al. 1985b, ODENDAAL 1982, JENKINS e SCHJODTZ HANSEN 1983, VALKOVIC 1983, CIHS 1981,

GOODMAN e CHADWICK 1978 e WILLIAMS 1975. Nessas publicações os autores analisam em pormenor os problemas da qualidade das águas subterrâneas provocadas por actividades mineiras, incluindo as de lenhites. VALKOVIC 1983, JENKINS e SCHOJODTZ HANSEN 1983 e FERNANDEZ-RUBIO 1981 desenvolvem estudos sobre a ocorrência e a concentração de elementos poluentes contidos no carvão e nas suas cinzas. Não é objectivo deste trabalho o estudo desses elementos. Para a exemplificação da aplicação das metodologias desenvolvidas nos Capítulos 4 e 5 bastará a consideração de qualquer um dos numerosos poluentes conservativo ou com decaimento existentes nas cinzas: As, Be, Cd, Co, Cr, Cu, F, Hg, Li, Mn, Mo, Ni, Pb, Sb, U, V, Zn e S.

Refere-se finalmente que os parques de armazenamento de carvão existentes na área da central térmica podem também originar problemas de poluição de águas subterrâneas por lixiviação, se não forem devidamente protegidos e drenados.

No ponto seguinte desenvolver-se-á um estudo da qualidade das águas do aquífero de Rio Maior com base em nove cenários, que incluem três áreas diferentes destinadas ao depósito das cinzas e três taxas de infiltração e recarga de aquíferos de águas de lixiviação das cinzas, função do grau de impermeabilização dos depósitos.

6.4 - Modelação matemática do transporte de poluentes

6.4.1 - Seleção de métodos matemáticos e de programas de computador

Para a selecção dos métodos matemáticos e dos programas de computador mais adequados à resolução do problema do transporte de poluentes, apresentado no ponto 6.3, recorreu-se às Árvores de Decisão desenvolvidas no Capítulo 4 (ponto 4.4.4). Das quatro Árvores que aí se apresentam deve seleccionar-se a Árvore n. 1, desenvolvida para a resolução de problemas relacionados com a "Indústria e Minas". Os condicionalismos físicos e hidrogeológicos do problema são os seguintes:

- a) Depósitos de resíduos sólidos (cinzas).
- b) Depósitos à superfície ou enterrados com infiltração lenta, contínua, por lixiviação.
- c) Poluentes conservativos.
- d) Número de Peclet do escoamento "Alto ou Médio".

$$Pe = \frac{V l}{D} \quad (6.1)$$

$$V = 0,25 \text{ m/dia}$$

$l = 500 \text{ m}$ para a malha dos modelos (estudados no Teste 7 do Capítulo 4)

$$D = 5 \text{ m}^2/\text{dia}$$

$$Pe = \frac{0,25 * 500}{5} = 25$$

$10 < Pe = 25 < 50$, portanto situado entre as classificações "Alto" e "Médio".

Os métodos matemáticos adequados à resolução do problema segundo a Árvore de Decisão n. 1 "Indústria e Minas" são os seguintes:

- a. Método dos elementos finitos
- b. Método das diferenças finitas / Método das características
- c. Soluções analíticas
- d. Método das células de mistura

A escolha final dos programas de computador fica condicionada às restrições de projecto:

- . Precisão de resultados : DISP4.FOR
- . Custos de projecto : KONIK3.FOR
- . Prazos de execução do projecto : SA2D1.FOR/KONIK3.FOR
- . Carência de dados : MIXCEL.FOR

Eliminada a última restrição, uma vez que se possui um conhecimento suficientemente profundo das características hidrogeológicas do aquífero, e ainda a utilização do programa SA2D1.FOR, baseado na resolução de uma solução analítica, não adequada a esta situação real, ficam seleccionados os seguintes programas:

DISP4.FOR

Uma escolha entre os dois programas por "condicionalismos de projecto" não se adequa aos objectivos deste Capítulo 6. Optou-se assim pela aplicação paralela dos dois programas.

6.4.2 - Estudo hidrogeológico

O estudo hidrogeológico do aquífero das areias brancas de Rio Maior é desenvolvido em pormenor nos relatórios do LNEC, referidos em 6.3.

Neste ponto completaram-se esses estudos de modo a permitir a aplicação dos programas apresentados no Capítulo 4 ao estudo do aquífero de Rio Maior (tanto para o Teste 7 como para este capítulo). Parte do trabalho desenvolvido consistiu no cálculo de cartas piezométricas anuais médias, baseadas nos valores apresentados por RODRIGUES 1981. As cartas foram discretizadas em cada nó e em cada centro de célula das malhas dos seguintes modelos:

MIXCEL.FOR

KONIK3.FOR

RANDOM.FOR

DISP1.FOR

DISP2.FOR

DISP3.FOR

DISP4.FOR

Calculou-se para cada um desses pontos (nós e células) a cota do fundo do aquífero, os valores das velocidades intersticiais do escoamento subterrâneo e a sua decomposição segundo os eixos x e y. Para o programa MIXCEL.FOR foi ainda necessário proceder ao cálculo dos volumes hídricos que transitam de célula para célula, das fronteiras de recarga para as células e destas para as fronteiras de descarga. Os valores calculados permitiram o desenvolvimento do Teste 7 apresentado em 4.3.3.3.

Na Fig. 6.3 apresenta-se uma carta do aquífero contendo as linhas equipotenciais da superfície piezométrica anual média, as linhas de nível da base do aquífero e as direcções dos eixos x e y. A diferença de cotas das duas superfícies permitiu o cálculo da espessura saturada em cada nó e em cada célula do aquífero livre. Nas células e nós situados abaixo do complexo carbonífero-diatomítico a espessura saturada foi considerada igual a 100 m.

Para o cálculo das velocidades intersticiais do escoamento subterrâneo considerou-se uma porosidade eficaz de 11%. O cálculo do gradiente hidráulico baseou-se nas linhas equipotenciais traçadas na Fig. 6.3. Utilizou-se no cálculo a velocidade aparente (V_a) de Darcy. Para o cálculo da velocidade intersticial (V_i) considerou-se o valor de cedência específica (S_y) de 11%:

$$V_i = V_a/S_y.$$

6.4.3 - Cenários de gestão

6.4.3.1 - Áreas de depósitos de cinzas

Ir-se-á admitir a hipótese das cinzas provenientes da central térmica virem a ser depositadas em áreas esgotadas da mina, formando parcialmente o aterro necessário para preencher as escavações (alguns com mais de 100 m de profundidade) resultantes da exploração. Mesmo que a escavação não venha a ser totalmente preenchida pelo aterro, por exemplo para a formação de um lago artificial, as hipóteses admitidas continuam a ser válidas se houver a utilização, mesmo que parcial, das cinzas para aterro ou ainda a de qualquer outro material que inclua elementos poluentes lixiviáveis.

Na Fig. 6.4 encontram-se desenhadas as áreas admitidas para depósito de cinzas (sobrepostas à malha do modelo DISP4.FOR). No Cenário 1 considerou-se uma área aproximadamente igual a 0,5x1,0 km². No Cenário 2 duplicou-se, aproximadamente, essa área. No Cenário 3 quadruplicou-se a área inicial. As áreas consideradas são assim, aproximadamente, iguais a:

Cenário 1 : 0,5 km²

Cenário 2 : 1,0 km²

Cenário 3 : 2,0 km²

A análise dos resultados de concentrações, a apresentar em 6.4.5 permite, se necessário, a extrapolação (aproximada) dos resultados obtidos nos três cenários estudados para outros cenários com áreas de aterro diferentes.

6.4.3.2 - Impermeabilização dos depósitos de cinzas

Cada um dos três cenários acabados de apresentar foi completado com três hipóteses de impermeabilização do fundo e das paredes laterais dos aterros contendo as cinzas.

Se houver o cuidado de efectuar uma impermeabilização eficaz das áreas de aterro, como por exemplo, segundo FERNANDEZ-RUBIO 1981, com barreiras de argila, betão, asfalto, latex ou plástico, a infiltração e a recarga dos aquíferos com águas fortemente poluídas será substancialmente reduzida. Para atender a este tipo de situações completou-se cada um dos três cenários apresentados no ponto anterior com três situações diferentes de taxas de infiltração e recarga de aquíferos.

A lixiviação dos poluentes é causada pela parcela de infiltração pluvial que atravessa a camada de solo superficial, sujeito à evapotranspiração, e recarrega o aquífero subjacente.

O estudo das várias variáveis do ciclo hidrológico e em especial das suas componentes subterrâneas vem descrito em FERREIRA et al. 1981. Nesse estudo calculam-se balanços hídricos sequenciais diários que incluem as seguintes variáveis: precipitação, escoamento superficial, evapotranspiração potencial e real, humidade do solo, infiltração superficial e recarga profunda de aquíferos. O modelo matemático desse balanço hídrico serviu de base à elaboração do programa BALSEQ.FOR. O modelo foi inicialmente desenvolvido e aplicado (FERREIRA et al. 1981 e FERREIRA 1982a) para o cálculo das reservas hídricas da ilha do Porto Santo. Posteriormente foi aplicado a regiões mais húmidas como Faro, em FERREIRA 1981, Rio Maior em FERREIRA 1982b, Sines em HENRIQUES e RODRIGUES 1986 e na bacia do rio Ave, em RODRIGUES e FIGUEIREDO 1986.

Em FERREIRA 1982b quantifica-se a "recarga pluvial do

aquífero da bacia hidrográfrica que drena para a mina" (de Rio Maior). O valor calculado para a recarga foi comparado com o valor (implícito) da recarga que origina as superfícies piezométricas levantadas, no campo, por RODRIGUES 1981. A concordância dos valores validou a utilização do modelo para as situações climáticas, de ocupação do solo e do tipo de solo da bacia hidrográfrica de Rio Maior.

Nos cálculos desenvolvidos neste capítulo optou-se, de acordo com FERREIRA 1982b, por uma recarga anual média do aquífero de 187,1 mm. Este valor foi em seguida majorado em cerca de 25% obtendo-se uma taxa de infiltração média diária e uma recarga do aquífero das areias brancas de aproximadamente 1 mm ou seja 1000 m³/km². A majoração de aproximadamente, 1/4 do valor inicial permite a consideração de situações desfavoráveis provenientes de remoções e revolvimentos do terreno natural e da sua substituição por terrenos de aterro ou ainda devidas a modificações no coberto vegetal. A esta taxa de infiltração atribuiu-se um valor relativo de 100(%). Consideraram-se também duas taxas de infiltração correspondentes a percentagens de 50% e 10% desse valor.

Em síntese as três taxas de infiltração consideradas foram as seguintes:

- a) Taxa A: infiltração média diária de 1000 m³/km².
- b) Taxa B: infiltração média diária de 500 m³/km².
- c) Taxa C: infiltração média diária de 100 m³/km².

