

Modelo de interpolação de valores de contaminantes em águas subterrâneas

D. Lopes ^(a), A. Perdigão ^(b), J. Rocha ^(c)

^(a) IGOT/Universidade de Lisboa, dianalopes@campus.ul.pt

^(b) Direção Geral da Agricultura e Desenvolvimento Rural, perdigao@dgadr.pt

^(c) IGOT/Universidade de Lisboa, Jorge.rocha@campus.ul.pt

RESUMO

A água subterrânea é um dos recursos naturais com maior importância estratégica devido à sua utilização no abastecimento das populações, nas atividades agrícolas e na indústria. A acumulação de contaminantes nestas águas ocorre devido a processos naturais, mas sobretudo devido a ações antrópicas como a agricultura. Esta situação promove, entre outros, a eutrofização das águas sendo bastante prejudicial para a saúde humana. A estimativa da concentração destes poluentes em águas subterrâneas, feita através de um conjunto de pontos amostrais, não pode ser realizada com recurso aos interpoladores tradicionais. Assim, desenvolveu-se um modelo assente num algoritmo geoestatístico denominado interpolador de difusão com barreiras com o intuito de estimar de forma mais exata os valores de contaminantes presentes em águas subterrâneas. Este método é especialmente adaptado a situações em que a estimativa tem apenas um pequeno enviesamento (bias) e é muito mais precisa do que um estimador imparcial.

Palavras chave: Interpolador, Leis de Fick, Poluentes, Geoestatística, Águas subterrâneas

1. INTRODUÇÃO

Na atualidade assiste-se a uma crise relativa à quantidade e qualidade da água. Os principais problemas de qualidade da água estão relacionados com as substâncias de origem microbiológica e de contaminação orgânica provenientes das atividades humanas e depositadas no meio ambiente que comprometem os recursos hídricos superficiais e subterrâneos.

Em situações em que existem gradientes de concentração de uma substância, ocorre um fluxo de partículas que tende a homogeneizar a dissolução e uniformizar a concentração. Face ao exposto, torna-se óbvio que a estimativa de concentração de um determinado contaminante, feita através de um conjunto de pontos amostrais, não pode ser realizada com recurso aos interpoladores tradicionais, e.g. *Spline* ou *Inverse Distance Weight* (IDW). Assim, optou-se por recorrer ao algoritmo de interpolação da difusão com barreiras (*Difusion Interpolation With Barriers*) que se baseia na solução fundamental da equação de Fick.

Os valores estimados (interpolados) através deste método fluem de forma suave em torno de barreiras. Na ausência de barreiras, os dados fornecidos pela interpolação de difusão são aproximadamente os mesmos da interpolação Gaussiana de Kernel. Este algoritmo é uma variante do polinómio de interpolação de primeira ordem em que a instabilidade nos cálculos é impedida usando um método similar àquele usado na regressão de limiar (*ridge regression*) para estimar os coeficientes de regressão.

2. ÁREA DE ESTUDO E DADOS

A região escolhida para o estudo corresponde à

zona vulnerável a nitratos do Tejo, umas das nove zonas vulneráveis a nitratos de Portugal continental inserida numa área com cerca de 240.000 hectares, integrada na unidade hidrogeológica da bacia do Tejo-Sado (Figura 1). A área em estudo ocupa parcialmente 20 municípios dos distritos de Lisboa, Santarém e Setúbal.

Para a escolha dos locais a aplicar o modelo, de modo a obter resultados distintos foi tido em consideração a textura do solo e o uso do solo em conjunto com a direção de fluxo superficial e o valor de nitrato (mg/L) no poço escolhido (Figura 2). A presença de nitratos na água subterrânea é uma das formas de contaminação mais comuns e a sua presença está ligada à agricultura intensiva e à aplicação excessiva de fertilizantes de base azotadas no solo. Estes fatores estiveram na base da sua eleição como elemento para testar o modelo.

O primeiro ponto escolhido é relativo ponto de qualidade da água 418/AG49 que se encontra num solo de textura franco-arenosa (grosseira) em que é praticado o regadio; o segundo ponto é relativo ponto de qualidade da água 377/262 que se encontra num solo de textura argilosa (fina) em que são praticadas atividades de regadio e por fim o ponto de qualidade de água 433/AG74 que se encontra num solo de textura franco-arenosa (grosseira) onde existem sistemas agroflorestais de sobreiro com pastagens.

