

CALIBRAÇÃO DA CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA HORIZONTAL UTILIZANDO O MÉTODO ITERATIVO DO GRADIENTE HIDRÁULICO

Paulo Roberto Lacerda Tavares¹; Marco Aurélio Holanda de Castro²; Hans Dieter Max Schuster³;
Celme Torres Ferreira da Costa⁴; Horst Frischkorn⁵ & Mariano da Franca Alencar Neto⁶.

Resumo – O processo de calibração de parâmetros hidrodinâmicos representa parte importante dos modelos e sua abordagem geral consiste em minimizar uma função objetivo expressa pela diferença entre as cargas hidráulicas observadas e calculadas. Guo e Zhang (2000), no início dos anos 2000 e, depois, Schuster e Araújo (2004) propuseram um processo alternativo para estimação dos parâmetros, através da minimização da diferença entre os gradientes hidráulicos observados e calculados e denominado Método Iterativo do Gradiente Hidráulico (MIGH). A geração da matriz de cargas observadas tem função determinante no sucesso do processo de calibração. Na abordagem tradicional, a matriz observada é constituída por meio de um processo de interpolação matemática. Este trabalho propõe-se a investigar a geração da matriz observada, utilizando o próprio processo de simulação, fixando, no modelo, os pontos de carga aferidas em campo. Perceberam-se, ainda, grandes esforços manuais na busca de integrar o software simulador (PMWIN) e o calibrador (MIGH); neste sentido, toda a metodologia de calibração foi implementada e automatizada no programa computacional desenvolvido na pesquisa, denominado UFC-MIGH. Para aplicação da metodologia proposta, foram calibradas as condutividades hidráulicas horizontais de um exemplo hipotético, demonstrando resultados mais eficientes que a metodologia tradicional, implementada no software PEST.

Abstract – The process of calibration of hydrodynamic parameters represents an important part IN computer modeling; its general approach consists of minimizing an objective function expressed by the difference between observed and simulated hydraulics heads. Guo and Zhang (2000) and Schuster and Araújo (2004) proposed an alternative process for estimating the parameters, through the minimization of the difference between observed and simulated hydraulic gradients and denominated it Iterative Method of the Hydraulic Gradient (IMHG). The generation of the matrix of the observed heads has decisive function in the success of the calibration process. In the traditional approach, the observed matrix is obtained using a mathematical interpolation. This work intends to investigate the generation of the observed head matrix, using the simulation process itself, fixing, in the model, the points where the heads are known. Normally, great manual efforts were noticed in the attempt of integrating the simulating software (PMWIN) and the (IMHG); therefore, all calibration methodology was automatically implemented and a computer code was developed, denominated UFC-MIGH. For the application of the proposed methodology, the horizontal hydraulic conductivities of a hypothetical case were used and demonstrated smaller errors than the traditional methodology, implemented in the software PEST.

Palavras-Chave: Condutividade hidráulica; Calibração; MIGH.

¹ Professor Adjunto da Universidade Federal do Ceará, Campus Cariri, Rua Tenente Raimundo Rocha, s/n. Bairro Universitário. CEP: 63.040-360, Juazeiro do Norte, Ceará. Fone/Fax: (88) 3572.7223. E-mail: prltavares@ufc.br.

² Professor Associado do Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental da Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, CEP: 60445-760. Bloco 713, Fortaleza, Ceará. Fone: (88) 3366.9492. E-mail: marco@ufc.br

³ Professor Associado do Departamento de Mineração e Geologia da Universidade Federal de Campina Grande, Av Aprígio Veloso, 882. CEP: 58104-970. E-mail: didischuster@yahoo.de

⁴ Professora Adjunta da Universidade Federal do Ceará, Campus Cariri, Rua Tenente Raimundo Rocha, s/n. Bairro Universitário. CEP: 63.040-360, Juazeiro do Norte, Ceará. Fone/Fax: (88) 3572.7223. E-mail: celmetorres@ufc.br

⁵ Professor Adjunto do Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental da Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, CEP: 60445-760. Bloco 713, Fortaleza, Ceará. E-mail: cariri@ufc.br

⁶ Professor do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia, Av. Treze de Maio, 2081. Bairro Benfica. CEP: 60040-531, Fortaleza, Ceará. E-mail: mariano@cefetce.br

1. INTRODUÇÃO

A água tem papel fundamental no desenvolvimento socioeconômico dos países e, neste sentido, identifica-se uma situação que merece crescente preocupação: garantir o abastecimento econômico e seguro de água potável nos meios urbano e rural, sem comprometer a oferta e qualidade de tais recursos hídricos. Nesse contexto, as fontes de água subterrânea se mostram com importância estratégica, uma vez que oferecem uma alternativa de suprimento de qualidade a relativo baixo custo.

A modelagem computacional do fluxo subterrâneo da água se apresenta como ferramenta indispensável, tendo em vista oferecer grande eficiência no uso dos dados disponíveis, permitindo analisar situações, em geral, complexas, que envolvem inúmeros cálculos e apresentando respostas quantitativas e qualitativas para os diversos problemas relacionados ao comportamento dos aquíferos.

O processo de modelagem apesar de ser entendido como uma simplificação de fenômenos reais, ainda sim, envolve uma trabalhosa seqüência de procedimentos, que se estendem desde a composição inicial do modelo, contemplando todos os parâmetros da área, até a verificação, análise e apresentação final dos resultados.

Entre os procedimentos constituintes da modelagem, destaca-se a etapa de calibração dos parâmetros hidrodinâmicos. A calibração tem como proposta estabelecer o valor dos parâmetros de forma que o modelo possa reproduzir as cargas aferidas em campo. Pode ser realizada através do ajuste dos parâmetros por tentativa-e-erro ou por meio de métodos matemáticos automatizados em códigos computacionais.

Conforme Schuster e Araújo (2004) a calibração de parâmetros é uma etapa muito importante na modelagem de um sistema aquífero e consome o maior tempo no procedimento de simulação numérica. Inúmeras técnicas têm sido desenvolvidas e são discutidas nos trabalhos de Yeh (1986), Carrera e Neuman (1986), Carrera (1987), Sun (1994), McLaughlin e Towley (1996), Guo e Zhang (2000) e Schuster e Araújo (2004).

A abordagem clássica dos procedimentos de estimação de parâmetros hidrodinâmicos fundamenta-se na minimização, através da técnica inversa dos mínimos quadrados, de uma função objetivo composta pela diferença entre as cargas observadas e calculadas. Esta metodologia está implementada em códigos computacionais, destacando o MODINV (DOHERTY, 1990), MODFLOWP (HILL, 1992), PEST (DOHERTY, 1994) e o UCODE (POETER e HILL, 1998).