As taxas B e C correspondem ao efeito benéfico de eventuais

barreiras impermeáveis construídas sobre e em redor do aterro dos depósitos de cinzas ou de modificações, significativas, do escoamento subterrâneo local.

A análise dos valores de concentrações, a apresentar em 6.4.5, permitirá, se necessário, a extrapolação (aproximada) dos resultados obtidos, das três taxas estudadas, para outras taxas correspondentes a valores de infiltração diferentes.

6.4.4 - Malhas e condições de fronteira dos modelos matemáticos

6.4.4.1 - Malhas dos modelos matemáticos

Nas Figs. 4.58 e 4.56 apresentam-se as malhas utilizadas para os modelos DISP4.FOR e KONIK3.FOR. (Estas foram as malhas utilizadas no Ensaio 7 (ponto 4.3.3.3)). Considera-se pouco refinada a malha do programa DISP4.FOR para o desenvolvimento de um estudo rigoroso. Tal não é, no entanto, como se referiu em 6.1 o objectivo principal deste capítulo. Segundo HUYAKORN e PINDER 1983 os espaçamentos considerados para a malha do modelo DISP4.FOR, aproximadamente de 500 m para x e de 500 m para y, deveriam ser 10 vezes menores para as velocidades médias do escoamento consideradas ($V = 0,25$ m/dia) e para as dispersões calculadas ($DL = 5,0$ m²/dia). Os tempos de CPU necessários à execução dos programas com tais malhas e o número de cálculos efectuados (18), que se apresentam em 6.4.5 e 6.4.6, tornaria desnecessariamente elevado o custo da elaboração deste estudo. Repare-se no entanto, que mesmo assim, cada aplicação do programa DISP4.FOR, para os cenários apresentados, demora mais de 1 hora e oito minutos de CPU (1:08:20.03).

Cada célula do programa KONIK3.FOR tem as dimensões aproximadas de 250 mx250 m. O tempo de CPU de cada aplicação é de 5 minutos e 35 segundos (5:37:19).

O passo temporal de cálculo utilizado para o programa DISP4.FOR foi de 50 dias. Os ensaios foram conduzidos até 40 000 dias. Para o programa KONIK3.FOR o passo temporal de cálculo utilizado (que é corrigido automaticamente pelo programa, caso seja demasiado elevado) foi de 250 dias. Os ensaios decorreram também até 40 000 dias.

Para comparação dos resultados eliminou-se a possibilidade de auto-correcção da piezometria que o programa KONIK3.FOR possui (no Teste 7 seguiu-se a mesma metodologia). Recorde-se que este programa além de resolver a equação do transporte resolve também a equação do escoamento.

6.4.4.2 - Condições de fronteira naturais e essenciais

Na Fig. 6.4 indicam-se as fronteiras naturais e essenciais utilizadas para o programa DISP4.FOR. O procedimento seguido para a definição das fronteiras foi o considerado em CORREIA 1981 para o cálculo do escoamento subterrâneo do aquífero de Rio Maior, pelo método dos elementos finitos.

As fronteiras compreendidas entre os nós A e I e os nós B e H foram consideradas impermeáveis (falhas geológicas) tendo sido admitidas velocidades tangenciais à fronteira em cada um desses nós. A fronteira compreendida entre os nós A e B é uma fronteira de recarga tendo a concentração de recarga sido imposta em cada nó igual a zero. A fronteira H - I é uma fronteira de descarga, não tendo sido imposta explicitamente qualquer condição de fronteira. Para o programa KONIK3.FOR seguiu-se um critério

equivalente.

6.4.4.3 - Condições de fluxo e de recarga do aquífero

As condições de fronteira naturais são simuladas no programa KONIK3.FOR, pela existência de uma fiada de células, localizada fora dos limites do aquífero, que possuem transmissividades nulas. Obriga-se assim o escoamento a ser tangencial às fronteiras das células externas, impermeáveis. Para fronteiras impermeáveis consideraram-se as indicadas no ponto anterior.

Para o programa KONIK3.FOR foi admitida uma geração de partículas de concentração nula (fluxo) para a fronteira de recarga, seguindo um procedimento equivalente ao utilizado para o programa DISP4.FOR. A fronteira de descarga foi considerada sumidouro de partículas.

As condições de recarga pluvial do aquífero, devidas à lixiviação de cinzas, foram quantificadas com os valores apresentados em 6.4.3.2 para as três Taxas de infiltração (100%, 50% e 10%): 1000 m³/km², 500 m³/km² e 100 m³/km². Para cada nó do modelo DISP4.FOR situado em áreas de recarga, correspondentes aos Cenários 1, 2 e 3, calculou-se o volume de recarga de acordo com o método dos polígonos de Thiessen e com as taxas de infiltração consideradas. A concentração de recarga foi considerada igual a 100 unidades.

Para o modelo KONIK3.FOR o cálculo é mais fácil de efectuar uma vez que a dimensão de cada célula é constante e igual a 0,25x0,25 km². Cada célula situada na zona de recarga dos Cenários 1, 2 e 3 foi considerada geradora de um caudal equivalente ao da recarga pluvial, com uma concentração igual a 100 unidades.

6.4.4.4 - Condições iniciais

As condições iniciais atribuídas a cada nó da malha do modelo DISP4.FOR e a cada célula da malha do KONIK3.FOR foram consideradas iguais a zero. Exceptuam-se os nós ou células situadas na zona de recarga correspondente às áreas de depósito das cinzas dos Cenários 1, 2 e 3 (Fig. 6.4). Para esses nós e células admitiu-se uma concentração inicial de 100 unidades. Esta concentração inicial considera-se correspondente à poluição existente no aquífero cativo durante a fase de exploração da mina. Nessa fase apenas essa zona será afectada pela exploração, uma vez que a recarga do aquífero contendo os poluentes será bombeada pelas captações destinadas ao rebaixamento do nível piezométrico. Assim que cessar a exploração da mina a mancha de águas poluídas percolará pelo aquífero em conjunto com o escoamento subterrâneo natural.

6.4.5 - Aplicação dos modelos matemáticos

Com base nas características definidas nos pontos anteriores e nos valores da dispersividade longitudinal calculados em 5.6 para o aquífero das areias brancas efectuaram-se nove execuções de cada um dos programas (KONIK3.FOR e DISP4.FOR).

O valor médio admitido para a dispersão longitudinal regional foi de 5 m²/dia, para o programa DISP4.FOR (Hipótese 1. de 5.6), e ainda para a dispersividade regional o valor de 40 m/dia, para o programa KONIK3.FOR (Hipótese 2. de 5.6). Considerou-se uma velocidade média intersticial do escoamento

subterrâneo de 0,25 m/dia.

O valor admitido para a dispersão transversal foi de 10% da dispersão longitudinal, tal como aconteceu no Teste 7, Capítulo 4. No ponto seguinte analisar-se-á o efeito dessa relação nos resultados calculados.

Os resultados obtidos foram tabelados para a captação B5 (Chainca). Nos Quadros 6.1 e 6.2 e nas Figs. 6.5 e 6.6 apresentam-se respectivamente os valores da concentração obtidos pelos programas DISP4.FOR e KDNK3.FOR, para os Cenários 1, 2 e 3 e para as Taxas de infiltração A, B e C (100%, 50% e 10%). Estas Taxas correspondem respectivamente a infiltrações de 1000 m³/km², 500 m³/km² e 100 m³/km² de água (poluída), com uma concentração de referência de 100 unidades. As condições iniciais de concentração eram de 100 unidades nas zonas do aquífero situadas sob as áreas dos depósitos de cinzas. Nas áreas restantes a concentração inicial admitida foi de zero unidades.

Fixando a Taxa de infiltração igual a 100% e variando os Cenários 1, 2 e 3 observa-se, para o programa DISP4.FOR, no Quadro 6.1 e na Fig. 6.5 a enorme importância que a extensão da área de deposição das cinzas tem no valor do pico, esperado, das concentrações. No caso do Cenário 3 verifica-se inclusivé uma acumulação dos valores da concentração inicial com os dos lixiviados dos depósitos de cinza, ultrapassando a concentração do pico calculada (127,3) os valores de entrada (100). Esse valor vem reduzido no Cenário 2 para 86,8 e no Cenário 3 para 47,5 unidades.

Em relação ao valor final de equilíbrio das concentrações a diferença permanece, sensivelmente, igual descendo a razão entre as concentrações verificada nos picos (2,7), para 2,5 na situação

de equilíbrio, Cenários 1 e 3.

Observando agora o efeito da taxa de infiltração nos resultados obtidos verifica-se que uma diminuição da infiltração acarreta uma melhoria significativa quer nos valores do pico de concentrações quer nos valores finais de equilíbrio. A longo prazo a relação entre as taxas de infiltração corresponde sensivelmente à relação entre as concentrações calculadas.

Uma análise económica apropriada permitiria, com base nestes valores, escolher a melhor solução custo-eficácia, para reduzir os valores da concentração do pico e/ou da concentração de equilíbrio a longo prazo.

Deve referir-se que o valor muito elevado das concentrações dos picos das curvas calculadas poderá ser, eventualmente, atribuído ao pequeno refinamento da malha do programa DISP4.FOR, provocando oscilações numéricas. A realização de um estudo com uma malha mais refinada permitiria esclarecer esta suposição.

Os resultados do programa KONIK3.FOR, Quadro 6.2 e Fig. 6.6, são diferentes dos analisados anteriormente principalmente para as concentrações máximas correspondentes aos picos e ainda no que se refere à data da sua ocorrência. Tal facto poderia ser atribuído à diferença de valores das variáveis caracterizadoras da dispersão que cada programa considera: as dispersões longitudinal e transversal, no programa DISP4.FOR, e as dispersividades longitudinal e transversal do programa KONIK3.FOR que foram consideradas duplas das equivalentes do programa DISP4.FOR. No entanto um ensaio de verificação efectuado com uma dispersividade longitudinal de 20 m/dia, equivalente à dispersão longitudinal considerada no programa DISP4.FOR, para o Cenário 2 com a Taxa de infiltração B (50%), permitiu obter resultados

praticamente idênticos aos calculados com o valor da dispersividade longitudinal de 40 m/dia (Quadro 6.2 e Fig. 6.6). Assim pensa-se que a diferença dos resultados dos dois programas deve ser atribuída ao pequeno refinamento das malhas dos modelos, que origina oscilações numéricas nos resultados do programa DISP4.FOR e, eventualmente, dispersões numéricas nos resultados do programa KONIK3.FOR. Deve-se notar ainda que devido ao facto do campo de velocidades do aquífero não ser uniforme não existe uma relação fixa entre as dispersões e as dispersividades.