Esta ferramenta foi aplicada para os três poços e calculada de ano a ano até ao máximo de dez anos desde que a massa de poluente é lançada no local. Para o poço 1 e 3 foram utilizados os valores dos parâmetros de transporte de nitratos para a amostra indeformada de textura grosseira e para o poço 2 foram utilizados os parâmetros para a amostra indeformada para textura fina.

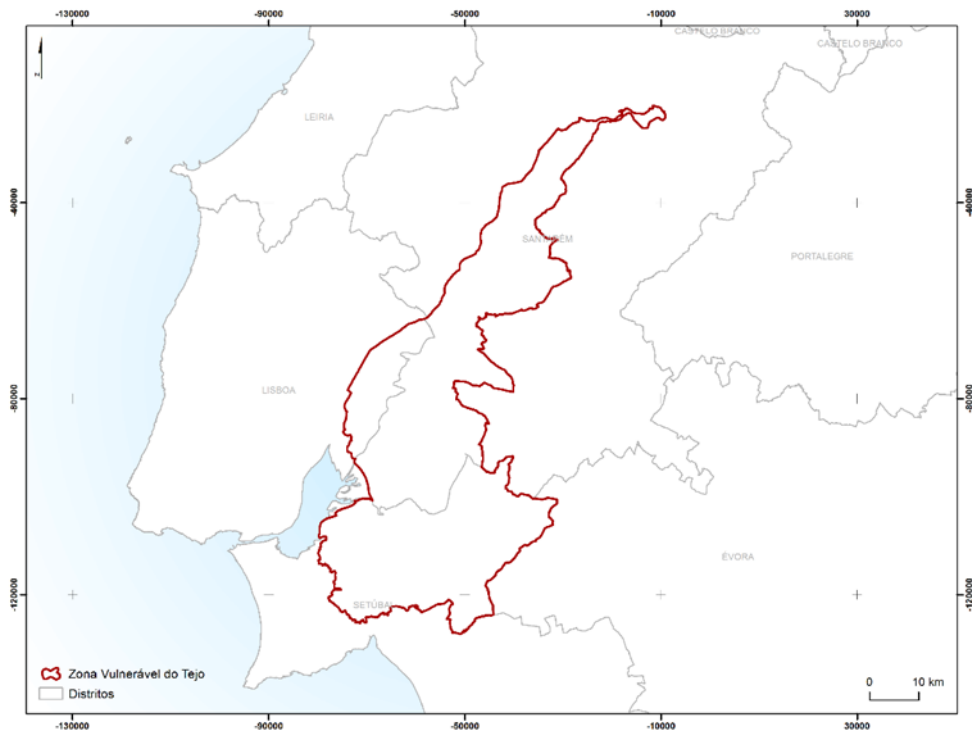


Figura 1 - Enquadramento da Zona Vulnerável do Tejo.