No início dos anos 2000, Guo e Zhang (2000) e, depois, Schuster e Araújo (2004) desenvolveram a técnica de estimação de parâmetros hidrodinâmicos referidos em seus trabalhos,

respectivamente, como *Hydraulic Gradient Comparison Method* e Método Iterativo do Gradiente Hidráulico (MIGH), baseada na minimização do gradiente hidráulico observado e calculado.

2. OBJETIVOS

Tem-se como objetivo geral, desenvolver e aprimorar o procedimento de calibração de parâmetros hidrodinâmicos através da modificação do Método Iterativo do Gradiente Hidráulico, aplicado à modelagem computacional de aquíferos.

3. METODOLOGIA

3.1. Método Iterativo do Gradiente Hidráulico (MIGH)

Na forma clássica, a estimação de parâmetros hidrodinâmicos é realizada a partir da minimização da função objetivo, dada pela Equação (1), através da técnica inversa dos mínimos quadrados.

$$F_{obj} = \sum_{i=1}^N (h_i^{obs} - h_i^{calc})^2 \quad (1)$$

Em que:

F_{obj} : a função objetivo a ser minimizada;

N: número total de cargas observadas;

h_i^{obs} : cargas observadas [L]

h_i^{calc} : cargas calculadas [L]

No Método Iterativo do Gradiente Hidráulico, conforme Guo e Zhang (2000) e Schuster e Araújo (2004) a função objetivo a ser minimizada é:

$$F_{OBJ} = \int_R (\nabla h^{calc} - \nabla h^{obs}) (\nabla h^{calc} - \nabla h^{obs}) dx dy \quad (2)$$

Em que:

∇h^{obs} : gradiente hidráulico observado [L/L]

∇h^{calc} : gradiente hidráulico calculado [L/L]

R: domínio do fluxo.

Conforme demonstrado por Guo e Zhang (2000), para um aquífero não confinado, a derivada parcial da função objetiva com relação ao parâmetro, no caso, a condutividade hidráulica, utilizando o método do estado adjunto ou o método de cálculo variacional, é dada por:

$$\frac{\partial F_{obj}}{\partial K_j} = -\frac{1}{2K_j} \int_{r_j} \left[(\nabla h_j^{calc})^2 - (\nabla h_j^{obs})^2 \right] (\nabla h_j^{calc}) dx dy = 0 \quad (3)$$

Em que:

K_j : condutividade hidráulica [L/T]

O procedimento numérico para calibração do parâmetro consiste em expressar a Equação (3) em diferenças finitas com a dimensão igual a cada célula do modelo e realizar um processo iterativo que tem início com uma estimativa inicial do parâmetro hidrodinâmico e, após cada iteração, o valor do parâmetro é ajustado até que os critérios de convergência sejam atingidos.

Guo e Zhang (2000) propuseram o ajuste do parâmetro em cada iteração pelo método de descida profunda, através da equação:

$$K_j^{i+1} = K_j^i - \lambda \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial K_j} \right)^i \quad (4)$$

Em que:

λ : fator de comprimento do passo.

Na formulação alternativa do método iterativo do gradiente hidráulico, Schuster e Araújo (2004) substituíram a Equação (4) de ajuste pela expressão:

$$K_j^{i+1} = K_j^i \frac{|\nabla h_j^{i calc}|}{|\nabla h_j^{i obs}|} \quad (5)$$

Em cada iteração, calcula-se o ângulo φ formado pelos vetores gradiente hidráulico observado e calculado, conforme Equação (6) e a raiz do erro quadrático médio (RMSEH) dado pela Equação (7), finalizando o processo iterativo quando a média dos ângulos φ e/ou o RMSEH atingem um valor mínimo predefinido.

$$\varphi_j = \text{acos} \frac{\nabla h_j^{i obs} \cdot \nabla h_j^{i calc}}{|\nabla h_j^{i obs}| |\nabla h_j^{i calc}|} \quad (6)$$

$$RMSEH = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (h^{obs} - h^{calc})_i^2} \quad (7)$$

Em que,

N: quantidade de pontos observados ou número de células ativas

O fluxograma a seguir (Figura 1) apresenta as etapas do processo de calibração de parâmetro hidrodinâmico pelo método iterativo do gradiente hidráulico, conforme originalmente foi proposto.

