



FACULDADE DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIVERSIDADE NOVA DE LISBOA

Modelos Geológicos Estocásticos 3D e Interface para Modelos de Simulação de Fluxo. Aplicação à Área Subjacente da Antiga Fábrica da SPEL

Paulo Afonso Luís Arruda Quental
(Licenciado)

Dissertação para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Geológica (Georrecursos)

Orientador: Doutor José António de Almeida

Juri:

Presidente: Doutora Maria Manuela Malhado Simões Ribeiro, Prof. Auxiliar – FCT/UNL

Vogais: Doutor Luís Miguel Amorim Ferreira Fernandes Nunes, Prof Auxiliar – FCMA/U.Algarve

Doutor José António de Almeida, Prof. Auxiliar – FCT/UNL

Fevereiro 2011

Modelos Geológicos Estocásticos 3D e Interface para Modelos de Simulação de Fluxo. Aplicação à Área Subjacente da Antiga Fábrica da SPEL

Copyright © Paulo Afonso Luis Arruda Quental, 2011

A Faculdade de Ciências e Tecnologia e a Universidade Nova de Lisboa têm o direito, perpétuo e sem limites geográficos, de arquivar e publicar esta dissertação através de exemplares impressos reproduzidos em papel ou de outra forma digital, ou por qualquer meio conhecido ou que venha a ser inventado, e de a divulgar através de repositórios científicos e de admitir a sua própria cópia e distribuição com objectivos educacionais ou de investigação, não comerciais, desde que seja dado crédito ao autor e editor.

AGRADECIMENTOS

O concluir deste trabalho significa mais do que na realidade é: apresenta-se como o finalizar de uma etapa da minha vida. É nesta pequena folha que se relembra e mostra apreço por todas as pessoas e entidades que de um modo directo ou indirecto e mais ou menos espaçadamente no tempo contribuíram para que aqui se chegasse.

Em primeiro lugar dirijo o meu sincero agradecimento ao Professor Doutor José António Almeida. Este é um agradecimento que se materializa de diversas formas: i) pela oportunidade de ser seu orientando, desenvolvendo um trabalho de investigação que, pelos constantes desafios e problemas de interessante resolução, se mostrou bastante aliciante; ii) pela imaginação e inovação na busca de respostas, que sempre me motivaram a continuar o trabalho e; iii) acima de tudo pelo seu exemplo de inigualável profissionalismo.

Tenho de agradecer a sempre pronta ajuda, partilha de dados, conhecimentos e levantamento de questões pertinentes por parte do Nuno Barreiras, Helena Amaral e Judite Fernandes. O meu sincero agradecimento.

Porque ter levado este projecto a bom porto muito se deve ao ambiente vivido no local de trabalho, tanto pela ciência que na sala se respira como pela boa disposição que todos eles transmitem, tenho de agradecer: ao Martim Chichorro pela revisão dos textos e pelas discussões acerca da validade do modelo geológico; ao António Ferreira pela prontidão com que sempre me auxiliou em todas as dúvidas e por ter sempre colocado o seu enorme conhecimento sobre o *gOcad* à minha disposição; à Agnieszka Ysocka, Nuno Leal e Isabel Borges por todos os momentos de boa disposição.

Como este é o finalizar de todo um percurso académico, desejo agradecer, de um modo geral, a todos os que dele fizeram parte: aos docentes do DCT que, através do seu rigor científico, capacidade e entusiasmo a transmitir conhecimento, contribuíram para a minha formação profissional; a todos os colegas que partilharam noites de estudo, preocupação, desejos e projectos, e que muitas vezes, em situações que pareciam inultrapassáveis, mais do que caminharam a meu lado. O meu muito obrigado. De um modo particular agradeço ao Tiago Guimarães, Fernando Alves, Filipe Carrasco e João Oliveira.

Ao Carlos Silva e Ana Luísa Pacheco, e a todos os outros que de um modo paralelo sempre estiveram presentes neste percurso, oferecendo amizade e muita acalmia nos tempos difíceis. Um muito obrigado.

À Filipa Matias, porque o modo como se enquadra em cada agradecimento até aqui feito é representativo da sua importância neste percurso. A preocupação, apoio, motivação e carinho são a face de algo que é muito mais que um sentimento. Muito obrigado por tudo, para sempre.

Por último, e de um modo geral, quero agradecer à minha família. Ao significado que têm na minha vida, traduzido num equilíbrio emocional que faz-me ser mais e melhor. São a base de todos os valores morais e sociais pelos quais orgulhosamente me rejó, e que me fazem dar sempre o melhor. De um modo particular às pessoas que mais admiro, os meus pais. Ao meu saudoso Pai, cuja imagem de homem convicto dos seus valores e figura parental irrepreensível se encontra cravada na minha memória, inspirando-me diariamente e sobretudo nos momentos mais difíceis. À minha Mãe, que todos os dias me

enche de amor e alegria para enfrentar qualquer adversidade. São dois exemplos que procuro seguir, que sempre acreditaram em mim e que sem eles nada disto teria feito sentido, nem teria sido possível. O meu mais profundo e sincero agradecimento, com muito amor.

RESUMO

A modelação do fluxo em sistemas aquíferos num simulador dinâmico é um exemplo onde podem ser utilizados modelos geoestatísticos, nomeadamente na delimitação vertical dos sistemas aquíferos e atribuição local de propriedades hidráulicas. No entanto, a interface entre estes 2 modelos é condicionada pela resolução espacial. Enquanto os modelos estocásticos geológicos podem ser definidos em malhas constituídas por milhões de blocos, os modelos de simulação dinâmica encontram-se limitados às dezenas de milhares de blocos.

O presente trabalho tem como principal objectivo a implementação de uma metodologia que faça a integração otimizada entre os modelos geológicos estocásticos de alta resolução (modelos geoestatísticos) e os modelos de simulação de sistemas aquíferos (modelo hidrogeológico). A solução apresentada centra-se na realização de um modelo geológico de alta resolução, tirando partido de algoritmos geoestatísticos e ulterior adaptação optimal (*upscaling*) para uma malha de maior dimensão.

A metodologia implementada subdivide-se em duas etapas principais. Numa primeira etapa realiza-se a construção de um modelo geológico 3D das litologias por simulação sequencial da indicatriz (SSI). No algoritmo SSI foram inseridas, simultaneamente, 2 condicionantes, o que constitui uma das inovações deste trabalho: i) correcção às médias locais, respeitando a complexidade geológica da área e a ocorrência vertical de litogrupos, e ii) histograma das transições entre litogrupos na direcção vertical, obrigando a que as regras de transição entre troços dos dados experimentais fosse respeitada.

Na segunda etapa faz-se a adaptação / simplificação optimal do modelo. Para tal, definiram-se as principais unidades hidrogeológicas de forma conceptual. Seguidamente aplicou-se a simplificação através de uma aplicação informática inovadora que foi desenvolvida, programada e testada, baseada no método de optimização *Simulated Annealing*. São assim obtidos localmente os limites para cada uma das unidades hidrogeológicas e uma matriz de parâmetros hidráulicos (permeabilidade, porosidades e coeficientes de armazenamento) que podem ser utilizados directamente no modelo de fluxo.

A metodologia proposta foi implementada aos terrenos subjacentes da antiga fábrica da SPEL, no concelho do Seixal. Para além do desenvolvimento dos modelos geológico e hidrogeológico do local, foram feitos testes sintéticos do fluxo da água subterrânea no MODFLOW.

Palavras-chave: Modelo geológico 3D de alta resolução; Simulação sequencial da indicatriz (SSI), *Simulated Annealing*, *Upscaling*.

ABSTRACT

The modelling of groundwater flow systems in a dynamic simulator is an example which can be used geostatistical models, particularly in vertical delineation of aquifers and the allocation of local hydraulic properties. However, the interface between these two models is constrained by the spatial resolution. While the stochastic geological models can be defined on meshes consisting of several millions of blocks, the dynamic simulation models are limited to tens of thousands of blocks.

This work has as main objective the implementation of a methodology that makes optimal integration between the geological models of stochastic high resolution (geostatistical models) and simulation models of groundwater (hydrogeological model). The solution presented is focused on achieving a high resolution geological model, taking advantage of geostatistical algorithms and subsequent optimal adaptation (upscaling) for a larger mesh.

The methodology implemented is divided into two main steps. In a first step a 3D stochastic geological model of the lithologies (high resolution geological model) using the algorithm sequential indicator simulation (SIS) were constructed. SSI algorithm included simultaneously two constrains, which is one of the innovations of this work: i) correction for local means, respecting the geological complexity of the area and the vertical occurrence lithogroups, and ii) histogram of the vertical transitions between lithogroups, requiring that the transition between sections of the experimental data was honoured.

In the second step the geological model is upgraded / simplified according an optimal procedure. To this end, first we defined conceptually the main hydrogeological units. Therefore, the option of simplifying optimal stochastic geological model was carried out through an innovative software application developed, programmed and tested, based on the optimization method Simulated Annealing. Limits are obtained, for each of the hydrogeologic units, and an array of hydraulic parameters (transmissivity, storage coefficient and porosity), that can be used directly in the flow model.

The proposed methodology was implemented to the underground area of the SPEL, in Seixal council. In addition to developing geological and hydrogeological models, synthetic tests of groundwater flow in MODFLOW were made.

Keywords: High resolution 3D geological model; Sequential Indicator Simulation (SIS), Simulated Annealing, Upscaling.

ÍNDICE GERAL

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Introdução | 1 |
| 1.1 | Enquadramento da tese e objectivos | 1 |
| 1.2 | Organização da tese | 2 |
| 2 | Descrição do caso de estudo | 3 |
| 2.1 | Enquadramento geográfico e problemática ambiental | 3 |
| 2.2 | Enquadramento geológico | 4 |
| 2.2.1 | Estratigrafia e litologia | 6 |
| 2.2.2 | Colunas litostratigráficas sintéticas comparativas de sector para sector | 9 |
| 2.2.3 | Tectónica | 10 |
| 2.2.4 | Hidrogeologia | 11 |
| 3 | Metodologia e fundamentos teóricos | 15 |
| 3.1 | Estratégia | 15 |
| 3.2 | Modelo Geológico 3D | 18 |
| 3.2.1 | Formalismo da Indicatriz | 18 |
| 3.2.2 | Variografia | 19 |
| 3.2.3 | Simulação sequencial da indicatriz | 22 |
| 3.3 | Adaptação optimal do modelo geológico 3D para o Visual ModFlow | 26 |
| 3.3.1 | Caracterização do algoritmo simulated annealing | 27 |
| 3.3.2 | Método de optimização | 27 |
| 3.3.3 | Cálculo das propriedades de cada célula | 28 |
| 3.4 | O software Visual ModFlow | 28 |
| 4 | Tratamento dos dados | 31 |
| 4.1 | Dados geológicos | 31 |
| 4.1.1 | Classificação dos litogrupos | 33 |
| 4.1.2 | Análise estatística dos litogrupos | 34 |
| 5 | Caso de estudo | 41 |
| 5.1 | Modelo geológico 3D | 41 |
| 5.1.1 | Análise da continuidade espacial | 41 |
| 5.1.2 | Simulação Sequencial da Indicatriz | 43 |
| 5.1.3 | Imagem média | 51 |
| 5.1.4 | Representação do modelo estocástico geológico 3D | 53 |
| 5.2 | Modelo hidrogeológico | 54 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 5.2.1 | Adaptação do modelo geológico..... | 54 |
| 5.2.2 | Modelo Conceptual | 58 |
| 5.2.3 | Testes sintéticos de extracção..... | 61 |
| 6 | Discussão e considerações finais..... | 67 |
| 7 | Referências bibliográficas | 71 |

Anexos

Anexo A – Base de dados geológica;

Anexo B – Análise às transições por região: desvios SSI com correcção das probabilidades locais e condicionamento ao histograma das transições;

Anexo C – Análise às médias por região: Desvios SSI com correcção das probabilidades locais e condicionamento ao histograma das transições;

Anexo D – Análise às transições por região: desvios SSI com correcção das probabilidades locais;

Anexo E – Análise às médias por região: desvios SSI com correcção das probabilidades locais;

Anexo F – Análise às transições por região: SSI normal;

Anexo G – Análise às médias por região: SSI normal;

Anexo H – Visualização dos furos D1 e D4.

ÍNDICE DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| Figura 2.1 - Localização geográfica da área em estudo | 3 |
| Figura 2.2 - Área da antiga Sociedade Portuguesa de Explosivos | 4 |
| Figura 2.3 - Geologia da área em estudo (Carta Geológica – Folha 34-D) | 5 |
| Figura 2.4 - Localização das colunas litostratigráficas sintéticas..... | 9 |
| Figura 2.5 - Colunas litoestratigráficas de diferentes zonas da área (1, 2 e 3, respectivamente) | 10 |
| Figura 6 - Metodologia adoptada para o presente estudo | 16 |
| Figura 7 - Exemplo de avaliação de proporções de transição | 26 |
| Figura 4.1 – Localização das sondagens na área de estudo..... | 32 |
| Figura 4.2 - Representação em perspectiva das sondagens na área de estudo (vista de Sul e ampliada 5 vezes) | 32 |
| Figura 4.3 - Distribuição dos dados experimentais segundo regiões de 50 metros (imagem vista de Oeste e sobrelevada 5x). | 37 |
| Figura 5.1 - Variograma experimental do litogrupo "Areias" | 41 |
| Figura 5.2 - Variograma experimental do litogrupo "Calcários" | 42 |
| Figura 5.3 - Variograma experimental do litogrupo "Arenito" | 42 |
| Figura 5.4 - Variograma experimental do litogrupo "Argilas" | 42 |
| Figura 5.5 - Variograma experimental do litogrupo "Margas" | 42 |
| Figura 5.6 - Variograma experimental multifásico horizontal | 42 |
| Figura 5.7 - Variograma experimental multifásico vertical | 42 |
| Figura 5.8 - Imagem simulada 3, em planta Z=1 | 44 |
| Figura 5.9 - Imagem simulada 6, em planta Z=1 | 44 |
| Figura 5.10 - Imagem simulada 13, em perfil x=110012.5..... | 44 |
| Figura 5.11 - Imagem simulada 18, em perfil y=1831012.5..... | 45 |
| Figura 5.12 – Variogramas multifásicos da simulação #2. As direcções (0,0), (90,0) e (0,90) correspondem respectivamente aos eixos Y, X e Z | 46 |
| Figura 5.13 – Variogramas multifásicos da simulação #5. As direcções (0,0), (90,0) e (0,90) correspondem respectivamente aos eixos Y, X e Z | 46 |
| Figura 5.14 - Diagrama de cálculo dos desvios..... | 47 |
| Figura 5.15 - Gráfico do comportamento do desvio em cada método | 49 |
| Figura 5.16 - Gráfico do comportamento do desvio em cada método | 51 |
| Figura 5.17 - Imagem média das simulações em planta Z=1 | 52 |
| Figura 5.18 - Imagem média das simulações em planta Z=161 | 52 |
| Figura 5.19 - Imagem média das simulações em perfil X= 110012.5 | 52 |
| Figura 5.20 - Imagem média das simulações em perfil X=114112.5 | 52 |
| Figura 5.21 - Representação das 2 722 500 células em que se discretizou a área em estudo (ampliado 5 vezes) | 53 |
| Figura 5.22 – Modelo geológico 3D | 53 |
| Figura 5.23 - Esquema das unidades e dos limites existentes entre as mesmas..... | 54 |
| Figura 5.24 - Exemplo da construção dos limites entre unidades: 1) unidades de partida; 2) resultado final após método de optimização; 3) pós-processamento | 56 |
| Figura 5.25 - Imagem média das simulações, perfil X= 110012.5..... | 57 |
| Figura 5.26 - Imagem obtida através do método SA, perfil X= 110012.5 | 57 |
| Figura 5.27- Distribuição da entropia, X=113262.5 | 58 |

| | |
|--|----|
| Figura 5.28 - Malha do modelo vista em planta..... | 59 |
| 5.29 - Perfil da grelha e unidades hidrogeológicas, perfil sobreelevado 5x (y=182012.5)..... | 59 |
| 5.30 - Perfil da grelha e unidades hidrogeológicas, perfil sobreelevado 5x (x=110012.4)..... | 59 |
| Figura 5.31 - Exemplo de permeabilidade horizontal (m/d), x=112475 (perfil sobreelevado 5 vezes) | 61 |
| Figura 5.32 – Perfil do modelo geológico (x=112462.5) | 61 |
| Figura 5.33 - Localização dos poços de extracção..... | 62 |
| Figura 5.34 - Exemplo de permeabilidade horizontal (m/d), x=112012.5 (perfil sobreelevado 5 vezes), Poço D2..... | 63 |
| Figura 5.35 - Exemplo de permeabilidade vertical (m/d), x=112012.5 (perfil sobreelevado 5 vezes), Poço D2..... | 63 |
| Figura 5.36 – Comportamento dos vectores velocidade de fluxo, x=112012.5 (perfil sobreelevado 5x), Poço D2..... | 64 |
| Figura 5.37 - Exemplo de permeabilidade horizontal (m/d), y=182679 (perfil sobreelevado 5x), Poço D3 64 | |
| Figura 5.38 - Exemplo de permeabilidade vertical (m/d), y=184230 (perfil sobreelevado 5x), Poço D3 | 64 |
| Figura 5.39 - Comportamento dos vectores velocidade de fluxo, y=184230 (perfil sobreelevado 5x), Poço D3 | 65 |

ÍNDICE DE TABELAS

| | |
|--|----|
| Tabela 2.1 - Esquema estratigráfico para o Cenozóico da Bacia do Baixo Tejo – Sector Distal (in (CUNHA et al., 2009))..... | 7 |
| Tabela 4.1 – Litologias presentes nas sondagens e litogrupos | 33 |
| Tabela 4.2 - Litogrupos e respectivas proporções | 34 |
| Tabela 4.3 – Proporções de cada litogrupo por intervalos de profundidade..... | 37 |
| Tabela 4.4 – Ocorrência dos dados experimentais por níveis | 38 |
| Tabela 4.5 – Tabela das transições entre os dados experimentais na região 1 (0 – 50m)..... | 38 |
| Tabela 4.6 - Tabela das transições entre os dados experimentais na região 2 (51 – 100m) | 38 |
| Tabela 4.7 - Tabela das transições entre os dados experimentais na região (101 – 150m) | 38 |
| Tabela 4.8 - Tabela das transições entre os dados experimentais na região (151 – 200m) | 39 |
| Tabela 5.1 - Comparação entre as proporções dos litogrupos nos dados experimentais com as das imagens simuladas | 46 |
| Tabela 5.2 - Variação percentual entre cada simulação e os dados experimentais | 46 |
| Tabela 5.3 - Desvios entre as proporções nos litogrupos na SSI sem qualquer correcção e nos dados experimentais | 48 |
| Tabela 5.4 - Desvios entre as proporções nos litogrupos na SSI com correcção médias locais e nos dados experimentais | 48 |
| Tabela 5.5 - Desvios entre as proporções nos litogrupos na SSI com correcção médias locais e transições e nos dados experimentais..... | 48 |
| Tabela 5.6 - Desvios entre estatísticos de transição nos litogrupos entre as 3 simulações e os dados experimentais, região 1..... | 50 |
| Tabela 5.7 - Desvios entre estatísticos de transição nos litogrupos entre as 3 simulações e os dados experimentais, região 2..... | 50 |
| Tabela 5.8 - Desvios entre estatísticos de transição nos litogrupos entre as 3 simulações e os dados experimentais, região 3..... | 50 |
| Tabela 5.9 - Desvios entre estatísticos de transição nos litogrupos entre as 3 simulações e os dados experimentais, região 4..... | 50 |
| Tabela 5.10 – Arquétipos para definição das camadas | 55 |
| Tabela 5.11 - Paramentros hidrogeológicos de cada litogrupo..... | 60 |
| Tabela 5.12 - Propriedades dos poços de extracção..... | 62 |

1 INTRODUÇÃO

1.1 ENQUADRAMENTO DA TESE E OBJECTIVOS

O presente trabalho foi desenvolvido no âmbito da disciplina de dissertação em Engenharia Geológica (Georrecursos) e inserido no projecto de I&D designado por “CRUDE – Delineating new sampling, analysing and modelling strategies for assessing the Contamination of soil and gRoUnDwatEr by organic compounds”, PTDC/CTE-GEX772959/2006, com os seguintes objectivos: i) construção de um modelo geológico 3D estocástico e ii) adaptação do modelo geológico 3D para entrada num simulador do fluxo da água. Para tal foi desenvolvida uma metodologia que se baseia fortemente em métodos geostatísticos de simulação.

Os métodos geostatísticos permitem determinar com precisão a distribuição espacial e/ou temporal de determinado fenómeno natural, que evidencia correlação (SOARES, 2000). Através da determinação do comportamento de corpos geológicos, os métodos estocásticos ostentam grande importância nas ciências da Terra, nomeadamente na construção de modelos geológicos 3D. Estes modelos são uma ferramenta poderosa para a compreensão da geologia, permitindo integrar várias fontes de informação (MATIAS, 2010). Também podem ser utilizados para validação de hipóteses geológicas.

Os modelos geológicos 3D (MG3D) assumem relevância quando aplicados na indústria mineira e petrolífera, como base para cálculos de reservas e avaliação económica (ALMEIDA, 2010). Representam um salto qualitativo entre um modelo conceptual criado a partir de mapas geológicos 2D e perfis, conjugados com pontos de dados específicos como por exemplo sondagens, e um modelo conceptual que se entende robusto, baseado em métodos matemáticos complexos como os geostatísticos. No entanto, a criação destes MG3D não se deve basear única e exclusivamente nos métodos matemáticos, apoiando-se numa análise pericial da geologia. Um modelo conceptual hidrogeológico deve respeitar este compromisso, evitando-se assim falta de compreensão entre a estrutura geológica e a sua relação com a hidrogeologia.

O domínio de utilização dos modelos de fluxo é abrangente. Podem ser utilizados para diversos fins, apresentando grande relevância em estudos como, por exemplo, quantificação da utilização da água de determinado aquífero, determinação de perímetros de protecção para furos de captação e transporte de contaminantes. Neste último exemplo, são ferramentas essenciais na realização de um modelo conceptual da contaminação (PEREIRA et al, 2001), através dos modelos de transporte de massa e rastreio de partículas. É possível prever o historial do percurso dos contaminantes, acendendo por fim à fonte de contaminação e respectiva evolução temporal.

Devido à forte inovação tecnológica no que diz respeito ao processamento gráfico e de cálculo, nos últimos anos tem sido possível criar modelos geológicos 3D ou hidrogeológicos viáveis, em espaços temporais relativamente curtos (ROSS et al, 2004). Todavia, no caso do objecto de estudo serem as águas subterrâneas, o papel dos modelos estocásticos tem sido relevado para segundo plano, limitando-se normalmente à interpolação dos limites das unidades e dos parâmetros hidráulicos das respectivas unidades.

Um dos problemas relacionados com a geração de modelos hidrogeológicos com base nos modelos geoestatísticos ou estocásticos prende-se com a realização de uma discretização pormenorizada da realidade geológica. A um modelo conceptual cujo grau de detalhe se apresente elevado, os modelos de simulação de fluxo respondem com incapacidade de cálculo. A necessidade de simplificação da realidade geológica pode levar a resultados irreais e a *outputs* de modelos de fluxo pouco fiáveis. É este problema que a presente dissertação se propõe ultrapassar, apresentando uma metodologia que permite a criação de um modelo geológico 3D de pormenor, propondo condicionamentos ao algoritmo de simulação, e a adaptação para modelo de fluxo. Esta adaptação é realizada através de métodos estocásticos, determinando com precisão limites entre unidades hidrogeológicas e estabelecendo os parâmetros hidráulicos das mesmas.

Para a área em estudo existem alguns artigos científicos que utilizam modelos de transporte, como é o caso de FERNANDES et al, 1999. Já a problemática ambiental em que a área se encontra envolvida é largamente estudada, devendo ser feita referência a ALMEIDA et al, 2002 e AMARAL et al, 2009.

Para a ser levado a cabo o trabalho, houve necessidade de recorrer a alguns *softwares* como o *geoMS* (RODRIGUES et al, 1998), *gOcad* e *VisualMODFLOW*.

1.2 ORGANIZAÇÃO DA TESE

A presente dissertação encontra-se dividida em 6 capítulos, de acordo com a organização do trabalho. No primeiro capítulo são apresentados os objectivos e as motivações da tese.

No segundo capítulo realiza-se uma descrição da realidade geológica da área a ser estudada. Esta fase é de extrema relevância para o desenrolar do trabalho, tanto para a compreensão do modelo geológico obtido como para a criação do modelo hidrogeológico.

O terceiro capítulo apresenta todos os pressupostos teóricos que servem de base para a criação do modelo estocástico geológico 3D, bem como a estratégia adoptada. Ainda é exposto o método de optimização utilizado para a determinação dos limites hidrogeológicos e o método de cálculo das propriedades hidráulicas.

O tratamento dos dados é descrito no capítulo 4. É realizada uma análise aos dados geológicos e uma análise estatística, essenciais para o processo de simulação. São apresentados os condicionamentos que se inserem no algoritmo de simulação

No quinto capítulo descreve-se a realização do modelo estocástico geológico 3D e a adaptação para o modelo de fluxo. Realizam-se também testes de extracção para verificar o comportamento da circulação de água.

No sexto capítulo apresenta-se as conclusões que são possíveis de alcançar com o presente trabalho. Ainda são realizados comentários finais à metodologia adoptada e sugestões para trabalhos futuros.

2 DESCRIÇÃO DO CASO DE ESTUDO

2.1 ENQUADRAMENTO GEOGRÁFICO E PROBLEMÁTICA AMBIENTAL

O presente estudo é relativo a uma área localizada no concelho do Seixal, na Península de Setúbal, pertencente ao distrito com o mesmo nome. Situa-se na margem esquerda da zona vestibular do rio Tejo e encontra-se limitada a Noroeste pelo Baía do Seixal. A Sul faz fronteira com o concelho de Sesimbra, enquanto a Este e Oeste é limitada pelos concelhos de Almada e Barreiro, respectivamente. Na Figura 2.1 apresenta-se o enquadramento geográfico nacional e regional da área de estudo, representada cartograficamente na Carta Militar de Portugal, do Instituto Geográfico do Exército, escala 1:25000, Folha 442 – Barreiro.

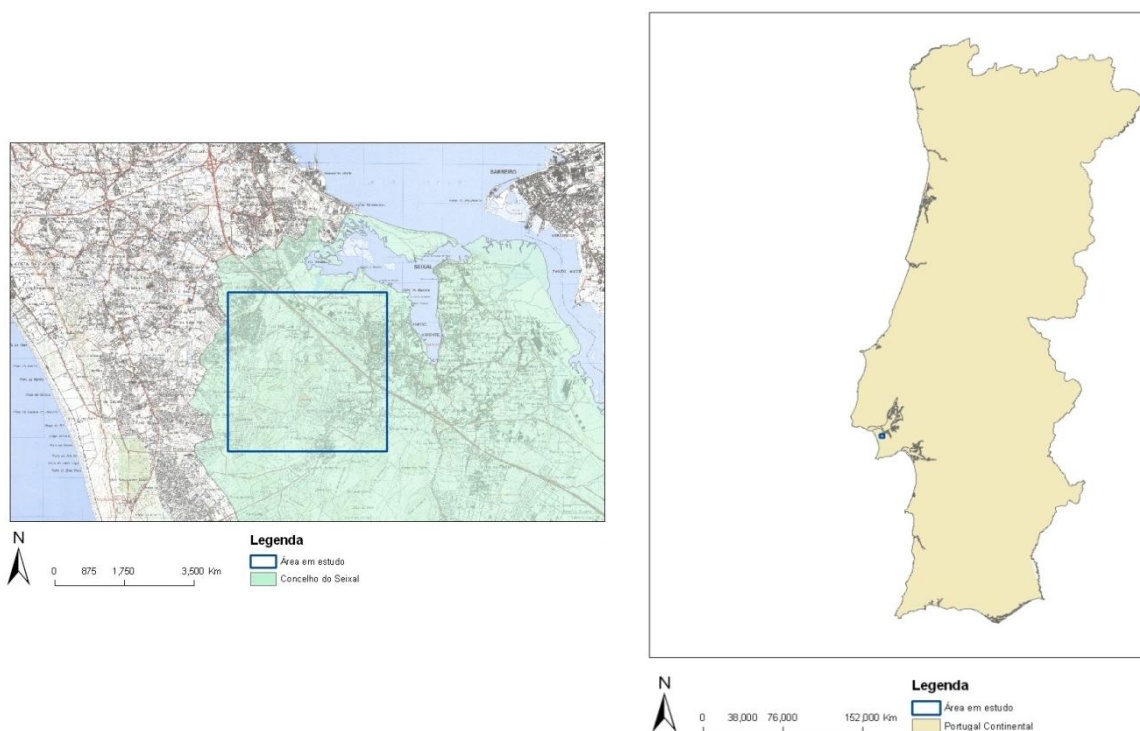


Figura 2.1 - Localização geográfica da área em estudo

A área estudada é um quadrado com 4 km de lado (1 600 000 m²), tendo-se seleccionado informação disponível até aos 200 metros de profundidade.

Nesta área localizam-se os terrenos onde, entre 1949 e 1998, a Sociedade Portuguesa de Explosivos (SPEL) desenvolveu produção de explosivos para fins militares (Figura 2.2). Durante os cerca de 50 anos de actividade, a SPEL produziu compostos orgânicos, tóxicos e potencialmente cancerígenos, entre os quais ácido sulfúrico, ácido nítrico e nitratos de tolueno, trinitrotolueno (TNT) e dinitrotolueno (DNT). A água utilizada para esta actividade foi depositada em lagoas escavadas nas areias não impermeabilizadas (AMARAL et al., 2009). Para além desta actividade, outras operações, tais como a existência de um vazadouro não controlado para resíduos de produção, a queima das lamas geradas no

tratamento das águas residuais ou o armazenamento de solos contaminados, potenciaram a contaminação dos solos e dos aquíferos existentes.