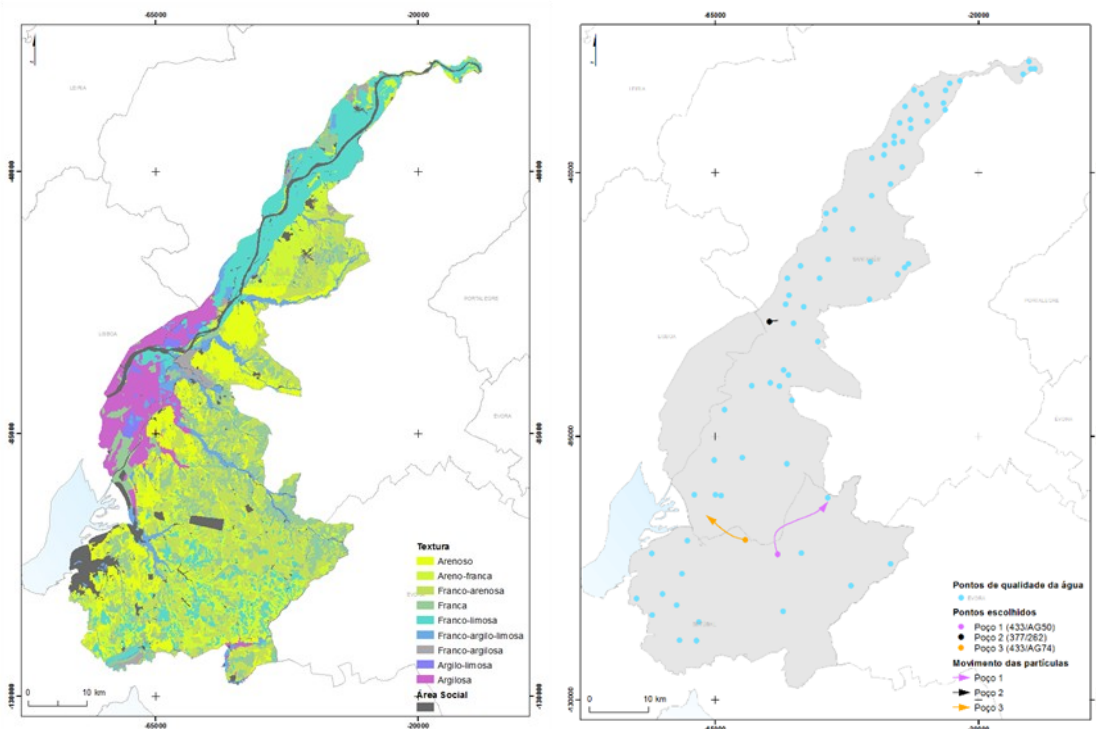


Figura 2 - Textura do solo (a) e Fluxo de Nitratos com poços seleccionados (b).

3. MODELO DINÂMICO DE DISPERSÃO E DIFUSÃO

O algoritmo de interpolação da difusão com barreiras é especialmente adaptado a situações em que a estimativa tem apenas um pequeno enviesamento (*bias*) e é muito mais precisa do que um estimador imparcial. Em Hoerl e Kennard (1970) podem ser consultados mais detalhes sobre este tipo de regressão.

Na interpolação polinomial local, o erro de pre-

visão é estimado assumindo que o modelo está correto, i.e., que o número de condições espaciais é muito pequena em todas as localizações. Esta suposição é muitas vezes violada e o número de condições espaciais destaca as áreas onde as previsões e os erros padrão de previsão são instáveis. No modelo de suavização de Kernel, o problema com grandes erros-padrão de previsão é corrigido com o parâmetro de limiar (*ridge*) através da introdução de uma pequena quantidade de enviesamento nas equações.

Dado que o parâmetro de limiar recorre a um enviesamento para estabilizar as predições, o seu valor deve ser tão pequeno quanto possível, mantendo a estabilidade do modelo. Detalhes deste processo podem ser encontrados em Gribov e Krivoruchko (2011). O interpolador de difusão com barreiras usa o seguinte kernel radial simétrico:

$$e^{-3\left(\frac{r}{h}\right)^2} \quad (1)$$

Onde r é um raio centrado no ponto s e h é a largura de banda. A interpolação de difusão pode usar uma métrica de distância complexa, definida pela superfície de custo, a qual é uma função matricial que calcula o custo de movimento de uma célula para a seguinte. Neste contexto as regras de transição são bastante simples, estando diretamente relacionadas com a facilidade, ou não, da massa de água se deslocar. Desta forma, são identificadas as direções preferenciais de deslocação no sentido vertical, designadas de fator vertical (FV), e na direção horizontal, designada de fator horizontal (FH). Neste caso, como a modelação é feita no plano horizontal, apenas é utilizado o FH, que corresponde às direções de fluxos.

O algoritmo utiliza a representação de célula como um nó. Nesta representação o centro da célula é considerado um nó e cada nó está ligado aos nós adjacentes. Deste modo, para aplicar este método são necessárias três componentes: uma superfície de custo, o fator horizontal e o vertical.

Na superfície matricial de custo é atribuído a cada célula um peso proporcional a um custo associado aos fenómenos que estão a ser modelados ao passar através de cada célula. O fator horizontal influencia o custo total de movimento numa célula, sendo responsável por qualquer atrito horizontal encontrado. Para calcular este fator é necessário um processo composto por duas etapas: (i) calcula-se primeiro o sentido horizontal; e (ii) só depois o fator horizontal.