As relações entre os valores obtidos para os vários cenários e para as várias taxas de infiltração mantêm-se válidas e consequentemente as conclusões apontadas para os resultados do programa DISP4.FOR.

Os resultados obtidos para os dois programas deverão, nesta primeira análise, apenas ser considerados como ordem de grandeza. Uma análise mais rigorosa com malhas mais refinadas permitiria esclarecer as diferenças observadas. Tal estudo não ofereceria dificuldades de maior, mas não se considera essencial para a concretização dos objectivos deste capítulo.

Nas Figs. 6.7 a 6.12 apresentam-se gráficos bidimensionais e perspectivas tridimensionais que permitem observar o avanço da mancha de poluição pelo aquífero ao longo do tempo, para o Cenário (médio) 2 com a Taxa de infiltração (média) B (50%). Utilizam-se os resultados do programa KONIK3.FOR. (Os programas utilizados para a visualização gráfica encontram-se descritos em FERREIRA e CRUZ 1985).

6.4.6 - Análise da influência da dispersão transversal

A dispersão transversal só muito raramente tem sido estudada experimentalmente. Experiências com escoamentos naturais ou artificiais, onde se imponham linhas de fluxo radiais ou paralelas, como nos apresentados em FRIED 1975 e em LALLEMAND-BARRES et al. 1981, permitem a sua análise.

Nos ensaios efectuados no aquífero de Rio Maior apresentados no Capítulo 5, não foi possível quantificar o valor da dispersão transversal, uma vez que o escoamento imposto pela Captação 85 é radial e que os piezómetros PC7/2 e PC8 têm um alinhamento, também, radial.

A análise da literatura da especialidade, permitiu concluir que se não dá, em geral, um relevo significativo à quantificação experimental da dispersão transversal. Estabelecem-se normalmente limites de variação da dispersão transversal em função da dispersão longitudinal ou então fixa-se essa relação, em aplicações práticas.

No ponto 4.3.3 apresentaram-se os Testes 5 e 6 que permitem estudar a variação das concentrações para três valores diferentes da dispersão transversal, fixada a dispersão longitudinal e a velocidade do escoamento.

No estudos, práticos, analisados apresentam-se em geral dois valores para o quociente entre as dispersões longitudinal e transversal:

$$a) \frac{\alpha_L}{\alpha_T} = \frac{D_L}{D_T} = 10 \quad (6.2)$$

$$b) \frac{\alpha_T}{\alpha_L} = \frac{D_T}{D_L} = 0,30 \quad (6.3)$$

Para o caso a) refere-se (1) GUPTA et al. 1975, num estudo desenvolvido para Sutter Basin, nos EUA; (2) de FRIED 1975 pode-se obter um valor médio, de vários estudos, de 10,7; (3) KLOTZ 1982c permite obter também um valor médio igual a 10, da média dos valores limites que refere:

$$2 < \frac{D_L}{D_T} < 20$$

O segundo grupo de valores (b) é apresentado em BREDEHOEFT e PINDER 1973, KONIKOW 1977, KONIKOW e BREDEHOEFT 1978, PRICKETT et al. 1981. Como se referiu este valor é igual a: $D_T/D_L = 0,30$.

KONIKOW 1981 refere, para o estudo que apresenta, que os valores determinados para as concentrações foram muito sensíveis às variações dos valores da porosidade eficaz mas que foram pouco sensíveis às variações dos valores da dispersividade transversal.

Para permitir uma análise deste tipo, em relação aos resultados de concentrações apresentados no ponto anterior, repetiram-se, para um novo valor do quociente das dispersividades transversal e longitudinal, as execuções dos programas DISP4.FOR e KONIK3.FOR. Nos Quadros 6.3 e 6.4 e nas Figs. 6.13 e 6.14 apresentam-se os valores calculados para as concentrações com base na seguinte relação de dispersões:

$$\frac{\alpha_T}{\alpha_L} = \frac{D_T}{D_L} = 0,30$$

Como se pode observar, comparando os valores dos Quadros 6.3 e 6.1 e os valores dos Quadros 6.4 e 6.2, os resultados são praticamente idênticos aos obtidos anteriormente. Naturalmente

que o pico de concentrações é ligeiramente mais atenuado no caso $DT/DL = 0,30$. As diferenças não são no entanto significativas. As curvas de concentração agora obtidas são mais suaves, apresentando menores oscilações, anómalas, no programa DISP4.FOR.

Não se pensa assim que seja fundamental a realização de experiências de campo para o cálculo das dispersões transversais de aquíferos, a não ser para casos especiais onde se pretenda calcular rigorosamente a dispersão da mancha de poluição.

6.5 - Conclusões do estudo de poluição desenvolvido

O desenvolvimento do estudo que se apresentou, neste capítulo, teve por objectivo exemplificar a aplicação dos métodos matemáticos e experimentais expostos no Capítulo 4 e 5 a situações hidrogeológicas reais. Os quadros e as figuras apresentados permitem a análise dos vários cenários considerados.

A aplicação de dois modelos matemáticos permitiu observar a importância que pode ter o refinamento das malhas e os valores das variáveis empregadas nos resultados de um estudo de aplicação prática. É fundamental, na realização de estudos desse tipo efectuar uma análise de sensibilidade quanto ao espaçamento da malha e quanto ao passo de cálculo. A existência de uma biblioteca de programas, adequados à resolução de várias situações reais, em vez do emprego sistemático dum único modelo permite uma detecção mais fácil de erros de cálculo desse tipo.

O exemplo escolhido baseou-se num problema de poluição industrial. O procedimento geral a desenvolver para outros tipos de problemas, por exemplo problemas de engenharia sanitária (tratamento de efluentes no solo com infiltração rápida) não

seria substancialmente diferente. No caso de problemas agrícolas, como por exemplo do impacto ambiental da utilização de fertilizantes na qualidade das águas subterrâneas, ou de outros problemas de engenharia ambiental e sanitária o procedimento teria de ser diferente e exigiria um estudo da percolação do poluente na zona não saturada do solo, dos efeitos atenuantes das plantas e ainda dos efeitos introduzidos pela drenagem e pelas reacções químicas sofridas pelos fertilizantes e poluentes no solo.

7. SINTESE, CONCLUSÕES E TEMAS PARA PROSSEGUIMENTO DA INVESTIGAÇÃO

A utilização dos recursos hídricos subterrâneos para abastecimento doméstico, industrial e agrícola tem vindo a registar um aumento importante a nível tanto nacional como internacional. A região de Lisboa tem sido, em certos períodos, abastecida por cerca de 70% de águas subterrâneas, captadas nos aquíferos da bacia do baixo Tejo. Noutros países as percentagens são em certos casos significativamente maiores : 99% na Áustria e na Dinamarca, 91% na Itália, 50 a 75% na Alemanha Federal, Bélgica, França e Holanda e nos EUA 75% para o abastecimento à população e 60% para a agricultura por irrigação.

As percentagens que se apresentam permitem observar a importância actual dos recursos hídricos subterrâneos. O seu estudo, no entanto, só muito recentemente se começou a desenvolver no País. O recurso a modelos matemáticos para o estudo dos escoamentos subterrâneos e para a quantificação das reservas hídricas subterrâneas iniciou-se entre nós apenas na década passada (v. LNEC 1982).

Do ponto de vista da qualidade das águas subterrâneas a situação nacional é actualmente grave. Repare-se, por exemplo, no extracto da carta que o Ministro da Qualidade de Vida enviou ao Secretário de Estado das Obras Públicas, em Janeiro de 1985 (MQV 1985):

"...o estado indecente e degradado a que chegou o sistema hidrológico português e a contaminação das águas subterrâneas."

A recente tomada de consciência por parte das entidades governamentais quer a nível central quer a nível regional e local, sobre o assunto, permitirá, porventura, inverter ou pelo menos travar o agravamento da situação.

Encontram-se presentemente em elaboração no LNEC estudos preliminares para a caracterização da qualidade das águas subterrâneas e do risco e vulnerabilidade da poluição dos aquíferos nacionais, resultantes da integração de Portugal na CEE.

Em relação ao estudo do transporte de poluentes em águas subterrâneas de uma perspectiva de engenharia que incluísse a utilização de métodos matemáticos e técnicas experimentais para a caracterização dos parâmetros de aquíferos, o estado dos conhecimentos em Portugal, anteriormente ao desenvolvimento desta tese, era praticamente nulo. Com a apresentação deste trabalho, de índole teórico-prática, procura ultrapassar-se essa situação.

A metodologia seguida permite a aplicação, dos conhecimentos adquiridos a casos reais de poluição de águas subterrâneas, originados por sectores diversos da vida económica nacional como a indústria e minas, a agricultura, os efluentes e resíduos de aglomerados populacionais e ainda os acidentes ambientais. A variedade de métodos matemáticos e de modelos analisados permite desenvolver estudos em função de condicionamentos de projecto como a precisão dos resultados, os prazos e os custos dos estudos, ou a carência de dados hidrogeológicos.

O trabalho que se apresenta foi elaborado de acordo com o seguinte esquema:

- a) No **Capítulo 1** apresentou-se a introdução ao tema do estudo e ao trabalho.
- b) No **Capítulo 2** relacionou-se a perspectiva desenvolvida para o estudo com a de outras áreas da engenharia civil, nomeadamente com as das engenharias sanitária e ambiental. Descreveram-se, introdutoriamente, os mecanismos físicos, químicos e biológicos a que ficam sujeitas as partículas poluentes depois de entrarem no meio subterrâneo. Apresentaram-se ainda algumas técnicas empregadas usualmente para proteger e controlar, respectivamente, as águas subterrâneas naturais e as poluídas.
- c) A apresentação do **Capítulo 3** visou inserir o tema do trabalho numa perspectiva mais geral que englobasse não só a modelação física mas também a matemática. Quanto à modelação matemática apresentaram-se temas complementares em relação ao do transporte de poluentes: a modelação do escoamento subterrâneo (indispensável para a modelação matemática do transporte de poluentes) e a associação de modelos de gestão a modelos de transporte de poluentes (qualidade da água). Em relação ao primeiro tema, modelação do escoamento subterrâneo, o estado dos conhecimentos em Portugal é já suficientemente profundo quer do ponto de vista da análise teórica quer do ponto de vista da aplicação prática de modelos matemáticos. Em relação ao segundo tema, associação de modelos de gestão a modelos de qualidade de águas subterrâneas o estado actual

dos conhecimentos do ponto de vista da aplicação prática é nulo. Este tema é no entanto de relevante importância para uma adequada gestão, em termos de quantidade e de qualidade dos recursos hídricos subterrâneos nacionais. Sugere-se vivamente a sua análise futura. Em separado os dois temas, modelos de gestão por um lado e modelos de qualidade de água por outro (após a apresentação deste trabalho), são suficientemente conhecidos. A associação dos dois tipos de modelos dever-se-á efectuar assim com relativa facilidade.