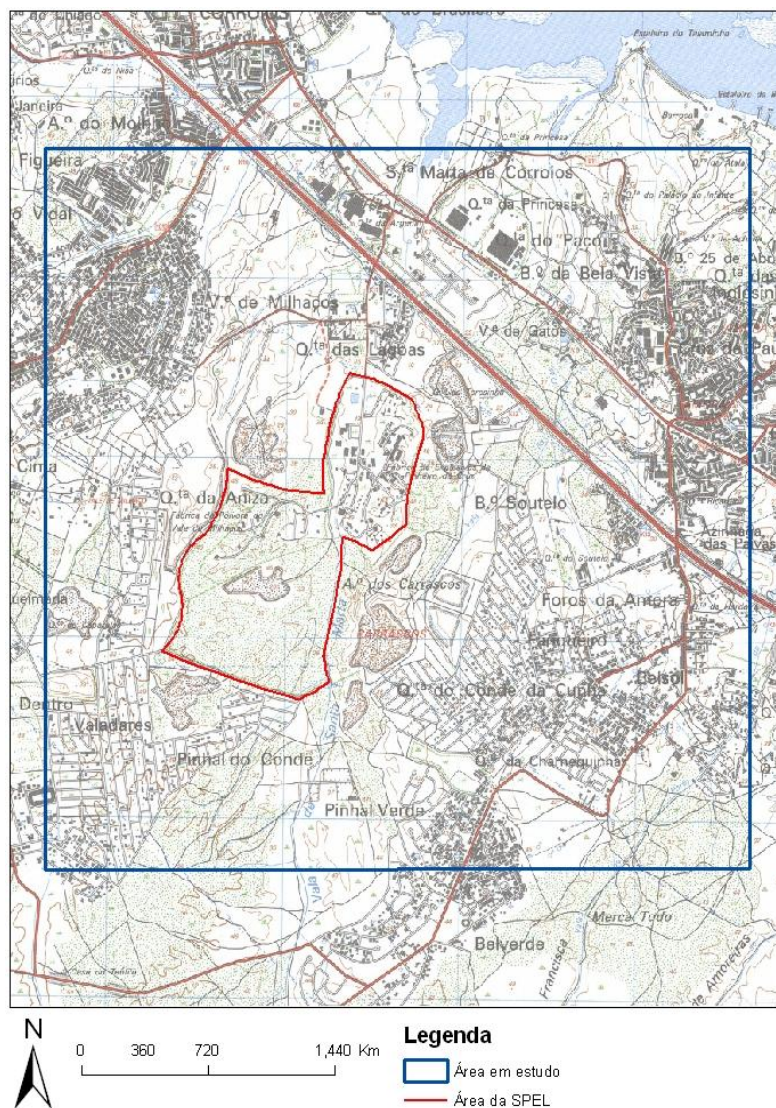


Figura 2.2 - Área da antiga Sociedade Portuguesa de Explosivos

As águas destes aquíferos têm diversos fins, destacando-se a utilização para consumo humano, agricultura e indústria. O principal malefício para a Saúde Pública centra-se na ingestão directa da água contaminada do aquífero livre. Existe também grande possibilidade de ingestão de alimentos contaminados, tendo em conta que a mesma água é utilizada para fins agrícolas.

2.2 ENQUADRAMENTO GEOLÓGICO

A área em estudo situa-se na Bacia do Baixo Tejo. Ao longo do tempo, esta bacia teve uma evolução complexa, resultando da interacção entre as diversas oscilações do nível do mar e os movimentos tectónicos a que esteve sujeita. A estes juntam-se as diversas alterações do clima que se fez sentir, fazendo também variar o tipo de sedimentos que enchem a bacia.

A Bacia do Baixo Tejo gerou-se no ciclo orogénico alpino (RIBEIRO et al., 1979). Em termos geomorfológicos, é uma depressão alongada na direcção NE-SW que se encontra ladeada a W e N pelas formações mesozóicas da orla ocidental, a NE e E pelo substrato hercínico e a sul comunica com o Atlântico na Península de Setúbal. Em resposta aos grandes movimentos de subsidência, ocorreu nesta bacia sedimentação intensa. A depressão encontra-se preenchida por depósitos paleogénicos e neogénicos, em grande parte recobertos por depósitos quaternários (Figura 2.3). A sedimentação que se verificou na bacia foi caracterizada pela alternância entre sedimentação continental, sedimentação de fácies salobra e sedimentação marinha, atestando assim a sucessão de ciclos regressivos e transgressivos que ocorreram principalmente durante o Neogénico – no total foram 7 ciclos para o período do Miocénico e pelo menos um ciclo para o Pliocénico (PAIS, 2004)

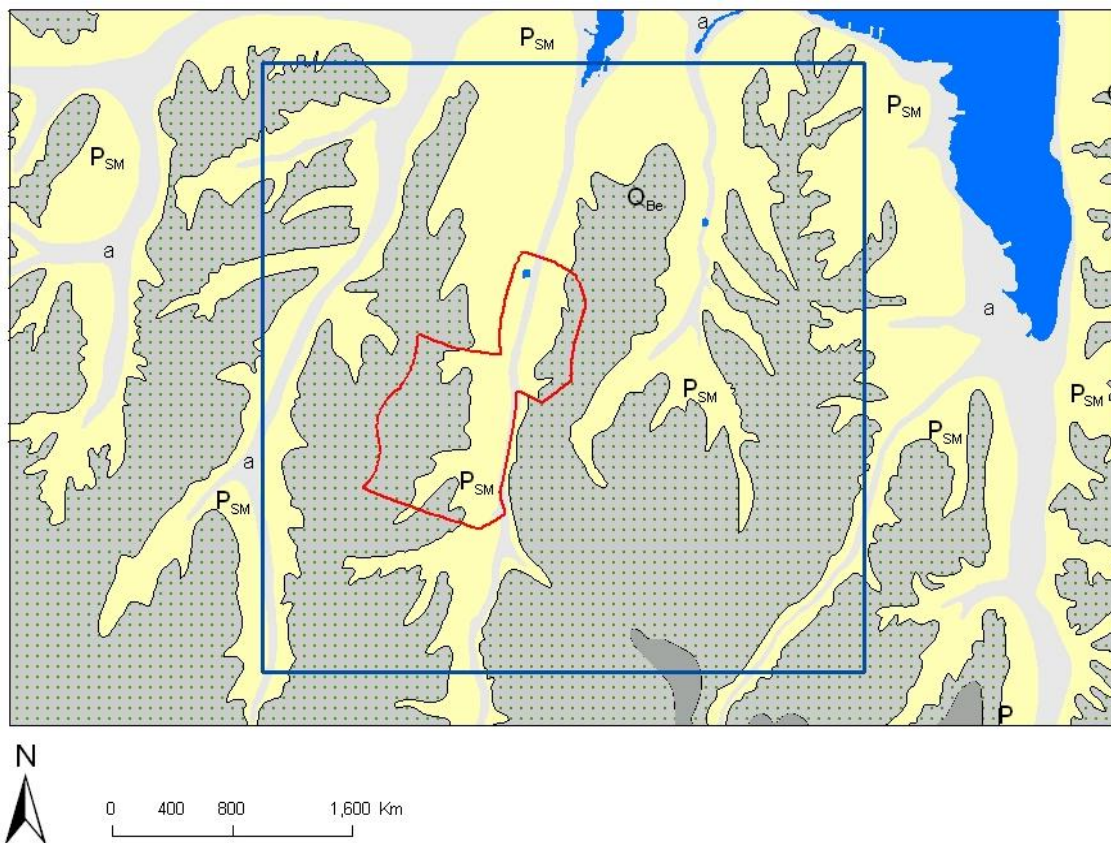


Figura 2.3 - Geologia da área em estudo (Carta Geológica – Folha 34-D)

Legenda

- Área em estudo
- Área da SPEL
- a – Aluviões e/ou aterros
- Q_{Be} – Conglomerados de Belverde
- P_{SM} – Formação de Santa Marta

A sedimentação nesta parte da bacia, o sector distal, iniciou-se no Paleogénico. No início do Miocénico o nível relativo do mar subiu, devido à subsidência progressiva da bacia, estendendo-se um pouco para interior e formando algumas zonas pantanosas nas regiões marginais. Ainda no Miocénico Inferior uma nova subida relativa do mar faz-se sentir, estendendo-se a sua influência muito para o interior, para perto da Azambuja. Posteriormente, aproximadamente há 17 Ma, o nível do mar terá descido, deixando assim

lugar para o Pré-Tejo divagar numa planície aluvial com um extenso delta terminal. O rio transportou até Lisboa areias grosseiras resultantes da erosão das cordilheiras do interior do território. O registo estratigráfico aponta para duas novas descidas do nível do mar neste período regressivo. No Miocénico médio o nível do mar voltou a subir, até às proximidades de Santarém. Nova descida do nível do mar que fez com que se depositassem areias finas na região de Lisboa, seguidas por biocalcarenitosossilíferos. No Miocénico Superior (Tortoniano médio), o mar retirou-se da Península de Setúbal.

No Pliocénico o pré-Tejo transportou os primeiros sedimentos de montante que chegaram à Península de Setúbal. Então esta seria toda ocupada por um largo estuário ou delta, que se estenderia pelo menos até ao Sado. Posteriormente, no Pliocénico superior há o levantamento de relevos, que conduziram ao aumento da energia do rio. Tal facto leva ao transporte e acumulação de mantos de cascalheiras que se estendem até ao litoral actual, onde constituem os Conglomerados de Belverde (PAIS & DIAS, 2009). Este episódio marca também a passagem do Pliocénico ao Quaternário. Após este acontecimento, e devido à subsidência da península para NE, dá-se uma inversão da rede de drenagem, que aliada a fenómenos de natureza tectónica levam ao desvio do Tejo para a posição actual. Passou-se para um ambiente de sedimentação diverso. Por fim, tanto o clima como as condições de larga parte da zona costeira passaram a ser favoráveis à deposição de grandes unidades de areias eólicas.

Resumindo e em termos gerais os depósitos do Paleogénico são essencialmente arcoses, arenitos arcósicos, conglomerados, argilitos e calcários margosos. É possível afirmar que o Miocénico é de fácies marinha nas zonas mais próximas do estuário, sendo constituído por 2 conjuntos: i) um areno-argiloso e ii) um conjunto greso-margoso geralmente mais antigo. No seu conjunto poder-se-á afirmar que o Miocénico está sobretudo representado a topo por alternâncias de camadas argilosas e arenosas e que para a base predominam unidades de arenito e margas. Os depósitos do Pliocénico são fundamentalmente continentais, com a existência de um episódio marinho no Placenciano, e são quase exclusivamente constituídos por areias com intercalações lenticulares de argilas. Estes sedimentos são de origem fluvial. O Pliocénico tende a aflorar nas zonas de encaixe de linhas de água e depressões na topografia.

2.2.1 ESTRATIGRAFIA E LITOLOGIA

A estratigrafia da área em estudo é definida com base na coluna litostratigráfica sintética do sector sul e leste, apresentado na Folha 34-D Lisboa (PAIS ET AL., 2006). As formações geológicas que se descrevem são inferidas com base nas descrições litológicas apresentadas na notícia explicativa da Folha 34-D Lisboa (PAIS ET AL., 2006). Outra fonte de referência é a síntese da coluna estratigráfica elaborada por CUNHA ET AL., 2009, PAIS ET AL., 2010 para o cenozóico do sector distal da Bacia do Baixo Tejo (Tabela 2.1). Algumas destas formações são mais importantes para o objectivo do presente trabalho, dado que têm uma maior representatividade na área. Em seguida realiza-se uma descrição mais pormenorizada das diferentes unidades geológicas descritas para o sector em estudo e área envolvente.

Tabela 2.1 - Esquema estratigráfico para o Cenozóico da Bacia do Baixo Tejo – Sector Distal (in (CUNHA et al., 2009))

| Erat./Erat. | Peri./Sist. | Época/Série | Idade/Andar | Unidades faunísticas | Ma | Fase tectónica | Sector distal | | | |
|-------------|----------------|--------------|------------------|----------------------|---------------------------------|---------------------|------------------------------------|---|---|----------------------------------|
| | | | | | | | Lisboa / Almada | Península de Setúbal Litoral ocidental Flanco norte da serra da Arrábida | | |
| Cenozóica | Quaternário | Holocénico | Versiliano | | 0,01 | Iberomanchega | Aluviões | Aluviões Dunas | | |
| | | Plistocénico | Tirreniano | | 1,8 | | Terraços | Terraços | | |
| | | | Calabriano | | | | | Formação Marco Furado | | |
| | | | Gelasiano | | | | | Conglomerado de Belverde | | |
| | | Pliocénico | Sup. Placenciano | Villaniano | 2,6 | | | | | |
| | | | Inf. Zanciano | Rusciano | 3,6 | | | | | Áreas de Santa Marta |
| | Neogénico | Sup. | Messiniano | Turoliano | 5,3 | Bética | T2 VIIb | Áreas de Cabo Ruivo | Depósitos de Ribeira da Lage | Áreas e margas de Quinta do Anjo |
| | | | Tortoniano | Valesiano | 7,3 | | T1 VIIa | Áreas de Barço de Prata | | |
| | | Méd. | Serravaliano | Astaraciano | 11,6 | S2 VIIb | Grés de Grilos | Dep. glauconíferos de Penedo | Arenitos e biocalcarenitos de Pinhal e Castelo de Palmela | |
| | | | Langhiano | Orleaniano | | S1 VIIa | Argilas azuis de Xabregas | | | |
| | | Vc | | | Calcários da Quinta das Conchas | | | | | |
| | | Inf. | Burdigaliano | Ageriano | 16 | L1 Vb | Áreas do Vale de Chelas | Biocalcarenitos e margas de Foz da Fonte | Argilitos de Azeitão | |
| | | | | | | Va3 | Calcários da Musqueira | | | |
| | | | Aquitano | | 20,4 | B2 Va2 | Áreas com <i>Placuna miocenica</i> | | | |
| | | | | | | Va1 | Calcários do Casal Vistoso | | | |
| | | Paleogénico | Sup. | Chatiano | 23 | Castelhana | B1 IVb | Áreas da Quinta do Bacalhau | Congl. e areias de F. Fonte | Formação de Benfica |
| | Inf. Rupeliano | | | IVa | | | Argilas azuis do Areiro | | | |
| | Eocénico | | Sup. Priaboniano | 34 | Pirenaica | III | Banco Real | | | |
| | | | Méd. Bartoniano | | | B0 II | Áreas da Estefânia | | | |
| | Paleocénico | | Inf. Luteciano | 56 | Pré-Pirenaica | A2 I | Camadas com <i>Venus ribeiroi</i> | | | |
| | | | Sup. Tanetiano | | | Neolarâmida | A1 | Associação IV | | |
| | | | Méd. Selandiano | | | | Associação III | | | |
| | Inf. Daniano | | 66 | Paleolarâmida | Associação II | Formação de Benfica | Associação I | | | |

Refira-se ainda, que os dados litológicos serão cruzados com os descritos na sondagem de Belverde (Notícia Explicativa da Folha 34-D Lisboa), realizada pela Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa (PAIS et al, 2003) com o objectivo de se proceder a um levantamento estratigráfico em profundidade naquele sector. A sua relativa proximidade em relação ao sector em estudo, faz com que o log da referida sondagem possa contribuir para eventuais leituras de correlação lateral.

2.2.1.1 MIOCÉNICO

M_{FT} – Argilas do Forno de Tijolo

Esta unidade é constituída por areias finas argilosas. Na margem sul do rio Tejo ocorrem desde as proximidades de Cacilhas até à Trafaria. Na sondagem de Belverde, entre os 410 m e o 469 m, foram intersectados os equivalentes laterais desta unidade, materializados em arenitos finos e siltitos esverdeados, com a presença de alguns bancos de argilitos e de biocalcarenitos.

M_{QB} – Areias da Quinta do Bacalhau

Esta unidade caracteriza-se pela presença de depósitos progradantes de areias arcósicas fluviais com bancadas de argilitos, com uma espessura de cerca de 35 m. Na margem esquerda do rio Tejo afloram entre Cacilhas e a Trafaria. Na sondagem de Belverde foram descritos, entre os 375 e os 410 metros, os seus equivalentes laterais constituídos essencialmente por arenitos finos e alguns bancos de biocalcarenitos.

M_{QC} – Calcários de Quinta das Conchas

Esta formação é representada por biocalcarenitos grosseiros. Na sondagem de Belverde ocorrem entre os 272 e os 287 metros e são constituídos por siltitos micáceos com fracção argilosa abundante. No topo existem biocalcarenitos.

M_{Xa} – Argilas azuis de Xabregas

É um conjunto silto-argiloso, às vezes com a presença de areias finas. São representativos dos ambientes mais profundos do Neogénico da Bacia do Baixo Tejo. Foram reconhecidos na sondagem de Belverde entre as profundidades de 238 e 272 metros de profundidade, onde se encontram representadas por siltitos argilosos com algumas intercalações de biocalcarenitos.

M_{MG} – Calcários de Marvila e Grés dos Grilos indiferenciados

É uma unidade constituída por arenitos finos e biocalcarenitos. Na sondagem de Belverde esta unidade foi reconhecida entre os 209 e os 238 metros, sendo constituído por arenitos finos, na parte inferior, e siltitos na parte superior.

M_{CB} – Areolas de Cabo Ruivo e Areolas de Braço de Prata indiferenciados

São representadas alternâncias de arenitos finos, areias e bancadas finas de calcários margosos e gressosos. Este conjunto foi identificado na sondagem de Belverde entre os 130 e os 209 metros de profundidade, onde ocorreram arenitos finos a muito finos.

2.2.1.2 PLIOCÉNICO

P_{SM} – Formação de Santa Marta

Esta apresenta-se como uma das formações mais importantes da área em estudo. Encontra-se largamente representada na Península de Setúbal. Na base desta formação ocorrem conglomerados pouco espessos, seguidos de areias finas a grosseiras. Esta unidade apresenta espessura variável, cerca de 320 metros em Pinhal Novo, não ultrapassando os 50 metros na faixa litoral. Na sondagem de Belverde foram identificadas entre os 10 e os 130 metros de profundidade, sendo representadas por areias médias a finas.

Q_{BE} – Conglomerado de Belverde

Esta unidade sobrepõe o conjunto arenoso de Santa Marta. Apresenta uma espessura de cerca de 10-15 metros, matriz arenosa e clastos sub-rolados. No local da sondagem de Belverde a unidade encontra-se representada por conglomerados médios, mal calibrados e com matriz arenosa abundante.

Q_{MF} – Formação de Marco Furado

É uma unidade conglomerática, com matriz areno-argilosa e atinge uma espessura da ordem dos 30-40 m. Para oeste da Ribeira de Coima esta formação assenta sobre os Conglomerados de Belverde, enquanto para Este daquela ribeira repousa sobre as areias de Santa Marta.

2.2.2 COLUNAS LITOSTRATIGRÁFICAS SINTÉTICAS COMPARATIVAS DE SECTOR PARA SECTOR.

Com o principal objectivo de realizar uma pequena análise à evolução das litologias representadas nas sondagens em diferentes zonas da área de estudo, geraram-se 3 colunas litostratigráficas sintéticas, cujos resultados se apresentam na Figura 2.5. Estas colunas foram criadas com base em diversas sondagens que se encontravam próximas, sendo que a coluna 1 diz respeito ao aglomerado de sondagens que se situa no 1, a 2 no sector 2 e a 3 no sector 3 (Figura 2.4).

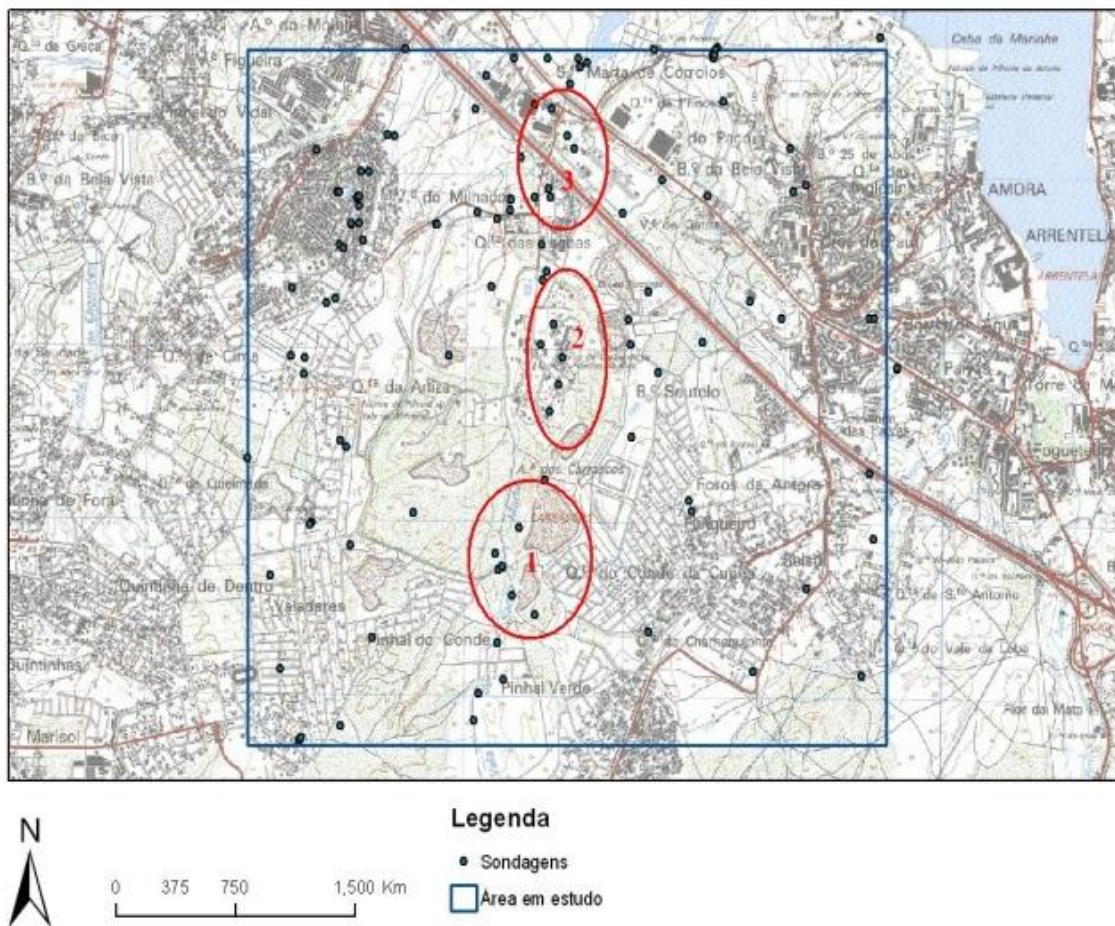


Figura 2.4 - Localização das colunas litostratigráficas sintéticas

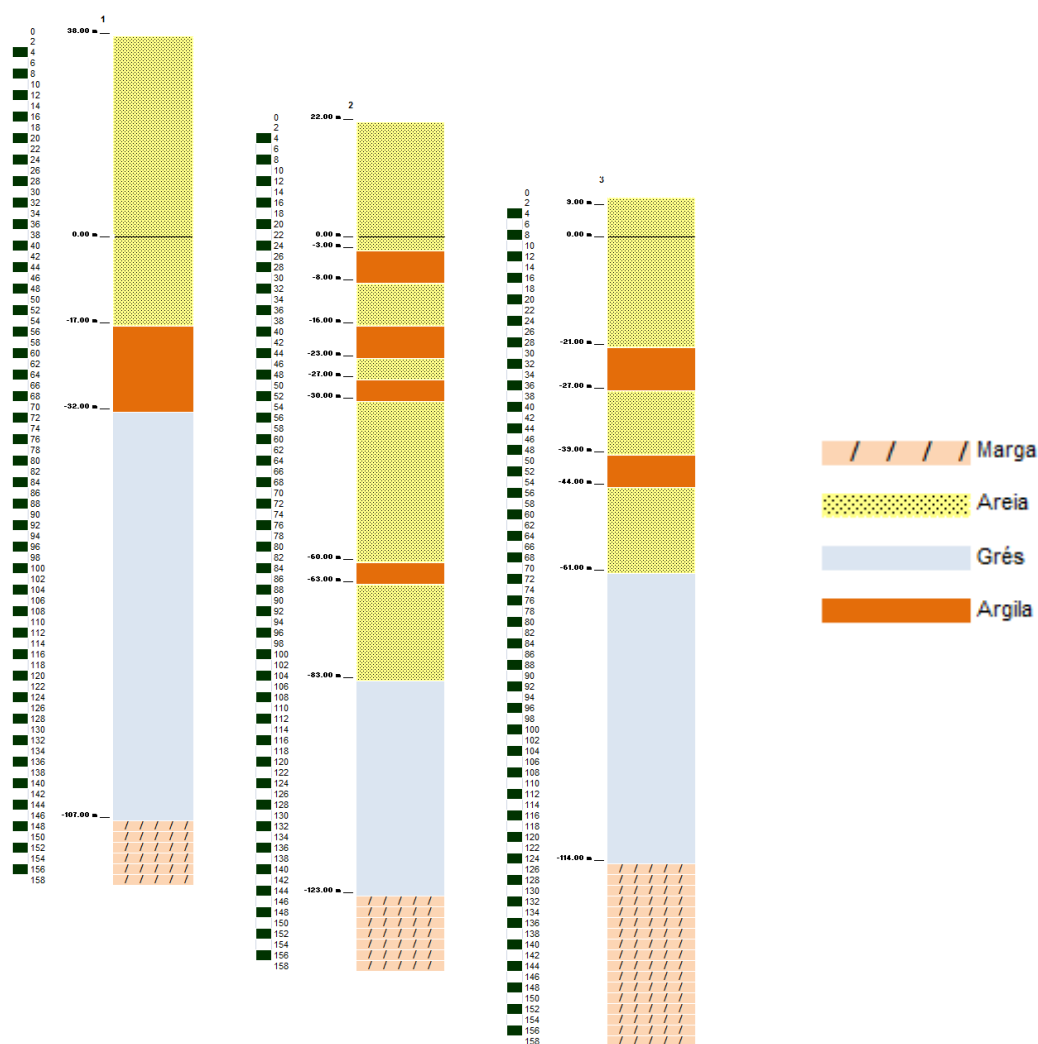


Figura 2.5 - Colunas litoestratigráficas de diferentes zonas da área (1, 2 e 3, respectivamente)

É possível verificar, e como esperado, nos primeiros metros existem areias e algumas intercalações de argilas. Estas litologias dizem respeito à “Formação de Santa Marta”. É possível averiguar também que devido ao aumento da profundidade, no segundo e terceiro sector, surgem lenticulas de argila que são comuns em toda a área de estudo. À medida que se aumenta a profundidade, surge um conjunto arenítico e por fim um corpo margoso. Existe a possibilidade de se relacionar as litologias aqui identificadas com as unidades hidrogeológicas da área em estudo, sendo que as areias correspondem ao aquífero superior livre e os arenitos com o aquífero semi-confinado.

2.2.3 TECTÓNICA

A bacia do Baixo Tejo é dominada por uma tectónica frágil, devendo-se sobretudo à sua extensão por activação de acidentes tectónicos do soco Mesozóico e Paleozóico. As formações que a preenchem dispõem-se de modo sub-horizontal e os bordos coincidem com falhas normais, activas durante o período de subsidência. Segundo ALMEIDA et al., 2000 a bacia, que corresponde a uma depressão tectónica alongada na direcção NE-SW, sofreu subsidência principalmente no decorrer do Miocénico.

As formações Cenozóicas da Bacia do Tejo, em geral sub-horizontais estão localmente afectadas por basculamentos, frequentemente associados à influência dinâmica de estruturas (falhas) do Soco Mesozóico e Paleozóico, reactivadas durante a subsidência da bacia e os impulsos Béticos e Quaternários. A influência dessas estruturas faz-se sentir ao nível de meso-fracturas e diaclasamento que afectam algumas unidades mio-pliocénicas. Ressalva-se ainda a estrutura em “graben” com direcção N-S, entre Alcochete e Setúbal, e com largura média de 2 Km, cuja existência se encontra associada à presença de uma estrutura diapirica profunda na área de Pinhal Novo (ALMEIDA, 2000).

A Bacia do Baixo Tejo (RIBEIRO et al., 1979, 1990; CURTIS, 1999; KULLBERG et al, 2000) é interpretada como uma bacia ante-país que foi gerada na dependência de um regime compressivo que desencadeou a inversão tectónica da Bacia Lusitânica. Esta regista os efeitos dos 2 eventos compressivos principais a que a Península Ibérica se encontrou sujeita, entre o fini-Cretácico-Paleogénico e Miocénico: o Pirenaico e o Bético, respectivamente.

Os depósitos pliocénicos que constituem a Bacia do Baixo Tejo contactam com os depósitos miocénicos sobrejacentes através de uma descontinuidade erosiva. Tal facto reflecte uma modificação na evolução da Bacia, através da interrupção da tendência subsidente no período que mediou entre a deposição dos dois conjuntos sedimentares neogénicos.

Os depósitos pliocénicos, no flanco N dos dobramentos da Cadeia Orogénica da Arrábida (Folha 38-B), não apresentam deformação, assentando em discordância sobre os sedimentos miocénicos inclinados para Norte. Este facto demonstra que a sedimentação dos depósitos pliocénicos ocorre posteriormente aos impulsos principais de inversão da bacia Lusitânica e de estruturação da Bacia do Baixo Tejo. Também deve ser referido que existiu uma reactivação da subsidência nesta área devido à deposição de toda a série arenosa pliocénica, que atingiu a centena de metros, e um controlo tectónico por parte de algumas das estruturas principais.

No Quaternário existe a passagem da agradação pliocénica a fluvial. A incisão fluvial encontra-se testemunhada por níveis de erosão, algumas vezes com depósitos continentais sobrepostos (Formação de Marco Furado), e terraços fluviais escalonados na topografia (PAIS ET AL, 2006).