A função utilizada no FH foi a de movimento em frente (Figura 3a). Se o HRMA for inferior a 45 graus o HF é definido como o valor associado ao fator de zero, i.e. 0,5. Quando o HRMA é igual ou superior a 45 graus e menor de 90 graus, o HF é definido como o valor lateral, o qual por definição é assumido como 1. Se o HRMA é igual ou superior a 90 graus, o HF é definido como infinito. Na prática isto significa que a massa de terreno nunca pode voltar para trás ($HRMA \geq 90 \Rightarrow FH = \infty$), e que o movimento se processa preferencialmente num ângulo de 45, visto que o custo de deslocação entre os 45 e os 90 é o dobro (de 1 para 0,5).

Na prática, o FH vai fazer com que as partículas poluentes sigam o fluxo da água subterrânea, sendo bastante penalizado qualquer desvio face a essa direção (mas não impossível) e inviabilizado qualquer deslocação em sentido oposto ao do fluxo. A conjugação destes dados com a distância euclidiana inversa - pondera pelo fator de atenuação de concentração de nitratos - aos pontos com valores de amostra de poluente fornece a superfície de custo que vai condicionar a predição dos

valores de nitratos.

Kim *et al.* (1996) e, Lee e Kim (2002) desenvolveram procedimentos para determinar o uso ideal de fertilizantes tendo em conta os parâmetros de transporte dos nitratos nas águas subterrâneas e assumiram que uma proporção fixa de fertilizantes aplicados irá sofrer lixiviação para as águas subterrâneas e que o período de tempo entre a aplicação do fertilizante e a sua entrada no aquífero é representada por um intervalo de tempo constante. Os autores consideraram que nas águas subterrâneas o fator de decadência tem uma taxa específica. Frind *et al.* (1990) consideram que o coeficiente de decadência λ está relacionado com o tempo de meia vida do nitrato $t_{1/2}$ segundo a seguinte equação.

$$\lambda = \frac{0,693}{t_{1/2}} \quad (2)$$

Os autores consideram também que o tempo de meia vida dos nitratos se encontra entre 1 ano e 2,3 anos, no entanto este intervalo de tempo não pode ser generalizado uma vez que também é dependente da tipologia do aquífero. O intervalo de tempo utilizado para calcular o tempo de decadência foi de 2,3 anos convertidos em segundos.

4. RESULTADOS

A Figura 3, representa a concentração de nitratos calculadas com base na metodologia descrita e correspondente ao Poço 1 (b), Poço 2 (c) e Poço 3(b) respetivamente. Uma vez que a concentração calculada é efetuada para áreas pequenas e tem em conta o valor de massa do poluente recolhido nos pontos de monitorização de qualidade da água e a direção do fluxo de água subterrânea os resultados obtidos têm pequenas variações entre o valor máximo e o valor mínimo.

A partir da visualização dos três mapas observa-se que as alterações na concentração do poluente, ainda que suaves estão relacionadas com a direção do fluxo de água subterrânea. Nos resultados obtidos para a concentração de nitratos na área envolvente ao Poço 1 observa-se que a concentração aumenta na direção do fluxo de água subterrânea sendo que nas áreas em que a concentração é superior a direção norte do fluxo das águas faz com que a concentração de nitratos diminua nesta direção.

Nos resultados obtidos para a área envolvente ao Poço 2 observa-se que a direção do fluxo onde a concentração de nitratos é menor é orientada em direções diferentes, no entanto o fluxo acaba por encontrar a certa altura a mesma direção mas o fluxo acaba por se dirigir em direção aos valores de maior concentração.

Para a área envolvente ao Poço 3 é onde se encontra uma maior variedade de direções nos fluxos e também onde se observa que as concentrações de nitratos vão de acordo à sua direção. A partir dos resultados obtidos observa-se a situação contrária aos dois resultados anteriores uma vez que a concentração de nitratos em vez de aumentar na direção dos fluxos diminui. A forma como a concentração de nitratos se dispersa está relacionada com as diferentes direções observadas ao longo do mapa.