- d) No Capítulo 4 desenvolveu-se um estudo original dos principais métodos matemáticos adequados à resolução dos problemas do transporte de poluentes em águas subterrâneas. Para cada método efectuou-se uma análise bibliográfica que além de permitir observar a evolução dos conhecimentos na matéria permitiu enquadrar o modelo matemático seleccionado para o estudo no contexto mais geral do respectivo método..

A selecção de cada modelo e programa de computador baseou-se na importância da sua implantação internacional e/ou na representatividade do modelo em relação ao método em que se baseia.

Três dos programas analisados foram desenvolvidos no âmbito deste estudo: DISP3.FOR, DISP4.FOR e BEMDIS.FOR. Os fundamentos desses programas foram apresentados noutros estudos de investigação. Dois outros programas seleccionados (KONIK3.FOR e RANDOM.FOR) foram alterados durante o estudo, de modo a permitir a utilização de unidades métricas e a permitir a sua comparação com os restantes programas.

A comparação dos modelos foi efectuada de modo a que não fosse privilegiado nenhum deles em particular, por refinamento de malhas, passos de cálculo, etc. De facto cada um dos programas testados comportou-se como o mais rigoroso em pelo menos dois dos dezasseis ensaios efectuados. Procurou-se ainda estudar situações limites de aplicabilidade dos modelos.

A análise efectuada permitiu observar a influência da dispersão longitudinal e da dispersão transversal na configuração das curvas de concentração calculadas.

A análise custo-eficácia que se desenvolveu para os modelos de qualidade de águas subterrâneas, permitiu o cálculo de uma matriz objectiva do escalonamento dos modelos entre si, em relação a oito variáveis de decisão seleccionadas (precisão de resultados, custos de tempo de cálculo em computador, custos de preparação de dados, etc.). Calculou-se também uma matriz subjectiva de escalonamento dos modelos, baseada em factores de ponderação das variáveis seleccionadas.

A análise efectuada permitiu a elaboração de regras para o desenvolvimento do estudo de novos problemas de poluição de águas subterrâneas e o tracado de quatro Árvores de Decisão destinadas à selecção dos métodos matemáticos e dos programas de computador mais adequados à resolução de problemas de poluição de águas subterrâneas originadas pela "Indústria e Minas", "Agglomerados Populacionais", "Agricultura" e "Acidentes Ambientais". O tracado das Árvores baseou-se nas características de cada problema de poluição e nos condicionalismos hidrogeológicos

e de projecto (precisão de resultados, custos de projecto, prazos de projecto e carência de dados hidrogeológicos).

Toda a análise desenvolvida se fundamentou em modelos determinísticos. Seria interessante estender o estudo efectuado a modelos que incluíssem a consideração de variáveis estocásticas do transporte de poluentes.

O estudo referente à associação de vários métodos, procurando tirar partido das características mais vantajosas de cada um, foi incluído, parcialmente, neste trabalho e constituirá um seu prosseguimento natural. Os modelos KONIK3.FOR e RANDOM.FOR seguem essa metodologia, associando os métodos das diferenças finitas, das características e do percurso aleatório. Outras associações poderão ser também vantajosas como por exemplo a associação dos métodos dos elementos finitos e das características, em situações hidrogeológicas para as quais o número de Peclet da malha dos modelos não seja demasiado pequeno (em relação às quais o método das características apresenta comportamentos deficientes). Em termos práticos, no entanto, as Árvores de Decisão que se traçaram deverão sofrer apenas alterações de pormenor, uma vez que o programa KONIK3.FOR apresenta características excepcionais de tempo de cálculo em computador, diminuindo significativamente os custos de projecto.

e) No Capítulo 5 apresentaram-se técnicas experimentais e os resultados obtidos para os ensaios de traçadores (cloreto de sódio e sulforodamina B) efectuados no aquífero das areias brancas de Rio Maior. O objectivo de análise desse

estudo era o desenvolvimento de técnicas que permitissem a determinação dos parâmetros característicos dos meios porosos (aquíferos), necessários à modelação matemática do transporte de poluentes em águas subterrâneas: a dispersividade longitudinal e a velocidade intersticial do escoamento subterrâneo.

Efectuaram-se sete ensaios de traçadores. Cada um caracterizou uma situação hidrogeológica bem determinada. Obtiveram-se curvas de concentração para três distâncias de ensaio diferentes: (aprox.) 0,25 m, 15,00 m e 25,00 m. O cloreto de sódio e a sulforodamina B foram testados simultaneamente para analisar o efeito da adsorção iónica reversível.

Os ensaios de traçadores destinaram-se principalmente à caracterização do comportamento de poluentes conservativos. Seria interessante estender o estudo efectuado a poluentes adsorvíveis, tanto no que se refere à realização de ensaios de traçadores como ainda ao estudo de modelos matemático que incluam permutas iónicas entre a fase líquida do escoamento e a fase sólida do meio poroso. Esse estudo teria particular importância para a resolução de alguns problemas de engenharia sanitária, como por exemplo para a análise dos efeitos dos poluentes de aterros sanitários.

Para os ensaios de traçadores utilizaram-se vários furos de observação e de captação de águas subterrâneas. Desenvolveu-se um método experimental que utiliza apenas um furo de observação (piezómetro) para a injeção e para a detecção de traçadores. Os resultados obtidos são da ordem de grandeza dos apresentados na literatura da

especialidade.

A análise das curvas de concentração no tempo, para a determinação da dispersividade longitudinal e da velocidade intersticial do escoamento foi efectuada tanto por métodos directos que se baseiam na teoria de Taylor (associação da configuração da lei normal à configuração da curva da variação da concentração) como pelo método inverso (tentativa e erro), segundo a mesma teoria.

A extrapolação da dispersividade longitudinal, calculada à escala dos ensaios (25 m), para uma dispersividade à escala regional (macrodispersividade) foi efectuada por um método que se baseia nos resultados experimentais obtidos em aquíferos da RFA, e também por um método que caracteriza a dispersividade regional em função da variabilidade da condutividade hidráulica do aquífero (análise estocástica). Os métodos de análise são muito recentes e ainda pouco experimentados.

Seria interessante desenvolver um estudo teórico-prático que visasse a identificação de parâmetros característicos do aquífero, incluindo a dispersividade longitudinal, em situações de incerteza. A análise estocástica dos valores da dispersividade, calculada em diferentes secções do aquífero por ensaios de traçadores, permitiria uma interpolação mais correcta e realista da dispersividade longitudinal para outras áreas do aquífero.

- f) Embora as conclusões do estudo de aplicação que se apresenta no Capítulo 6 não atribuam à dispersividade transversal um papel de relevo no transporte de poluentes

em águas subterrâneas, seria interessante efectuar ensaios de traçadores que permitissem o seu cálculo. O objectivo seria o de quantificar as relações entre as duas dispersividades, a transversal e a longitudinal, e observar a correcção das hipóteses admitidas no estudo de aplicação efectuado.

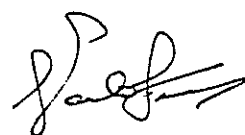
No Capítulo 6 analisaram-se vários cenários para a futura gestão da mina de lenhites de Rio Maior, que incluem a deposição das cinzas produzidas pela central térmica, projectada para Rio Maior, em áreas esgotadas da mina. Por lixiviação as cinzas serão arrastadas pelo aquífero indo contaminar a água subterrânea captada para abastecimento da cidade de Rio Maior. Analisaram-se os efeitos positivos da impermeabilização dos depósitos de cinzas na redução da taxa de infiltração dos materiais poluentes e consequentemente no valor das concentrações dos poluentes na água do aquífero. Os quadros e as figuras que contêm os resultados da análise de nove cenários permitem quantificar os efeitos de impacto ambiental (nocivos) que se observarão tanto na captação da Chainca (furo B5), que abastece a cidade de Rio Maior, como regionalmente no aquífero. Caso se venha a efectivar qualquer dos cenários estudados a análise efectuada neste trabalho permitirá orientar as entidades responsáveis pelo projecto e pelo meio ambiente nacional na tomada das decisões mais adequadas, tanto do ponto de vista económico, como do ambiental. As limitações que se introduziram no refinamento das malhas dos programas, utilizados no Capítulo 6, por motivos de ordem económica, deveriam ser

ultrapassadas permitindo uma análise mais rigorosa dos cenários considerados para Rio Maior. O desenvolvimento, pelo LNEC, dum estudo desse tipo não oferece agora dificuldades significativas.

Sugere-se, finalmente, a aplicação das metodologias desenvolvidas a estudos que incluam problemas de poluição de águas subterrâneas provocados por efluentes de aglomerados populacionais ou por lixiviados de aterros sanitários, e ainda pelos fertilizantes mais utilizados na agricultura. Essas aplicações, inseridas em projectos de investigação básica ou aplicada, permitiriam a aquisição de novos conhecimentos, que seriam úteis para o desenvolvimento de estudos reais, que incluam aspectos agora não quantificados.

Neste trabalho propõe-se um conjunto completo de metodologias, quer de índole matemática quer experimental, que permitem o estudo de uma vasta gama de problemas de transporte de poluentes em meios porosos. A aplicação, a nível nacional, dos conhecimentos e dos métodos que se apresentaram depende agora, fundamentalmente, da vontade política que existir a nível governamental para que se possa conhecer e evitar eficazmente a crescente degradação da qualidade das águas subterrâneas nacionais, contributo fundamental para a preservação do meio ambiente do País.

Lisboa, 16 de Janeiro de 1986



João Paulo de Cárcomo Lobo Ferreira

BIBLIOGRAFIA

- ABECASIS, J. L. 1978 - Estudo Hidrológico da Bacia Hidrográfica do Rio Maior com vista à Avaliação da Influência das Águas Superficiais nos Aquíferos da Zona dos Jazigos de Lenhite. Relatório, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.
- ABRAMOWITZ, M. e STEGUN, I. (Ed.) 1970 - Handbook of Mathematical Functions. New York, Dover Publications, Inc.
- A.CAVACO 1979 - Aproveitamento das Legnites de Rio Maior. Anteprojecto da Exploração da Mina a Céu Aberto. Empreitada de Prospeccão Geotécnica e Hidrogeológica (2 volumes). Lisboa, A. Cavaco.
- ACKOFF, R. e SASIENI, M. 1971 - Pesquisa Operacional. Coleccão Universitária de Administração N. 4, Rio de Janeiro, Livros Técnicos e Científicos Editora.
- AGUADO et al. 1974 - Optimal Pumping for Aquifer Dewatering. Proceedings of the American Society of Civil Engineers, New York, Vol. 100, HY 1.
- AGUADO, E. e REMSON, I. 1974 - Ground-water Hydraulics in Aquifer Management. Proceedings of the American Society of Civil Engineers. New York, Vol. 100, HY 1.