2.2.4 HIDROGEOLOGIA

O Sistema Aquífero do Tejo-Sado é o mais importante sistema aquífero português, em grande parte pela qualidade físico-química desta água mas também por ser o maior sistema aquífero do território nacional. Os recursos hídricos subterrâneos apresentam-se como um importante factor de desenvolvimento, assegurando o abastecimento de diversos aglomerados urbanos, indústrias e actividade agrícola, situados a Sul do Tejo. No entanto existem heterogeneidades laterais e em profundidade deste sistema que fazem com que, em determinados sectores, se observe um aumento da mineralização da água, tornando-a imprópria para diversos fins, tais como o doméstico, agrícola e industrial.

Como referido anteriormente, este sistema aquífero é constituído essencialmente por terrenos paleogénicos e neogénico, em parte recobertos por unidades quaternárias. A estruturação da bacia é sempre subhorizontal, composta por unidades detríticas continentais, de idade paleogénica e neogénica, com intercalações de formações marinhas e salobras correspondentes aos máximos das transgressões

miocénicas. Neste sistema aquífero alternam as unidades aquíferas, arenitos e rochas carbonatadas (calco-arenitos, margas, calcários), com outras de permeabilidade baixa, como as argilas e as margas (RIBEIRO et al., 1979).

De um modo mais específico, a área de estudo situa-se na Bacia do Baixo Tejo, onde o sistema aquífero é constituído por um aquífero superior livre, sobrejacente a um aquífero, confinado a localmente semiconfinado, mio-pliocénico. Ambos os aquíferos apresentam comportamento análogo ao de meios porosos, embora sobretudo no Miocénico carbonatado, a permeabilidade possa ser também controlada por fissuração. Por fim, e com a presença de formações margosas separando-o do aquífero anterior, existe um aquífero confinado, multicamada, que tem por suporte as camadas greso-calcárias da base do Miocénico.

O aquífero superior encontra-se instalado nas camadas do topo do Pliocénico. É constituído por areias finas, médias ou grosseiras, com intercalações argilosas e/ou argilo-arenosas. O topo do aquífero é composto por depósitos detríticos mais recentes.

É possível afirmar que as formações arenosas apresentam elevada permeabilidade, visto tratarem-se de sedimentos não consolidados ou com reduzido grau de consolidação. No entanto apresentam lentículas e camadas argilosas ou argilo-arenosas que por vezes ultrapassam a dezena de metros de espessura. Devido a esta variabilidade e heterogeneidade textural, a estrutura é complexa, o que faz corresponder, em certas zonas a um aquífero com superfície livre, mas também com zonas semi-confinadas, níveis suspensos e zonas não saturadas, separadas por camadas de baixa permeabilidade. É possível afirmar que, embora as lentículas de argila não formem uma camada confinante contínua, a frequência com que surgem em conjunto promovem uma situação local de confinamento nos terrenos subjacentes. Este encontra-se sobrejacente a um aquífero confinado e multicamada. O mesmo é suportado pelas camadas de base do Pliocénico e pelas camadas areníticas, calcoareníticas e margosas do Miocénico médio a superior. Segundo SOBREIRA, (1995), os níveis onde se instalam os drenos de captação nos furos são principalmente calcarenitos ou níveis arenitos mais profundos. A existência de níveis argilosos nos depósitos Pliocénicos sobrejacentes, ou níveis argilosos e margosos do próprio Miocénico, causam confinamento do aquífero em alguns locais. As águas presentes neste aquífero apresentam-se medianamente mineralizadas.

Subjacente a este conjunto e separado por formações margosas espessas, existe um aquífero confinado, também multicamada, tendo por suporte as formações greso-calcárias da base do Miocénico. Este aquífero é o mais profundo e é o menos conhecido, visto que a elevada profundidade a que se encontra aliado à baixa permeabilidade e qualidade, levam a que seja um alvo pouco atractivo para a pesquisa.

A recarga destes aquíferos é feita principalmente por infiltração directa nos depósitos detríticos quaternários e pliocénicos, que cedem parte desta infiltração às formações mais profundas do Pliocénico. Estes, por sua vez, cedem parte dessa recarga às formações miocénicas subjacentes, por drenância. Estas formações também recebem água directamente, nos locais onde afloram. Uma vez no aquífero, a água tende a seguir o percurso natural de escoamento subterrâneo, acompanhado o desenvolvimento da rede de drenagem superficial, em direcção à Lagoa de Albufeira e ao rio Tejo, e ao longo do sistema aquífero até ao Oceano Atlântico.

No que diz respeito à vulnerabilidade deste sistema aquífero à poluição, é possível concluir que o mesmo se apresenta muito vulnerável, principalmente o aquífero superior tendo em conta que a recarga do aquífero é feita de modo directo, através das águas pluviais. Este aquífero, em toda a sua extensão, não se encontra impermeabilizado, possibilitando assim o transporte de diversos tipos de agentes poluidores. A proximidade do nível piezométrico da superfície do terreno e a elevada permeabilidade do terreno são razões que levam à redução do tempo de circulação da água na zona não saturada, diminuindo a possibilidade de esta sofrer um processo de depuração.

3 METODOLOGIA E FUNDAMENTOS TEÓRICOS

3.1 ESTRATÉGIA

Os modelos geoestatísticos são utilizados recorrentemente na modelação dos fenómenos relacionados com a quantificação dos recursos naturais possuidores de uma estrutura espacial, e resultam da associação do seu comportamento com os fundamentos teóricos da matemática e estatística, em particular da teoria das funções aleatórias (GOOVAERTS, 1997; SOARES, 2000). A escolha do algoritmo e/ou modelo geoestatístico (simulação – estimação) deve ter por base o estudo e o conhecimento do fenómeno natural em causa, incorporando-se a sua componente espacial na respectiva caracterização, que pode servir para aplicações distintas nas áreas do planeamento, do ordenamento, da valorização e monitorização do recurso natural. A validação destes modelos geoestatísticos é efectuada a posteriori, mediante o cruzamento entre os resultados obtidos pela modelação e o restante conhecimento do recurso em causa, o que permite encontrar um maior ou menor afastamento dos resultados à realidade e quantificar a incerteza reflectida pela informação disponível.

A modelação do fluxo de sistemas aquíferos num simulador dinâmico é um exemplo onde podem ser utilizados modelos geoestatísticos, quer para a delimitação vertical dos sistemas aquíferos (geração de superfícies) quer para a atribuição de propriedades aos blocos (permeabilidade e porosidade). Todavia, a aplicação dos modelos geoestatísticos nos modelos hidrogeológicos levanta o problema de reconciliação de resoluções espaciais. Isto porque por um lado os modelos geoestatísticos são interessantes para fazer representações espaciais de alta resolução, com muitos milhões de blocos ou células, enquanto os modelos hidrogeológicos de fluxo são bastante mais simplificados, admitindo grelhas de blocos no máximo da ordem das dezenas de milhares de blocos.

Existem assim duas estratégias possíveis: I) não tirar partido completamente das funcionalidades dos algoritmos geoestatísticos, e fazer-se modelos espaciais das propriedades numa malha de baixa resolução do simulador dinâmico ou II) fazer modelos geoestatísticos de elevada resolução e adaptação e simplificação (*upscaling*) para a malha de maior dimensão.

Cada uma destas estratégias tem vantagens e desvantagens. No caso I, fazer modelos geoestatísticos é quase sempre uma vantagem relativamente aos modelos não geoestatísticos, porque estes incorporam a estrutura espacial dos dados; todavia fazer modelos geoestatísticos de baixa resolução, com grande dimensão do bloco, é desaproveitar a vantagem destes modelos, porque implicam sempre alguma forma de *upscaling* dos dados de partida (mistura de suportes, simplificação da informação). Já no que se refere à estratégia II, a modelação de alta resolução desde que compatível com a resolução da informação disponível é uma vantagem, mas um posterior e necessário *upscaling* é sempre uma perda de informação / resolução, mas que pode ser feito de forma optimal.

O presente trabalho tem como objectivo o desenvolvimento de uma metodologia que faça a integração optimizada dos modelos geoestatísticos de alta resolução (milhões de células) num modelo hidrogeológico de fluxo (limitado a algumas dezenas de milhares de células). Esta metodologia foi aplicada ao local da antiga SPEL, enquadrado no capítulo anterior.

Foi desenvolvido em duas etapas principais: i) a construção de um modelo geológico 3D de alta resolução por simulação geoestatística a partir de informação de sondagens; ii) simplificação / adequação optimal do modelo geoestatístico para entrada no simulador dinâmico de fluxo. A metodologia encontra-se descrita na Figura 6.

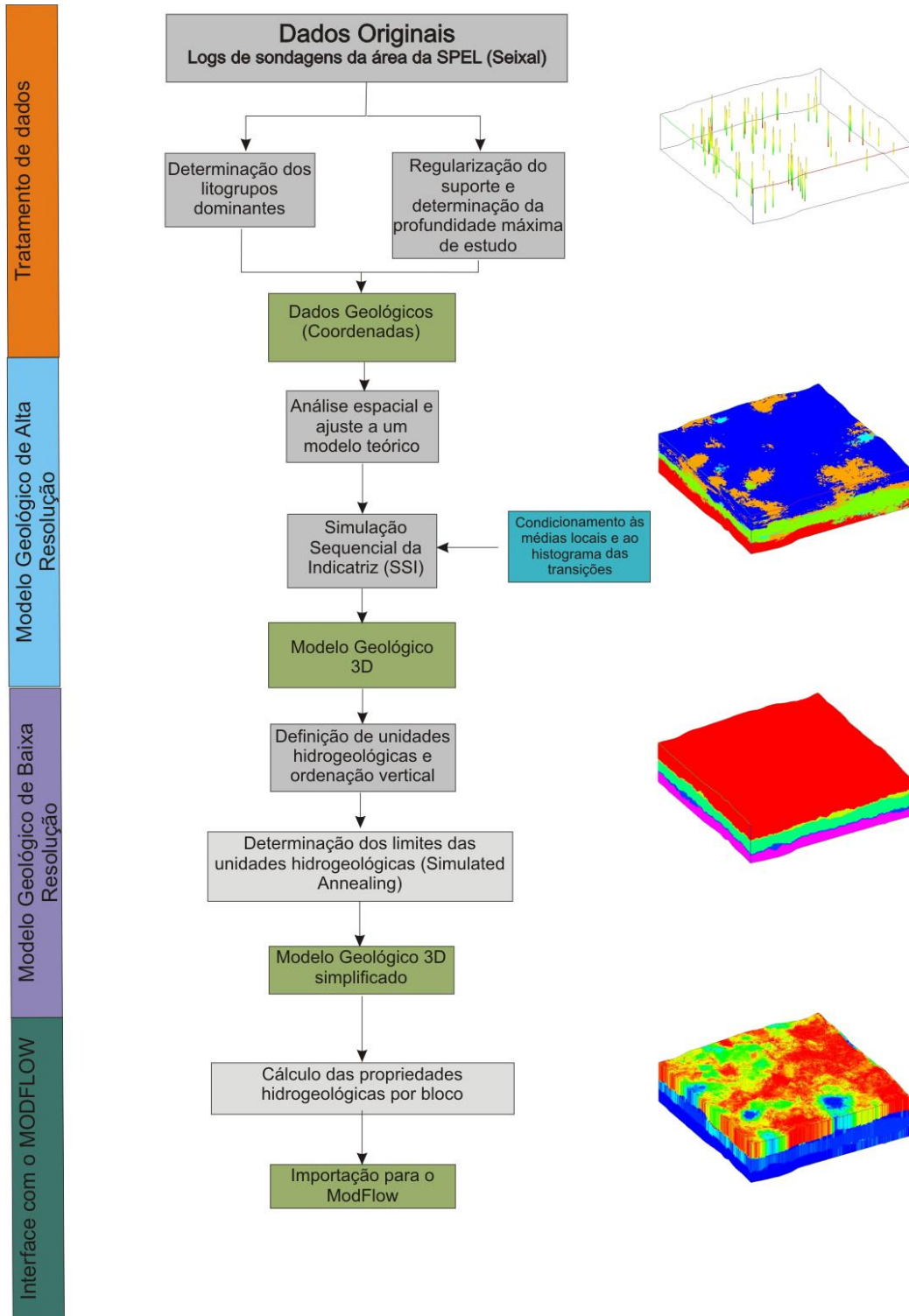


Figura 6 - Metodologia adoptada para o presente estudo

A informação de partida disponível para este estudo é proveniente de 81 logs de sondagens com descrições geológicas que foram disponibilizados pelo Laboratório Nacional de Energia e Geologia (LNEG) e Departamento de Ciências da Terra (DCT) (Anexo A). A primeira etapa consistiu precisamente na codificação numérica desta informação litológica, que serviu de ponto de partida para o restante estudo.

O tratamento preliminar destes dados litológicos foi realizado em duas etapas concorrentes: i) reclassificação das litologias em litogrupos dominantes, após análise cuidadosa aos dados recebidos, sustentada por diversa bibliografia e interpretação pericial; ii) definição da profundidade máxima a estudar e regularização dos troços de sondagem para a mesma dimensão. Para a escolha da profundidade máxima foi tida em conta a profundidade a que se deixa de observar um número representativo de dados experimentais; já a escolha da dimensão do suporte teve por base uma análise estatística comparativa para várias dimensões testadas. Foi ainda estabelecida a resolução horizontal da malha tendo em conta a distância mínima e média entre sondagens.

A etapa seguinte consistiu na geração do modelo geoestatístico 3D das litologias (modelo geológico de alta resolução) por simulação sequencial da indicatriz (SSI). Envolveu as etapas clássicas análise de continuidade espacial (variogramas multifásicos) para várias direcções (horizontal e vertical), ajuste de um modelo teórico de variograma e simulação da indicatriz propriamente dita.

Para melhor reproduzir as proporções em profundidade das litologias, e as respectivas transições, no algoritmo SSI foram impostos simultaneamente 2 condicionamentos: i) correcção às médias locais, respeitando a complexidade geológica da área e a ocorrência vertical de litogrupos, e ii) histograma das transições verticais entre litogrupos, obrigando a que a transição entre troços dos dados experimentais fosse respeitada. A implementação simultânea destes dois condicionamentos é seguidamente descrita em mais detalhe e constitui uma das inovações deste trabalho.

Na variografia foi utilizado o software *geoMS* e na simulação uma versão alterada do programa SSI do *geoMS*. Os resultados do modelo foram ainda importados para o software *gOcad* para um objecto do tipo *voxel*.

A segunda etapa do presente trabalho teve por objectivo, tal como foi referido anteriormente, a adaptação por simplificação (*upscaling*) optimal do modelo geológico para poder ser utilizado no simulador de fluxo *MODFLOW*.

Para que o modelo hidrogeológico se apresente correcto tem de estar em concordância com a geologia, uma vez que são indissociáveis. Tendo em conta este princípio, o primeiro passo desta segunda fase consistiu na definição das unidades hidrogeológicas (modelo conceptual). Através de análise pericial às sondagens e aos modelos geológicos entretanto gerados, foi estabelecido para o local um modelo conceptual com 5 unidades hidrogeológicas principais:

- I) Areias, que dizem respeito ao aquífero livre;
- II) Argilas, referentes à primeira camada impermeável;
- III) Grés, definidos como a terceira unidade hidrogeológica, um aquífero semiconfinado;
- IV) Novamente um nível argiloso impermeável;
- V) Nível margoso como 5ª unidade hidrogeológica.

Refira-se ainda que as camadas de argila não ocorrem em todas as sondagens e na mesma posição, pelo que é de esperar que ocorram nalguns sítios e não noutros, constituindo uma estrutura em lenticulas muito heterogénea geradora de fluxos irregulares em profundidade.

Tendo em conta o modelo conceptual das 5 unidades hidrogeológicas em profundidade, e a resolução horizontal do modelo geológico, optou-se por fazer a simplificação optimal do modelo geológico geoestatístico para 5 camadas. Para esta simplificação optimal foi desenvolvida, programada e testada uma aplicação informática inovadora baseada no método de optimização *Simulated Annealing* e que se descreve nas secções seguintes em mais detalhe. Os resultados são apresentados sob a forma de matrizes 3D com os parâmetros hidráulicos (permeabilidade, coeficientes de armazenamento e porosidades) que podem ser utilizados directamente no modelo de fluxo.

Estas matrizes foram finalmente importadas para o software *Visual MODFLOW* tendo-se efectuado alguns testes sintéticos de extracção de forma a testar o comportamento da circulação da água lateralmente e em profundidade no modelo hidrogeológico criado.

Nas secções seguintes descrevem-se com mais detalhe a construção do modelo geológico e respectiva simplificação optimal por *Simulated Annealing*, apresentando-se ainda de forma muito sintética os princípios do software *MODFLOW*.

3.2 MODELO GEOLÓGICO 3D

A criação do modelo geológico 3D teve por base de orientação o conjunto de pressupostos teóricos que regem os métodos geoestatísticos e matemáticos segundo o formalismo da indicatriz e que se descrevem seguidamente.

3.2.1 FORMALISMO DA INDICATRIZ

Na geoestatística, o formalismo da indicatriz é aplicado para a modelação de corpos geológicos (corpo e seu complementar), regiões com valores acima ou abaixo de um determinado valor de corte ou mais genericamente, todas as situações que envolvam a delimitação morfológica de 2 fases. Dado que é feita a correspondência de uns e zeros a cada valor conhecido, o formalismo da indicatriz associa a teoria das probabilidades à modelação.

A sua aplicação inicia-se com a construção de uma variável do tipo indicatriz, dicotómica, através da classificação dos dados amostrais em 1 e 0, com base num critério de classificação (X):

$$I(x_i) = \begin{cases} 1 & \text{se } x_i \in X \\ 0 & \text{se } x_i \notin X \end{cases} \quad (3.1)$$

A transformação para variável indicatriz dá origem a uma população binária pertencente à classe X e ao seu complementar X^C , no domínio $A = X \cup X^C$. Sendo a população um conjunto de n amostras, localizadas em A , com $i = 1, 2, 3, \dots, n$.

3.2.1.1 POPULAÇÕES MULTIFÁSICAS COM P CLASSES

O formalismo da indicatriz pode ser estendido para vários critérios de classificação ou valores de corte, designando-se por estrutura multifásica. Para o caso de estruturas multifásicas como a do presente trabalho, $X_k, i=1, \dots, K$, em que K refere-se ao número de litogrupos, por exemplo é possível, para um ponto x , localizado espacialmente na área em estudo, definir um vector binário $I_k(x)$:

$$I_k = \begin{cases} 1 & \text{se } x \in X_k \\ 0 & \text{se } x \in X_j, j \neq k \end{cases} \quad (3.2)$$

Este vector binário $I_k(x)$, no contexto de um modelo estocástico, pode ser entendido como a probabilidade de um ponto x pertencer a um litogrupo $X_k, k = 1, \dots, K$, e pode ser utilizado como variável aleatória localizada em x .

$$I_k(x) = \text{prob}(x \in \text{litogrupo } k), \forall k = 1, \dots, K \quad (3.3)$$

O conjunto de N amostras, transformado em vectores binários de “1” e “0”, pode ser interpretado como a realização de uma função aleatória. A realização desta função aleatória $I_k(x)$ pode ser caracterizada, em cada fase, pelos seguintes momentos de primeira e segunda ordem:

$$m_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N I_k(x_i) \quad (3.4)$$

A expressão (3.4) refere-se à média de cada fase: mede a proporção de cada fase X_k em toda a área.

$$\sigma_k^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (I_k(x_i) - m_k)^2 = m_k(1 - m_k) \quad (3.5)$$

E a expressão (3.5) refere-se à variância de cada fase σ_k^2 .

3.2.2 VARIOGRAFIA

Para estudar a continuidade espacial de um determinado fenómeno não é suficiente analisar os estatísticos básicos da população amostrada, devendo-se recorrer a ferramentas apropriadas para o estudo da continuidade espacial.

Admitindo a estacionaridade da variância, para a análise espacial de um dado fenómeno são examinados os valores da variável em estudo para todos os pares de pontos que podem ser considerados (análise biponto). Cada par é caracterizado por uma determinada distância, ou vector h – passo; $z(x)$; $z(x+h)$ e pelo quadrado das diferenças dos respectivos valores.

A média do quadrado das diferenças entre todos os pares de pontos $z(x)$ e $z(x+h)$ para várias ou todas as classes do vector h denomina-se variograma:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [z(x_i) - z(x_i + h)]^2 \quad (3.6)$$

O conjunto dos valores $\gamma(h)$ para cada intervalo de distância do vector h pode ser representado graficamente. A partir da sua análise é possível estudar a variação espacial das amostras (se continua ou não), e quantificar a correlação espacial. Esta análise pode ser feita para várias direcções no espaço, sendo assim possível observar a variação da continuidade do fenómeno para diferentes direcções. Este é o modo mais tradicional de descrever o modo como a continuidade espacial varia segundo a distância h e direcção (ISAAKS & SRIVASTAVA, 1989).

Os conceitos mais relevantes da análise do variograma são os seguintes:

Amplitude (a) – Distância a partir da qual as amostras deixam de ter correlação entre si. À medida que a distância entre as mesmas aumenta, o valor do variograma correspondente aumenta também. Eventualmente, a um dado aumento na distância entre pontos, deixa de corresponder um aumento no valor do respectivo variograma, atingindo-se um patamar. A distância a que o variograma atinge o patamar chama-se amplitude.

Patamar (C) - Corresponde ao valor do variograma ao qual atinge a amplitude. Representa a variância da variável em estudo e reflecte a sua dispersão.

Efeito Pepita (C₀) – Apesar do valor do variograma para $h=0$ ser precisamente 0, diversos factores como erros de amostragem e variabilidade a pequena escala podem ser causa de disparidade entre dados separados por pequenos h . Estes factores causam descontinuidade na origem do variograma.

Depois de calculados os valores dos variogramas para diferentes passos h , há a necessidade os modelar por intermédio de uma função matemática geral e representativa. Isto significa ajustá-los a uma curva atenuada média, função de um número reduzido de parâmetros que quantifique a continuidade espacial de $z(x)$ (SOARES, 2000). Esta etapa apresenta-se de extrema importância uma vez que é neste período que é feita a síntese das características estruturais do fenómeno espacial, numa função matemática. Na realidade trata-se de modelar e sintetizar os principais padrões de continuidade espacial representativos do fenómeno em estudo.

A prática geoestatística do ajuste de um variograma está limitada a um conjunto restrito de funções definidas positivas, cujo comportamento se assemelha à generalidade das situações de dispersão de fenómenos espaciais naturais. Entre outras, as mais utilizadas são a função/ modelo esférico e exponencial.

Modelo Esférico

$$\gamma(h) = \begin{cases} C \left[1.5 \frac{h}{a} - 0.5 \left(\frac{h}{a} \right)^3 \right] \\ C \end{cases} \quad (3.7)$$

É um dos modelos mais usuais em geoestatística. Existem 2 factores preponderantes: o patamar C e a amplitude $h = a$.

Modelo Exponencial

$$\gamma(h) = C \left[1 - e^{-\frac{3h}{a}} \right] \quad (3.8)$$

Esta função utiliza os mesmos dois parâmetros do modelo esférico, sendo que o variograma tende assintoticamente para o patamar. O valor da amplitude a é a distância em que o modelo atinge, aproximadamente, 95% do patamar: $\gamma(a) \cong 0.95C$.

Uma dada característica de fenómeno natural diz-se que é *isótropa* quando o variograma tem o mesmo comportamento em todas as direcções. Quando o padrão de continuidade espacial varia com a direcção, diz-se que o fenómeno em estudo é anisótropo (GOOVAERTS, 1997).

Existem diversos condicionantes que devem ser tidos em conta aquando da análise da continuidade espacial do fenómeno. Primeiramente o conhecimento prévio do fenómeno dá-nos boas indicações sobre quais as direcções preferenciais de possível continuidade. Em segundo lugar, o número e densidade de amostras em cada direcção.

3.2.2.1 VARIOGRAFIA DE POPULAÇÕES MULTIFÁSICAS COM P CLASSES

Na análise da continuidade espacial de um conjunto multifásico, a quantidade de informação disponível nalgumas modalidades é normalmente insuficiente para estimar a covariância e os variogramas. Nestes casos, é possível definir uma medida de continuidade média da estrutura global, $C(h)$, como a probabilidade de 2 pontos x e $x + h$, separados por um vector h , pertencerem à mesma fase X_K , qualquer que ela seja, $k = 1, \dots, K$ (SOARES, 1992; ALMEIDA, 2010):

$$C(h) = E \left\{ \sum_{k=1}^K [I_k(x) \cdot I_k(x + h)] \right\} \quad (3.9)$$

E o equivalente variograma multifásico:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} E \left\{ \sum_{k=1}^K [I_k(x) - I_k(x + h)]^2 \right\} \quad (3.10)$$

Tanto a covariância $C(h)$ como o variograma multifásico $\gamma(h)$ quantificam a variabilidade morfológica média das estruturas multifásicas.

Em determinados casos de estudo, como por exemplo aqueles em que o número de classes é elevado e as suas características demasiado distintas para a construção de um único conjunto, existe a necessidade de os caracterizar com recurso a mais do que um variograma multifásico. No entanto não devem ser utilizados mais do que dois (ALMEIDA, 1999), porque podem surgir incompatibilidades.

Considerando (h) como o número de pares de pontos separados por h , o variograma multifásico pode ser calculado pela expressão (3.11).

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} \left\{ \sum_{k=1}^K [I_k(x_i) - I_k(x_i + h)]^2 \right\} \quad (3.11)$$

Os passos seguintes no processo de avaliação da continuidade espacial são: i) avaliar a presença de anisotropias; e ii) ajuste de uma função teórica, normalmente de tipo esférico ou exponencial aos variogramas experimentais. As relações entre os parâmetros clássicos dos variogramas são válidas para os conjuntos multifásicos, as amplitudes são uma medida média dos corpos no conjunto multifásico e o efeito de pepita, a medida de irregularidade morfológica no contacto entre os diferentes corpos, corresponde à heterogeneidade à pequena escala.

3.2.3 SIMULAÇÃO SEQUENCIAL DA INDICATRIZ

Através da simulação geoestatística pretende-se criar imagens das características de um fenómeno espacial, nas quais são reproduzidas a proporção e a maior ou menor continuidade espacial dos diferentes corpos, das heterogeneidades e das classes extremas dos histogramas dessas características (JOURNAL et al, 1984; SOARES, 2000).

Através de um modelo de simulação pretende-se reproduzir, na imagem simulada, a variabilidade do fenómeno em estudo através de 2 estatísticas: a função de distribuição de $Z(x) - F_z(z) = \text{prob}\{Z(x) < z\}$ – que garante a frequência das diferentes classes do histograma e o variograma $\gamma(h)$, que reproduz a continuidade espacial de $Z(x)$ (SOARES, 2000). A simulação é capaz de reproduzir diferentes comportamentos, como sejam a dispersão e concentração do fenómeno em estudo, à custa de um amplo conjunto de imagens.

A imagem simulada deve cumprir as seguintes condições:

1. Para qualquer valor de z : $\text{prob}\{Z(x_\alpha) < z\} = \text{prob}\{Z_c(x) < z\}$;
2. $\gamma(h) = \gamma_c(h)$, sendo $\gamma(h)$ e $\gamma_c(h)$ os variogramas dos valores experimentais e dos valores simulados, respectivamente;
3. $Z(x_\alpha) = Z_c(x_\alpha)$, ou seja, em qualquer ponto experimental x_α , o valor de $Z(x_\alpha)$ e o valor simulado $Z_c(x_\alpha)$ coincidem.

A simulação sequencial baseia-se num condicionamento crescente à informação existente na vizinhança dos pontos a simular, que é obtido, tanto pelos valores experimentais como pelos valores anteriormente simulados. Tal é feito através da relação de Bayes, que pode ser generalizada do modo seguinte:

$$F(Z_1, Z_2, Z_3, \dots, Z_N) = F(Z_1)F(Z_2|Z_1)F(Z_3|Z_1, Z_2) \dots F(Z_N|Z_1, Z_2, \dots, Z_{N-1}) \quad (3.12)$$

Considerando a lei de distribuição conjunta de N variáveis aleatórias e n dados experimentais condicionantes iniciais $F(N) = (Z_1, Z_2, Z_3, \dots, Z_N | (n))$. Para se obter um conjunto de valores z_1, \dots, z_N de $F(N)$, o processo pode ser resumido nos seguintes passos:

1. Primeiramente a simulação de um valor z_1 com base na função de distribuição cumulativa $F(Z_1|(n))$. Uma vez simulado o valor de z_1 passa a ser tido em conta para os subsequentes passos da simulação, passando a n a $n + z_1$;
2. Simulação de um novo valor z_2 a partir da lei de distribuição condicional Z_2 , com base nos $(n + 1)$ valores condicionantes. Finda a simulação de z_2 , os dados condicionantes passam a ser actualizados para $(n + 2) = (n + 1) + z_2$;
3. Repetição do processo sequencial até se proceder à simulação completa das N variáveis.

As N variáveis aleatórias dependentes de $Z_1, Z_2, Z_3, \dots, Z_N$ podem representar a mesma grandeza espacialmente referenciada nas N possíveis posições da malha do mapa que se pretende simular. Se se considerar os n valores condicionantes iniciais correspondentes aos valores experimentais $Z_\alpha, \alpha = 1, \dots, n$, a função $F(N)$ vem $F(N) = (Z(x_1), Z(x_2), Z(x_3), \dots, Z(x_N)|(n))$.

A grande limitação prática deste algoritmo de simulação sequencial reside no desconhecimento das N funções cumulativas condicionais:

$$\begin{aligned} & \text{prob}\{Z(x_1) < z|(n)\} \\ & \text{prob}\{Z(x_2) < z|(n + 1)\} \\ & \text{prob}\{Z(x_3) < z|(n + 2)\} \\ & \quad \vdots \\ & \text{prob}\{Z(x_N) < z|(n + N - 1)\} \end{aligned} \quad (3.13)$$

JOURNEL & ALABERT, 1989 consideraram a krigagem como ferramenta adequada na estimativa das mesmas, nomeadamente a krigagem multiGaussiana para a simulação sequencial gaussiana (SSG) e a krigagem da indicatriz para a simulação sequencial da indicatriz (SSI).