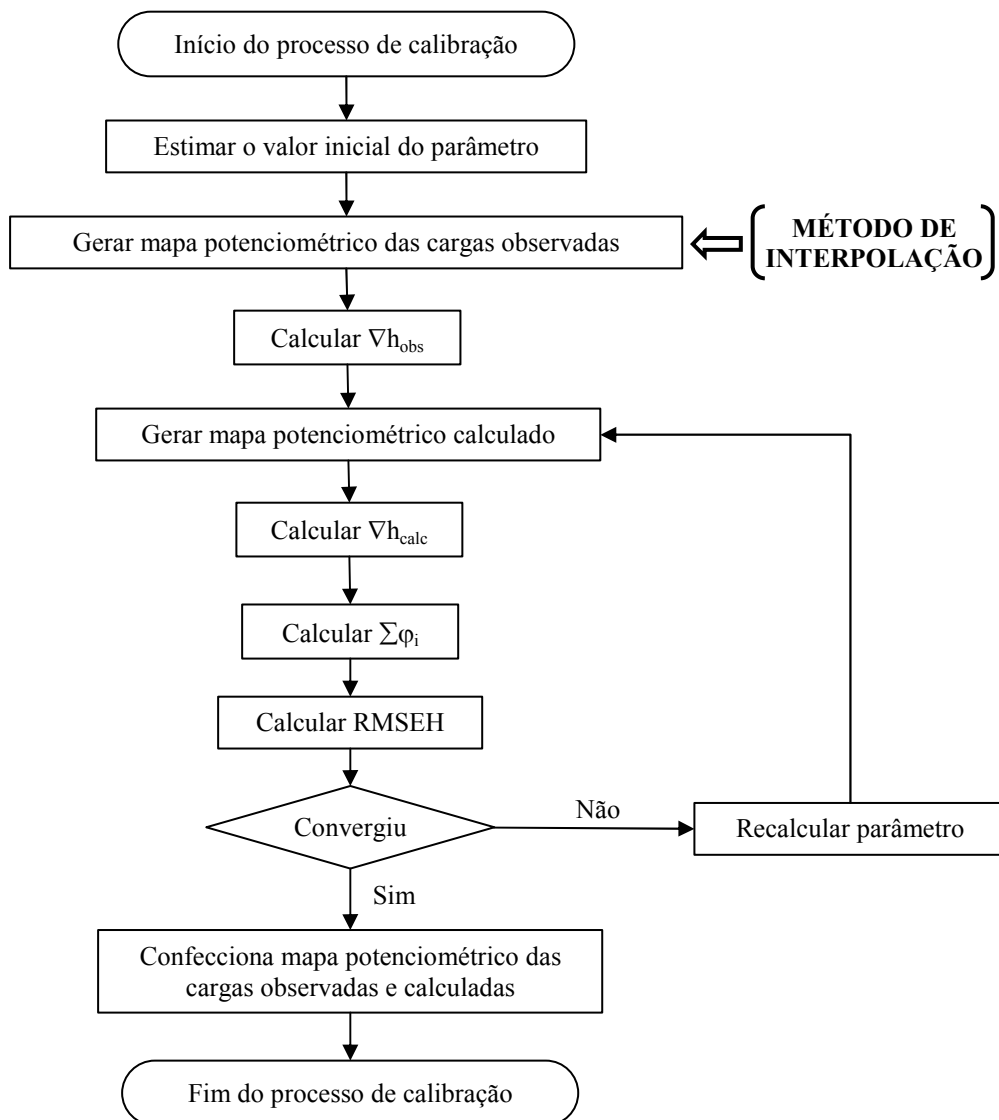


Figura 1 – Fluxograma do processo de calibração pelo Método Iterativo do Gradiente Hidráulico original.

Neste trabalho, investigou-se a utilização, em lugar do mapa potenciométrico observado gerado por interpolação, de um mapa potenciométrico calculado a partir das cargas observadas. O procedimento consiste em obter o mapa potenciométrico observado a partir da modelagem do fluxo subterrâneo, tornando invariáveis as cargas observadas em campo. De uma forma prática:

- (a) Faz-se uma estimativa inicial do parâmetro a calibrar;
- (b) Algumas cargas distribuídas pela área de estudo são aferidas em campo;
- (c) Compõe-se o modelo computacional da área (malha, camadas, condições de contorno, parâmetros iniciais, etc.);

- (d) Os pontos com cargas observadas em campo são indicados como invariáveis (fixas) no modelo;
- (e) Realiza-se a simulação, obtendo como resultado o mapa potenciométrico observado.

Com este procedimento as células não-fixas do modelo respondem hidrogeologicamente às características da área, sem fugir dos valores observados em campo (células fixas).

Na etapa seguinte, a simulação acontece livremente (sem fixar as cargas observadas), obtendo como resposta o mapa potenciométrico calculado.

Geradas as cargas observadas e calculadas, procede-se com a verificação de convergência conforme o MIGH, caso os critérios de convergência não sejam satisfeitos, é gerada uma nova matriz do parâmetro, a qual é utilizada para produzir os novos mapas potenciométricos (observado e calculado), reiniciando o processo iterativo.

Desta forma, o fluxograma do método iterativo do gradiente hidráulico contemplando o novo procedimento de geração das cargas observadas fica:

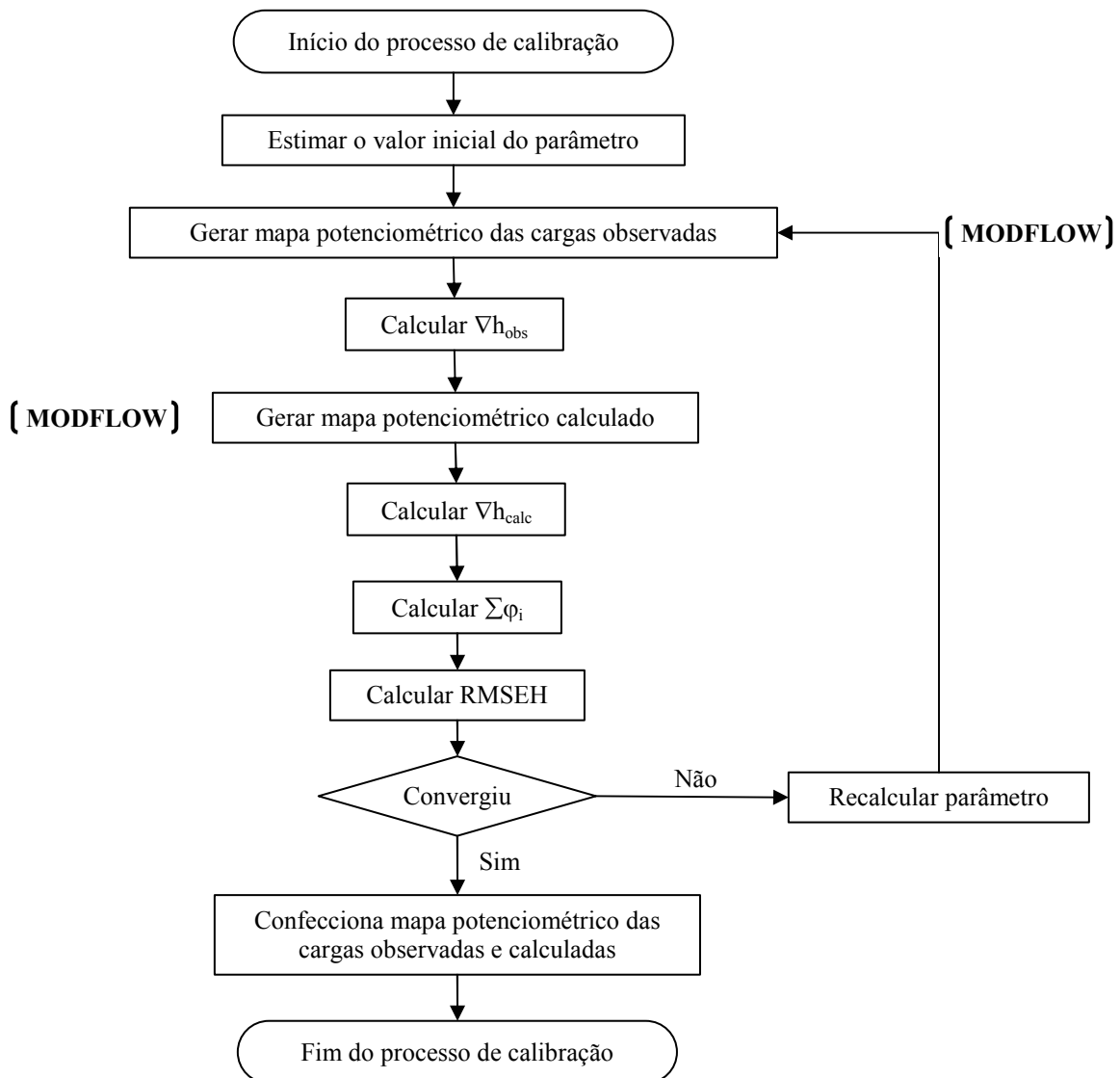


Figura 2 – Fluxograma do processo de calibração pelo Método Iterativo do Gradiente Hidráulico modificado.