- AL- NIAMI, A. e RUSHTON, K. 1978 - Finite Difference Solution for One-Dimensional Dispersion Using an Improved Mesh Design. Journal of Hydrology, Vol. 5, N. 5.
- AMES, W. F. 1977 - Numerical Method for Partial Differential Equations. New York, Academic Press. (Citado em HUYAKORN e PINDER 1983).
- ARIS, R. 1956 - On the Dispersion of a Solute in a Fluid Flowing Through a Tube. Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Vol. 235.
- BABU, D. K. e PINDER, G. F. 1984 - A Finite Element - Finite Difference Alternating Direction Algorithm for Three Dimensional Groundwater Transport, in "Finite Elements in Water Resources, Burlington, 1984". Berlin, Springer-Verlag.
- BACHMAT, Y. et al. 1980 - Groundwater Management: The Use of Numerical Models. Washington, American Geophysical Union.
- BACK, W. e CHERRY, J. 1976 - Chemical Aspects of Present and Future Hydrogeological Problems. Proceedings of the Symposium Advances in Groundwater Hydrology.
- BAEDECKER, M. J. e BACK, W. 1979 - Hydrogeological Processes and Chemical Reactions at a Landfill. Groundwater, Reston, Vol. 17, N. 5.
- BAPTISTA, A. Melo et al. 1984 - The 2 - D, Unsteady, Transport Equation Solved by the Combined Use of the Finite Element Method and the Method of Characteristics, in

"Finite Elements in Water Resources, Burlington, 1984".
Berlin, Springer - Verlag.

BAROVIC, G. et al. 1978 - Messung Von Dispersionkoeffizienten
im Feld. Hannover, Technische Universität Hannover.

BEAR, J. 1972 - Dynamic of Fluids in Porous Media. New York,
American Elsevier Publishing Company.

BEAR, J. 1979 - Hydraulics of Groundwater. New York,
McGraw-Hill.

BEDIENT, P. B. et al. 1983 - Ground-water Transport from
Wastewater Infiltration. Proceedings of the American
Society of Civil Engineers. Journal of Environmental
Engineering, Vol. 109, N. 2.

BEHRENS, H. 1982 - Verbesserung des qualitativen und
quantitativen Nachweises von Nebeneinander Voliegenden
Fluoreszenztracern durch Systematische Probenbehandlung,
in "Beiträge über hydrologische Tracermethoden und ihre
Anwendungen". Munique, Gesellschaft für Strahlen-und
Umweltforschung.

BEHRENS, H. e SEILER, K.-P. 1982a - Karst-wassermarkierungen
auf der südlichen Frankenalb zwischen Anlauter, Altmühl
und Donau, in "Beiträge über hydrologische
Tracermethoden und ihre Anwendungen". Munique,
Gesellschaft für Strahlen-und Umweltforschung.

BEHRENS, H. e SEILER, K.-P. 1982b - Beziehungzwischen der
Dispersivität und der Länge des Fließweges des
Grundwassers nach Geländeversuchen in den

fluvioglazialen Kiesen des oberen Loisachtales (Oberau) und von Dornach (Münchener Schotterebene), in "Beiträge über hydrologische Tracermethoden und ihre Anwendungen". Munique, Gesellschaft für Strahlen-und Umweltforschung.

BELTAOS, S. e DAY, T.J. 1978 - A Field Study of Longitudinal Dispersion. Canadian Journal of Civil Engineering, Vol. 5.

BENNETT, G. 1976 - Introduction to Groundwater Hydraulics. Washington, Techniques of Water Resources Investigations of the United States Geological Survey, US Government Printing Office.

BHATTACHARYA, R. N. e GUPTA, V. K. 1983 - A Theoretical Explanation of Solute Dispersion in Saturated Porous Media at the Darcy Scale. Water Resources Research, Vol. 19, N. 4.

BLAIR, A. M. 1974 - Hydrogeological Factors in Groundwater pollution, in " Groundwater Pollution in Europe, Port Washington". Water Information Center, Inc.

BREBBIA, C. A. 1978a - Boundary Element Method for Engineers. London, Pentech Press.

BREBBIA, C. A. (Ed.) 1978b - Recent Advances in Boundary Element Methods. London, Pentech Press.

BREBBIA, C. A. et al. (Ed.) 1978 - Finite Elements in Water Resources. Proceedings of the Second International Conference, Imperial College, London. London, Pentech Press.

- BREBBIA, C. A. (Ed.) 1980 - New Developments in Boundary Element Methods. Proceedings of the Second International Seminar. Southampton, Computational Mechanics Centre Publications.
- BREBBIA, C. A. (Ed.) 1981 - Boundary Element Methods. Proceedings of the Third International Seminar. Berlin, Springer-Verlag.
- BREBBIA, C. A. (Ed.) 1983 - Boundary Element Methods. Proceedings of the Fourth International Seminar. Southampton, Computational Mechanics Centre Publications.
- BREBBIA, C. A. e WALKER, S. 1980 - Boundary Element Techniques in Engineering. London, Newnes - Butterworths.
- BREBBIA, C. A. e WROBEL, L. 1980 - Application of Boundary Elements in Water Resources, in "Finite Elements in Water Resources, Oxford, University of Mississippi, 1980".
- BREBBIA, C. A. e SKERGET, P. 1984 - Diffusion-Convection Problems Using Boundary Elements, in "Finite Elements in Water Resources, Burlington, 1984". Berlin, Springer-Verlag.
- BREDEHOEFT, J. D. e PINDER, G. F. 1973 - Mass Transport in Flowing Groundwater. Water Resources Research, Vol. 9, N. 1.
- BRESLER, E. 1973 - Simultaneous Transport of Solutes and Water under Transient Unsaturated Flow Conditions. Water Resources Research, Vol. 9, N. 4.

- CABRERA, G. e MARINO, M. 1976 - A Finite Element Model of Contaminant Movement in Groundwater. Water Resources Bulletin, American Water Resources Association, Minneapolis, Vol. 12, N. 2.
- CAMPANA, M. E. 1975 - Finite-State Models of Transport Phenomena in Hydrologic Systems. Ph. D. Dissertation. Tucson, University of Arizona.
- CAMPANA, M. E. et al. 1976 - Finite State Mixing Cell Models: Part II, Application to Aquifer Modeling. Tucson, University of Arizona.
- CEOTMA 1981 - Curso International sobre Geoquímica y Contaminación de las Aguas Subterráneas. Madrid, Universidad Autonoma de Madrid, C.E.O.T.M.A.
- CHATWIN, P. C. 1971 - On the Interpretation of some Longitudinal Dispersion Experiments. Journal of Fluid Mechanics, Vol. 48, N. 4.
- CHENG, A. H.-D. 1984 - Boundary Integral Solution of Darcy's Flow with Variable Permeability, in "Finite Elements in Water Resources, Burlington". Berlin, Springer-Verlag.
- CHERRY, J. A. (Ed.) 1983 - Migration of Contaminants in Groundwater at a Landfill: A Case Study. Journal of Hydrology. Vol. 63, N. 1/2.
- CIHS 1981 - Jornada sobre Analisis y Evolucion de la Contaminación de Aguas Subterráneas en España. Barcelona, Curso Internacional de Hidrologia Subterránea.

CLEARY, R. e UNGS, M. J. 1978 - Groundwater Pollution and Hydrology. Mathematical Models and Computer Programs. Princeton, N. J., Princeton University.

CLOUGH, R. W. 1960 - The Finite Element Method in Plane Stress Analysis. Proceedings of the American Society of Civil Engineers. J. Struct. Div. Proc. 2nd Conf. Electronic Computation. (Citado em HUYAKORN e PINDER 1983).

CMC 1977 - DISPER1. Transient and Steady State Dispersion (Computer Code). Southampton, Computational Mechanics Centre Publications.

CORREIA, R. M. 1979 - Análise dos Escoamentos Bidimensionais Horizontais em Meios Porosos em Regime Variável pelo Método dos Elementos Finitos. Relatório, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

CORREIA, R. M. 1981 - Empreendimento de Rio Maior. Modelos Numéricos de Rebaixamento dos Níveis Piezométricos. Relatório, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

COURANT, R. 1943 - Variational Methods for the Solution of Problems of Equilibrium and Vibration. Bull. Amer. Math. Soc., Vol. 49. (Citado em HUYAKORN e PINDER 1983).

CUSTODIO, E. e LLAMAS, M. R. 1976 - Hidrologia Subterrânea. Barcelona, Ediciones Omega, S.A.

DAGAN, G. 1982a - Stochastic Modeling of Groundwater Flow by

Unconditional and Conditional Probabilities: 1. Conditional Simulation and the Direct Problem. Water Resources Research, Vol. 18, N. 4.

DAGAN, G. 1982b - Stochastic Modeling of Groundwater Flow by Unconditional and Conditional Probabilities: 2. The Solute Transport. Water Resources Research, Vol. 18, N. 4.

DAGAN, G. 1984 - Solute Transport in Heterogeneous Porous Formations. Journal of Fluid Mechanics, Vol. 145.

DIERSCH, H. J. e KADEN, S. 1984 - Contaminant Plume Migration in an Aquifer. Finite Element Modeling for the Analysis of Remediation Strategies: A case Study. Collaborative Paper CP-84-11, Laxemburg, International Institute for Applied Systems Analysis.

DIEULIN, A. et al. 1981 - Time Dependence of an "Equivalent Dispersion Coefficient" for Transport in Porous Media, in "Proceedings of the EUROMECH 143: Flow and Transport in Porous Media, Delft, 1981". Rotherdam, A. A. Balkema.

DROST, W. et al. 1982 - Isotopenhydrologische Untersuchungen im Grundwassergewinnungsgebiet Missholz bei Neumarkt in der Oberpfaltz, in "Beiträge Über hydrologische Tracermethoden und ihre Anwendungen". Munique, Gesellschaft für Strahlen-und Umweltforschung.

EHLIG, C. 1976 - Comparision of Numerical Methods for Solution of Diffusion-Convection Equation in One and Two Dimensions, in "Finite Elements in Water Resources,

Princeton University, 1976". London, Pentech Press.

EICHINGER, L. et al. 1932 - Messmethoden für Radicaktive Umweltisotope, in "Beiträge über hydrologische Tracermethoden und ihre Anwendungen". Munique, Gesellschaft für Strahlen-und Umweltforschung.

ELANGO, K. e RAO, H. S. 1977 - Discussion on FEM Coupled with LP for Water Pollution Control. Proceedings of the American Society of Civil Engineers. Vol. 103, HY6.