3.2.3.1 SIMULAÇÃO PARA POPULAÇÕES MULTIFÁSICAS COM P CLASSES

Os vectores obtidos com a transformada da indicatriz constituem os dados de entrada para este algoritmo de simulação sequencial que pode ser sintetizado nos seguintes passos:

- i) Para determinada localização x_1 , escolhida ao acaso dentro do campo geométrico A , cálculo da probabilidade de pertença a cada fase pelo estimador de krigagem:

$$[I_k(x_1)]^* = \text{prob}\{x_1 \in x_k\}^*, k = 1, \dots, p \quad (3.14)$$

- ii) Correção das probabilidades locais (ver 3.2.3.2)
- iii) Cálculo da função cumulativa

$$\begin{aligned} [F_1(x_1)]^* &= [I_k(x_1)]^* \\ [F_1(x_2)]^* &= [I_1(x_1)]^* + [I_2(x_2)]^* \\ & \quad \vdots \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$[F_l(x_1)]^* = \sum_{k=1}^l [I_k(x_1)]^*, l = 1, \dots, p$$

- iv) Geração de um valor s , distribuído no intervalo $[0,1]$, que determinará o valor final de x_1 , com base na pertença de s a determinada classe p , tendo por base a seguinte condição:

$$s \in [[F_{k-1}(x_1)]^*, [F_k(x_1)]^*] \quad (3.16)$$

Assim, o valor simulado em x_1 é 1 se pertencente à fase k , $I_k(x_1) = 1$ e 0, $I_j(x_1) = 0$, se pertencente a qualquer outra classe distinta de k , j por exemplo $k \neq j$.

- v) Os valores entretanto simulados, $I_k(x_1), k = 1, \dots, p$ são adicionados ao conjunto condicionante de todo o processo de simulação. O processo sequencial é repetido até se proceder à simulação completa da totalidade dos pontos existentes em A.

3.2.3.2 SIMULAÇÃO SEQUENCIAL DA INDICATRIZ COM CORRECÇÃO DAS PROBABILIDADES LOCAIS

Com o objectivo de minimizar os desvios entre as proporções de cada fase e as proporções dos valores simulados, (SOARES, 1998) propõe uma correcção para as probabilidades locais. As proporções finais de cada população multifásica encontram-se muito dependentes dos primeiros pontos que são escolhidos aleatoriamente para serem simulados. Neste caso as classes com menores proporções tendem a sofrer grandes desvios, principalmente se encontrarem representadas por variogramas com grandes amplitudes. De modo a contrariar este problema é realizada a correcção das probabilidades locais p_k^s , com base nas proporções globais originais de cada classe m_k .

Após a estimação da $[prob\{x_0 \in X_k\}]^* = [I_k(x_0)]^*, i = 1, \dots, N$ em cada nó da malha x_0 por krigagem, a ideia básica é fazer a correcção destas probabilidades de acordo com as proporções globais de cada fase (probabilidades marginais). Considerando as proporções globais m_k da fase k calculadas com base nos dados experimentais, é possível em cada iteração s calcular o desvio e_k^s entre as proporções dos valores entretanto simulados e as proporções globais:

$$e_k^s = m_k - p_k^s \quad (3.17)$$

onde p_k^s representa a proporção marginal da fase k na iteração s .

$$p_k^s = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} [I_k(x_i)]^*, k = 1, \dots, p \quad (3.18)$$

Este desvio e_k^s é então adicionado às probabilidades locais estimadas:

$$[I_k^s(x_i)]^* = [I_k(x_i)]^* + e_k^s, \quad k = 1, \dots, p \quad (3.19)$$

Dado que todas as correcções somam zero, todas as probabilidades corrigidas continuam a somar um; no caso de alguma probabilidade ser corrigida para um valor negativo, este é corrigido para zero e faz-se a normalização dos restantes valores para somarem um.

Após esta correcção, a simulação sequencial segue o procedimento habitual, ou seja, construção da lei cumulativa de probabilidades locais e simulação de um valor (fase) por Monte Carlo relativo ao nó x_0 . O valor simulado é adicionado ao vector de valores simulados e o processo continua até todos os nós serem simulados.

3.2.3.3 EXTENSÃO DA CORRECÇÃO DAS PROBABILIDADES LOCAIS PARA TRANSIÇÕES ENTRE FASES

Na construção de modelos geológicos com a SSI é necessário impor localmente as proporções dos litogrupos que são observados nos dados experimentais, mas também é vantajoso impor constrangimentos ao nível das transições entre litologias / litogrupos, principalmente na perpendicular entre camadas. No presente caso de estudo, as camadas são sub-horizontais, pelo que um constrangimento de transições deve ser imposto na direcção vertical.

Na geoestatística existem 2 algoritmos onde se aplicam constrangimentos quanto às transições entre fases, que são a simulação plurigaussiana (LE LOC'H et al, 1994; 1997) e a simulação multi-ponto (STREBELLE, 2002). Nenhuma referência foi encontrada até agora relativamente à simulação sequencial da indicatriz. Neste trabalho foi desenvolvida, programada e testada a extensão do algoritmo SSI com correcção das probabilidades locais para ter em conta as transições entre litogrupos, na direcção vertical, e que se apresenta seguidamente.

Considere-se as proporções globais originais de cada fase m_k e as proporções globais originais de cada dois pares de pontos consecutivos (x_i e x_{i+1}) m_{jk} , calculados do seguinte modo (Np número de pares de pontos em posição consecutiva):

$$m_{jk} = \frac{1}{Np} \sum_{i=1}^{Np} I_j(x_i) \cdot I_k(x_{i+1}) \quad \text{com } j, k = 1, K \quad (3.20)$$

Considere-se ainda mp_j como a proporção de vezes onde o par consecutivo (x_i e x_{i+1}) começa por uma fase de índice j (mp_j é aproximadamente igual à proporção da fase j):

$$mp_j = \sum_{k=1}^K m_{jk} \quad \text{com } j = 1, K \quad (3.21)$$

Na Figura 7 pode-se visualizar um exemplo desta avaliação de proporções de transição.

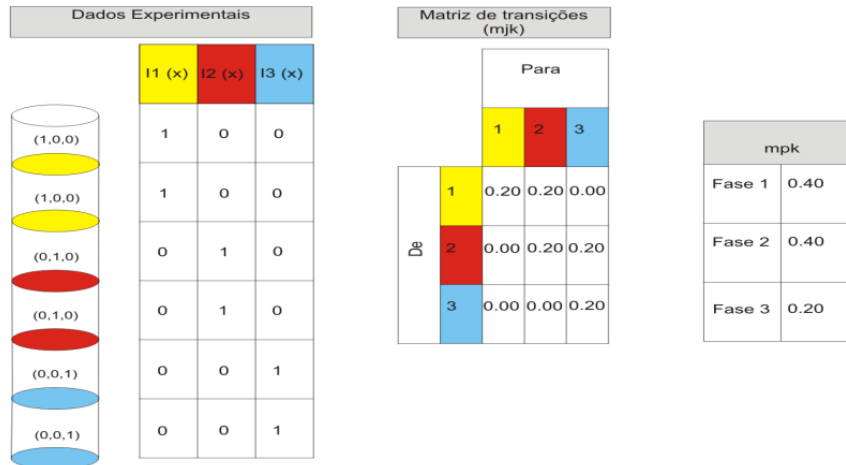


Figura 7 - Exemplo de avaliação de proporções de transição

A implementação desta correcção adicional no algoritmo SSI é feita de forma muito semelhante à correcção habitual e explicada no ponto anterior. Após a estimação da $[prob\{x_0 \in X_k\}]^* = [I_k(x_0)]^*, i = 1, \dots, N$ em cada nó da malha x_0 por krigagem, a ideia básica é fazer a correcção destas probabilidades da seguinte forma:

- I) Se o nó a simular x_0 não for precedido por nenhum outro já simulado (o que acontece mais frequentemente no início da simulação), é feita a correcção habitual entre as proporções dos valores entretanto simulados e as proporções globais.
- II) Se for precedido de outro nó já simulado x_i , então a correcção passa a ser feita entre as proporções de cada dois pares de pontos em posição consecutiva (x_i e x_0) entretanto simulados e as mesmas proporções de transição dos dados de partida.

Se por exemplo em x_i tiver sido simulada uma fase α , é possível em cada iteração s calcular o desvio e_{ak}^s entre as proporções de transições dos valores entretanto simulados e as proporções globais:

$$e_{ak}^s = m_{ak} / mp_{\alpha} - p_{ak}^s / mp_{\alpha}^s \quad (3.22)$$

onde p_{ak}^s representa a proporção marginal da transição entre as fases α e k na iteração s calculada entre nós adjacentes:

$$p_{ak}^s = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} [I_{\alpha}(x_i)][I_k(x_i)], \quad k = 1, \dots, K \quad (3.23)$$

Este desvio e_{ak}^s é então adicionado às probabilidades locais estimadas tal como descrito anteriormente.

3.3 ADAPTAÇÃO OPTIMAL DO MODELO GEOLÓGICO 3D PARA O VISUAL MODFLOW

Para a adaptação optimal do modelo geológico 3D para uma grelha do *Visual MODFLOW* desenvolveu-se e testou-se uma aplicação baseada no conceito de optimização *Simulated Annealing* e que se descreve seguidamente.

3.3.1 CARACTERIZAÇÃO DO ALGORITMO SIMULATED ANNEALING

Genericamente, *Simulated Annealing* é uma classe de algoritmos destinados a encontrar a solução de um problema de optimização (DEUTSCH ET AL, 1994; GOOVEARTS, 1996). É baseada na evolução de um sistema por um mecanismo de perturbações massivas e consecutivas do tipo “tentativa e erro” até ser atingido o mínimo de uma função objectivo que descreva o estado final do sistema. Quando aplicado a imagens, pode ser resumido nas seguintes etapas (SOARES, 2000; ALMEIDA, 2010):

1. Definição da função objectivo, que deverá retratar as propriedades / condições que se pretendem ver reproduzidas, sendo que para imagens é calculada com base no desvio quadrático médio da função de distribuição cumulativa $F_i^*(z)$, simulada na iteração i em relação a $F(z)$ que se pretende impor à classificação da imagem,

$$O_i = \sum_z [F_i^*(z) - F_z(z)]^2 \quad (3.24)$$

2. Perturbação da imagem, que consiste na re-alocação de determinado valor a uma célula x ou permuta de valores entre duas localizações x e y .
3. Actualização da função objectivo, sendo O_i e O_{i+1} respectivamente antes e depois da perturbação. É aceite a perturbação que contribui para o decréscimo da função objectivo $O_i > O_{i+1}$ e algumas das que aumentam, de acordo com a lei de distribuição de probabilidades de Gibbs. O processo volta ao ponto 2, e é repetido massivamente, até que a função objectivo atinja um mínimo que garanta que as propriedades / condições definidas se encontram reproduzidas.

3.3.2 MÉTODO DE OPTIMIZAÇÃO

No presente estudo pretende-se adaptar de forma optimal uma malha de elevada resolução para uma malha de menor resolução (*upscaling* na vertical, de 100 células de 2m cada para 5 camadas), perdendo o mínimo de informação e para tal considerou-se que esta classe de algoritmos seria adequada ao problema. Para a aplicação do *Simulated Annealing* a este objectivo consideraram-se os seguintes pressupostos:

Modelo de controlo para cálculo da função objectivo – modelo geológico de litogrupos, modelo geoestatístico.

Estado inicial – Para cada traço de valores na malha original (índices linha e coluna, respectivamente ix e iy), posição inicial do topo e base de cada uma das L camadas consideradas ($l_i^{topo}(ix, iy)$; $l_i^{base}(ix, iy)$; $i = 1, \dots, L$). No estado inicial consideraram-se todas as camadas horizontais.

Função objectivo – Para cada camada ($l_i, i = 1, \dots, L$), definição de proporções objectivo para cada litogrupo $p_{l_i,k} i = 1, \dots, L; k = 1, \dots, K$. As diferenças entre as proporções objectivo e o estado inicial constitui a função objectivo a minimizar.

Perturbação – Selecção aleatória de um traço de valores na malha original (índices linha e coluna, respectivamente ix e iy , selecção de um limite entre duas camadas consecutivas l_{ij} , alteração do limite de uma determinada magnitude $d_{l_{ij}}$ positiva ou negativa.

Resultado – Posição optimal de cada camada ($l_i, i = 1, \dots, L$) em cada traço de índices ix e iy .

A aplicação massiva do *Simulated Annealing* com estes pressupostos permitiu definir 5 camadas de forma optimizada, de acordo com os princípios da função objectivo e os arquétipos proporções de cada litogrupo em cada camada. Importa ainda referir que o *Simulated Annealing* é um algoritmo de simulação e que por isso existem várias soluções para cada problema. Os resultados obtidos são discutidos no capítulo da aplicação prática.

3.3.3 CÁLCULO DAS PROPRIEDADES DE CADA CÉLULA

A adaptação da grelha da modelação geoestatística para o modelo hidrogeológico simplificado em L camadas resultante do processamento por *Simulated Annealing* termina com o *upscaling* da informação que se encontrava distribuída pelas várias células que constituem cada traço, para uma única camada.

Esta homogeneização para cada camada foi feita para as propriedades permeabilidade (segundo as 3 direcções ortogonais), porosidades e coeficientes de armazenamento. Para as permeabilidades horizontais, porosidade e para os coeficientes de armazenamento foi utilizada a média aritmética e para a permeabilidade vertical a média harmónica.

$$t_z = \frac{n}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{t_i}}, t_i > 0 \quad (3.25)$$

3.4 O SOFTWARE VISUAL MODFLOW

O MODFLOW é um software de modelação 3D do fluxo de águas subterrâneas, baseado no modelo matemático de diferenças finitas. Este software foi desenvolvido pela United States Geological Survey (USGS), e foi inicialmente publicado em 1984.

A estrutura do MODFLOW encontra-se dirigida para a simplificação na assimilação dos processos por parte do utilizador, baseando-se numa interface entre o programa principal e um conjunto de módulos altamente independentes. Cada conjunto destes módulos diz respeito a uma característica específica do sistema hidrogeológico a simular. A existência destes módulos permite não só a realização de uma análise independente a cada uma das características do modelo, como também a possibilidade de desenvolvimento de novos módulos e/ou alteração dos existentes, sem interferir com os restantes (WATERLOO HYDROGEOLOGIC INC., 2005).

Existem diversas actualizações que foram sendo realizadas ao software, desde 1984. A versão utilizada no presente estudo foi a MOFLOW-2000. Destacam-se, de entre as diversas potencialidades desta versão, as seguintes:

- i) Possibilidade de realizar simulações com fluxo constante e não constante, num sistema de fluxo irregular em que as camadas podem ser determinadas como confinadas, não confinadas ou uma mistura das duas;
- ii) Capacidade de simulação de diversas fontes externas de perturbação no sistema, como por exemplo a presença de fluxo de poços, áreas de recarga, evapotranspiração, rios, entre outros;
- iii) Existe a possibilidade de definir diferentes condutividades hidráulicas e permeabilidades em cada célula. O coeficiente de armazenamento também pode ser diferente;
- iv) Existe também a capacidade de determinar e até mesmo simular diferentes condições de fronteira para o sistema;

O MODFLOW-2000 baseia-se na resolução da equação de fluxo de águas subterrâneas, através do método numérico das diferenças finitas. O método iterativo utilizado é o “Block Successive Over-relaxation” (SOR) ou, em português, o método de Sobre Relaxação Sucessiva.

A equação de fluxo de águas subterrâneas pode ser escrita através da seguinte equação diferencial parcial:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) - W = S_s \frac{\partial}{\partial t} \quad (3.26)$$

Em que K_{xx} , K_{yy} e K_{zz} são as condutividades hidráulicas nas 3 direcções do espaço (m/s), h é a altura piezométrica (m), W é o fluxo por unidade de volume e representa a recarga/descarga de água (m³/s). O S_s diz respeito ao coeficiente de armazenamento dos poros do meio e é adimensional, e o t é o tempo (s).

4 TRATAMENTO DOS DADOS

A primeira etapa da metodologia proposta consiste em caracterizar e organizar a informação de partida. Os dados são logs de sondagens realizados para captação ou para reforço de abastecimento de águas, levados a cabo por entidades municipais ou por empresas privadas. As entidades que executaram os furos e os relatórios técnicos foram empresas da especialidade, tais como A. Cavaco, J. Keller e T. Duarte. Dos relatórios das sondagens constam elementos de grande importância para o presente estudo, tais como as descrições litológicas das camadas atravessadas ao longo da furação e os elementos hidrogeológicos. Relativamente ao tratamento dos dados foram levados a cabo os seguintes passos:

- i) Organização da informação para uma folha Excel;
- ii) Unificação e transformação das coordenadas das sondagens meridiano e paralelo para o sistema Hayfor-Gauss, Datum Lisboa (IGeoE);
- iii) Selecção das sondagens na área de estudo previamente definida. Este procedimento teve lugar no software ArcGIS 9.2 e foram encontradas 81 sondagens.
- iv) Estudo da coluna litológica apresentada no relatório da sondagem, desde a boca do furo até à sua base;
- v) Estudo dos níveis hidrostáticos e hidrodinâmicos. Os dados recolhidos nas sondagens (LNEG e DCT) não foram considerados por estarem desactualizados. Assim, optou-se pela informação disponível no site do Sistema Nacional de Informação de Recursos Hídricos (SNIRH, 2010).
- vi) Criação de uma Base de Dados com informação referente à geologia. Esta base de dados contém informação relativa à identificação da sondagem, localização, profundidade inicial e final, espessura do troço e litologia.

A base de dados da geologia / litologia resultante desta organização inicial dos dados foi da maior importância para as restantes etapas do trabalho, nomeadamente a interpretação geológica e análise estatística. As Figura 4.1 e 4.2 representam a localização das sondagens na área em estudo. É possível verificar que estas se encontram distribuídas de modo irregular. Tal facto vai de encontro ao objectivo com que foram realizadas pelos seus proprietários: a captação da água para consumo e rega.

4.1 DADOS GEOLÓGICOS

O tratamento dos dados na componente geológica consistiu na categorização das litologias segundo a terminologia utilizada nos *logs* e em concordância com a bibliografia estudada e numa análise estatística e de uniformização do tamanho dos suportes. A importância do tratamento dos dados geológicos centra-se sobretudo na correcta compreensão da complexidade geológica da área. Isto leva a que a geologia seja, ulteriormente, bem representada por um modelo geológico 3D, sendo assim possível compreender a complexidade hidrogeológica que marca a área de estudo.

Através da bibliografia consultada foi possível antecipar as litologias predominantes nesta zona, que são areias, argilas, grés, margas e calcários. Dentro destes litogrupos é possível especificar alguns sub-grupos, devido à variação do tamanho do grão e/ou matriz que os constituem. Foi ainda possível inferir as características físicas e mecânicas que, posteriormente, permitiram associar aos litogrupos comportamentos hidrogeológicos.

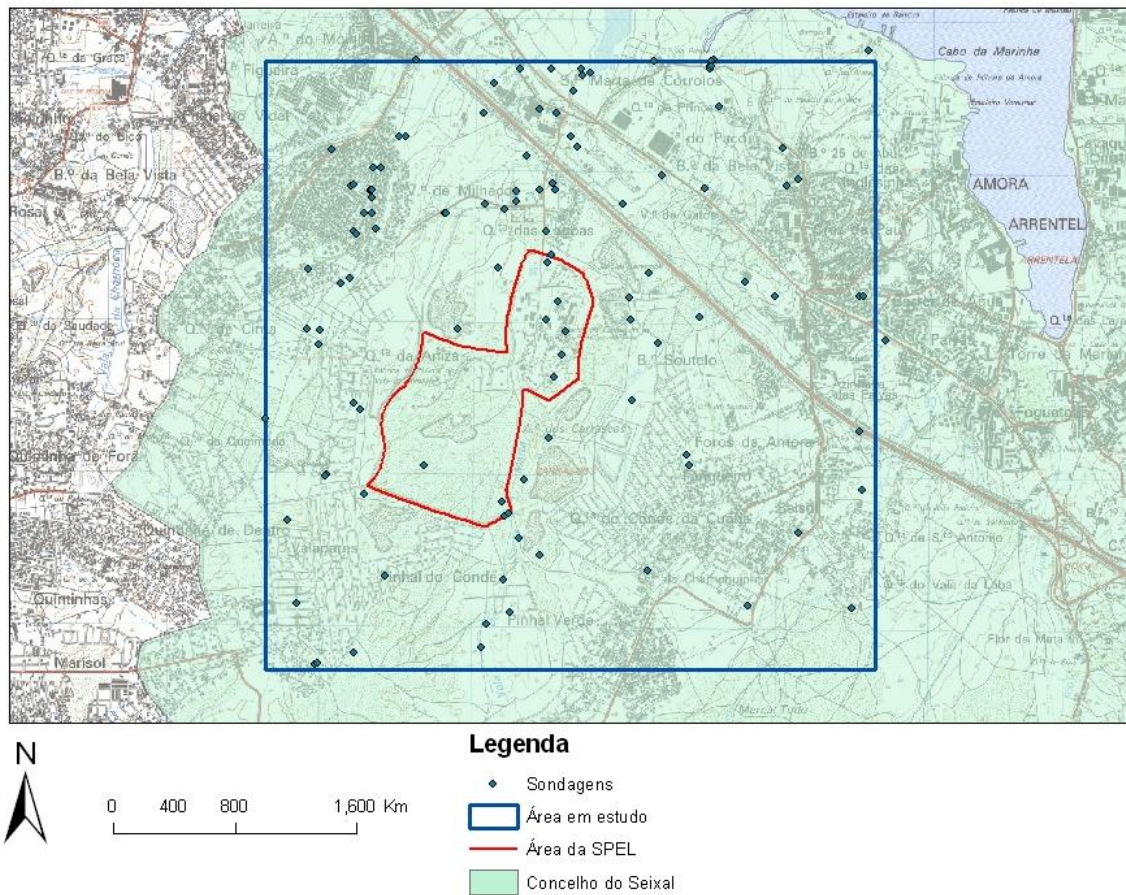


Figura 4.1 – Localização das sondagens na área de estudo

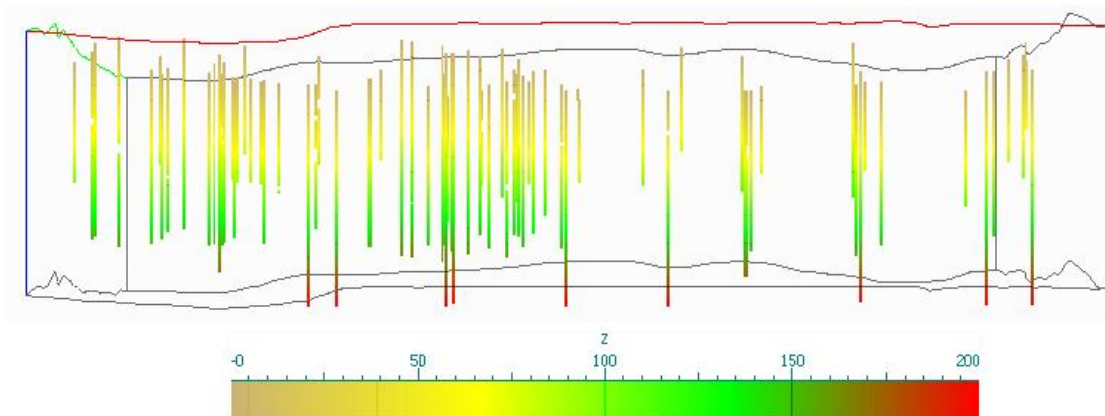


Figura 4.2 - Representação em perspectiva das sondagens na área de estudo (vista de Sul e ampliada 5 vezes)

Relativamente à profundidade atingida pelas sondagens, observou-se que a maior parte não atinge os 200 metros, pelo que se considerou esta como a profundidade máxima de estudo. Também, o facto de nem todas as sondagens terem o mesmo comprimento faz com que nas zonas mais próximas da superfície os dados sejam mais representativos.

Segundo (PAIS et al., 2003), os primeiros 130 metros, em Belverde, são compostos por areias plio-pleistocénicas, a denominada “Formação de Santa Marta”. Existem algumas mudanças na espessura desta formação, sendo que entre a lagoa de Albufeira e a Quinta do Conde há uma variação de cerca de 100 metros da sua espessura. Observando os dados das sondagens, é possível observar que a litologia predominante nos primeiros 100 metros são as areias existindo, no entanto, algumas intercalações de argilas. Posteriormente aparecem as formações Miocénicas, constituídas essencialmente por biocalcarenitos, numa profundidade que atinge os cerca de 150 metros. As formações margosas surgem a partir dos 150 metros até ao à profundidade limite de estudo.

4.1.1 CLASSIFICAÇÃO DOS LITOGRUPOS

Procedeu-se então à averiguação das terminologias utilizadas para a descrição das litologias presentes em cada uma das sondagens. Estas foram realizadas por diferentes entidades, nem sempre recorrendo à mesma empresa de perfuração, o que resulta em terminologias e descrições geológicas diferentes. A variabilidade nos termos utilizados para a descrição das litologias deve-se sobretudo à subjectividade deste tipo de observação. Após a realização desta análise chegou-se a conclusão que existiriam, nas 81 sondagens, 16 descrições distintas de litologias (Tabela 4.1). Estas 16 descrições foram agrupadas em 5 litogrupos conforme a bibliografia: areias, calcários, grés, argilas e margas. Na definição dos litogrupos houve um cuidado especial, tentando que os mesmos fossem compostos por litologias com características hidrogeológicas semelhantes.

Tabela 4.1 – Litologias presentes nas sondagens e litogrupos

| Litogrupo | Código | Litologia |
|-----------|--------|---------------------------|
| Areia | 1 | Areia argilosa |
| | | Areia fina |
| | | Areia grosseira |
| | | Areia média |
| | | Areias |
| | | Lodo e areias |
| Calcário | 2 | Calcário |
| | | Calcário gresoso |
| Grés | 3 | Grés |
| | | Grés argiloso |
| | | Grés Calcário |
| | | Grés calcário fossilífero |
| | | Grés margoso |
| Argila | 4 | Argila |
| | | Argila arenosa |
| Margas | 5 | Margas |

No litogrupo das areias insere-se todo o tipo de litologias designadas nos *logs* de sondagens pelos termos presentes na Tabela 4.1. As descrições variam entre “Areia grosseira por vezes com seixo e/ou burgau por vezes esbranquiçada”, referindo-se às areias com maior granulometria; e “Areia argilosa”, representando as areias com menor granulometria. Estes últimos, e todos os troços cujas descrições

indicam que a variação da granulometria se encontra entre aquelas duas litologias, foram contabilizados no litogrupo 1. A maioria dos troços pertencentes a este litogrupo encontra-se nas secções iniciais das sondagens, facto concordante com a presença da “Formação de Santa Marta”. O segundo litogrupo a ser definido foi o dos calcários. Neste inserem-se as litologias designadas por “Calcário” e “Calcário gresoso”. De referir que ambas apresentam pouca representatividade nos dados experimentais.

O litogrupo 3 é o grés. Este é constituído por diversas litologias com descrições que evidenciam a matriz como, por exemplo, “Grés calcário”, “Grés margoso” e “Grés fino a médio calcário”.

Para o litogrupo 4, argila, foram contabilizados todos os troços com as litologias apresentadas na tabela. As descrições nas sondagens são “Argila com intercalações arenosas”, “Argila arenosa”, “Argila”, entre outras.

O quinto e último litogrupo definido foi o das margas. É a última camada que se identifica na área de estudo (atinge uma profundidade de 200 metros), e segundo (ALMEIDA et al., 2000) é uma formação espessa que apresenta um papel importante na definição das unidades hidrogeológicas deste sistema aquífero.

4.1.2 ANÁLISE ESTATÍSTICA DOS LITOGRUPOS

Nesta fase procedeu-se à análise estatística dos litogrupos anteriormente definidos. Este passo reveste-se de grande importância, porque a análise estatística mostra a sua representatividade e pode recomendar a junção dos litogrupos eventualmente pouco abundantes.

Refira-se que a análise estatística teve repercussões na definição dos litogrupos. Numa fase inicial considerou-se um litogrupo de conglomerados, mas após análise estatística foi decidido reagrupá-lo, dado que representava cerca de 0,4% dos litogrupos. Outro caso que mereceu especial atenção foi a presença de “Terra Vegetal” nas sondagens. Devido à sua localização superficial e fraca espessura e representatividade (0,5%), este litogrupo não foi considerado.

Contabilizaram-se os troços identificados por cada litogrupo e a sua espessura e calcularam-se as respectivas proporções nos dados experimentais (Tabela 4.2). É possível averiguar que os litogrupos mais representativos são as areias com cerca de 42,5% do total dos dados observados, seguidos do grés com 28%, posteriormente encontra-se a argila com 18,2% e por fim as margas com cerca de 9,5%. O litogrupo calcário é o que se encontra menos representado, contabilizando cerca de 1,8% dos dados experimentais.

Tabela 4.2 - Litogrupos e respectivas proporções

| | Litogrupo | Troços | Espessura total (m) | % |
|----------|-----------|--------|---------------------|--------|
| Areias | 1 | 406 | 4762,29 | 42,443 |
| Calcário | 2 | 28 | 199,00 | 1,774 |
| Grés | 3 | 231 | 3149,05 | 28,065 |
| Argila | 4 | 348 | 2042,21 | 18,201 |
| Margas | 5 | 44 | 1068,00 | 9,518 |

Estes resultados são coerentes com a bibliografia geológica da região (ALMEIDA et al., 2000). Como referido anteriormente, os primeiros metros da área de estudo são essencialmente constituídos pela “Formação de Santa Marta”, com uma espessura que varia entre os 80 e os 100 metros, o que corresponde a cerca de 40% da área de estudo.

Após esta análise procedeu-se à escolha justificada de uma dimensão uniforme para suporte da informação geológica nas sondagens. Aqui existem duas premissas que se devem ter em conta: i) se a dimensão do suporte for muito elevada face média dos dados experimentais, o detalhe da informação dos troços de menor dimensão desaparece e ocorre simplificação; ii) pelo contrário se for muito inferior à dimensão média dos dados originais irá originar repetição de informação. Importa ainda referir que a dimensão da malha de amostragem deve ser igual à dimensão do suporte, pelo que se esta for muito reduzida a simulação geoestatística poderá ser incomportável pelo número de células a simular.