O processo de calibração, conforme descrito no fluxograma da Figura 2, foi implementado em linguagem computacional *Delphi*, resultando na interface denominada UFC-MIGH (Figura 3). Com programa UFC-MIGH, o procedimento foi automatizado, contemplando a calibração através do método iterativo do gradiente hidráulico, bem como, a simulação da área a cada iteração, utilizando o software MODFLOW.

A utilização do programa UFC-MIGH é simples, bastando assinalar o parâmetro, indicar o número de iterações e clicar no botão calibrar. O manual de utilização está apresentado no Anexo 1 deste trabalho.

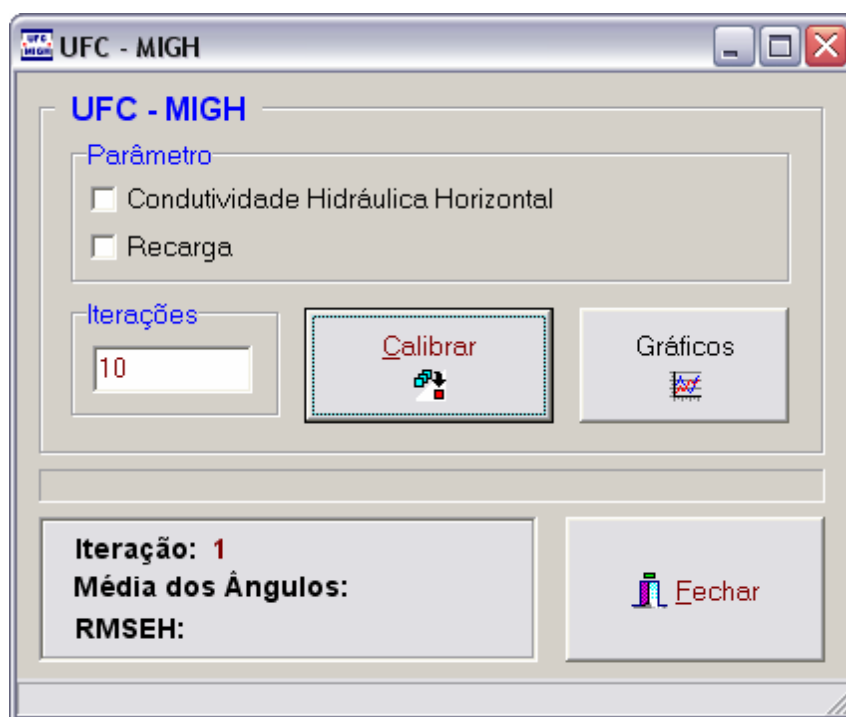


Figura 3 – Interface do programa UFC-MIGH.

4. ESTUDO DE CASO

As modificações propostas para Método Iterativo do Gradiente Hidráulico foram aplicadas na calibração da condutividade hidráulica e modelagem do fluxo em uma área hipotética correspondente a um aquífero não confinado, homogêneo e isotrópico, com porosidade efetiva de 25%; extensão de 2000 m na direção Leste-Oeste; 1100 m na direção Norte-Sul e espessura de 20,00 m, discretizado em 220 células com dimensões de 100 x 100 m.

O domínio é caracterizado por contorno impermeável em toda extensão da parte Norte e numa porção Sudoeste da área (células de cor cinza); na parte Oeste tem-se carga constante 11,00 m e, na parte Leste, carga constante 10,00 m (células de cor azul).

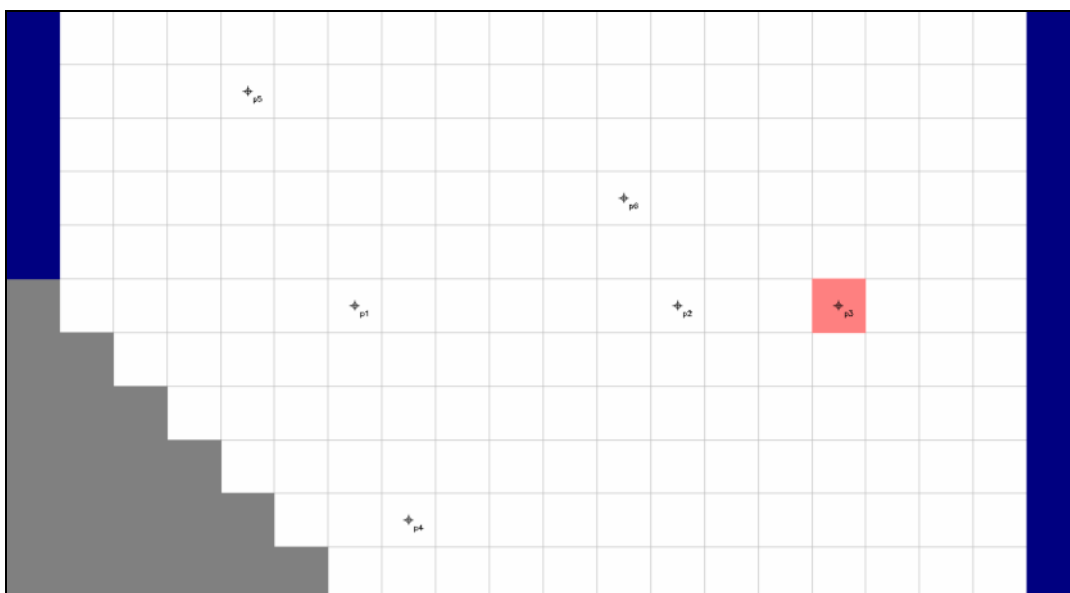


Figura 4 – Representação em malha do Exemplo 1.

A área apresenta, ainda, uma descarga representada por um poço de bombeamento com vazão de 0,020 m³/s (célula de cor vermelha) e 6 poços de observação, com nível estático conhecido, conforme a Tabela 1.

Tabela 1 – Locais dos Poços de Observação e as Cargas hidráulicas observadas do Exemplo 1.

Poço	x [m]	y [m]	h [m]
P1	650	550	10,50
P2	1250	550	10,20
P3	1550	550	10,10
P4	750	150	10,40
P5	450	950	10,70
P6	1150	750	10,30

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A simplicidade do modelo permitiu a reprodução manual e por meio de planilha eletrônica dos procedimentos matemáticos envolvidos no método, favorecendo a implementação computacional e identificação de erros operacionais.

O procedimento de calibração utilizando o PEST e o MIGH teve início com o valor de condutividade hidráulica de 0,008 m/s para todo o domínio em estudo, obtendo como resultado as linhas potenciométricas apresentados na Figura 5. Na cor vermelha estão apresentadas as linhas potenciométricas observadas e na cor azul as linhas potenciométricas calculadas. Este mapa é ponto de partida de ambas as calibrações.