ELANGO, K. e RAO, H. S. 1978 - Finite Element Description of Flowfield in Groundwater Management Models, in " Finite Elements on Water Resources, Imperial College, 1978". London, Pentech Press.

ELANGO, K. e ROUVE, G. 1980 - Aquifers: Finite Element Linear Programming Model. Proceedings of the American Society of Civil Engineers, Vol. 106, HY10.

ERDOGAN, H. e NEUFELD, R. 1983 - Modeling Leachates at Landfill Boundaries. Proceedings of the American Society of Civil Engineers. Journal of Environmental Engineering, Vol. 109, N. 5.

EVERETT, L. G. 1980 - Groundwater Monitoring. Schenectady, N. Y., General Electric Company.

FAO 1979 - Groundwater Pollution. FAO Irrigation and Drainage Paper 31, Rome, Food and Agriculture Organization of the United Nations.

FERNANDEZ-RUBIO, R. 1981 - Efecto sobre las Águas Subterráneas de las Actividades Mineras. Medidas de Prevencion, in

"Análisis y Evolution de la Contaminacion de Aguas Subterráneas en España". Barcelona, Curso Internacional de Hidrologia Subterránea.

FERREIRA, J. P. Lobo 1981 - Modelação Matemática do Balanço Hídrico Sequencial Diário. Exemplo de Aplicação à Região Algarvia (Faro). in "Seminário sobre os Recursos Hídricos Subterrâneos e sua Utilização. O Caso do Algarve". Lisboa, Associação Portuguesa dos Recursos Hídricos.

FERREIRA, J. P. Lobo 1982a - Mathematical Model for the Evaluation of the Recharge of Aquifers in Seminarid Regions with Scarce Hydrogeological Data. Memória 582, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil. (Comunicação apresentada ao "European Mechanics Colloquium EUROMECH 143: Flow and Transport in Porous Media, University of Delft, 1981").

FERREIRA, J. P. Lobo 1982b - Actualização do Estudo Hidrológico da Bacia Hidrográfica do Rio Maior. Relatório, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

FERREIRA, J. P. Lobo 1983a - Introdução à Contaminação de Águas Subterráneas. Informação Técnica ITH2, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

FERREIRA, J. P. Lobo 1983b - The Finite Element Method in Water Resources Engineering. Informação Técnica ITH4, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

FERREIRA J. P. Lobo et al. 1981 - Estudo Global dos Recursos Hídricos da Ilha do Porto Santo. Relatório, Lisboa,

Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

FERRÉIRA J. P. Lobo e CRUZ, M. Palmira 1985 - Programas para a Visualização Gráfica de Resultados Numéricos Obtidos por Modelos de Cálculo Automático. Relatório 25/85, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

FINNEMORE, E. J. e HANTZSCHE, N. N. 1983 - Ground-water Mounding Due to On-Site Sewage Disposal. Proceedings of the American Society of Civil Engineers, Journal of Irrigation and Drainage Engineering, Vol. 109, N. 2.

FLÜHLER, H. e JURY, W. 1983 - Estimating Solute Transport Using Nonlinear, Rate Dependent Two Site Adsorption Models. Berichte 245, Birmensdorf, Swiss Federal Institut of Forestry Research

FRIED, J. J. 1975 - Groundwater Pollution. Developments in Water Science 4, Amsterdam, Elsevier Scientific Publishing Company.

FUTAGAMI, T. et al. 1976 - FEM Compled with LP for Water Pollution Control. Proceedings of the American Society of Civil Engineers, Vol. 102, HY7.

GARDER, A. D. et al. 1964 - Numerical Calculation of Multidimensional Miscible Displacement by the Method of Characteristics. Society of Petroleum Engineers Journal, Vol. 4, N. 1.

GELHAR, L. e AXNESS, C. L. 1983 - Three-Dimensional Stochastic Analysis of Macrodispersion in Aquifers. Water Resources Research, Vol. 19, N. 1.

- GOBLET, P. 1984 - General Review of Methodologies and Approaches in Mathematical Models for Interpretation of Tracer Data in Hydrological Systems, in "Proceedings of the Advisory Group Meeting on Mathematical Models for Interpretation of Tracer Data in Groundwater Hydrology". Vienna, International Atomic Energy Agency.
- GOMEZ, S. et al. 1980 - The BIEM Applied to Flow Through Porous Media, in "Finite Elements in Water Resources, Oxford, University of Mississippi, 1980".
- GOODMAN, G. e CHADWICK, M. 1978 (Ed.) - Environmental Management of Mineral Wastes. Alphen aan den Rijn, Sijthoff and Noordhoof.
- GRAY, W. G. et al. (Ed.) 1976 - Finite Element in Water Resources. Proceedings of the First International Conference, Princeton University. London, Pentech Press.
- GSF 1982 - Beiträge Über Hydrologische Tracermethoden und ihre Anwendungen. Munique, Gesellschaft für Strahlen-und Umweltforschung.
- GUPTA, S. K. et al. 1975 - A Three-Dimensional Finite Element Ground Water Model. Contribution 152, Davis, California Water Resources Center.
- GUPTA, S. K. e COLE, C. R. 1985 - FE3DGW Flow Model: Formulation, Computer Source Listings and User's Manual. Columbus, Ohio, Battelle Project Management Division, United States Office of Nuclear Waste Isolation.

- GVEN , J. et al. 1984 - An Analysis of Dispersion in a Stratified Aquifer. Water Resources Research, Vol. 20, N. 10.
- HARLEMAN, D. R. F. e RUMER, R. R. 1963 - Longitudinal and Lateral Dispersion in an Isotropic Porous Medium. Journal of Fluid Mechanics, Vol. 16, part 3.
- HENRIQUES, R. Goncalves 1980 - Métodos de Cálculo Automático para a Avaliação de Parâmetros Hidráulicos de Aquíferos com Base na Análise de Ensaio de Bombagem. Tese de Especialista, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.
- HENRIQUES, R. Goncalves e RODRIGUES, J. Delgado 1986 - Estudo e Modelação das Águas Subterrâneas da Bacia de Santo André. Modelação Matemática do Aquífero do Jurássico. Relatório, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil. (Em preparação).
- HIMMELBLAU, D. M. e BISCHOFF, K. B. 1968 - Process Analysis and Simulations: Deterministic Systems. New York, John Wiley and Sons.
- HOLZ, K. P. et al. (Ed.) 1982 - Finite Elements in Water Resources. Proceedings of the Fourth International Conference, Hannover, Germany. Berlin, Springer-Verlag.
- HOOPES, J. A. e HARLEMAN, D. R. F. 1967 - Dispersion in Radial Flow from a Recharge Well. Journal of Geophysical Research, Vol. 72, N. 14.
- HUANG, Y. H. e WU, S. J. 1976 - Comparision of

Three-Dimensional Finite Elements for Aquifer Simulation, in "Finite Elements in Water Resources, Princeton University, 1976". London, Pentech Press.

HUEBNER, K. H. 1975 - Finite Element Method for Engineers. New York, John Wiley and Sons. (Citado em HUYAKORN e PINDER 1983).

HUYAKORN, P. S. e PINDER, G. F. 1983 - Computational Methods in Subsurface Flow. New York, Academic Press.

HUYAKORN, P. S. et al. 1984 - Testing and Validation of Models for Simulation Solute Transport in Ground-water: Development, Evaluation, and Comparison of Benchmark Techniques. Indianapolis, International Ground Water Modeling Center, Butler University.

IAEA 1984 - Mathematical Models for Interpretation of Tracer Data in Groundwater Hydrology. Advisory Group Meeting, Vienna, International Atomic Energy Agency.

JASWON, M. A. e PONTER, A. R. 1963 - An Integral Equation Solution of the Torsion Problem. Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Vol. 273. (Citado em HUYAKORN e PINDER 1983).

JAVANDEL, I. e WITHERSPOON, P. A. 1968 - Application of the Finite Element Method to Transient Flow in Porous Media. Soc. Pet. Eng. Journal, Vol 8. (Citado em HUYAKORN e PINDER 1983).

JENKINS, S. H. e SCHOJDDTZ HANSEN, P. (Ed.) 1983 - Solid Wastes from Coal Fired Power Plants: Water Pollution

Problems. Water Science and Technology, International Association on Water Pollution Research and Control, Vol. 15, N. 11.

KABATA-PENDIAS, A. e PENDIAS, H. 1984 - Trace Elements in Soils and Plants. Boca Raton, CRC Press, Inc.

KADEN, S. et al. 1985a - Decision Support Model Systems for Regional Water Policies in Open-Pit Lignite Mining Areas. International Journal of Mine Water, Vol. 4, N. 1.

KADEN, S. et al. 1985b - Development of Simplified Models of Regional Groundwater and Surface Water Flow Processes based on Computational Experiments with Comprehensive Models. Collaborative Paper CP-85-25, Luxemburg, International Institute for Applied Systems Analysis.

KAMKE, E. 1967 - Differentialgleichungen, Lösungsmethoden und Lösungen. I. Gewöhnliche Differentialgleichungen. Leipzig, Akademische Verlagsgesellschaft.

KAZANOSWKI, A. D. 1968 - A Standardized Approach to Cost-Effectiveness Evaluations, in "Cost-Effectiveness, 1968". John Wiley and Sons.

KLOTZ, D. 1982a - Verhalten hydrologischer Tracer in ausgewählten Sanden und Kiesen. in "Beiträge über hydrologische Tracermethoden und ihre Anwendungen". Munique, Gesellschaft für Strahlen-und Umweltforschung.

KLOTZ, D. 1982b - Abhängigkeit der Longitudinalen Dispersion von Parametern des Grundwassers und des Grundwasserleiters,

in "Beiträge Über hydrologische Tracermethoden und ihre Anwendungen". Munique, Gesellschaft für Strahlen-und Umweltforschung.

KLJTZ, D. 1982c - Abhängigkeit der Transversalen Dispersion von Parametern des Grundwassers und des Grundwasserleiters, in "Beiträge Über hydrologische Tracermethoden und ihre Anwendungen". Munique, Gesellschaft für Strahlen-und Umweltforschung.

KONIKOW, L. 1977 - Modeling Chloride Movement in the Alluvial Aquifer at the Rocky Mountain Arsenal, Colorado. Water Supply Paper 2044, Reston, United States Geological Survey.

KONIKOW, L. e BREDEHOEFT, J. 1974 - Modeling Flow and Chemical Quality Changes in an Irrigated Stream-Aquifer. Water Resources Research, Vol. 10, N. 3.

KONIKOW, L. e BREDEHOEFT, J. 1978 - Computer Model of Two-Dimensional Solute Transport and Dispersion in Ground Water. Book 7, Chapter C2, Reston, United States Geological Survey.