Realizou-se então a análise dos estatísticos univariados da espessura dos troços das sondagens (Gráfico 4.1).

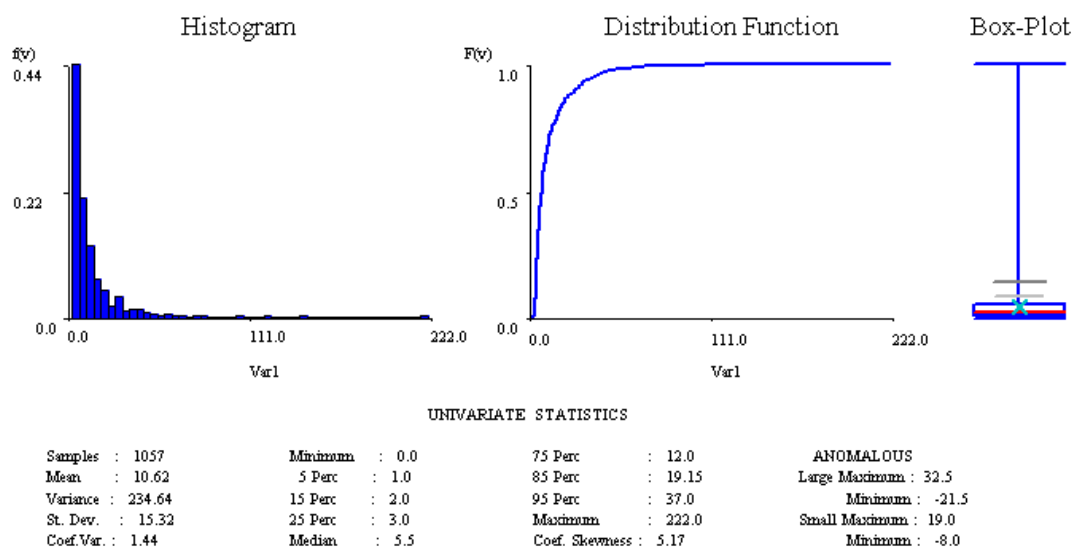


Gráfico 4.1 - Estatísticos univariados da espessura dos troços

Observou-se que a média da espessura dos troços é de 10,62 metros. Como sabido a média encontra-se bastante influenciada por valores extremos, pelo que para definir o suporte a ser utilizado há a necessidade de analisar as restantes medidas de localização. A mediana, que corresponde ao valor que separa 50% dos dados, é de 5,5 metros. A classe modal, que se entende como a classe de valores mais frequentada, é o intervalo $0 \leq x \leq 4,4 m$, com cerca de 44% dos dados. Optou-se por testar alguns valores dentro desse intervalo. Para testar se a dimensão de 2 metros apresentaria influência no detalhe de informação dos suportes com dimensão inferior, calculou-se a proporção dos dados que se encontravam abaixo dos 2 metros. Verificou-se que apenas se encontrariam 0,78% dos dados nesta situação. Sabendo que 50% dos dados se encontravam abaixo dos 5,5 metros testou-se a continuidade espacial com 2 suportes: 5 metros e 2 metros. Os resultados obtidos foram significativamente melhores com o suporte com uma dimensão de 2 metros, pelo que foi esta a dimensão adoptada.

Após esta etapa foi realizada uma nova análise com o objectivo de determinar a variação das proporções dos dados experimentais por suporte e em profundidade. Para cada nível calculou-se a média das proporções de cada litogrupo (Gráfico 4.2).

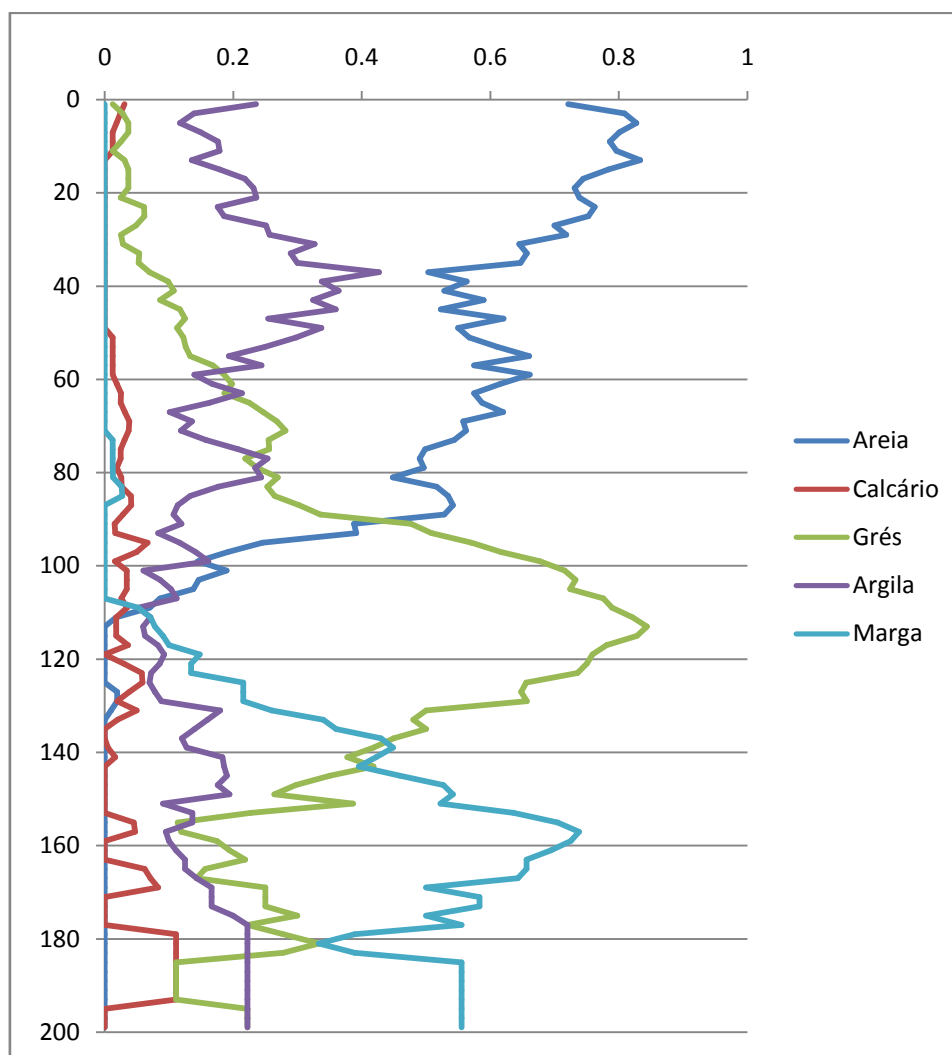


Gráfico 4.2 – Proporções dos litogrupos em profundidade (0 – 200 metros)

A partir do Gráfico 4.2 é possível concluir que quase todos os litogrupos apresentam comportamentos distintos em profundidade, com excepção das argilas que ocorrem um pouco para todas as profundidades, com um pico de ocorrências pelos 40 metros. Esta pequena variação prende-se com o facto de as argilas se encontrarem dissimuladas em lenticulas por toda a área de estudo.

É também possível observar a predominância de areias até aos 100 metros de profundidade, sendo que a partir desse nível deixa praticamente de ocorrer. Outro litogrupo com um comportamento particular é o das margas. Enquanto até aos 100 metros de profundidade é quase ausente, entre os 150 e os 200 é o litogrupo predominante. Entre os 90 e os 140 metros, o litogrupo com maior proporção nos dados experimentais é o grés. Os calcários são pouco encontrados até à profundidade estudada, mas têm maior predominância entre os 150 e os 200 metros.

Esta análise mostrou claramente um zonamento vertical dos litogrupos, que necessita de se ter em conta na modelação geológica. Assim, foram criadas 4 regiões na vertical com 50 metros cada.

Tabela 4.3 – Proporções de cada litogrupo por intervalos de profundidade

| | | Litogrupo | | | | |
|---------------------|---------|-----------|--------|--------|--------|--------|
| | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
| Profundidade (m) | 0;50 | 0,6940 | 0,0045 | 0,0546 | 0,2469 | 0,0000 |
| | 51;100 | 0,5126 | 0,0263 | 0,2824 | 0,1738 | 0,0048 |
| | 101;150 | 0,0314 | 0,0232 | 0,6303 | 0,1088 | 0,2063 |
| | 151;200 | 0,0000 | 0,0390 | 0,2057 | 0,1622 | 0,5931 |

A determinação das proporções dos litogrupos por região é importante porque, ulteriormente, vai condicionar a simulação dos litogrupos por correcção das probabilidades locais. Por exemplo, o litogrupo margas só deve ocorrer a partir dos 100 metros de profundidade, e o litogrupo areias não deve ocorrer abaixo dos 150 metros. Também através da correcção progressiva das probabilidades locais os resultados obtidos apresentam desvios mínimos em relação aos objectivos, ou seja, há um maior condicionamento às proporções iniciais. Outra vantagem da realização desta análise está relacionada com o desagrupamento (*declustering*) das amostras, porque a densidade de amostras não é constante em profundidade. É assim possível obter as proporções globais reais de cada litogrupo na área em estudo. A média global dos litogrupos encontra-se condicionada por um agrupamento preferencial dos dados experimentais, principalmente na vertical como é possível verificar pela Figura 4.3.

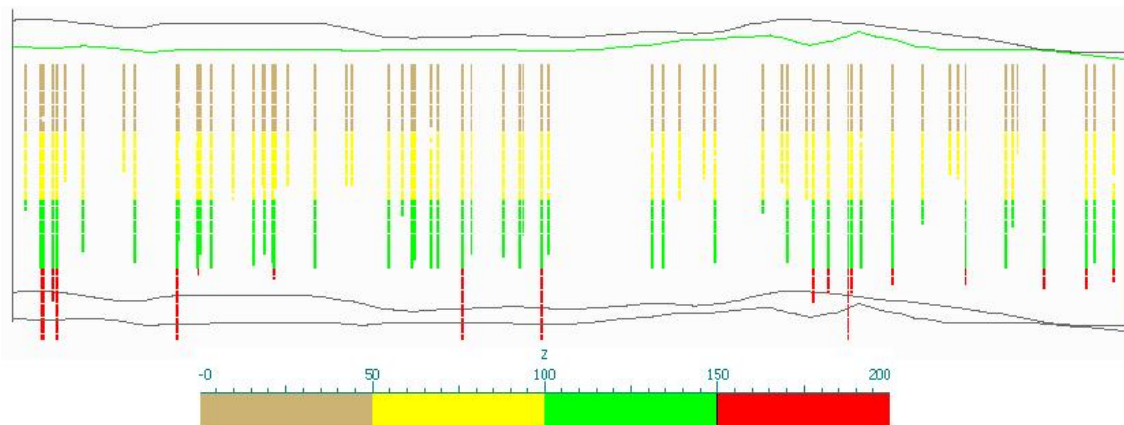


Figura 4.3 - Distribuição dos dados experimentais segundo regiões de 50 metros (imagem vista de Oeste e sobrelevada 5x).

Ao realizar uma análise à distribuição dos dados experimentais por região, é possível concluir que a maior parte encontra-se nos 2 primeiros níveis (mais de 70%), o 3º nível tem cerca de 23% dos dados experimentais enquanto o último tem apenas 6% (Tabela 4.4). Esta diferença na distribuição faz com que as médias globais se encontrem condicionadas aos diferentes aglomerados de amostras que se encontram na área de estudo.

Tabela 4.4 – Ocorrência dos dados experimentais por níveis

| Níveis (m) | % |
|------------|------|
| 0;50 | 36,7 |
| 51;100 | 34,0 |
| 101;150 | 23,2 |
| 151;200 | 6,1 |

A última fase da análise estatística aos dados experimentais consistiu no estudo das transições dos litogrupos entre suportes consecutivos, para cada uma das regiões definidas anteriormente. Aquando do processo de simulação, estas tabelas serão tomadas em conta para fazer o condicionamento.

Tabela 4.5 – Tabela das transições entre os dados experimentais na região 1 (0 – 50m)

| | Areias | Calcário | Grés | Argila | Margas | \sum % |
|----------|--------|----------|-------|--------|--------|----------|
| Areias | 0,918 | 0,001 | 0,005 | 0,075 | 0,000 | 1 |
| Calcário | 0,000 | 0,800 | 0,000 | 0,200 | 0,000 | 1 |
| Grés | 0,050 | 0,000 | 0,882 | 0,067 | 0,000 | 1 |
| Argila | 0,219 | 0,000 | 0,035 | 0,745 | 0,000 | 1 |
| Margas | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0 |

Analisando a Tabela 4.5, que corresponde às transições entre os troços dos dados experimentais da região 1 (0 - 50m), é possível afirmar que a probabilidade de um nó x_2 , antecedido por um nó x_1 cuja informação é “Areia”, ser novamente “Areia” é de cerca de 92%. Do mesmo modo, a probabilidade de um nó x_n , precedido por um nó x_{n-1} cuja informação é “Argila”, ser novamente “Argila” é de cerca de 75%, enquanto a probabilidade de ser “Areia” é de cerca de 21%. As restantes tabelas servem para condicionar as restantes áreas.

Tabela 4.6 - Tabela das transições entre os dados experimentais na região 2 (51 – 100m)

| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | \sum % |
|----------|-------|-------|-------|-------|-------|----------|
| Areias | 0,896 | 0,002 | 0,035 | 0,066 | 0,001 | 1 |
| Calcário | 0,000 | 0,915 | 0,064 | 0,021 | 0,000 | 1 |
| Grés | 0,018 | 0,007 | 0,930 | 0,041 | 0,004 | 1 |
| Argila | 0,237 | 0,008 | 0,124 | 0,631 | 0,000 | 1 |
| Margas | 0,000 | 0,000 | 0,333 | 0,000 | 0,667 | 1 |

Tabela 4.7 - Tabela das transições entre os dados experimentais na região (101 – 150m)

| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | \sum % |
|----------|-------|-------|-------|-------|-------|----------|
| Areias | 0,688 | 0,000 | 0,219 | 0,094 | 0,000 | 1 |
| Calcário | 0,000 | 0,667 | 0,267 | 0,067 | 0,000 | 1 |
| Grés | 0,000 | 0,007 | 0,932 | 0,024 | 0,038 | 1 |
| Argila | 0,008 | 0,033 | 0,057 | 0,878 | 0,024 | 1 |
| Margas | 0,000 | 0,000 | 0,004 | 0,000 | 0,996 | 1 |

Tabela 4.8 - Tabela das transições entre os dados experimentais na região (151 – 200m)

| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | Σ % |
|-----------------|-------|-------|-------|-------|-------|------------|
| Areias | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0 |
| Calcário | 0,000 | 0,692 | 0,231 | 0,000 | 0,077 | 1 |
| Grés | 0,000 | 0,048 | 0,855 | 0,000 | 0,097 | 1 |
| Argila | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 1,000 | 0,000 | 1 |
| Margas | 0,000 | 0,006 | 0,018 | 0,000 | 0,976 | 1 |

5 CASO DE ESTUDO

5.1 MODELO GEOLÓGICO 3D

Neste capítulo procedeu-se à construção do modelo estocástico geológico 3D na área subjacente à antiga fábrica da SPEL.

A modelação iniciou-se com o cálculo dos variogramas experimentais multifásicos dos litogrupos e ajuste de um modelo teórico (*software* geoMS - Geostatistical Modeling Software). Seguidamente foram simuladas 30 imagens dos litogrupos por SSI e foi calculada a respectiva imagem média (*software* desenvolvido para este caso de estudo a partir da versão paralelizada SSINDIC do *software* geoMS (NUNES, 2008; ALMEIDA, 1999), com as necessárias adaptações para ter em conta o condicionamento às transições.). Estas imagens foram importadas para o gOcad para visualização e validação, após transformação geométrica com o modelo digital de terreno.

A discriminação da informação em células permite a definição de litogrupos no espaço, determinando-se com relativa precisão a estratigrafia da área em estudo e, a partir daí, a estruturação das diversas propriedades dos mesmos. Este modelo tem a vantagem de poder ser utilizado para diversos fins, consoante o estudo a ser realizado, desde os mais simples como a determinação de volumes de determinado material até às mais complexas como a avaliação de reservas de minério. No presente trabalho é o ponto de partida para a construção de um modelo hidrogeológico de fluxo.

5.1.1 ANÁLISE DA CONTINUIDADE ESPACIAL

No processo de análise espacial foram calculados variogramas experimentais dos litogrupos nas direcções horizontal e vertical e calculado o respectivo variograma multifásico (soma dos variogramas individuais). Os litogrupos com maiores proporções na área em estudo formam camadas sub-horizontais não sendo expectável, para a escala de estudo, variação da continuidade segundo a direcção na horizontal. Nos gráficos 5.1 a 5.5 mostram-se os variogramas experimentais dos 5 litogrupos considerados na direcção horizontal. Os variogramas individuais mostram o comportamento de cada litogrupo de forma isolada.

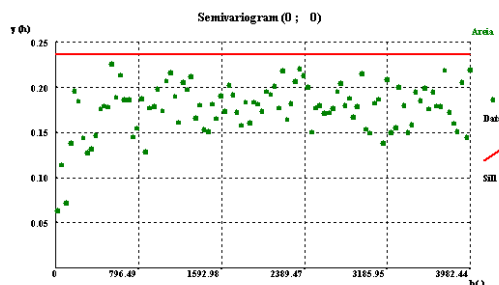


Figura 5.1 - Variograma experimental do litogrupo "Areias"

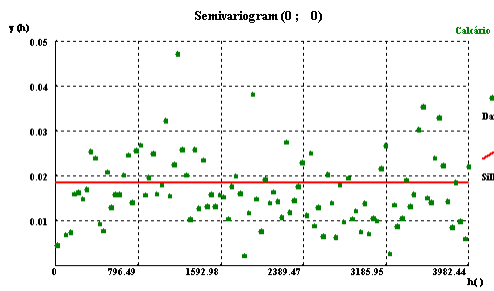


Figura 5.2 - Variograma experimental do litogrupo "Calcários"

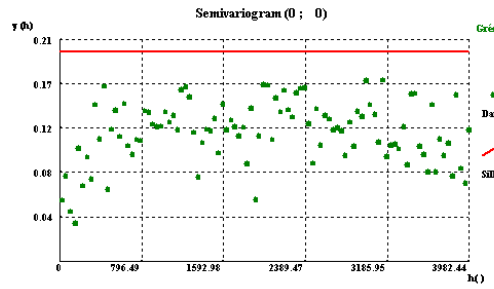


Figura 5.3 - Variograma experimental do litogrupo "Arenito"

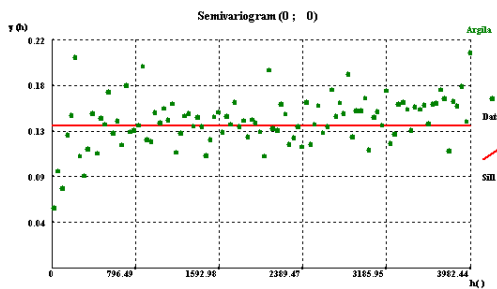


Figura 5.4 - Variograma experimental do litogrupo "Argilas"

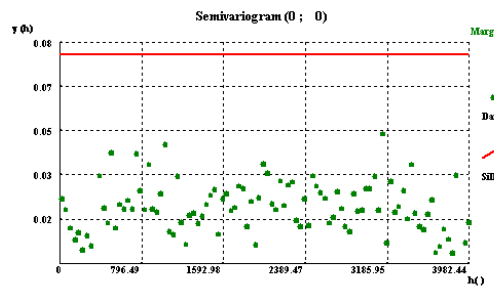


Figura 5.5 - Variograma experimental do litogrupo "Margas"

Através da análise dos variogramas é possível concluir que os litogrupos que apresentam maior continuidade na área em estudo são a "Areia", "Arenito" e principalmente as "Margas", com amplitudes consideráveis, ultrapassando os 4 km mesmo tendo em conta a dimensão da área de estudo. Este facto sugere a ocorrência de 2 estruturas, uma com duas a três centenas de metros e outra com amplitude superior a 4 km e que por isso não é completamente observada nos variogramas face à dimensão da área em estudo. Outro litogrupo que apresenta amplitude relevante mas inferior é o litogrupo das "Argilas", manifestando uma amplitude de cerca de 800 m. O litogrupo "Calcários" é o que apresenta menor continuidade espacial, o que é condicionado pela sua menor ocorrência. Tendo em conta estes dados preliminares, achou-se desnecessário a criação de duas ou mais populações para os litogrupos. Foram então calculados os variogramas experimentais multifásicos, horizontais e verticais e ajustados modelos teóricos (gráficos 5.6 e 5.7).

$$Exp_1(C = 0.456; a = 375m) + Exp_2(C = 0.208; a = 25000m)$$

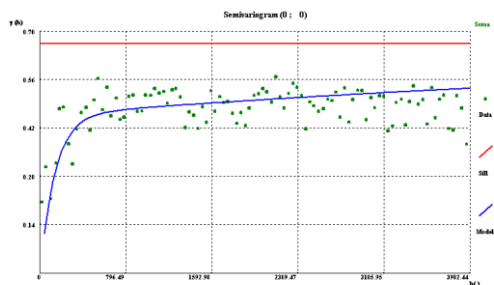


Figura 5.6 - Variograma experimental multifásico horizontal

$$Exp_1(C = 0.456; a = 70m) + Exp_2(C = 0.208; a = 70m)$$

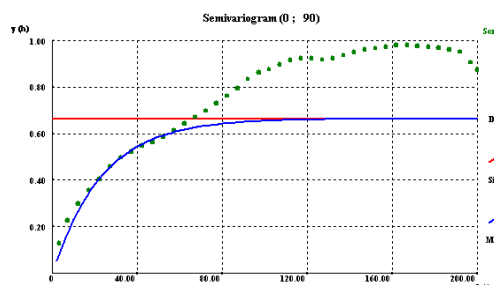


Figura 5.7 - Variograma experimental multifásico vertical

No variograma multifásico horizontal é possível verificar a existência de duas estruturas que foram ajustadas pela soma de 2 modelos teóricos exponenciais. A primeira estrutura apresenta menor

amplitude, com 375 metros, em comparação com a segunda, que atinge os 25000 metros. Na vertical apenas é visível uma estrutura neste caso com 70 metros de amplitude. Por uma questão de coerência com o número de estruturas, na modelação do variograma vertical foram consideradas duas estruturas com a mesma amplitude (70 m) e os mesmos patamares da direcção horizontal.

5.1.2 SIMULAÇÃO SEQUENCIAL DA INDICATRIZ

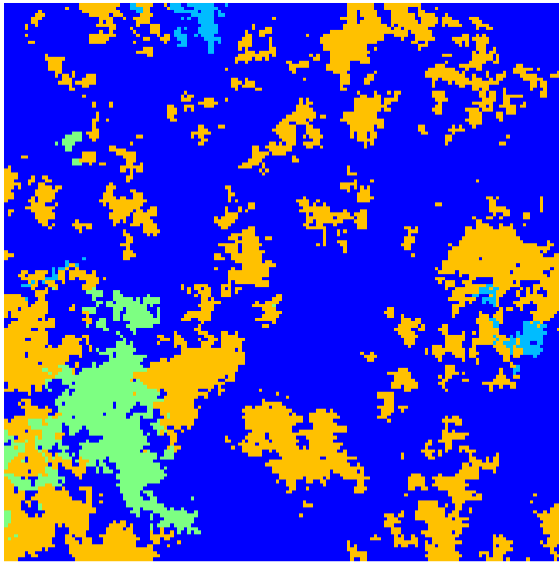
A fase seguinte consistiu na simulação estocástica de imagens dos litogrupos, tendo-se optado por gerar 30 imagens que são designadas por equiprováveis, têm a mesma variabilidade espacial e estatísticas dos valores experimentais. A malha de simulação contém 165 x 165 x 100 nós com as dimensões de 25 metros na horizontal e 2 metros na vertical, perfazendo 2 722 500 blocos.

Para melhorar o condicionamento das imagens simuladas aos dados experimentais, utilizou-se a SSI com condicionamento às médias locais de cada uma das 4 regiões em que se subdividiu o volume de estudo e às estatísticas de transições dos litogrupos observadas nos dados experimentais. Refira-se que o volume de estudo foi subdividido em profundidade em 4 regiões, com 50 metros cada. Através do condicionamento às probabilidades locais garante-se a melhoria destes estatísticos impondo um zonamento muito semelhante ao observado nos dados experimentais.

Os ficheiros utilizados para a realização da simulação foram os dados dos litogrupos, sob o formato de vector indicatriz, os variogramas experimentais que determinam a continuidade estrutural dos litogrupos e os histogramas locais e de transições por região (Capítulo 4, Tabela 4.3 a 4.8). Dado que existiam algumas situações em que duas sondagens coincidiam com o mesmo volume a simular, e que o ficheiro de valores experimentais da indicatriz continha valores entre 0 e 1, resultante da homogeneização dos suportes, optou-se pela simulação com a opção “two part search”, ou seja o condicionamento é feito iteração a iteração por uma mistura de amostras e nós (NUNES, 2008; ALMEIDA, 1999). Esta opção torna o processo de simulação muito mais lento (cada realização demora cerca de 1 hora) e não garante que em todas as simulações o valor do bloco coincida com o valor de uma amostra que esteja contida no bloco se o valor da amostra estiver afastado do centro do bloco.

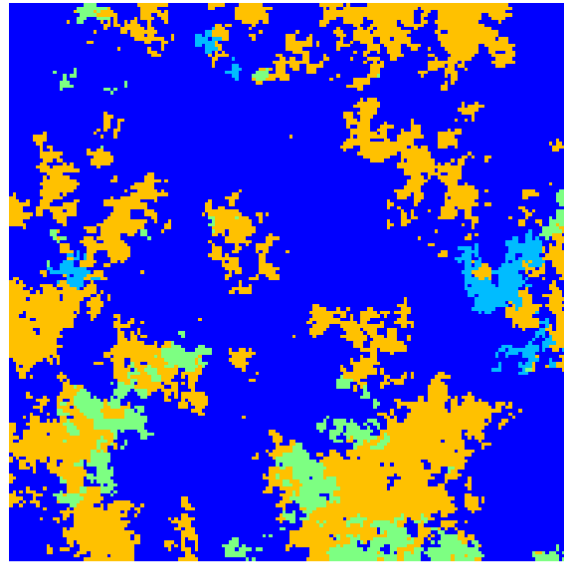
5.1.2.1 IMAGENS SIMULADAS

Com o intuito de fazer a análise das imagens simuladas, nas figuras seguintes mostram-se os resultados de 2 realizações, em planta (Figura 5.8 e Figura 5.9) e em perfil (Figura 5.10 e Figura 5.11).



Areia Calcário Arenito Argila Marga

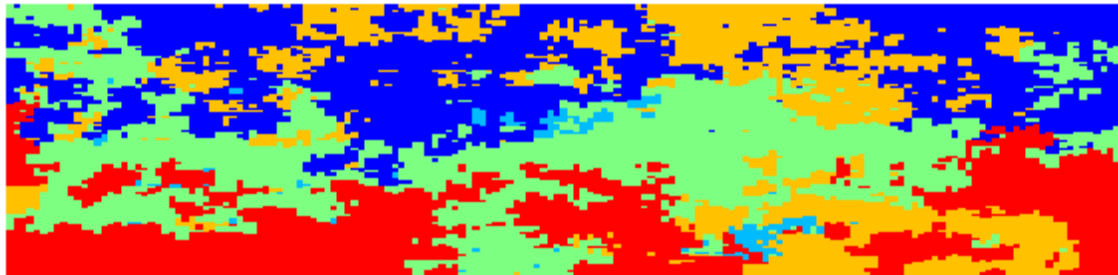
Figura 5.8 - Imagem simulada 3, em planta Z=1



Areia Calcário Arenito Argila Marga

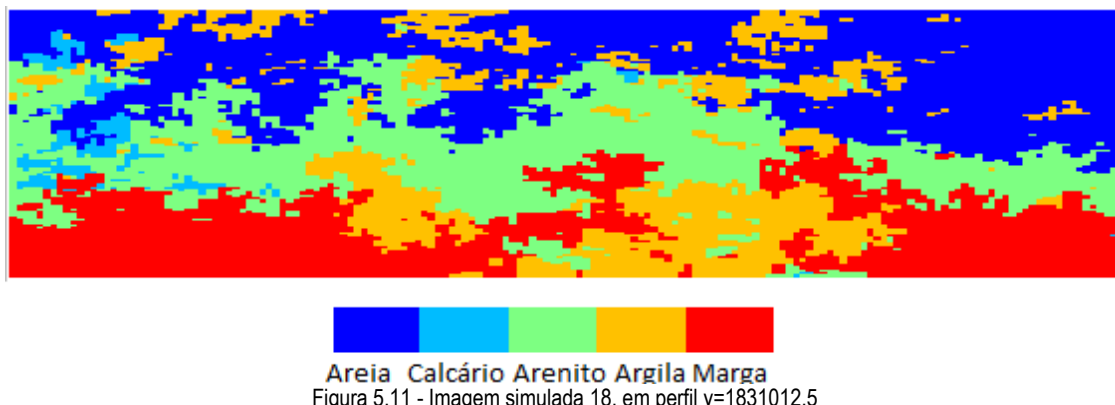
Figura 5.9 - Imagem simulada 6, em planta Z=1

Como já foi referido, as imagens simuladas apresentam cenários equiprováveis, sendo que as imagens apresentadas (realizações #3 e #6) embora respeitem tanto os estatísticos como a continuidade espacial das variáveis, são diferentes, e estas diferenças tendem maiores fora da localização das amostras. As imagens em planta da área em estudo respeitam o condicionamento às médias globais. Por exemplo, a ocorrência de valores simulados do litogrupo 5 (“Margas”) nestes horizontes da região superior é residual, assim como a ocorrência de valores simulados do litogrupo 1 (“Areias”) na região 4.