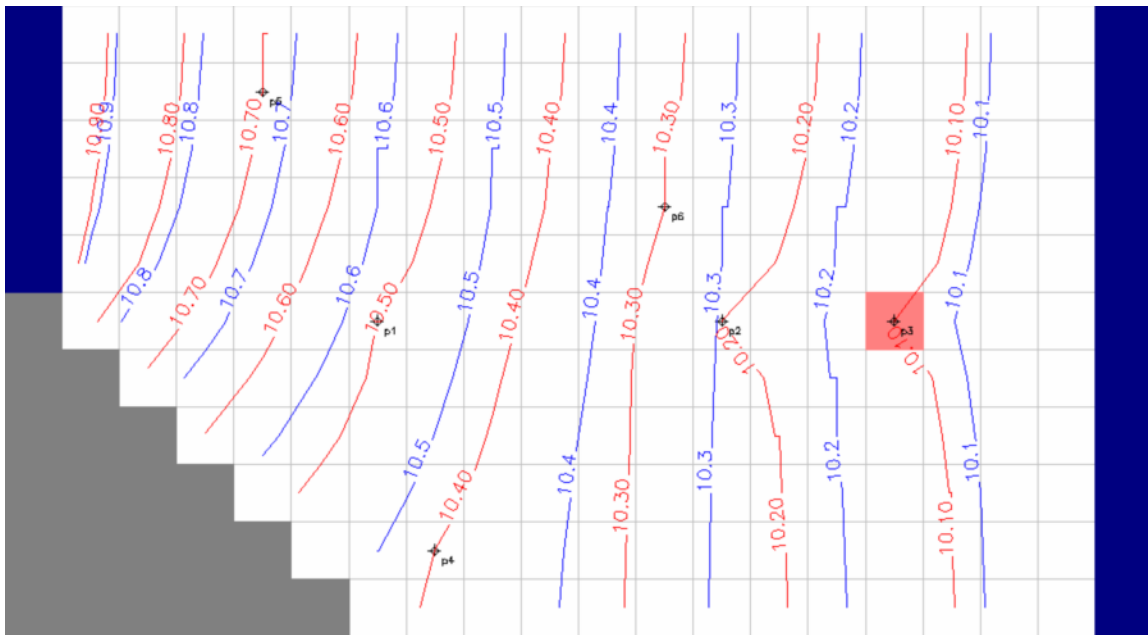


Figura 5 – Exemplo 1: Linhas potenciométricas iniciais. Cargas observadas (vermelho) e cargas calculadas (azul).

Ao final do processo iterativo com o PEST, que ocorreu em 3 iterações, os valores calculados se mostraram significativamente distantes dos valores observados, como pode ser visualizado na Figura 6.

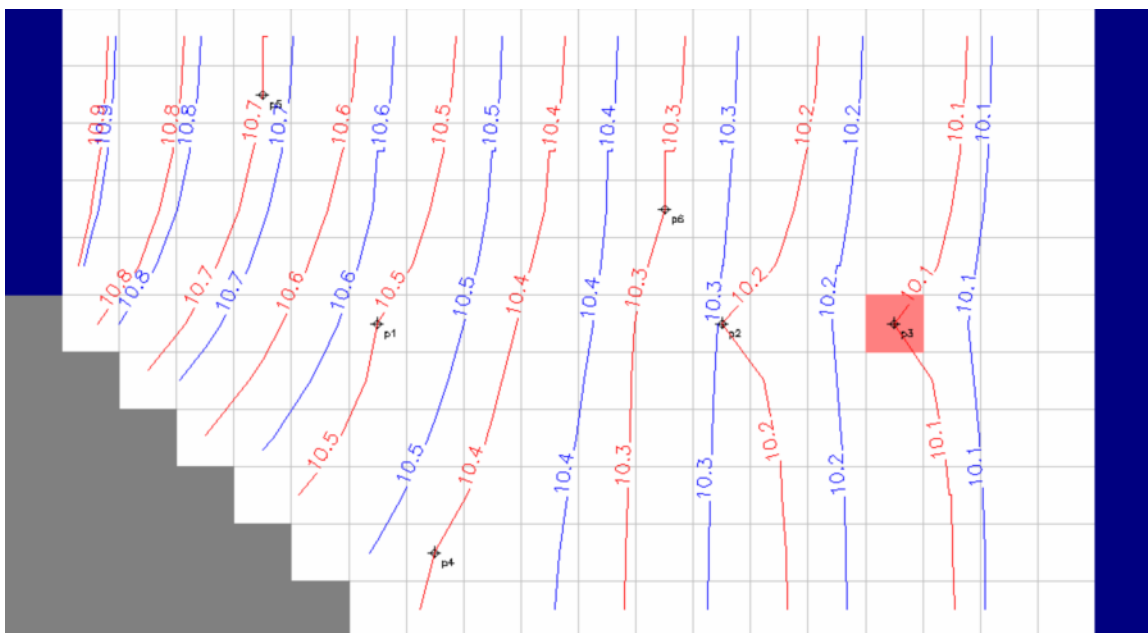


Figura 6 – Exemplo 1: Linhas potenciométricas finais utilizando o PEST (3ª Iteração). Cargas observadas (vermelho) e cargas calculadas (azul).

Em contrapartida, em poucos ciclos de iteração com o MIGH (9ª iteração), já fora constatada uma boa concordância entre os mapas potenciométricos observado e calculado, demonstrando uma diferença visual praticamente imperceptível, conforme Figura 7.