KREFT, A. e ZUBER, A. 1978 - On the Physical Meaning of the Dispersion Equation and its Solutions for Different Initial and Boundary Conditions. Chemical Engineering Science 33, Pergamon Press.

KREYSZIG, E. 1972 - Advanced Engineering Mathematics. New York, John Wiley and Sons.

KUPER, J. A. 1983 - Seleccão de um Método Numérico para

Simulação do Transporte de Poluentes em Águas Subterrâneas, in "Anais do Simpósio Luso-Brasileiro sobre Simulação e Modelação em Hidráulica e Recursos Hídricos, Blumenau, 1983". Florianópolis, Associação Brasileira de Hidrologia e Recursos Hídricos.

LAFE, O. et al. 1980 - Singularities in Darcy Flow Through Porous Media. Proceedings of the American Society of Civil Engineers, Vol. 106, HY6.

LAIABLE, J. P. et al. (Ed.) 1984 - Finite Elements in Water Resources. Proceedings of the Fifth International Conference, Burlington, Vermont. Berlin, Springer-Verlag.

LAFE, O. et al. 1981 - BIEM Solutions to Combinations of Leaky, Layered, Confined, Unconfined, Nonisotropic Aquifers. Water Resources Research, Vol. 17, N. 5.

LALLEMAND-BARRES, A. et al. 1981 - Échanges Physico-Chimiques et Transferts de Polluants dans les Aquifères. Orléans, Bureau de Recherches Géologiques et Minières, Service, Géologique National.

LAM, D. C. L. 1978 - Comparision of Finite Element and Finite Difference Methods for Nearshore Advection-Diffusion Transport Models, in "Finite Elements in Water Resources, Princeton University, 1976". London, Pentech Press.

LAPIDUS, L. e PINDER, G. F. 1982 - Numerical Solutions of Partial Differential Equations in Science and Engineering. New York, John Wiley and Sons. (Citado em

HUYAKORN e PINDER 1983).

- LEMOS, F. O. e FERREIRA, J. P. Lobo 1978 - Estruturas Compactas para Dissipação de Energia por Ressalto. Memória n. 502, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil. (Comunicação apresentada ao VII Congresso Latino-Americano de Hidráulica, Out. 1976, Santiago do Chile).
- LENNON, G. et al. 1979 - Boundary Integral Equation to Axisymmetric Potencial Flows. 1) Basic Formulation. 2) Recharge and Well Problems in Porous Media. Water Resources Research, Vol. 15, N. 5.
- LENNON, G. et al. 1980 - Boundary Integral Solutions to Three-dimensional Unconfined Darcy's Flow. Water Resources Research, Vol 16, N. 4.
- LEWIS, W. J. et al. 1982 - The Risk of Groundwater Pollution by On-Site Sanitation in Developing Countries. Report N. 01/82, Duebendorf, International Reference Center for Waste Disposal.
- LIGGETT, J. 1977 - Location of Free Surface in Porous Media. Proceedings of the American Society of Civil Engineers Vol. 103, HY4.
- LIGGETT, J. A. e LIU. P. L-F. 1983 - Boundary Integral Equation Method for Porous Media Flow. London, Allen and Unwin.
- LIU P. e LIGGETT, J. 1979 - Boundary Solutions to Two Problems in Porous Media. Proceedings of the American Society of

Civil Engineers, Vol. 105, HY3.

LIU, P. et al. 1981 - Boundary Integral Equation Solutions to Moving Interface Between Two Fluids in Porous Media. Water Resources Research, Vol. 17, N. 5.

LLAMAS, M. R. e ALFARO, P. E. Martinez 1981 - Application of Different Computer Models to the Study of Solute Transport in a Vertical Profile of Madrid Aquifer, in "Curso Internacional sobre Nuevos Métodos para el Estudio de la Geoquímica y la Contaminación de las Aguas Subterráneas". Madrid, Universidade Autonoma de Madrid, C.E.D.T.M.A.

LLAMAS, M. e CUSTODIO, E. 1980 - Notas sobre la Contaminación de Aguas Subterráneas en España, in "Actas del Simposio Agua Siglo XXI, Madrid". UNESCO - Comité Español del Programa Hidrológico Internacional.

LLAMAS, M. R. e SIMPSON, E. S. 1981 - Estudio del Transporte de Solutos em las Aguas Subterráneas del Sistema Acuífero de Madrid Mediante um Modelo Digital de Celdas de Mezcla, in "Curso Internacional sobre Nuevos Metodos para el Estudio de la Geoquímica y Contaminación de las AGUAS Subterráneas" Madrid, Universidad Autonoma de Madrid, C.E.D.T.M.A.

LNEC 1982 - Problemas de Recursos Hídricos em Ilhas e Zonas Costeiras. Seminário N. 258, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

LNEC 1983 - Sistemas de Abastecimento de Água e Evacuação de Excreta em Zonas Rurais e Pequenas Comunidades.

Seminário N. 300, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

LNEC 1986 - Tratamento de Efluentes Domésticos e Industriais no Solo. Seminário N. 326, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

LUCKNER, L. et al. 1985 - Development of Simplified Models of Water Quality in Lignite Mining Areas. Collaborative Paper CP-85-26, Laxenburg, International Institute for Applied Systems Analysis.

LUHR, H. P. 1972 - Vergleich der Lösungsmethoden für Stationäre Grundwasserströmungen mit Hilfe einer Kosten-Effektivitäts-Analyse. Wasser und Abwasser in Forschung und Praxis N. 8, Bielefeld, Erich Schmidt Verlag.

LYONS, T. C. 1976 - Groundwater Basin Water Quality Simulation to Study Alternative Management Plans, in "WRC Conference on Groundwater Quality, Measurement, Prediction and Protection, Reading, England".

MALOSZIEWSKI, P. e ZUBER, A. 1982 - Determining the Turnover Time of Groundwater Systems with the Aid of Environmental Tracers. 1: Models and their Applicability. Journal of Hydrology, Vol. 54, N. 3/4.

MALOSZIEWSKI, P. e ZUBER, A. 1984 - On the Theory of Tracer Experiments in Fissured Rocks with a Porous Matrix. Kraków, Institut of Nuclear Physics.

MERCADO, A. 1976 - Nitrate and Chloride Pollution of

Aquifers - a Regional Study with the Aid of a Single Cell Model. Water Resources Research, Vol. 12, N. 4.

MERCER, J. e FAUST, C. 1980 - Ground-water Modeling. Ground-water, (Ed.) water Well Journal, Worthington, Ohio, Vol. 13, N. 2.

MITCHELL, A. R. e GRIFFITHS, D. F. 1980 - The Finite Difference Method in Partial Differential Equations. New York, John Wiley and Sons. (Citado em HUYAKORN e PINDER 1983).

MOHSEN, M. F. N. 1984 - Numerical Experiments Using "Adaptive" Finite Elements with Collocation, in "Finite Elements in Water Resources, Burlington, 1984". Berlin Springer-Verlag.

MOLZ, F. J. et al. 1983 - An Examination of Scale-Dependent Dispersion Coefficients. Groundwater, Vol. 21, N. 6.

MOOD, A. M. e GRAYBILL F. A. 1963 - Introduction to the Theory of Statistics, New York, McGraw-Hill Book Company, Inc.

MQV 1985 - Carta do Ministro da Qualidade de Vida (Dr. Sousa Tavares) ao Secretário de Estado das Obras Públicas (Eng. Eugénio Nobre), sobre a Qualidade dos Recursos Hídricos Nacionais, em Janeiro de 1985. Lisboa, Ministério da Qualidade de Vida.

NALLUSWAMI, M. et al. 1972 - FEM for the Hydrodynamic Dispersion Equation with Mixed Partial Derivatives. Water Resources Research, Vol. 8, N. 5.

- NERETNIEKS, I. 1984 - Solute Transport in Fractured Rocks, in "Proceedings of the Advisory Group Meeting on Mathematical Models for Interpretation of Tracer Data in Groundwater Hydrology. Vienna, International Atomic Energy Agency.
- NEUMAN, S. P. 1981 - A Eulerian-Lagrangian Numerical Scheme for the Dispersion-Convection Equation Using Conjugate Space-Time Grids. Journal of Computational Physics, Vol. 41, N. 2.
- NEUMAN, S. P. e SOREK, S. 1982 - Eulerian-Lagrangian Methods for Advection-Dispersion, in "Finite Elements in Water Resources, Hannover 1982". Berlin, Springer-Verlag.
- NEUFVILLE, R. de 1970 - Cost-Effectiveness Analysis of Civil Engineering Systems: New York City's Primary Water Supply. Operations Research, Operations Research Society of America, Baltimore, Vol. 18, N. 5.
- NEUFVILLE, R. de e MARKS, D. H. (Ed.) 1974 - Systems Planning and Design. Case Studies in Modeling, Optimization, and Evaluation. Engle-Wood Cliffs, N. J., Prentice-Hall, Inc.
- NEUFVILLE, R. de e MIERZEJEWSKI, E. 1972 - Airport Access Cost-Effectiveness Analysis. Proceedings of the American Society of Civil Engineers. Vol. 98, TE3.
- NEUFVILLE, R. de e STAFFORD, J. 1968 - Engineering Systems Analysis. Cambridge, Department of Civil Engineering, Massachusetts Institut of Technology.

- NILSSON, K. e ENGLÖV, P. 1979 - Rapid Infiltration of Wastewater. Vatten, Lund, 35/3.
- NISHI, T. et al. 1976 - Movement of Pollutants in a Two-Dimensional Seepage Flowfield. Journal of Hydrology, Vol. 31.
- OAKES, Y. et al. 1981 - The Effects of Farming Practices on Groundwater Quality in the United Kingdom, in "Curso Internacional sobre Nuevos Métodos para el Estudio de la Geoquímica y de la Contaminación de las Aguas Subterráneas". Madrid, Universidad Autónoma de Madrid, C.E.O.T.M.A.
- ODENDAAL, P. E. (Ed.) 1982 - Mine Water Pollution. Proceedings of the Seminar held in Pretoria. Oxford. Pergamon Press.
- PAGENKOPF, J. et al. 1976 - A Two-Dimensional Finite Element Dispersion Model. Report MITSG676-12, Cambridge, Massachusetts Institut of Technology.
- PERRY, R. 1982 - Effects of Waste Disposal on Groundwater and Surface Water. IAHS Publication N. 139, Washington, International Association of Hydrological Sciences.
- PICKENS, J. e LENNOX, W. 1976 - Numerical Simulation of Waste Movement in Steady Groundwater Flow Systems. Water Resources Research, Vol. 12, N. 2.
- PINDER, G. F. 1973. - Galerkin-Finite Element Simulation of Ground-water Contaminant on Long Island, New York. Water Resources Research, Vol. 9, N. 6.