Areia Calcário Arenito Argila Marga

Figura 5.10 - Imagem simulada 13, em perfil x=110012.5



No que diz respeito às imagens de perfil é possível individualizar muito facilmente 3 camadas, da superfície para as regiões mais profundas, e que está de acordo com o modelo conceptual da região: i) a camada das areias, ii) a camada do arenito, e iii) a camada das margas. Outra característica que também está de acordo com o modelo conceptual da região é a ocorrência mais aleatória e em lenticulas das argilas, um pouco por todas as camadas.

5.1.2.2 VALIDAÇÃO DAS IMAGENS SIMULADAS

A validação das imagens simuladas é realizada com base nos 3 critérios de qualidade clássicos:

- i) Verificação do cumprimento local dos valores experimentais nas imagens simuladas;
- ii) Comparação entre as proporções experimental e simulada de cada litogrupo;
- iii) Comparação dos variogramas dos litogrupos nas imagens simuladas com o modelo utilizado nos dados experimentais

Estes critérios assentam nos pressupostos teóricos da simulação e na coerência entre as imagens simuladas e o modelo conceptual da realidade.

Para a verificação do cumprimento local dos valores experimentais nas imagens simuladas procedeu-se à sobreposição de várias imagens simuladas com os dados de partida. Em todas as observações verificou-se a coerência entre os valores experimentais e os valores simulados nas mesmas localizações, salvaguardando a excepção referida de amostras que estejam afastadas do centro do bloco (opção “two part search”).

Seguidamente apresenta-se a comparação entre as proporções experimental e simulada de cada litogrupo (Tabela 5.1), através dos estatísticos de imagens simuladas #2, #5, #14, #26 e #29, seleccionadas ao acaso.

Tabela 5.1 - Comparação entre as proporções dos litogrupos nos dados experimentais com as das imagens simuladas

| Litogrupo | Dados experimentais | Simulações | | | | |
|--------------|---------------------|------------|-------|-------|-------|-------|
| | | #2 | #5 | #14 | #26 | #29 |
| 1 "areia" | 0,310 | 0,314 | 0,311 | 0,310 | 0,309 | 0,310 |
| 2 "calcário" | 0,023 | 0,023 | 0,024 | 0,023 | 0,025 | 0,023 |
| 3 "arenito" | 0,293 | 0,284 | 0,284 | 0,284 | 0,285 | 0,288 |
| 4 "argila" | 0,173 | 0,174 | 0,175 | 0,173 | 0,173 | 0,175 |
| 5 "marga" | 0,201 | 0,205 | 0,206 | 0,210 | 0,208 | 0,205 |

Através da análise da tabela é possível concluir que, de um modo geral, as proporções obtidas nas simulações são semelhantes às proporções dos litogrupos nos dados experimentais. Nos litogrupos com maiores proporções não existem mudanças significativas a registar mas no caso do litogrupo 2, o de menor dimensão, as diferenças são maiores nalgumas realizações mas mesmo assim pouco significativas (ver tabela 5.2).

Tabela 5.2 - Variação percentual entre cada simulação e os dados experimentais

| Litogrupo | Simulações | | | | |
|--------------|------------|-------|-------|-------|-------|
| | #2 | #5 | #14 | #26 | #29 |
| 1 "areia" | 1,454 | 0,485 | 0,162 | 0,162 | 0,162 |
| 2 "calcário" | 1,288 | 3,004 | 1,288 | 7,296 | 1,288 |
| 3 "arenito" | 3,138 | 3,138 | 3,138 | 2,797 | 1,774 |
| 4 "argila" | 0,636 | 1,215 | 0,058 | 0,058 | 1,215 |
| 5 "marga" | 1,939 | 2,437 | 4,426 | 3,431 | 1,939 |

A última análise a ser realizada consiste na comparação dos variogramas multifásicos das imagens simuladas com o modelo utilizado nos dados experimentais. Para este procedimento foram escolhidas duas simulações ao acaso (realizações #2 e #5) e, aos respectivos variogramas, ajustou-se o modelo teórico utilizado no variograma dos dados experimentais.

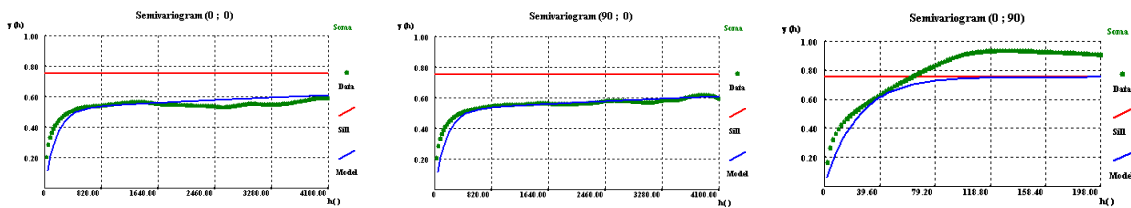


Figura 5.12 – Variogramas multifásicos da simulação #2. As direcções (0,0), (90,0) e (0,90) correspondem respectivamente aos eixos Y, X e Z

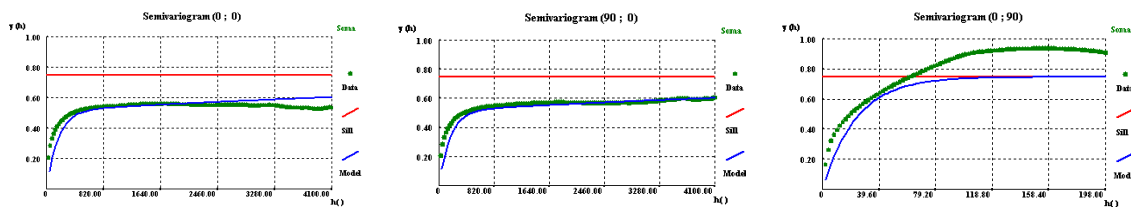


Figura 5.13 – Variogramas multifásicos da simulação #5. As direcções (0,0), (90,0) e (0,90) correspondem respectivamente aos eixos Y, X e Z

Através da sua análise é possível verificar que, de um modo geral, os modelos teóricos impostos se encontram bem reproduzidos. Outra conclusão que é possível retirar é a do ligeiro aumento do patamar das imagens simuladas relativamente aos dados experimentais, que é explicado pelo desagrupamento dos dados na direcção vertical. Refira-se que os variogramas experimentais dos dados dependem da maior quantidade de dados que existe à superfície relativamente às regiões mais profundas, e à superfície os dados são mais homogéneos. Após a análise de todos os critérios de qualidade é possível concluir que do ponto de vista do cumprimento dos requisitos do algoritmo da simulação sequencial, as imagens obtidas são consideradas válidas.

5.1.2.3 ANÁLISE AOS CONDICIONANTES NA SSI

Com o objectivo de quantificar as melhorias produzidas no processo de simulação através da introdução das 2 condicionantes (estatísticas dos litogrupos por região e transições), procedeu-se: i) cálculo das proporções de cada litogrupo em cada uma das regiões definidas, e ii) cálculo dos estatísticos das transições entre cada célula e em cada região.

Para esta análise realizaram-se mais 2 processamentos de SSI, tendo sido geradas 30 imagens em cada: i) SSI sem correcção às médias locais, ii) SSI com correcção das médias locais mas sem correcção das transições. A metodologia adoptada foi a presente na Figura 5.14 teve por base as equações (5.1) e (5.2), em que Pe_k^r refere-se às proporções dos dados experimentais (proporção do litogrupo k na região r), Ps_k^r às proporções dos dados simulados (proporção do litogrupo k na região r) e λ_r o factor de ponderação do número total de amostras na região r . Os resultados são apresentados através dos desvios e^s observados nos valores simulados relativamente aos valores experimentais.

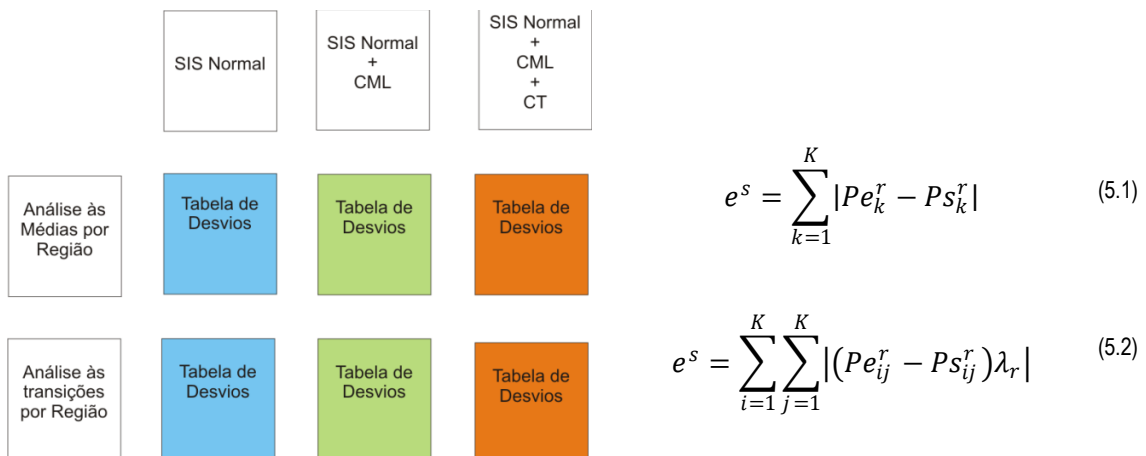


Figura 5.14 - Diagrama de cálculo dos desvios

A primeira análise realizada diz respeito à variação das médias por região conforme se aplicam restrições ao algoritmo SSI: sem qualquer correção (Tabela 5.3), com correção às médias locais (CML) (Tabela 5.4) e com correção às médias locais e transições (CT) (Tabela 5.5). Estas tabelas dizem respeito a uma realização escolhida ao acaso (#1).

Tabela 5.3 - Desvios entre as proporções nos litogrupos na SSI sem qualquer correção e nos dados experimentais

| Regiões | Litogrupos | | | | | e^S |
|---------|------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | |
| 0-50 | 0,064 | 0,002 | 0,086 | 0,081 | 0,058 | 1,308 |
| 50-100 | 0,141 | 0,002 | 0,015 | 0,010 | 0,133 | |
| 100-150 | 0,129 | 0,013 | 0,266 | 0,038 | 0,086 | |
| 150-200 | 0,084 | 0,031 | 0,038 | 0,022 | 0,008 | |

Tabela 5.4 - Desvios entre as proporções nos litogrupos na SSI com correção médias locais e nos dados experimentais

| Regiões | Litogrupos | | | | | e^S |
|---------|------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | |
| 0-50 | 0,013 | 0,001 | 0,008 | 0,001 | 0,004 | 0,200 |
| 50-100 | 0,018 | 0,012 | 0,007 | 0,005 | 0,018 | |
| 100-150 | 0,018 | 0,008 | 0,035 | 0,004 | 0,005 | |
| 150-200 | 0,016 | 0,016 | 0,005 | 0,002 | 0,003 | |

Tabela 5.5 - Desvios entre as proporções nos litogrupos na SSI com correção médias locais e transições e nos dados experimentais

| Regiões | Litogrupos | | | | | e^S |
|---------|------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | |
| 0-50 | 0,016 | 0,002 | 0,011 | 0,001 | 0,005 | 0,221 |
| 50-100 | 0,021 | 0,014 | 0,002 | 0,008 | 0,017 | |
| 100-150 | 0,019 | 0,008 | 0,046 | 0,009 | 0,011 | |
| 150-200 | 0,011 | 0,013 | 0,005 | 0,002 | 0,001 | |

A Figura 5.15 representa o comportamento do somatório do valor absoluto dos erros para as 30 simulações realizadas, para cada método.

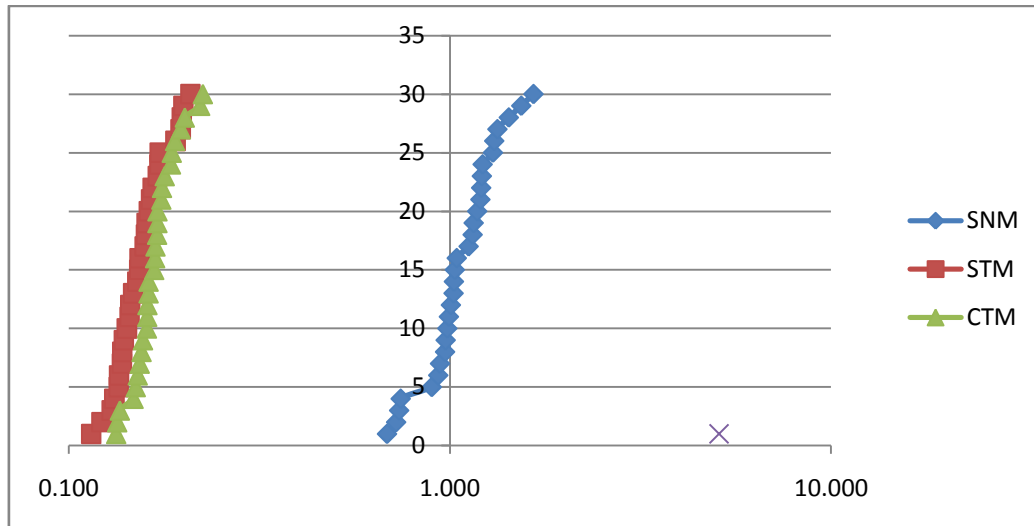


Figura 5.15 - Gráfico do comportamento do desvio em cada método

Através de uma breve análise às tabelas e gráfico anteriores, observa-se que as médias por região apresentam grandes desvios quando são obtidas apenas com recurso ao algoritmo SSI sem nenhuma correção, mas estes valores baixam muito com a correção das médias locais (a média dos erros baixa de cerca de 1,091 para 0,156) e que se mantém na mesma ordem de grandeza quando se aplica a correção das transições (o erro médio sobe de 0,156 para 0,169). Este aumento no desvio das médias da imagem simulada relativamente aos dados originais resulta do reajustamento dos resultados face a uma nova condicionante. No anexo C, E e G podem ser consultados os resultados.

A segunda análise diz respeito à variação das estatísticas das transições por região conforme se aplicam restrições ao algoritmo SSI. Novamente são apresentadas as tabelas referentes à mesma realização #1. As restantes tabelas são apresentadas nos anexos B, D e F.

A Figura 5.16 representa o comportamento do somatório do valor absoluto dos erros para as 30 simulações realizadas, para cada método.

A análise das tabelas e gráfico possibilita concluir que existem melhorias claras com a imposição gradual de condicionantes ao algoritmo SSI. A imagem obtida sem nenhum condicionante apresenta um desvio médio de cerca de 6,195. Quando a imagem é obtida através do algoritmo SSI com a correção das médias locais, os desvios baixam consideravelmente, para um valor médio de 0,156. A aplicação do condicionamento ao histograma das transições promove nova melhoria, centrando o desvio médio em cerca de 0,137. É possível verificar estas melhorias ao longo das 30 simulações, na Figura 5.16. As Tabela 5.6 a Tabela 5.9 representam os desvios entre os estatísticos de transição nos litogrupos na SSI (SSI), na SSI com correção das médias locais (SSI+CML) e na SSI com correção das médias locais e histograma das transições (SSI+CML+CT), para cada região.

Tabela 5.6 - Desvios entre estatísticos de transição nos litogrupos entre as 3 simulações e os dados experimentais, região 1

| | | SSI+CML+CT | | | | | SSI+CML | | | | | SSI | | | | | Região 1 |
|-----------|---|------------|-------|-------|-------|-------|-----------|-------|-------|-------|-------|-----------|-------|-------|-------|-------|----------|
| | | Litogrupo | | | | | Litogrupo | | | | | Litogrupo | | | | | |
| | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | |
| Litogrupo | 1 | 0,003 | 0,000 | 0,002 | 0,001 | 0,000 | 0,003 | 0,000 | 0,002 | 0,000 | 0,000 | 0,030 | 0,001 | 0,031 | 0,019 | 0,017 | |
| | 2 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,224 | 0,087 | 0,020 | 0,160 | 0,003 | |
| | 3 | 0,002 | 0,000 | 0,002 | 0,000 | 0,000 | 0,002 | 0,000 | 0,002 | 0,000 | 0,000 | 0,096 | 0,002 | 0,108 | 0,011 | 0,022 | |
| | 4 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,000 | 0,002 | 0,000 | 0,000 | 0,002 | 0,000 | 0,032 | 0,004 | 0,019 | 0,002 | 0,011 | |
| | 5 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,133 | 0,000 | 0,047 | 0,023 | 0,797 | |

Tabela 5.7 - Desvios entre estatísticos de transição nos litogrupos entre as 3 simulações e os dados experimentais, região 2

| | | SSI+CML+CT | | | | | SSI+CML | | | | | SSI | | | | | Região 2 |
|-----------|---|------------|-------|-------|-------|-------|-----------|-------|-------|-------|-------|-----------|-------|-------|-------|-------|----------|
| | | Litogrupo | | | | | Litogrupo | | | | | Litogrupo | | | | | |
| | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | |
| Litogrupo | 1 | 0,008 | 0,001 | 0,007 | 0,001 | 0,001 | 0,009 | 0,001 | 0,008 | 0,001 | 0,001 | 0,097 | 0,007 | 0,059 | 0,006 | 0,037 | |
| | 2 | 0,001 | 0,002 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,002 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,093 | 0,193 | 0,050 | 0,023 | 0,028 | |
| | 3 | 0,006 | 0,000 | 0,008 | 0,001 | 0,001 | 0,007 | 0,000 | 0,009 | 0,001 | 0,001 | 0,075 | 0,002 | 0,124 | 0,010 | 0,037 | |
| | 4 | 0,002 | 0,000 | 0,001 | 0,003 | 0,000 | 0,003 | 0,000 | 0,001 | 0,004 | 0,000 | 0,107 | 0,001 | 0,020 | 0,087 | 0,041 | |
| | 5 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,000 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,095 | 0,004 | 0,246 | 0,041 | 0,106 | |

Tabela 5.8 - Desvios entre estatísticos de transição nos litogrupos entre as 3 simulações e os dados experimentais, região 3

| | | SSI+CML+CT | | | | | SSI+CML | | | | | SSI | | | | | Região 3 |
|-----------|---|------------|-------|-------|-------|-------|-----------|-------|-------|-------|-------|-----------|-------|-------|-------|-------|----------|
| | | Litogrupo | | | | | Litogrupo | | | | | Litogrupo | | | | | |
| | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | |
| Litogrupo | 1 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,001 | 0,099 | 0,008 | 0,118 | 0,063 | 0,074 | |
| | 2 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,028 | 0,068 | 0,145 | 0,015 | 0,064 | |
| | 3 | 0,002 | 0,001 | 0,008 | 0,001 | 0,004 | 0,002 | 0,001 | 0,008 | 0,001 | 0,004 | 0,040 | 0,008 | 0,112 | 0,020 | 0,044 | |
| | 4 | 0,000 | 0,001 | 0,002 | 0,003 | 0,001 | 0,000 | 0,001 | 0,003 | 0,004 | 0,002 | 0,021 | 0,022 | 0,040 | 0,124 | 0,085 | |
| | 5 | 0,000 | 0,000 | 0,006 | 0,002 | 0,008 | 0,000 | 0,000 | 0,007 | 0,002 | 0,009 | 0,032 | 0,005 | 0,076 | 0,049 | 0,161 | |

Tabela 5.9 - Desvios entre estatísticos de transição nos litogrupos entre as 3 simulações e os dados experimentais, região 4

| | | SSI+CML+CT | | | | | SSI+CML | | | | | SSI | | | | | Região 4 |
|-----------|---|------------|-------|-------|-------|-------|-----------|-------|-------|-------|-------|-----------|-------|-------|-------|-------|----------|
| | | Litogrupo | | | | | Litogrupo | | | | | Litogrupo | | | | | |
| | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | |
| Litogrupo | 1 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,003 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,826 | 0,002 | 0,038 | 0,004 | 0,130 | |
| | 2 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,016 | 0,073 | 0,105 | 0,065 | 0,097 | |
| | 3 | 0,000 | 0,001 | 0,003 | 0,001 | 0,002 | 0,000 | 0,002 | 0,003 | 0,002 | 0,002 | 0,018 | 0,043 | 0,035 | 0,023 | 0,038 | |
| | 4 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,006 | 0,005 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,007 | 0,006 | 0,002 | 0,004 | 0,024 | 0,190 | 0,160 | |
| | 5 | 0,001 | 0,000 | 0,003 | 0,005 | 0,009 | 0,000 | 0,000 | 0,003 | 0,005 | 0,008 | 0,015 | 0,005 | 0,015 | 0,032 | 0,057 | |

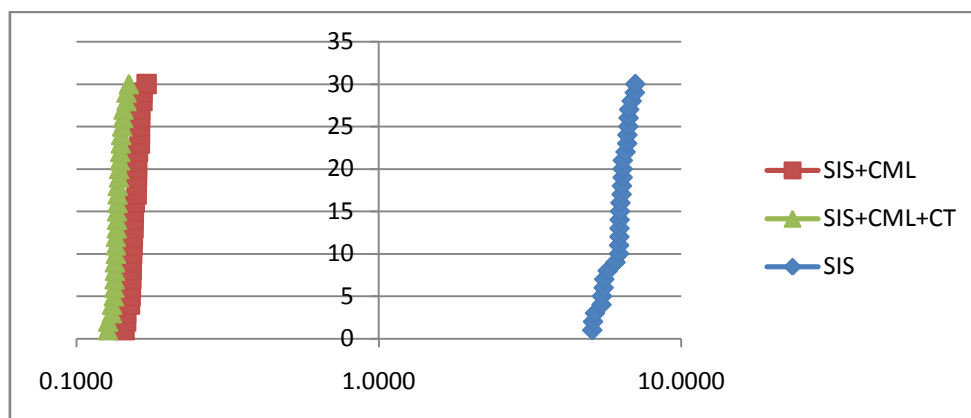


Figura 5.16 - Gráfico do comportamento do desvio em cada método

5.1.3 IMAGEM MÉDIA

Para as restantes etapas deste estudo optou-se por utilizar a imagem média das simulações (ALMEIDA ET AL, 1993) em detrimento das imagens simuladas, pelo que calculou-se a imagem média das 30 imagens simuladas, o que é equivalente a um mapa estimado por krigagem da indicatriz. Esta escolha encontra-se relacionada essencialmente com o objectivo do trabalho.

A construção de um cenário, cuja restrição principal seria a de respeitar a geologia da área, para posteriormente ser adaptado para o modelo de fluxo não exige nenhuma imagem específica. Os testes realizados no *Visual MODFLOW* foram sintéticos e apenas com o objectivo de analisar o reflexo da metodologia empregue, avaliação do comportamento dinâmico em profundidade do sistema de camadas e lenticulas de argila, e uma imagem média mostra esse comportamento. No entanto, caso se procedesse à calibração dos resultados obtidos, as imagens médias apresentariam determinadas limitações como a impossibilidade de caracterizar o comportamento espacial extremo e a incerteza daquele fenómeno. Neste caso apresentar-se-ia muito mais proveitoso a utilização das imagens simuladas, porque através destas é possível visualizar o comportamento extremo das características internas ou morfológicas de um dado recurso e, simultaneamente, quantificar a incerteza da localização espacial das mesmas (SOARES, 2000)

Refira-se ainda que a estimação directa por krigagem de uma imagem média seria sempre problemática, com geração de artefactos muito difíceis de atenuar, dada a distribuição de dados em linhas de amostragem, o que se chama na gíria geoestatística de “strings of data”.

Nas figuras 5.15 a 5.18 mostram-se 2 horizontes e 2 perfis da imagem média calculada.

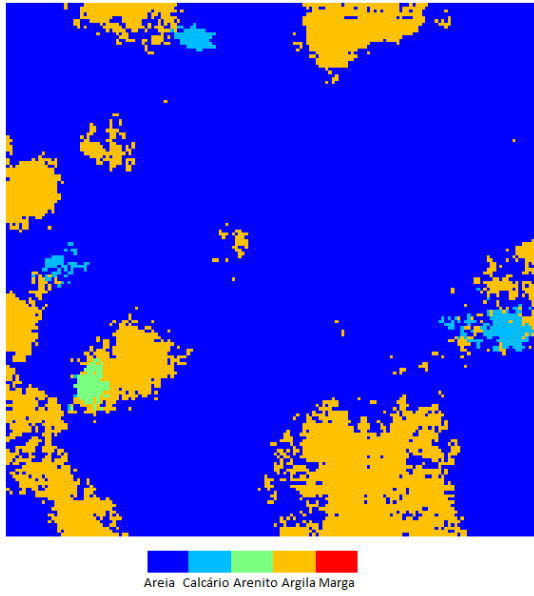


Figura 5.17 - Imagem média das simulações em planta Z=1

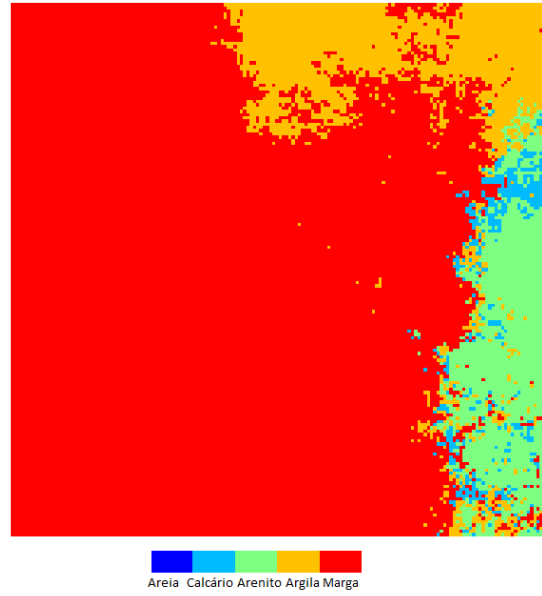


Figura 5.18 - Imagem média das simulações em planta Z=161

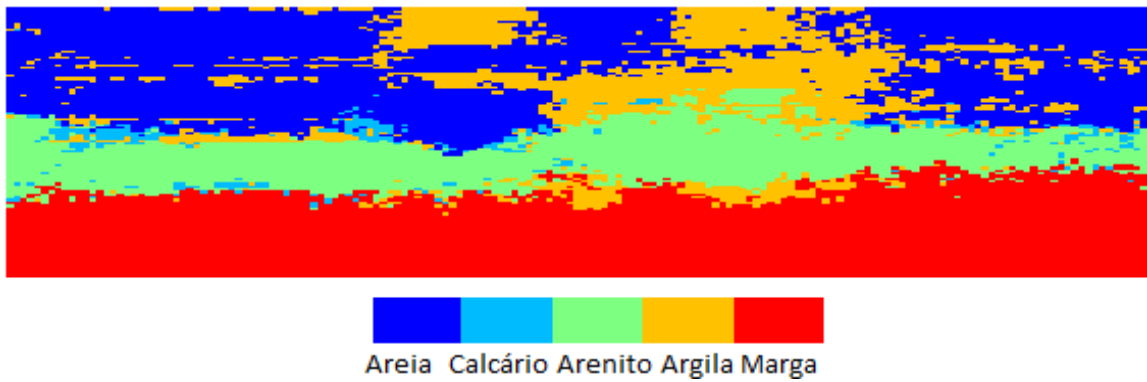


Figura 5.19 - Imagem média das simulações em perfil X= 110012.5

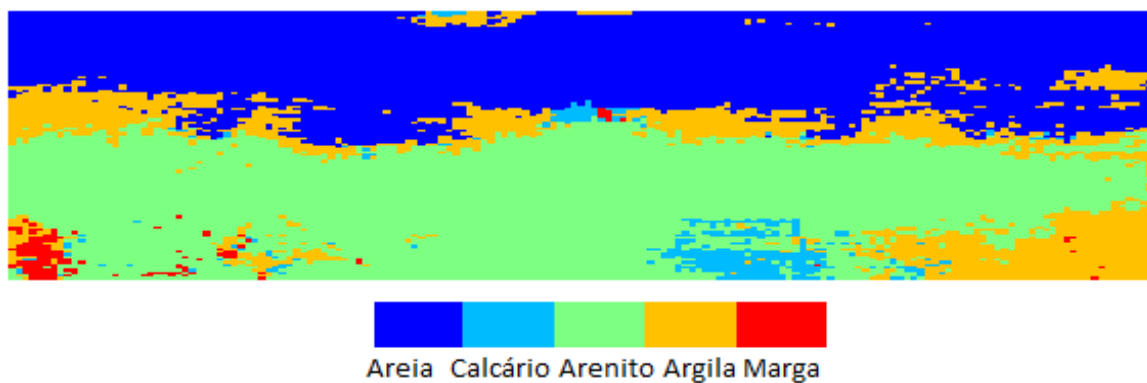


Figura 5.20 - Imagem média das simulações em perfil X=114112.5

5.1.4 REPRESENTAÇÃO DO MODELO ESTOCÁSTICO GEOLÓGICO 3D

A representação do modelo estocástico geológico 3D foi levada a cabo no *software* gOcad. Este software encontra-se a ser desenvolvido pelo Grupo de Pesquisa na Ecole Nationale Supérieure de Géologie (França) e respectivos parceiros. Este software foi desenhado especificamente para construir e analisar corpos geológicos e as suas propriedades (MALLET, 1992). Apesar de esta ferramenta se encontrar principalmente direccionada para a indústria petrolífera, é também muito utilizada noutras áreas. Para importar a matriz de litogrupos estimada, referente à imagem média, construiu-se no gOcad um objecto de tipo *s-grid*, com o mesmo espaçamento, coordenadas e número de células das imagens simuladas. Posteriormente, o topo desta *s-grid* foi deformado com base no modelo digital de terreno (Figura 5.21).