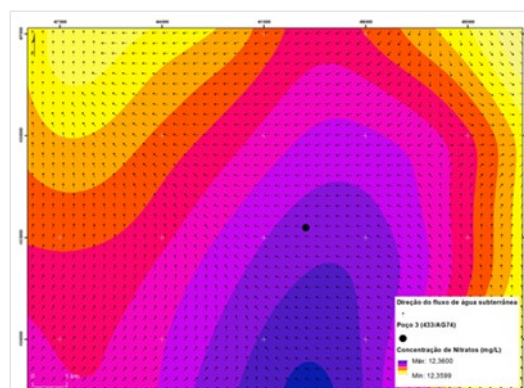
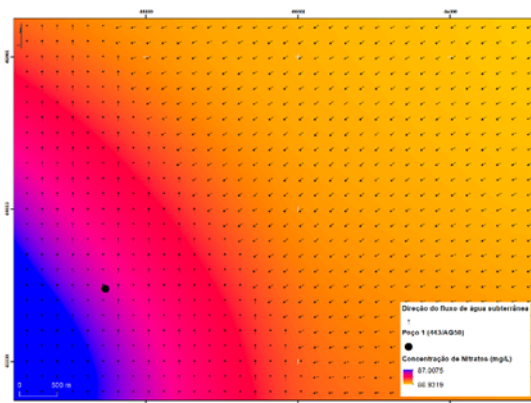
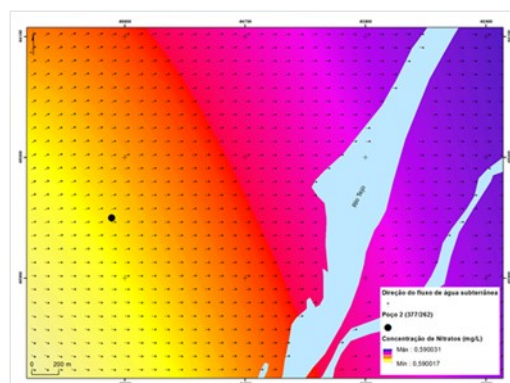
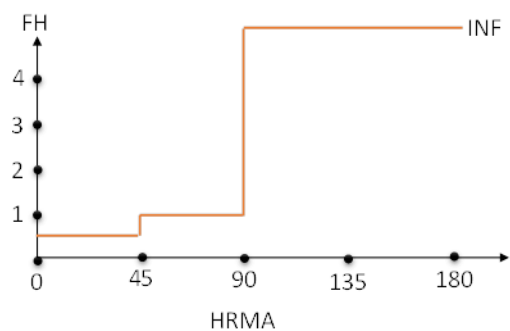


Figura 3 - Fator horizontal de movimento em frente.

5. CONCLUSÕES

Os resultados obtidos mostraram-se úteis para possíveis medidas de tratamento na sucessão de acidentes com poluentes pois a delimitação da dispersão da pluma em diferentes períodos de tempo permite prever o comportamento do poluente e a sua área de influência. No entanto há que referir que a ferramenta, embora seja útil, tem algumas limitações relativas à elipse de dispersão que assume que foi sempre a mesma massa de soluto que se moveu ao longo de todo o percurso.

6. BIBLIOGRAFIA

Frind, E., Duynisveld, W., Strelbel, O. e Boettcher, J., (1990). Modeling of multicomponent transport with microbial transformation in ground water: the Fuhrberg case. *Water Resources Research* 26 (8), 1707–1719.

Gribov, A. e Krivoruchko, K., (2011). Local polynomials for data detrending and interpolation in the presence of barriers. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment* 25, 1057-1063.

Hoerl, A.E. e Kennard, R.W., (1970). Ridge regression: biased estimation for nonorthogonal problems, *Technometrics*, 12, 55-67.

Kim, C.S., Sandretto, C., Hostetler, J., (1996). Effects of farmer response to nitrogen fertilizer management practices on ground water quality. *Water Resources Research* 32 (5), 1411–1415.

Lee, D.J. e Kim, C.S., (2002). Nonpoint source groundwater pollution and endogenous regulatory policies. *Water Resources Research* 38 (12), 1275.