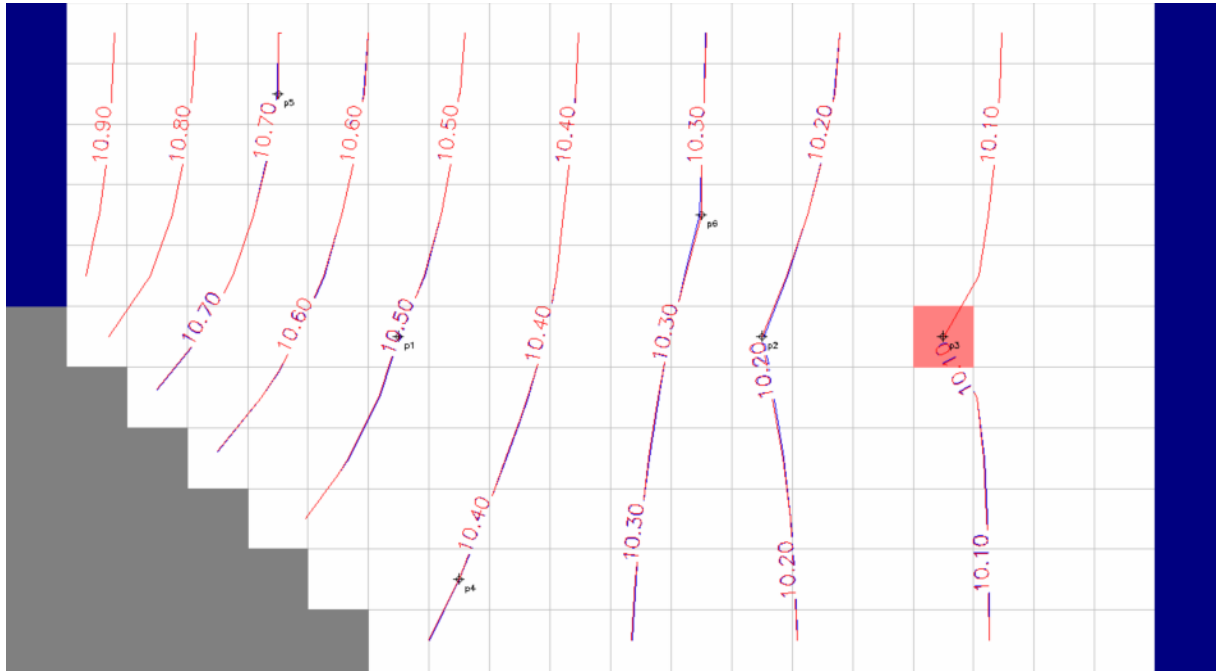


Figura 7 – Exemplo 1: Linhas potenciométricas finais utilizando o MIGH (9ª Iteração). Cargas observadas (vermelho) e cargas calculadas (azul).

Analisando os critérios de convergência para o MIGH, a raiz do erro quadrático médio, conforme definido pela Equação (7), iniciou o processo com o valor de 0,044 m e na nona iteração atingiu o valor de 0,000 m (Figura 8). Igualmente a média dos ângulos φ formado pelos vetores gradiente hidráulico observado e calculado, conforme Equação (3.6), seguiu a tendência de se aproximar do valor zero em poucas iterações (Figura 9).

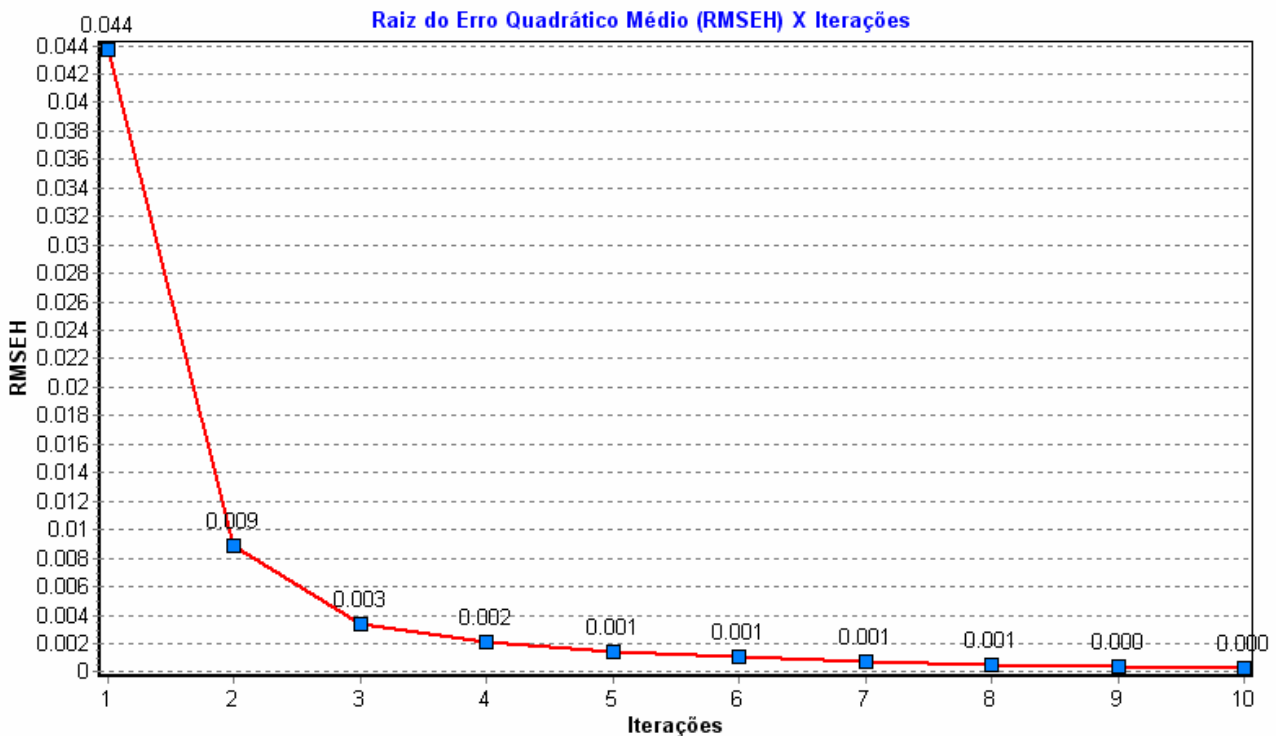


Figura 8 – Raiz do erro quadrático médio, em metros, vs Iteração.