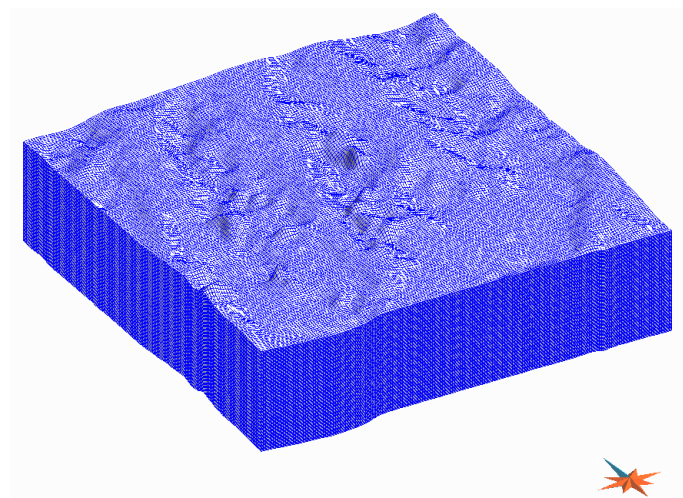


Figura 5.21 - Representação das 2 722 500 células em que se discretizou a área em estudo (ampliado 5 vezes)

O passo seguinte foi a importação dos dados obtidos da imagem média para o modelo matricial, através de um ficheiro em formato ASCII (*.txt). Na Figura 5.22 mostra-se o modelo geológico 3D (MG3D) relativo à imagem média.

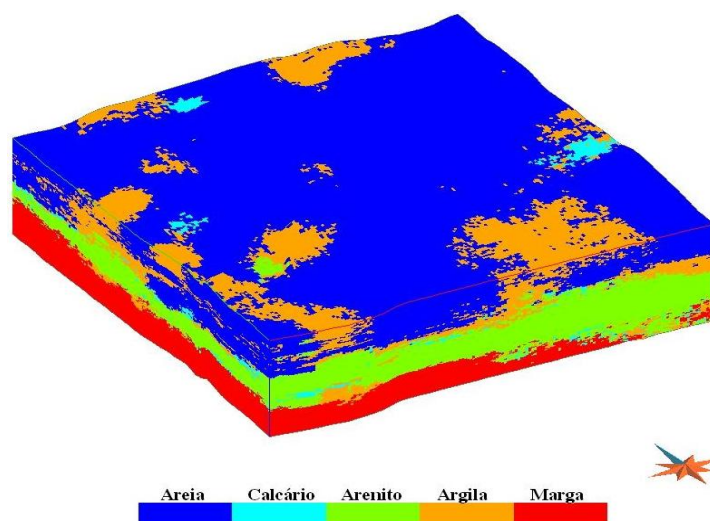


Figura 5.22 – Modelo geológico 3D

5.2 MODELO HIDROGEOLÓGICO

Como anteriormente referido, os modelos hidrogeológicos são limitados no que diz respeito à quantidade de blocos de informação para a realização de cálculos. Deste modo há necessidade de modificar a dimensão dos blocos no simulador de fluxo, reduzindo os milhões que compunham o modelo geológico de alta resolução, para apenas umas centenas de milhares. A resolução deste problema encontra-se no correcto *upscaling* da informação do modelo geológico para o modelo de simulação dinâmica, minimizando a perda de informação.

Esta adaptação dos modelos necessita de ter em conta o modelo conceptual da região, e as direcções onde é de esperar mais homogeneidade ou heterogeneidade. No local em estudo, as unidades hidrogeológicas apresentam-se conceptualmente como sub-horizontais, facilitando a determinação dos limites entre elas e, conseqüentemente, o processo de *upscaling* da informação deve simplificar os dados na direcção vertical em detrimento da direcção horizontal.

5.2.1 ADAPTAÇÃO DO MODELO GEOLÓGICO

O primeiro passo na adaptação do MG3D foi a delimitação de camadas, que de ponto de vista hidrogeológico são coerentes. Assim sendo, propôs-se que o litogrupo Areias fosse a primeira grande unidade hidrogeológica, ou seja o aquífero livre; e que o limite entre esta unidade e o nível seguinte, o nível argiloso, seria o limite 1 (Figura 5.23). Este limite admite-se como tendo uma profundidade média de 70 metros. Através da bibliografia estudada (RIBEIRO, 2009), e como referido em capítulos anteriores, o aquífero semiconfinado encontra-se em grande parte separado do aquífero livre pela presença de lenticulas de argila. Devido a este facto, a definição de um nível argiloso faz todo o sentido e apresenta-se com grande importância para a determinação do comportamento hidrogeológico das restantes unidades. A camada de Arenito foi definida como sendo a terceira unidade hidrogeológica, correspondendo ao aquífero semi-confinado. O limite que separa esta unidade das Argilas encontra-se a uma profundidade inicial média de 90 metros, e foi denominado de limite 2. Na parte inferior do aquífero semi-confinado existem novamente diversas lenticulas de argila. Face este facto foi definido o segundo nível argiloso, e para marcar a separação entre este e o aquífero semi-confinado determinou-se o limite 3, a uma profundidade inicial média de 130 metros. Por último existe o limite que separa o segundo nível argiloso do nível margoso. Este definiu-se como sendo o quarto e último limite e teve início à profundidade de 150 metros.

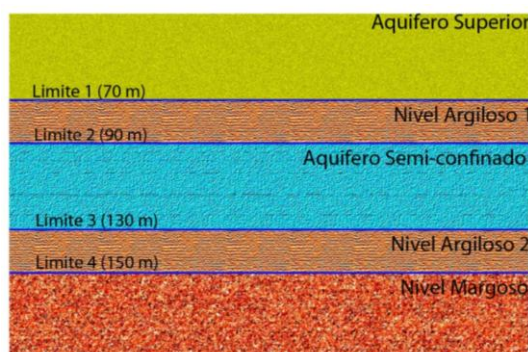


Figura 5.23 - Esquema das unidades e dos limites existentes entre as mesmas.

Como é possível antecipar, os limites das unidades hidrogeológicas não são perfeitamente horizontais e apresentam variações localmente com a espessura das unidades. Em alguns casos, quando existe uma unidade que não apresenta espessura (caso dos níveis argilosos por serem lenticulas), as unidades imediatamente a cima e abaixo encontram-se em contacto.

Para a determinação optimal destes limites foi utilizado o método de optimização *Simulated Annealing* (SA), através do qual é implementada uma função objectivo que se faz decrescer, até que os resultados obtidos forem considerados aceitáveis.

O método de optimização através do algoritmo SA já foi descrito em 3.3.2, mas referem-se aqui os aspectos práticos da implementação:

- I) Modelo de controlo para cálculo da função objectivo – modelo geológico de litogrupos, modelo geostatístico.
- II) Estado inicial – Para cada traço de valores na malha original (índices linha e coluna, respectivamente ix e iy), posição inicial do topo e base de cada uma das L camadas consideradas ($l_i^{topo}(ix, iy)$; $l_i^{base}(ix, iy)$; $i = 1, \dots, L$). No estado inicial consideraram-se todas as camadas horizontais.
- III) Função objectivo – Para cada camada (l_i , $i = 1, \dots, L$), definição de proporções objectivo para cada litogrupo $p_{l_i,k}$, $i = 1, \dots, L$; $k = 1, \dots, K$. As diferenças entre as proporções objectivo e o estado inicial constitui a função objectivo a minimizar.
- IV) Perturbação – Selecção aleatória de um traço de valores na malha original (índices linha e coluna, respectivamente ix e iy , selecção de um limite entre duas camadas consecutivas l_{ij} , alteração do limite de uma determinada magnitude $d_{l_{ij}}$ positiva ou negativa.
- V) Resultado – Posição optimal de cada camada (l_i , $i = 1, \dots, L$) em cada traço de índices ix e iy .

A aplicação massiva do SA com estes pressupostos permitiu definir 5 camadas de forma optimizada, de acordo com os princípios da função objectivo e os arquétipos proporções de cada litogrupo em cada camada (Tabela 5.10). Estes arquétipos admitem os valores (1/0) presença ou ausência do litogrupo ou o valor (-9) que significa indiferença do litogrupo na definição dos limites.

Tabela 5.10 – Arquétipos para definição das camadas

| Unidade | Características | Litogrupos | | | | |
|---------|-------------------------|------------|----|---|----|----|
| | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
| 1 | Aquífero superior | 1 | 0 | 0 | 0 | -9 |
| 2 | Nível argiloso 1 | 0 | -9 | 0 | 1 | -9 |
| 3 | Aquífero semi confinado | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 4 | Nível argiloso 2 | 0 | -9 | 0 | 1 | -9 |
| 5 | Nível margoso | -9 | 1 | 0 | -9 | 1 |

Os resultados obtidos após a execução do SA mostram que algumas camadas não têm continuidade lateral, o que está de acordo com o modelo conceptual em lenticulas mas que não permite que seja

executado no simulador de fluidos de diferenças finitas como é o caso do MODFLOW. Assim os resultados foram pós-processados para impor a continuidade lateral de todas as camadas (Figura 5.24). Adoptou-se uma espessura mínima de 3 células, ou seja 6 metros.



Figura 5.24 - Exemplo da construção dos limites entre unidades: 1) unidades de partida; 2) resultado final após método de otimização; 3) pós-processamento

Como é possível verificar no exemplo sintético da

Figura 5.24, numa fase inicial existem as unidades hidrogeológicas de partida, que são constituídas por diversas litologias / litogrupos. Por exemplo, a unidade de topo é constituída pelos litogrupos 1 e 4. Após a execução do SA, os limites são reposicionados e obtém-se um resultado como o da figura

Figura 5.24(b). O pós-processamento dos resultados não altera a delimitação das unidades mas faz o prolongamento artificial da geometria das camadas. Refira-se que no final as propriedades (permeabilidade e porosidade) são calculadas com base nos litogrupos existentes, e que por isso o prolongamento artificial das camadas não tem consequências nos resultados da simulação.

A execução deste algoritmo permitiu reduzir a discretização vertical de 100 células para apenas 5, com espessura variável. Esta redução no número de células levanta outro problema: a necessidade de realizar o *upscaling* da informação que se encontrava distribuída pelas células que constituíam cada coluna inicial, para uma única célula. A homogeneização do limite de cada unidade não inviabilizou que dentro da mesma não se encontra células com informação de outra unidade. A título de exemplo refere-se a unidade das “Areias” que é constituída por diversos aglomerados de células de “Argila”. O cálculo das propriedades de cada célula será discutido seguidamente.

Apresenta-se de seguida a Figura 5.25 e Figura 5.26 que contêm o exemplo de uma imagem simulada e a sua transformação através do método de otimização SA.

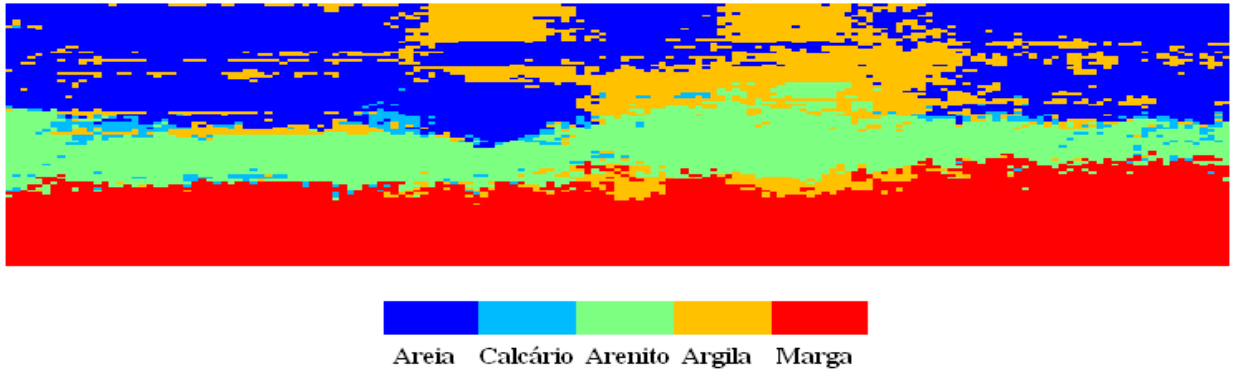


Figura 5.25 - Imagem média das simulações, perfil X= 110012.5

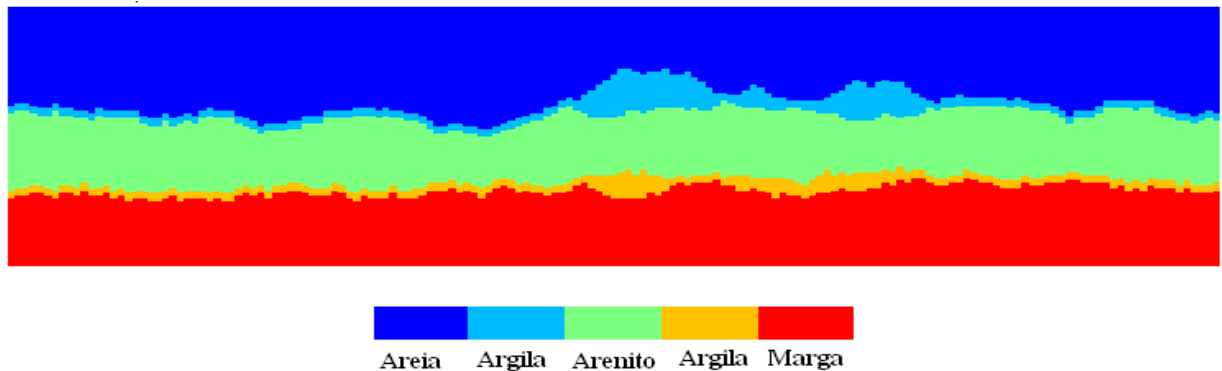


Figura 5.26 - Imagem obtida através do método SA, perfil X= 110012.5

5.2.1.1 ANÁLISE DA ENTROPIA SA

Como referido no capítulo 3, o método de SA é um algoritmo de otimização por simulação, apresentando deste modo várias soluções para cada problema. Para avaliar a variabilidade dos resultados obtidos, decidiu-se realizar uma análise estatística da variabilidade aos resultados de 10 corridas do SA. Esta foi feita através do cálculo da entropia da distribuição das probabilidades locais (GOOVEARTS, 1997; ALMEIDA, 2010), e pode ser definida do seguinte modo para um conjunto de K fases (litogrupos):

$$H(x) = - \sum_{k=1}^K [\ln p_k^*(x)] p_k^*(x) \quad (5.3)$$

Em que $p_k^*(x)$ é a média dos 10 valores simulados para cada célula x do volume simulado. Os resultados variam entre 0 (incerteza nula) até $\ln K$ (incerteza máxima). Também pode ser apresentada no intervalo 0 e 1:

$$H_R(x) = \frac{H(x)}{\ln K} \quad (5.4)$$

Na Figura 5.27 apresenta-se a distribuição da entropia para um perfil do modelo.

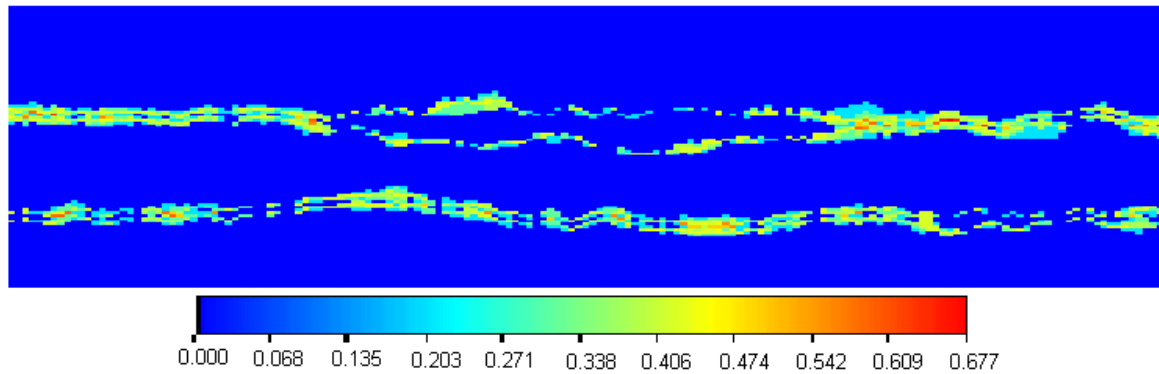


Figura 5.27- Distribuição da entropia, X=113262.5

No espectro de cores apresentado, as áreas a azul representam os locais de baixa incerteza. Estas zonas encontram-se relacionadas com a presença inequívoca de uma das unidades definidas, preenchendo os requisitos impostos pelo SA. Já as zonas que se apresentam com cores diferentes estão caracterizadas por algum grau de incerteza. Como é possível verificar estas encontram-se localizadas nas zonas de transição entre unidades.

5.2.2 MODELO CONCEPTUAL

Para a estruturação do modelo hidrogeológico no MODFLOW, que posteriormente servirá para o cálculo do modelo de fluxo, discretizou-se a área de estudo segundo a grelha determinada a partir do MG3D. Esta grelha consiste agora em 165x165x5 (Figura 5.28, 5.29 e 5.30), perfazendo um total de 136125 células. Na horizontal as dimensões são as mesmas do MG3D, $x=25$ metros e $y= 25$ metros e na vertical é variável, embora as 5 espessuras somadas sejam 200 metros. Assim utilizaram-se as unidades hidrogeológicas determinadas na secção anterior: 1) aquífero livre; 2) nível argiloso 1; 3) aquífero semi-confinado; 4) nível argiloso 2; 5) nível margoso (5.29 e 5.30).

As alterações realizadas na topografia do terreno foram importadas a partir do modelo matricial deformável, gerado no *gOcad* com base na topografia da estrutura natural da região.

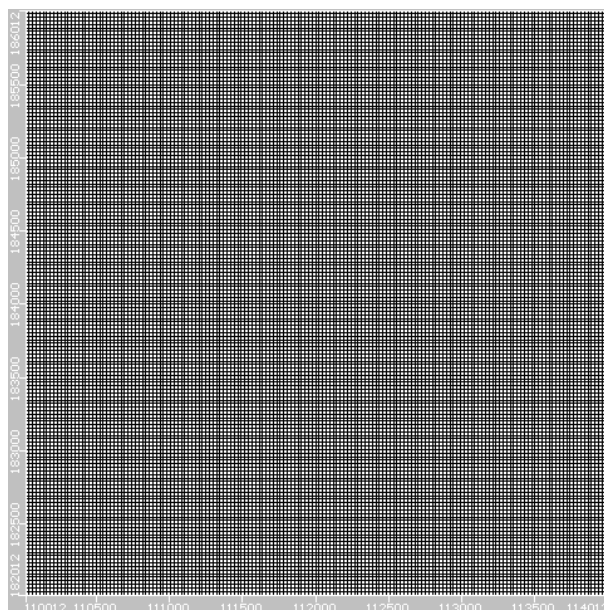
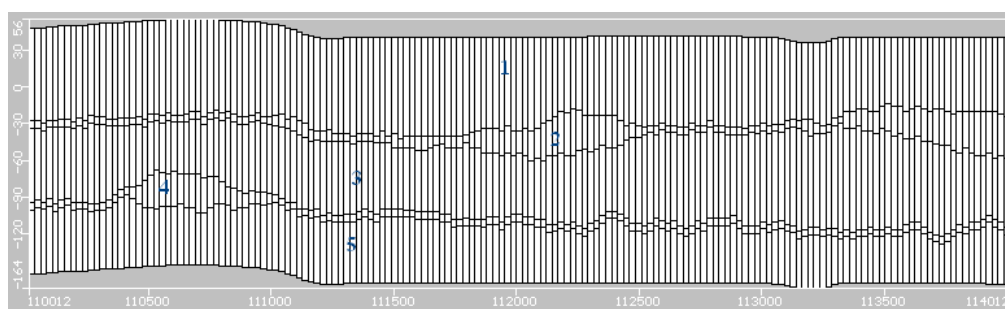
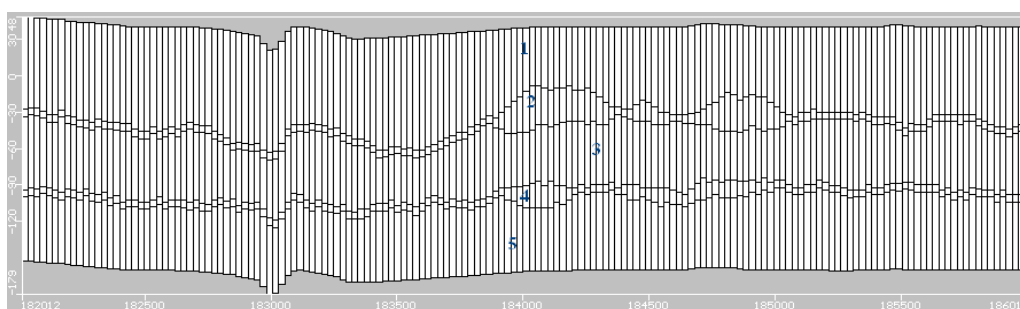


Figura 5.28 - Malha do modelo vista em planta.



5.29 - Perfil da grelha e unidades hidrogeológicas, perfil sobreelevado 5x (y=182012.5)



5.30 - Perfil da grelha e unidades hidrogeológicas, perfil sobreelevado 5x (x=110012.4)

5.2.2.1 CONDIÇÕES FRONTEIRA

O objectivo principal deste trabalho é o estudo da variação comportamento do fluxo segundo as zonas de maior ou menor permeabilidade. Para tal há a necessidade de regularizar as condições fronteiras de modo a minimizar a sua influência nos resultados da simulação. Estas são:

- i) Células com potencial hidráulico inicial constante. Impôs-se que tanto as células da fronteira norte como as da fronteira sul possuiriam o mesmo valor de carga hidráulica inicial, e que este seria constante até ao fim da simulação. Este valor foi de $h=11\text{m}$ e foi obtido com recurso a SNIRH, (2011).

- ii) A segunda condição de fronteira a ser definida foi a recarga. Pela influência que este parâmetro produz na simulação, foi decidido que não existiria recarga.

5.2.2.2 PARÂMETROS DO MODELO

Os parâmetros hidrogeológicos utilizados para o preenchimento da malha de blocos foram os seguintes:

Tabela 5.11 - Parâmetros hidrogeológicos de cada litogrupo

| Litogrupo | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|-------------------------|-------|----------|---------|--------|-------|
| Litologia | Areia | Calcário | Arenito | Argila | Marga |
| Porosidade Efectiva (%) | 25 | 5 | 20 | 45 | 5 |
| Porosidade Total (%) | 40 | 7 | 35 | 50 | 10 |
| Kx (m/dia) | 10 | 5 | 0,5 | 0,001 | 0,01 |
| Ky (m/dia) | 10 | 5 | 0,5 | 0,001 | 0,01 |
| Kz (m/dia) | 10 | 5 | 0,5 | 0,001 | 0,01 |
| Ss | 1E-6 | 1E-6 | 1E-6 | 1E-6 | 1E-6 |
| Sy | 0,24 | 0,04 | 0,19 | 0,06 | 0,01 |

Estes parâmetros foram estabelecidos com base na bibliografia FREEZE & CHERRY (1979), FETTER, (1980) e WHEIGHT, W, (2008). Apesar de haver consciência de existir, para cada litogrupo, um intervalo de valores de permeabilidade e não um único valor, como foi atribuído, o objectivo deste trabalho assim determinou que fosse apenas utilizado um valor médio. Como é sabido as areias que se encontram à superfície encontrar-se-ão soltas, ao invés das areias que se encontram sobre o efeito de cargas litoestáticas; do mesmo modo existirão diferentes valores de permeabilidade para as margas e para os calcários, dependentes do grau de fracturação. São inúmeros os factores que influenciam este parâmetro e que devem ser tidos em conta. A atribuição dos parâmetros foi realizada para cada um dos litogrupos e esta foi a primeira etapa na fase de determinação dos valores a serem importados para a grelha do *Visual MODFLOW*. Este processo admitiu os passos seguintes:

- 1) Determinação das características hidrogeológicas para cada um dos litogrupos, utilizando o MG3D;
- 2) Calculo das propriedades médias de cada célula, após processamento do MG3D por SA;
- 3) Obtenção de uma matriz de parâmetros hidrogeológicos e posterior importação para o *Visual MODFLOW*.

O resultado final foi uma matriz de parâmetros hidráulicos que posteriormente foi importada para o *Visual MODFLOW*. Analisando as imagens é possível verificar a variação da permeabilidade por zonas. Este facto relaciona-se com 2 situações: i) a camada corresponde a uma unidade de baixa permeabilidade; como são os casos dos níveis argilosos e da unidade das margas; ii) correspondendo a uma unidade de elevada condutividade hidráulica, como é o caso das areias, existem zonas onde a permeabilidade é baixa, devido à elevada presença de argilas. É possível concluir que se verifica uma boa reprodução dos parâmetros hidráulicos.

Analisando a Figura 5.31 é possível verificar também que o segundo nível (1º nível argiloso) apresenta zonas de elevada permeabilidade, cerca de $K_x = 10 \text{ m/d}$. Estas devem-se ao facto de as células do MG3D, que naquelas zonas se encontravam, apresentarem unicamente informação do litogrupo areia. É

também possível verificar a grande influência que a presença de argilas tem na unidade 1. Na parte superior esquerda da figura é possível observar uma zona de baixas permeabilidades. Este facto deve-se a uma existência de um aglomerado de argilas, que atravessa a unidade quase na totalidade, sendo que a restante secção encontra-se preenchida por arenito, de permeabilidade inferior às areias (Figura 5.32).

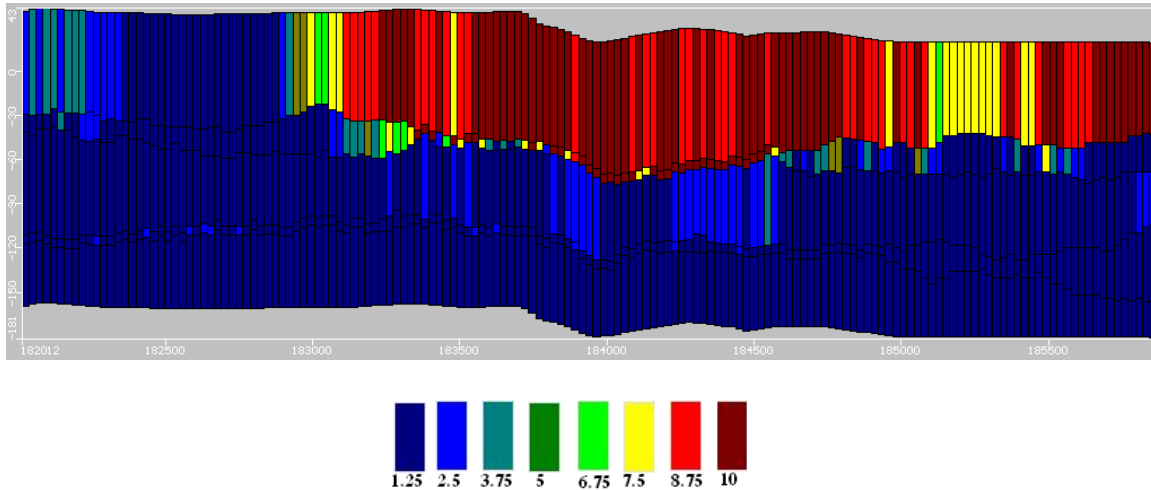


Figura 5.31 - Exemplo de permeabilidade horizontal (m/d), x=112475 (perfil sobre-elevado 5 vezes)

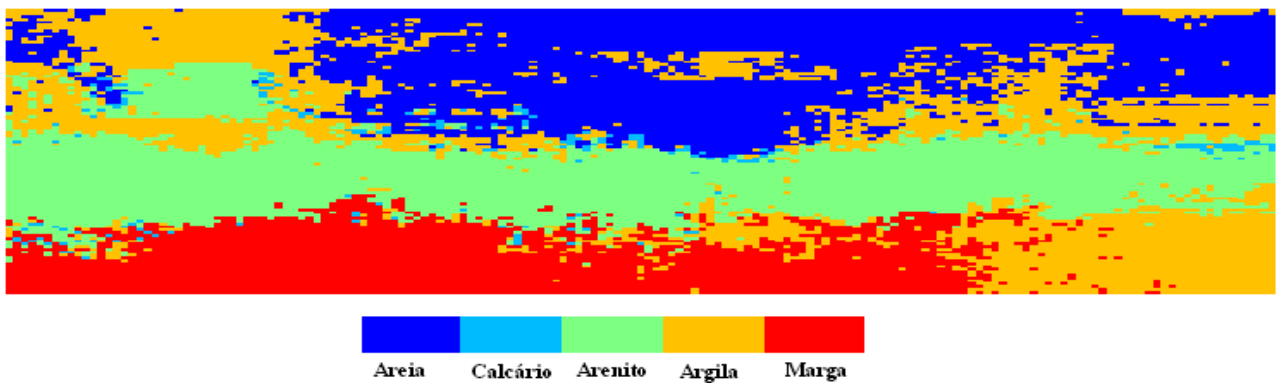


Figura 5.32 – Perfil do modelo geológico (x=112462.5)

5.2.3 TESTES SINTÉTICOS DE EXTRACÇÃO

Nesta etapa realizam-se testes sintéticos de extracção de forma a aferir o comportamento da circulação da água lateralmente e em profundidade no modelo hidrogeológico criado. Para tal foram adicionados ao modelo 4 poços de extracção (Figura 5.33), colocados em zonas estratégicas onde se pode averiguar o contraste entre as zonas de diferentes permeabilidades.



Figura 5.33 - Localização dos poços de extracção

Na Tabela 5.12 apresentam-se as propriedades dos poços de extracção. O caudal de extracção e o tempo de funcionamento (3650 dias) são comuns a todos.

Tabela 5.12 - Propriedades dos poços de extracção

| Poço | Coordenadas | Caudal de extracção (m3/dia) | Unidade intersectada |
|------|-------------------|------------------------------|----------------------|
| D1 | 111265.6/182327.9 | 250 | 3 |
| D2 | 112010/184096 | 250 | 3 |
| D3 | 112511.9/182676.8 | 250 | 3 |
| D4 | 111924.1/184765.2 | 250 | 1 |

Para esta análise foram investigados os vectores velocidade em detrimento do rastreamento de partículas. Esta opção deveu-se ao facto de que para sistemas complexos e heterogéneos, como é o caso, o rastreamento de partículas pode apresentar resultados irregulares, cuja apreciação se pode tornar difícil (FRIND, E.O., 2002).