- PINDER, G. F. e COOPER, H. H. Jr. 1970 - A Numerical Technique for Calculating the Transient Position of the Saltwater Front. Water Resources Research, Vol. 6, N. 3.
- PINDER, G. F. e FRIND, E. O. 1972 - Application of Galerkin's Procedure to Aquifer Analysis. Water Resources Research, Vol. 8, N. 1
- PORTELA, A. e ROMÃOZINHO, T. 1979 - Tópicos sobre o Método dos Elementos de Fronteira. Seminario, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.
- PRICE, H. S. et al. 1968 - Numerical Methods of Higher Order Accuracy for Diffusion Convection Equations. Soc. Pet. Eng. Journal. (Citado em HUYAKORN e PINDER 1983).
- PRICKETT, T. 1979 - Groundwater Computer Models. State-of-the-art. Groundwater, Vol. 17, N. 2.
- PRICKETT, T. e LONNQUIST, C. 1971 - Selected Digital Computer Techniques for Ground-water Resources Evaluation. Bulletin N. 55, Urbana, Illinois State Water Survey.
- PRICKETT, T. A. et al. 1981 - A "Random-Walk" Solute Transport Model for Selected Groundwater Quality Evaluations. Bulletin 65, Champaign, Illinois State Water Survey.
- REDDELL, D. L. e SUNADA, D. K. 1970 - Numerical Simulation of Dispersion in Groundwater Aquifers. Hydrology Paper 41, Fort Collins, Colorado State University.
- ROBERTSON, J. B. 1974 - Digital Modeling of Radioactive and Chemical Waste Transport in the Snake River Plain

Aquifer at the National Reactor Testing Station, Idaho. Open-File Report IDO 22054, United States Geological Survey.

ROBSON, S. G. 1974 - Feasibility of Digital Waterquality Modeling Illustrated by Application at Barstow, Cal. Water Resources Investigation 46-73, United States Geological Survey.

RODRIGUES, J. Delgado e OLIVEIRA, R. 1978 - Empreendimento de Rio Maior. Estudos Hidrogeológicos. Relatório, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

RODRIGUES, J. Delgado e OLIVEIRA, R. 1980 - Empreendimento de Rio Maior. Interpretação dos Ensaios de Bombagem. Relatório, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

RODRIGUES, J. Delgado 1981 - Empreendimento de Rio Maior. Síntese dos Estudos Hidrogeológicos. Relatório, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

RODRIGUES, J. Delgado e CORREIA, R. 1981 - Empreendimento de Rio Maior. Estudos Geotécnicos. Relatório, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil.

RODRIGUES, J. Delgado e FIGUEIREDO, L. 1986 - Estudo dos Recursos Hídricos Subterrâneos da Bacia do Rio Ave. Relatório, Lisboa, Laboratório Nacional de Engenharia Civil. (Em preparação).

ROSENBERG, D. V. von 1969 - Methods for Numerical Solution of Partial Differential Equations. New York, Elsevier

Scientific Publishing Company.

- SA da COSTA, A. e WILSON, J. 1979 - A Numerical Model of Seawater Intrusion in Aquifers. Report MITSG79-27, Cambridge, Massachusetts Institut of Technology.
- SAUTY, J. P. 1977 - Contribution à l'Identification des Paramètres de Dispersion dans les Aquifères par l'Interpretation des Experiences de Tracage. Thèse de Docteur-Ingenieur, Université de Grenoble.
- SCHEIDEGGER, A. E. 1961 - General Theory of Dispersion in Porous Media. Journal of Geophysics Research, Vol. 66, N. 10.
- SCHWARTZ, F. 1977 - Macroscopic Dispersion in Porous Media : The Controlling Factors. Water Resources Research, Vol. 13, N. 4.
- SEILER III, K. 1969 - Introduction to Systems Cost-Effectiveness. New York, Wiley-Inter-Science, John Wiley and Sons.
- SEILER, K. -P. e ALEXANDER, I. 1982 - Die Ausbreitung von Escherichia Coli im Vergleich zu Konservativen Tracern. Erste Ergebnisse und zukünftige Problemstellungen vom Versuchsfeld Dornach bei München, in "Beiträge über hydrologische Tracermethoden und ihre Anwendungen". Munique, Gesellschaft für Strahlen-und Umweltforschung.
- SHAMIR, V. e HARLEMAN, D. 1967 - Numerical Solutions for Dispersion in Porous Mediums. Water Resources Research, Vol. 3, N. 2.

- SHAREFKIN, M. et al. 1984 - Impacts, Costs and Techniques for Mitigation of Contaminated Ground Water: A Review. Water Resources Research, Vol. 16, N. 16.
- SIMPSON, E. S. et al 1976 - Finite Element State Mixing Cell Models: Part I, Computational Procedures. Tucson, University of Arizona.
- SMART, P. L. e LAIDLAW, I. M. S. 1977 - An Evaluation of Some Fluorescent Dyes for Water Tracing. Water Resources Research, Vol. 13, N. 1.
- SMITH, I. A. 1976 - Integration in Time of Diffusion-Convection Equations, in "Finite Elements in Water Resources, Princeton University, 1976". London, Pentech Press.
- SPRAGGS, L. D. 1978 - Comparison of Finite Element and Finite Difference Methods in Thermal Discharge Investigations, in "Finite Elements in Water Resources, Imperial College, 1978". London, Pentech Press.
- SYMN, G. T. 1963 - Integral Equation Methods in Potential Theory: II. Proc. of the Royal Society of London, Series A, 1963.
- TAYLOR, A. 1955 - Advanced Calculus. Waltham, Mass., Blaisdell Publishing Company.
- TAYLOR, G. I. 1954 - The Dispersion of Matter in Turbulent Flow Through a Pipe. Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Vol. 223.
- TRESCOTT, P. 1975 - Documentation of Finite-Difference Model for Simulation of Three-Dimensional Groundwater Flow.

Reports 75-438 and 76-519, Reston, United States Geological Survey.

TRESCOTT, P. et al. 1976 - Finite-Difference Model for Aquifers Simulation in Two Dimensions with Results of Numerical Experiments. Book 7, Chapter C1, Reston, United States Geological Survey.

TROISI, S. et al. 1984 - Application of a Transport-Diffusion Model to a Coastal Aquifer Utilizing in-situ Measurements of Dispersivity, in "Proceedings of the Advisory Group Meeting on Mathematical Models for Interpretation of Tracer Data in Ground-Water Hydrology". Vienna, International Atomic Energy Agency.

TUB 1977 - Theoretische Methoden der Bau-und Verkerstechnik IV. Berlin, Studienhilfe der Studentenschaft, Technische Universität Berlin.

TURNER et al. 1956 - Stiffness and Deflection Analysis of Complex Structures. Journal of Aeronautic Sciences, Vol. 23. (Citado em HUYAKORN e PINDER 1983).

UNESCO 1980 - Aquifer Contamination and Protection. Studies and Reports in Hydrology N. 30, Paris, UNESCO.

UNESCO 1983 - Ground-Water Studies. Studies and Reports in Hydrology N. 7, Paris, UNESCO.

URIA, A. F., HERRÁEZ, I. e LLAMAS, M. R. 1981 - Aplicacion de Modelos Analíticos al Estudio Preliminar de la Contamination de las Aguas Subterráneas por um Vertedero de Residuos Solidos Urbanos de Madrid, in "Jornadas

sobre Analisis y Evolucion de la Contamination de las Aguas Subterráneas em España". Barcelona, Curso Internacional de Hidrologia Subterránea.

URISH, D. 1981 - Electrical Resistivity-Hydraulic Conductivity Relationships in Glacial Outwash Aquifers. Water Resources Research, Vol. 17, N. 5.

VALKOVIC', V. 1983 - Trace Elements in Coal. Volume II. Boca Raton, CRC Press, Inc.

VEIGA, E. Veloso da 1985 - O Método dos Integrais de Fronteira Aplicado à Resolução de Alguns Problemas de Potencial Escalar. Tese de doutoramento, Braga, Universidade do Minho. (Em preparação).

VERRUIJT, A. e BARENDIS, F. B. J. (Ed.) 1981 - Flow and Transport in Porous Media. Proceedings of Euromech 143, Delft 1981. Rotterdam, A. A. Balkema.

WAGNER, E. G. e LANOIX, J. N. 1960 - Evacuation des Excreta dans les Zones Rurales et les Petites Agglomérations. Monografia 36, Geneve, Organização Mundial de Saúde.

WALKER, W. H. 1969 - Illinois Groundwater Pollution. Journal of the American Water Works Association, Vol. 56, N. 1.

WANG, S. Y. et al. (Ed.) 1980 - Finite Elements in Water Resources. Proceedings of the Third International Conference. Oxford, University of Mississippi, 1980.

WARD, C. F. 1985 - On-Site Sanitation and Groundwater Quality: A Methodology for Monitoring. Southampton, University of Southampton. (Draft).

- WILLIAMS, R. 1975 - Waste Production and Disposal in Mining, Milling and Metallurgical Industries. San Francisco, Miller Freeman Publications, Inc.
- WILLIAMS, J. 1982 - Diffusivity, Storativity and the Dupuit Assumptions for a Periodic Flow in a Vertical Hele-Shaw Model. Water Resources Research, Vol. 18, N. 4.
- WILLIS, R. 1979 - A Planning Model for the Management of Groundwater Quality. Water Resources Research, Vol. 15, N. 6.
- WILSON, J. et al. 1979 - Mathematical Development and Verification of a Finite Element Aquifer Flow Model. Aquifem-1. Report 248, Cambridge, R. M. Parsons Laboratory for Water Resources and Hydrodynamics, Massachusetts Institut of Technology.
- YEH, G. T. 1984 - Solution of Contaminant Transport Equations Using an Orthogonal Upstream Weighting Finite Element Scheme, in "Finite Elements in Water Resources Burlington, 1984". Berlin, Springer-Verlag.
- ZIENKIEWICZ, O. et al. 1966 - Solution of Anisotropic Seepage Problems by Finite Elements. Proceedings of the American Society of Civil Engineers, Vol. 92, EM1.
- ZIENKIEWICZ, O. 1977 - Finite Element Method. Maidenhead, McGraw Hill.
- ZIENKIEWICZ, O. et al. 1977 - The Coupling of the Finite Element Method and Boundary Solution Procedures. International Journal of Numerical Methods Engineering,

ZUBER, A. 1984 - Review of Existing Mathematical Models for Interpretation of Tracer Data in Groundwater Hydrology, in "Proceedings of the Advisory Group Meeting on Mathematical Models for Interpretation of Tracer Data in Groundwater Hydrology". Vienna, International Atomic Energy Agency.