Para a realização desta análise deve-se ter atenção tanto à permeabilidade vertical como à horizontal. Apresentam-se as imagens dos testes realizados para o poço D2 e D3. Os restantes encontram-se no Anexo H.

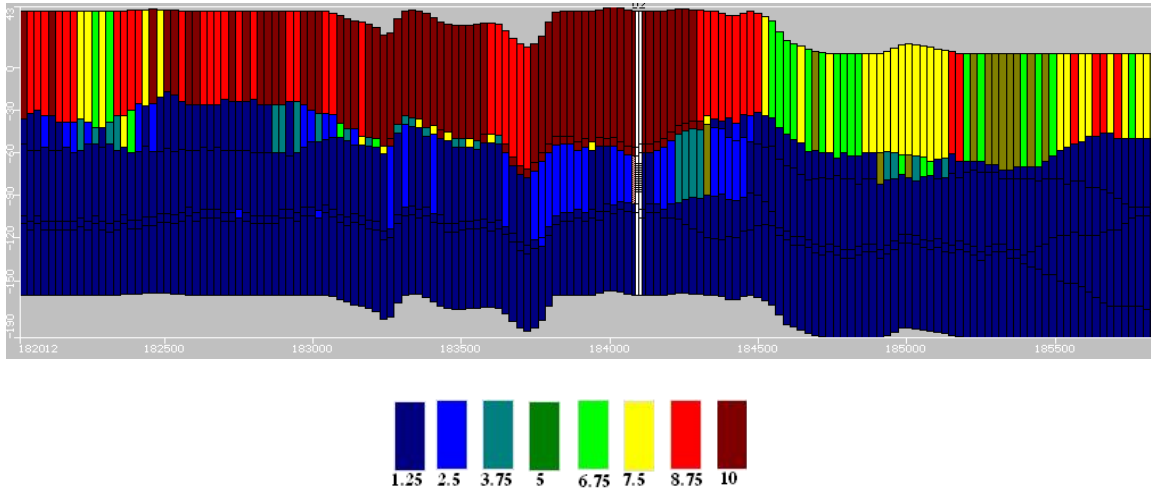


Figura 5.34 - Exemplo de permeabilidade horizontal (m/d), $x=112012.5$ (perfil sobreelevado 5 vezes), Poço D2

A escolha da localização do poço D2 para a realização dos testes de extração prendeu-se com a existência de altos valores de permeabilidade horizontal (Figura 5.34) e de permeabilidade vertical (Figura 5.35). As células onde existe maior permeabilidade vertical encontram-se rodeadas de células de permeabilidade inferior, sendo que existirá um contraste maior entre os vectores velocidade de fluxo nestas zonas. É possível verificar este facto na Figura 5.36, em que existe uma tendência do fluxo de seguir por zonas onde a permeabilidade é maior, verificando-se que os vectores de velocidade se encontram dispostos com uma tendência vertical.

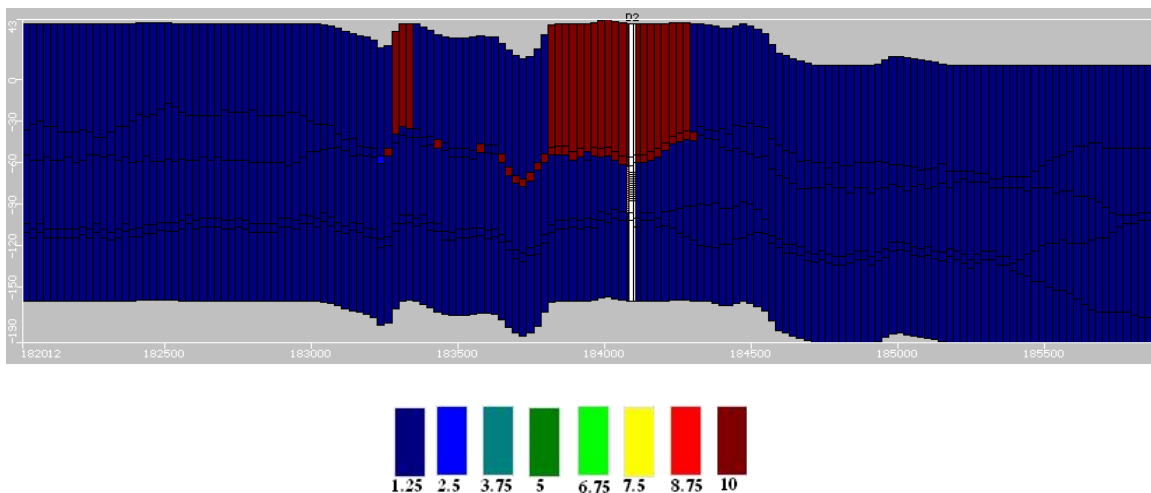


Figura 5.35 - Exemplo de permeabilidade vertical (m/d), $x=112012.5$ (perfil sobreelevado 5 vezes), Poço D2

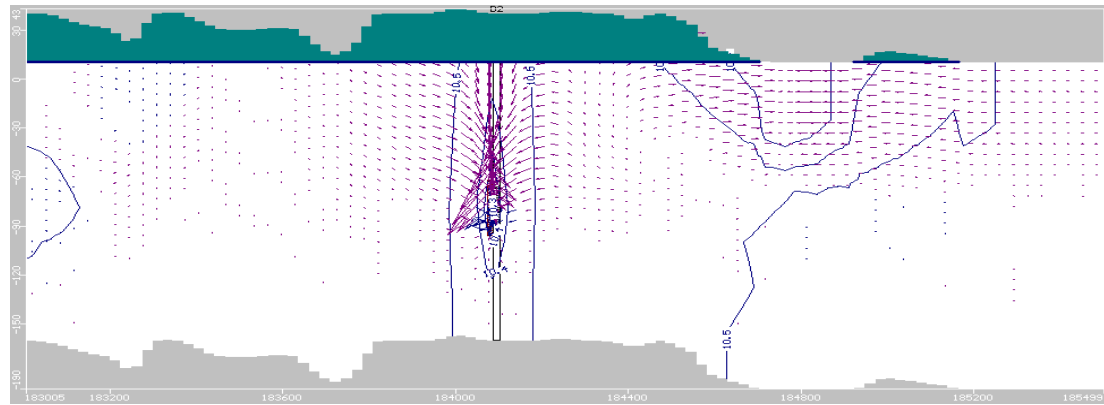


Figura 5.36 – Comportamento dos vectores velocidade de fluxo, $x=112012.5$ (perfil sobreelevado 5x), Poço D2

Outro teste foi realizado ao poço D3. A escolha deste local para a realização do teste de extracção encontra-se relacionada com presença de zonas de fraca permeabilidade, tanto horizontal como vertical (Figura 5.37 e Figura 5.38).

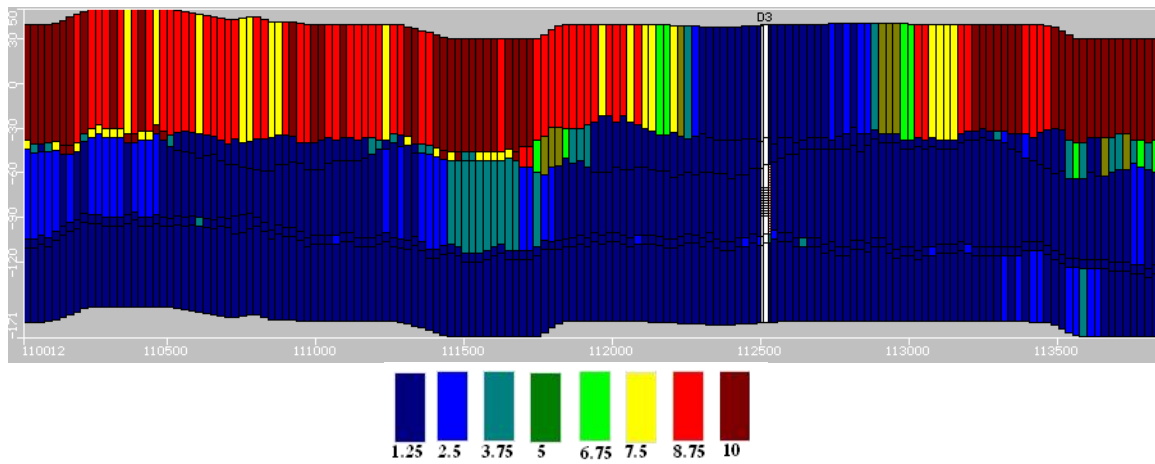


Figura 5.37 - Exemplo de permeabilidade horizontal (m/d), $y=182679$ (perfil sobreelevado 5x), Poço D3

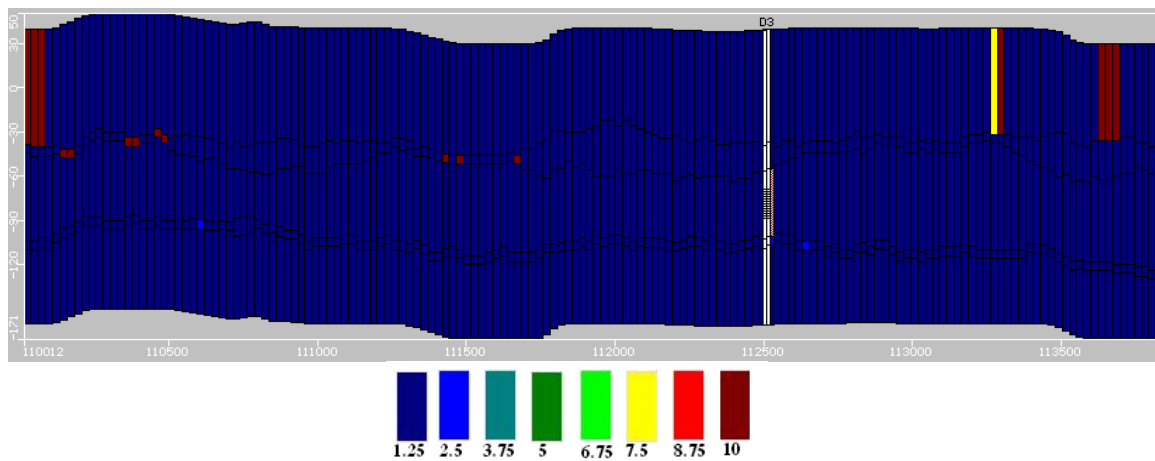


Figura 5.38 - Exemplo de permeabilidade vertical (m/d), $y=184230$ (perfil sobreelevado 5x), Poço D3

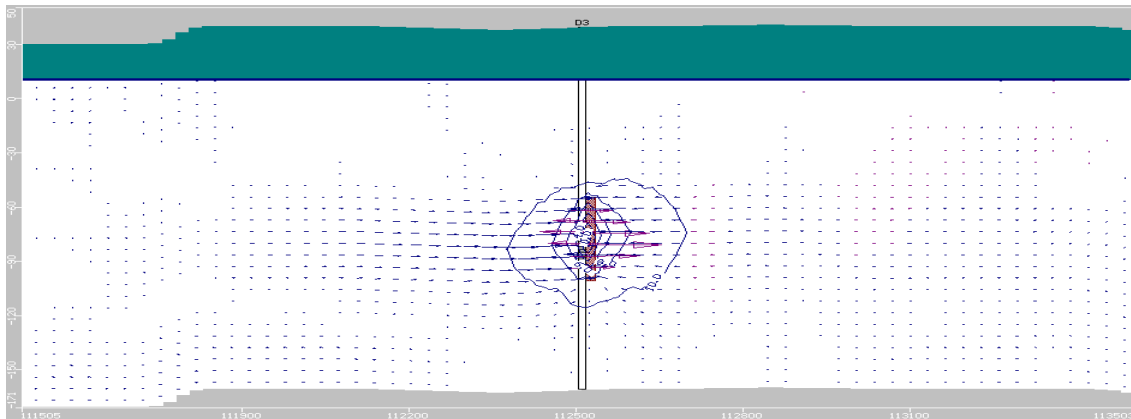


Figura 5.39 - Comportamento dos vectores velocidade de fluxo, $y=184230$ (perfil sobreelevado 5x), Poço D3

É possível verificar que os vectores velocidade se encontram dispostos de um modo sub-horizontal. Este facto encontra-se relacionado com a presença de maior permeabilidade horizontal nesta zona, apesar de baixa comparada com outras. Neste caso a permeabilidade vertical varia entre os 0.25 m/d e os 6 m/d, enquanto a permeabilidade horizontal encontra-se na casa dos 0.001 m/d.

6 DISCUSSÃO E CONSIDERAÇÕES FINAIS

O principal objectivo deste trabalho foi a construção de uma metodologia que faça a integração otimizada entre os modelos estocásticos geológicos de alta resolução e os modelos de simulação de fluxo, através da aplicação de métodos geostatísticos. Foi desenvolvida em várias fases, sendo possível retirar várias conclusões sobre os métodos e os resultados obtidos num caso de estudo com dados reais.

Relativamente à área piloto onde foi testada a metodologia, sintetizam-se as seguintes evidências com importantes repercussões nas restantes etapas do estudo:

- A área fez parte do antigo complexo da SPEL e revela contaminação por componentes orgânicos;
- Pertence à Bacia do Baixo Tejo e é composta essencialmente por terrenos Cenozóicos, sendo que a sua estruturação é sempre sub-horizontal, composta por séries detríticas continentais, de idade paleogénica e neogénica, com intercalações de formações marinhas e salobras. Na base encontram-se formações margosas espessas.
- Observa-se a existência de um aquífero superior, instalado nas camadas arenosas do topo do pliocénico, sobrejacente a um aquífero confinado multicamada composto por camadas areníticas;
- O Sistema aquífero é particularmente complexo, tendo sido identificadas lenticulas sob a forma de camadas de argila que, por vezes, ultrapassam a dezena de metros.

A primeira fase do presente trabalho consistiu na organização e tratamento da informação de partida. Esta fase é sempre importante e morosa, mas o resultado é uma base de dados com toda a informação relevante para o estudo, nomeadamente, sondagens e geologia / litologias e respectiva análise estatística. Refira-se que esta fase foi muito condicionada pela nomenclatura utilizada pelas diferentes empresas de sondagens intervenientes na colecção de dados, como por exemplo a descrição das litologias, pelo que houve necessidade de harmonizar descrições. As ferramentas geostatísticas, em conjunto com a correcta interpretação geológica e classificação dos dados de partida, permitiram criar bases sólidas para o restante processo de modelação estocástica.

Através da interpretação dos dados das sondagens, e com base na bibliografia consultada, foi possível avançar com as litologias predominantes nesta área: i) areia, ii) calcário, iii) arenito, iv) argila, v) marga. A classificação das descrições dos logs de sondagens foi realizada com base nestes 5 litogrupos predominantes.

A análise estatística permitiu apoiar a escolha da dimensão do suporte que se optou por 2 metros e, posteriormente, analisar o comportamento dos litogrupos em profundidade. Esta análise mostrou claramente o zonamento vertical dos litogrupos, que necessita de se ter em conta na modelação geológica. Para este efeito, o volume de estudo foi subdividido na vertical em 4 regiões de 50 metros cada, e onde se comprovou que as proporções dos litogrupos se apresentam distintas. Estes estatísticos serviram para o condicionamento às médias locais, imposto no algoritmo SSI. Outra vantagem da realização desta análise está relacionada com o desagrupamento (*declustering*) das amostras, porque a

densidade de amostras não é constante em profundidade. É assim possível obter uma estimativa desagrupada da proporção de cada litogrupo na área em estudo (estimativa mais real).

Outra análise estatística que se revelou muito importante na modelação geológica, e que constituiu uma das inovações do presente trabalho, foi a análise às transições entre os suportes dos dados experimentais. Foram construídas tabelas com as estatísticas de transição dos litogrupos em troços consecutivos por região.

A modelação iniciou-se com o cálculo dos variogramas experimentais multifásicos dos litogrupos e ajuste de um modelo teórico. Os litogrupos areia, arenito e marga apresentam grande continuidade na área em estudo, com amplitudes superiores a 4 km. O litogrupo argila apresenta uma amplitude menor, de cerca de 800 enquanto o litogrupo calcário apresenta comportamento errático. Este facto apresenta-se concordante com a disposição sub-horizontal e de grande continuidade dos 3 litogrupos principais, sendo que o litogrupo argila apresenta uma disposição irregular, em forma de lenticulas. Deste modo procedeu-se ao cálculo do variograma multifásico (soma dos variogramas individuais), e consequente ajuste a um modelo teórico. Foram calculados 2 variogramas: i) horizontal com duas estruturas ($Exp_1(C = 0.456; a = 375m) + Exp_2(C = 0.208; a = 25000m)$) e um vertical ($Exp_1(C = 0.456; a = 70m) + Exp_2(C = 0.208; a = 70m)$). A adopção deste tipo de variogramas tem repercussões nos litogrupos com menor representatividade, como é o caso dos calcários. No entanto, dado a sua fraca proporção nos dados estudados, achou-se desnecessário a criação de uma outra população multifásica contemplando os litogrupos com menor continuidade.

O processo de simulação estocástica foi levado a cabo através do algoritmo SSI e foi calculada a respectiva imagem média. O *software* foi desenvolvido para este caso de estudo a partir da versão paralelizada SSINDIC do *software* geoMS, com as necessárias adaptações para ter em conta o condicionamento às transições.

As imagens simuladas, do ponto de vista geoestatístico, apresentam-se correctas cumprindo todos os critérios de qualidade, baseados nos pressupostos teóricos da simulação e na coerência entre as imagens simuladas e o modelo conceptual da realidade. Estas imagens individualizam 3 camadas com comportamento contínuo: i) areia, ii) arenito e iii) marga. A maior aleatoriedade do litogrupo argila é concordante com a disposição lenticular desta litologia no cenário real.

Após o cálculo de 30 imagens simuladas realizou-se um estudo de modo a quantificar a melhoria dos condicionantes inseridos no algoritmo de simulação. É possível retirar duas conclusões principais:

- A imposição das estatísticas de transição dos litogrupos, por região, no algoritmo SSI mostra melhorias nos resultados na casa dos 10%, quando comparado com a mesma versão do programa sem imposição estas estatísticas de transição;
- No que diz respeito às proporções de cada litogrupo, nas regiões definidas, verifica-se uma melhoria muito significativa quando se introduz a correcção das médias locais ao algoritmo da SSI e um muito ligeiro afastamento dos mesmos quando se faz a introdução da condicionante das transições.

A utilização de uma imagem média das 30 simulações, equivalente a um mapa estimado, deve-se principalmente ao facto de esta se apresentar como uma boa imagem representativa da geologia. No entanto, deve-se referir que caso se procedesse a uma simulação dinâmica com exploração de cenários

extremos ou com qualquer tipo de calibração, a imagem média seria muito limitada para caracterizar o comportamento espacial extremo e não mostraria a incerteza do conhecimento geológico. Neste caso, apresentar-se-ia muito mais proveitoso a utilização das imagens simuladas. Outro facto que deve ser referido que a estimação directa por krigagem de uma imagem média seria sempre problemática, com geração de artefactos muito difíceis de atenuar, dada a distribuição de dados em linhas de amostragem, o que se chama na gíria geoestatística de “strings of data”, incidindo neste facto a escolha do calculo da média das simulações.

Para o desenvolvimento do modelo hidrogeológico foram definidas unidades hidrogeológicas e respectivas profundidades médias com base na bibliografia da região. Para a determinação optimal destes limites na área em estudo, a partir do modelo geológico 3D, foi utilizado o método de optimização *Simulated Annealing* (SA), numa versão programada e testada no presente caso de estudo, assumindo-se assim como uma segunda inovação deste trabalho. Os resultados obtidos após a execução do SA mostraram-se bastante satisfatórios e realistas e que no caso das argilas não têm continuidade lateral. Este facto é incompatível com os simuladores de fluidos de diferenças finitas como é o caso do MODFLOW. Assim existiu a necessidade de realizar um pós processamento aos resultados, impondo a continuidade lateral de todas as camadas. Dado que as propriedades (permeabilidade e porosidade) são calculadas com base no mapa médio de litogrupos, o prolongamento artificial das camadas não apresenta consequências nos resultados da simulação. Foi obtida também uma matriz de parâmetros hidrogeológicos que posteriormente foi importada para o *Visual MODFLOW*.

A última fase deste estudo centrou-se na realização de testes sintéticos de extracção de água no modelo hidrogeológico gerado, apenas com o objectivo de analisar o reflexo da metodologia empregue, avaliação do comportamento dinâmico em profundidade do sistema de camadas e lenticulas de argila. Como foi possível verificar estes resultados são muito promissores.

Para trabalhos futuros referem-se alguns pontos que de algum modo podem promover melhorias nos resultados obtidos:

- A realização de um estudo mais pormenorizado aos dados geológicos, tentando encontrar um lugar comum para cada uma das descrições geológicas proferidas nos logs de sondagens das diferentes empresas que as realizaram.
- Realização de um estudo de forma a encontrar histogramas dos parâmetros hidráulicos que se enquadrem nas diversas zonas da área em estudo;
- Realização de um estudo hidrogeológico de pormenor, obtendo assim um fiáveis parâmetros para o modelo, sendo possível realizar testes de calibração. Neste caso é plausível a utilização e combinação das imagens simuladas 3D;
- Utilizar um simulador de fluxo de elementos finitos, de forma a poder empregar formas geológicas mais complexas e sem a forma de camada.

Este estudo apresenta assim uma metodologia válida para a realização da interface entre os modelos geológicos estocásticos de alta resolução e os modelos de simulação de fluxo, ultrapassando com sucesso os problemas com que este processo se depara.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Almeida, C., Mendonça, J. J. L., Jesus, M. R., & Gomes, A. J., 2000. - *Sistemas Aquíferos de Portugal Continental - Sistema aquífero: Bacia do Tejo-Sado/Margem Esquerda (T3)*. Instituto da Água, Lisboa.
- Almeida, C., Costa, M.C., Dill, A.C., Fernandes, J., Francés, A., Midões, C., Müller, I., Nunes, F., Nuzzo, M., & Reis, M., 2002. - *Reabilitação de aquíferos contaminados pela indústria: resultados preliminares no caso de estudo do Seixal*. In: 6º Congresso da Água, Porto, APRH.
- Almeida, J., Soares, A. and Reynaud, R., 1993. *Modelling the Shape of Several Marble Types in a Quarry*, Proceedings of the XXIV International Symposium, APCOM, Montreal, vol. 3: 452-459.
- Almeida, J., 1999 - *Use of geostatistical models to improve reservoir description and flow simulation in heterogeneous oil fields*, Tese de Doutoramento, IST-UTL, 163p.
- Almeida, J.A., 2010. - *Stochastic simulation methods for characterization of lithoclasses in carbonate reservoirs*. *Earth–Science Reviews* 101, 250-270.
- Amaral, H., Fernandes, J., Berg, M., Schwarzenbach, R. P., & Kipfer, R., 2009. - *Assessing TNT and DNT groundwater contamination by compound-specific isotope analysis and 3H-3H groundwater dating: A case study in Portugal*. *Chemosphere* 77, 805-812.
- Cunha, P. P., Pais, J., & Legoinha, P., 2009. - *Evolução geológica de Portugal Continental durante o Cenozoico - sedimentação aluvial e marinha numa margem continental passiva (Ibéria ocidental)* 6º Simposio sobre el Margen Ibérico Atlántico MIA09, Oviedo, 1-5.
- Curtis, M.L., 1999 - *Structural and kinematic evolution of a Miocene to Recent sinistral restraining bend: the Montejuento massif, Portugal*. *Journal of Structural Geology*, 21, 39-54.
- Deutsch, C.V., Cockerham, P.W., 1994 - *Practical considerations in the application of simulated annealing to stochastic simulation*, *Mathematical Geology*, 26(1), 67-82.
- Fetter, C.W., 1980 - *Applied hydrogeology*. Book News, Inc., Portland, 691 p.
- Freeze, R.A., & Cherry, J.A. 1979 - *Groundwater*. Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, NJ. 604 p.
- Goovaerts, P., 1996 - *Stochastic simulation of categorical variables using a classification algorithm and simulated annealing*, *Mathematical Geology*, 28(7), 909-921.
- Goovaerts, P., 1997 - *Geostatistics for Natural Resources Evaluation*, Oxford University Press, 483 p.
- Isaaks, E. H. & Srivastava, R. M., 1989 - *An Introduction to Applied Geostatistics*. Oxford University Press, New York, 592 p.

- Journel, A.G., Isaaks, E.H., 1984 - *Conditional indicator simulation: application to a Saskatchewan uranium deposit*, *Mathematical Geology*, 16(7): 685-718.
- Journel, A.G. & Alabert, F.G., 1989. – *Non Gaussian data expansion in the earth sciences*. *Terra Nova* 1, 123-134.
- Kullberg, M.C., Kullberg, J.C. & Terrinha, P., 2000 – *Tectónica da Cadeia da Arrábida*. In: *Tectónica das regiões de Sintra e Arrábida*. Mem. Geociência, Museu do Nac. Hist. Nat., Univ. Lisboa, 2, pp.35-84
- Le Loc'h, G., Beucher, H., Galli, A., Doligez, B., Heresim Group, 1994. – *Improvement in the truncated Gaussian method: combining several Gaussian functions*. European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, vol. 4, pp. 1-13. Roros-Norway, 1994.
- Le Loc'h G. & Galli A.. 1997 - *Truncated plurigaussian method: theoretical and practical points of view*. In: *E.Y. Baafi & N.A. Schofield (eds), Geostatistics Wollongong '96*, Dordrecht, Kluwer Academic Press, 1:211-222.
- Matias, F., 2010 – *Modelação 3D de um Subsector das Mineralizações Auríferas de Casas Novas, Montemor-o-Novo*, Tese de mestrado, FCT-UNL, 121pp
- Nunes, R., 2008. *Paralelização dos Algoritmos de Simulação Sequencial Gaussiana, Indicatriz e Directa*. Tese de Mestrado. Universidade Nova de Lisboa, Faculdade de Ciências e Tecnologia. 79 p.
- Pais, J., Lopes, C. S., Legoinha, P., Ramalho, E., Ferreira, J., Ribeiro, I., Amado, A. R., Sousa, L., Torres, L., Baptista, R., & Pena dos Reis, R., 2003 - *Sondagem de Belverde (Bacia do Baixo Tejo, Península de Setúbal, Portugal)*, Ciências da Terra (UNL), Lisboa.
- Pais, J., 2004 – *The Neogene of the Lower Tagus Basin (Portugal)*. *Revista Espanhola de Paleontologia*, 19 (2): 229-243.
- Pais, J., Moniz, C., Cabral, J., Cardoso, J., Legoinha, P., & Machado, S., 2006. - *Notícia Explicativa da Folha 34-D Lisboa da Carta Geológica de Portugal, na escala 1/50 000*. Departamento de Geologia, INETI - Instituto Nacional de Engenharia, Tecnologia e Inovação., Lisboa.
- Pais, J. & Dias, R., 2009 – *Homogeneização da Cartografia Geológica do Cenozóico da Área Metropolitana de Lisboa (AML)*. *Comunicações Geológicas*, 2009, t. 96, pp. 39-50.
- Pais, J., Cunha, P.P. & Legoinha, P., 2010 – *Litostratigrafia do Cenozóico de Portugal*. In *Neiva, J.M.C., Ribeiro, A., Victor, L. M., Noronha, F. & Ramalho, M. (edit.) – Ciências Geológicas: Ensino e Investigação*. Vol. I: 365-37.
- Pereira, M. J., Almeida, J., Costa, C. e A. Soares, 2001 - *Accounting for soft information in mapping soil contamination with TPH at an oil storage site*, *geoENV III, Geostatistics for Environmental Applications*, P. Monastiez, D. Allard, and R. Froidevaux (eds.), Kluwer Academic Publishers: 475-486, ISBN: 0-7923-7107-0 (PB).

- Ribeiro, A., Antunes, M. T., Ferreira, M. P., Rocha, R. B., Soares, A. F., Zbyszewsky, G., Moitinho de Almeida, F., Carvalho, D., & Monteiro, J. H., 1979 - *Introduction à la Géologie Générale du Portugal*. Serviços Geológicos de Portugal, Lisboa.
- Ribeiro, A., Kullberg, M.C., Kullberg, J.C., Manuppella, G. & Phipps, S., 1990 – *A review of Alpine tectonics in Portugal: Foreland detachment in basement and cover rocks*. Tectonophysics, 184, pp - 357-366.
- Ribeiro, M.M.M.S, 2009 - *The cenozoic aquifer system of the Lower Tagus Basin: a description of the hydrogeological situation in the Almada region (Portugal)*. Hydrogeology Journal, 17(4), 999-1009.
- Rodrigues, A., Almeida, J., Soares, A., 1998 - *geoMS - Geostatistical Modelling Software*. Centro de Modelização de Reservatórios Petrolíferos, Instituto Superior Técnico, Lisboa. CDRom.
- Ross, M., Parent, M., Lefebvre, R., 2004 – *3D geological framework models for regional hydrogeology and land-use management: a case study from a Quaternary basin of southwestern Quebec, Canada*. Hydrogeology Journal, 13, 690-707.
- SNIRH, 2010 - *Serviço Nacional de Informação de Recursos Hídricos - Informação de Águas Subterrâneas*.
- SNIRH, 2011 - *Serviço Nacional de Informação de Recursos Hídricos - Informação de Águas Subterrâneas*.
- Soares, A., 1992. - *Geoestatistical Estimation of Multi-Phase Structures*. Mathematical Geology, 24 (2), 149-160.
- Soares, A., 1998. – *Sequential Indicator simulation with correction for local probabilities*. Mathematical Geology 30 (6), 761-765.
- Soares, A., 2000 – *Geoestatística para as ciências da terra e do ambiente*, IST press, 206 p.
- Sobreira, F. G., 1995 - *Estudo geoambiental do Concelho de Sesimbra*. Universidade de Lisboa, Lisboa.
- Strebelle, S., 2002. - *Conditional simulation of complex geological structures using multi-point statistics*. Mathematical Geology 34, 1–22.
- Weigh, W., 2008 – *Hydrogeology Field Manual*. McGraw-Hill Professional, 751 p.