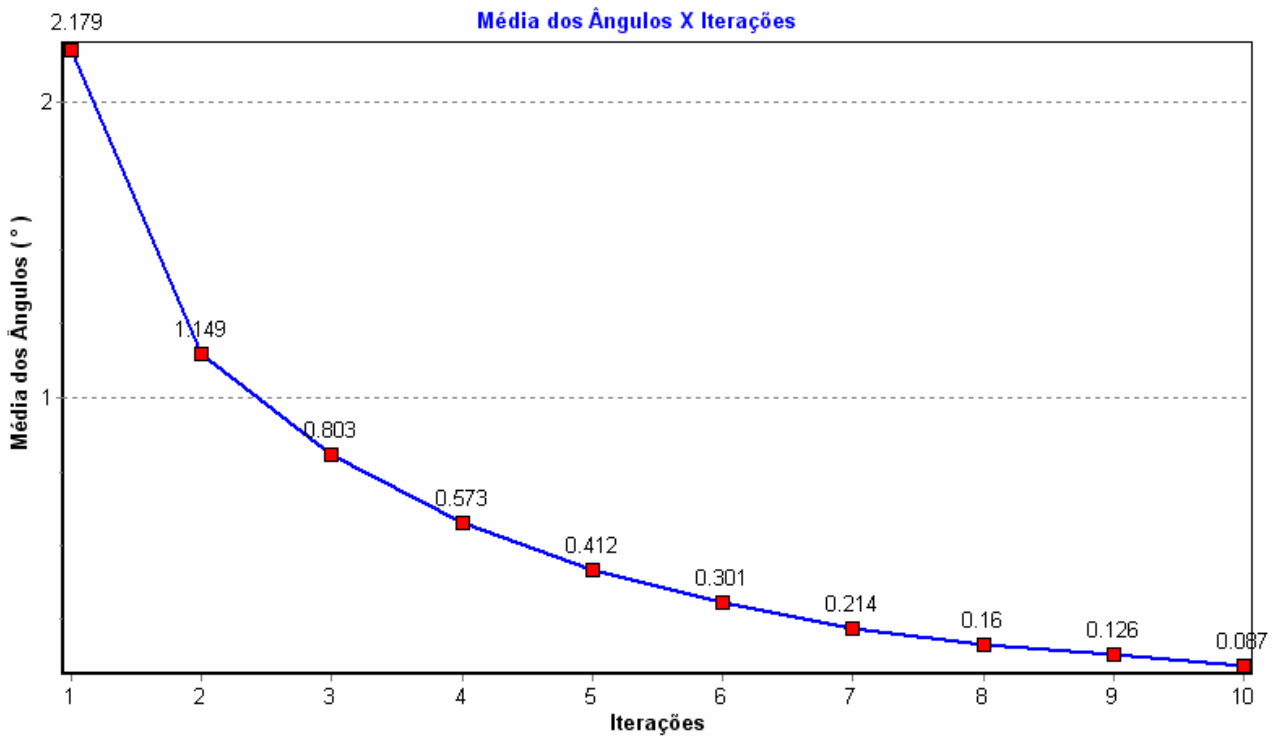


Figura 9 – Média dos ângulos ϕ , em graus, formado pelos vetores gradiente hidráulico observado e calculado vs. Iteração.

Em termos comparativos, considerando as cargas observadas, o PEST apresentou, após finalizada a calibração com 3 ciclos de iteração, o valor de RMSEH de 0,062 m, enquanto que através do MIGH, incluídas as modificações propostas no processo iterativo, demonstrou na terceira iteração o valor de RMSEH de 0,009 m e a partir da nona iteração passa a ser menor que 1,0 milímetro.

Tabela 2 – Comparativo do RMSEH entre os resultados da calibração com PEST e MIGH.

PEST (Iteração 3)			MIGH (Iteração 3)			MIGH (Iteração 9)		
Ponto de Observação	Calculado	Observado	Ponto de Observação	Calculado	Observado	Ponto de Observação	Calculado	Observado
Pt1	10,57	10,50	Pt1	10,51	10,50	Pt1	10,501	10,500
Pt2	10,30	10,20	Pt2	10,22	10,20	Pt2	10,202	10,200
Pt3	10,13	10,10	Pt3	10,10	10,10	Pt3	10,100	10,100
Pt4	10,47	10,40	Pt4	10,40	10,40	Pt4	10,400	10,400
Pt5	10,73	10,70	Pt5	10,70	10,70	Pt5	10,699	10,700
Pt6	10,35	10,30	Pt6	10,29	10,30	Pt6	10,298	10,300
RMSEH (m) =		0,062	RMSEH (m) =		0,009	RMSEH (m) =		0,001

Plotando em um gráfico os valores calculados e observados pode-se ter o indicativo do êxito no processo de calibração, utilizando o MIGH. A linha tracejada com ângulo de 45° em relação à horizontal representa a igualdade entre cargas observadas e calculadas e valores que se aproximam ou se sobrepõem a esta linha indicam eficiência na calibração, conforme demonstrado no caso em estudo (Figura 10).

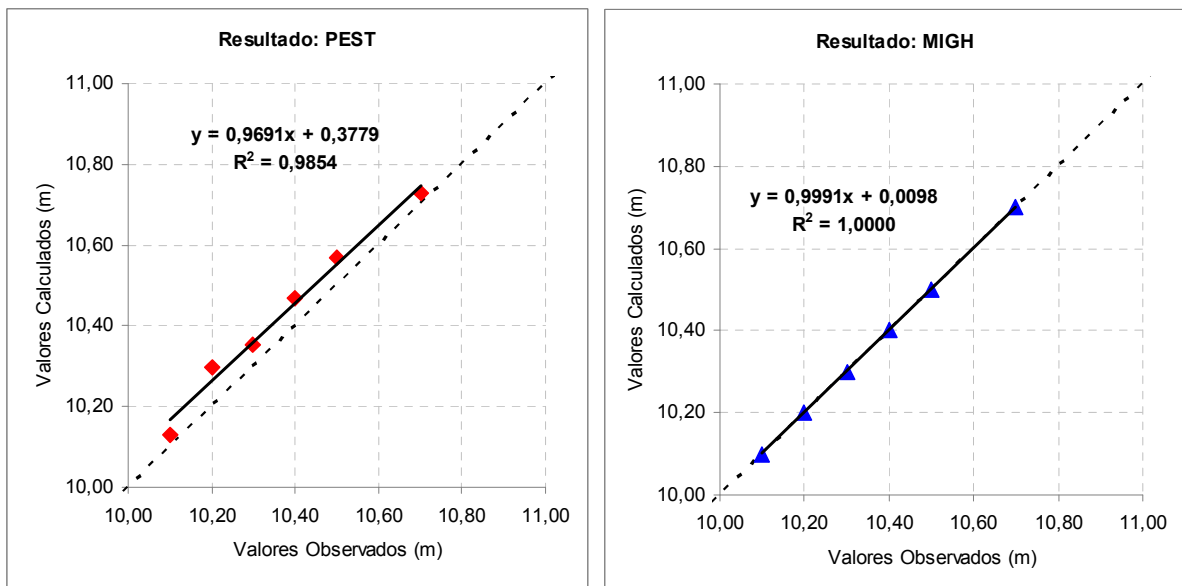


Figura 10 – Cargas calculadas vs. Cargas observadas. Resultado final do PEST (3ª Iteração) e do MIGH (9ª Iteração).

Finalizada a calibração, o PEST apresentou como resultado um valor de condutividade hidráulica horizontal de 0,0115 m/s para toda a área, enquanto que o MIGH oferece a seguinte distribuição:

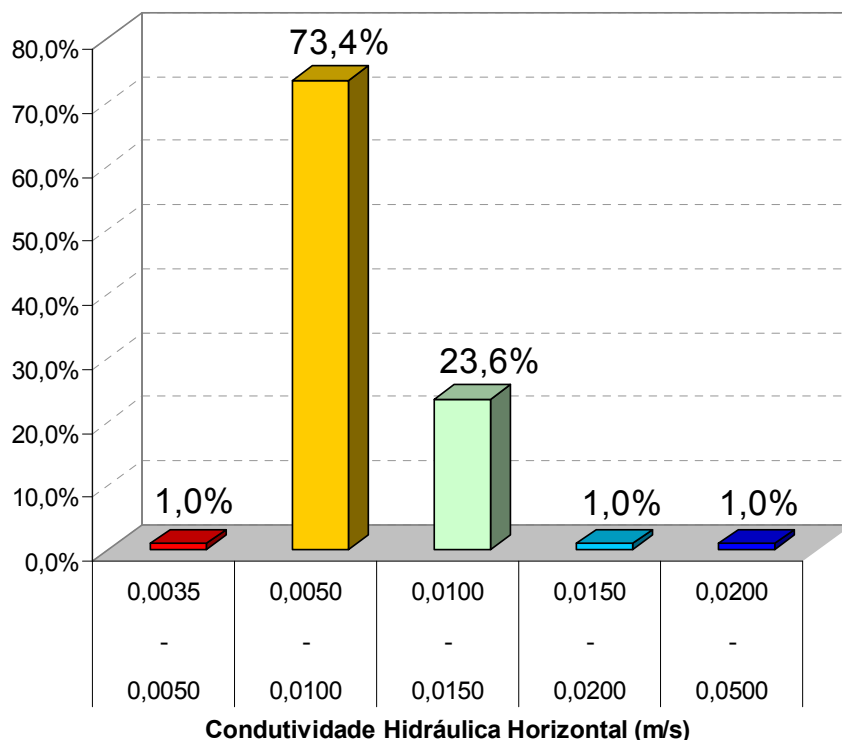


Figura 11 – Distribuição percentual da condutividade hidráulica horizontal pela área, calibrada com o MIGH (9ª Iteração).

Os valores de condutividade hidráulica horizontal estão distribuídos espacialmente da seguinte forma:

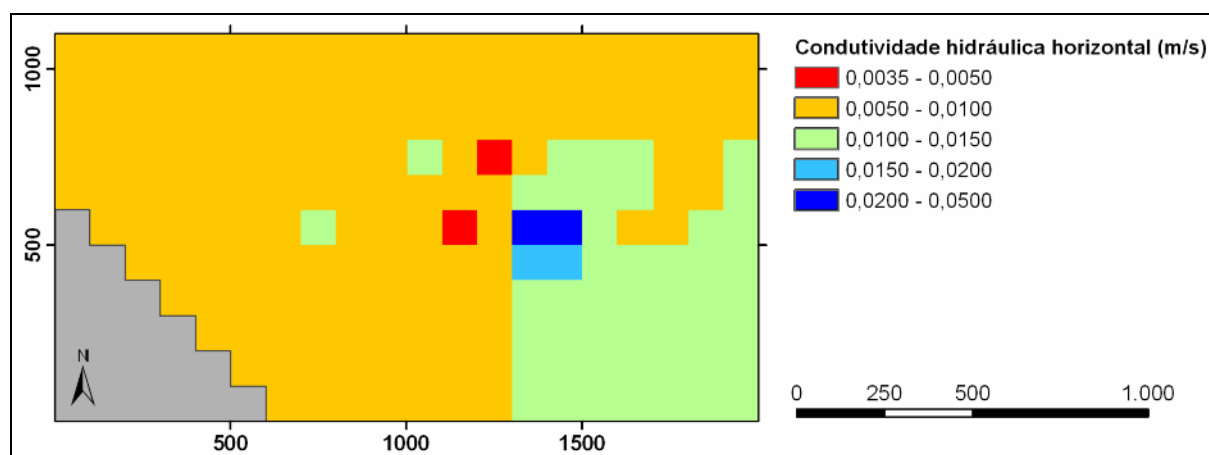


Figura 12 – Distribuição espacial da condutividade hidráulica horizontal, calibrada com o MIGH (9ª Iteração).

6. CONCLUSÃO

Referindo-se, inicialmente, ao aspecto prático da calibração, um grande avanço alcançado corresponde à automatização do processo, integralmente implementado no programa computacional UFC-MIGH. No início da pesquisa, o programa calibrador funcionava sem a integração automática com o software simulador (PMWIN – *Processing Modflow Pro*) e para cada iteração era requerido um esforço manual importante na preparação, compatibilização, importação e exportação dos arquivos de entrada e saída de ambos os programas. Dessa forma, com a automatização, reduziu-se o risco de erro na manipulação de arquivos de entrada e saída, além de reduzir expressivamente o tempo total para a realização da calibração.

Outro progresso a ser mencionado, refere-se a possibilidade de realização da calibração independente da utilização do software comercial PMWIN, uma vez que o programa UFC-MIGH, aprimorado na pesquisa, contempla a calibração, empregando o método iterativo do gradiente hidráulico, bem como, contempla a simulação, utilizando diretamente o software de código livre MODFLOW. No entanto, devido às dificuldades de composição dos arquivos de entrada do MODFLOW, o PMWIN não foi totalmente excluído do processo, sendo utilizado, apenas, como interface de entrada de dados e visualização dos resultados.

Com relação ao método iterativo do gradiente hidráulico, a implementação do procedimento que utiliza, como mapa potenciométrico observado, as cargas geradas através da modelagem, fixando os pontos de carga aferidas em campo, oferece resultados hidrogeologicamente mais coerentes, minimizando o problema de ajuste forçado, característico do emprego de métodos de interpolação, que, em geral, requerem correções manuais em condições específicas do modelo, tais como, cursos d'água e contornos de carga constante.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- CARRERA, J.; NEUMAN, S. P. Estimation of aquifer parameters under transient and steady conditions: Uniqueness, stability and solution algorithms. **Water Resources Research**, v. 22, n. 2, p. 211-227, 1986.
- CARRERA, J. **State of the art of the inverse problem applied to the flow and solute transport problem**. Groundwater Flow and Quality Modeling, NATO ASI Ser.: 549-585, 1987.
- DOHERTY, J. **MODINV**. Townsville, Australia: Australian Center for Tropical Fresh-Water Resources, 1990.
- DOHERTY, J. **PEST**. Corinda, Australia: Watermark Computing, 1994.
- GUO, X; ZHANG, C.-M.. Hydraulic gradient comparison method to estimate aquifer hydraulic parameters under steady-state conditions. **Ground Water**. v. 38, n. 6, p. 815-826, 2000.
- HILL, M. C. **A computer program (MODFLOWP) for estimation parameters of a transient, three-dimensional groundwater flow model using nonlinear regression**. USGS Open-File Report 91-484, 1992.
- MCLAUGHIN, D; TOWNLEY, L. R. A reassessment of the ground-water inverse problem. **Water Resources Research**. v. 32, n. 5, p. 1131-1161, 1996.
- POETER, E. P.; HILL, M. C. Documentation of UCODE, a computer code for universal inverse modeling. USGS WRI 98-4048, 1998.
- SCHUSTER, H. M. D.; ARAÚJO, H. D. B. Uma formulação alternativa do método iterativo de gradiente hidráulico no procedimento de calibração dos parâmetros hidrodinâmicos do sistema aquífero. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 9, n. 2, p. 31-37, 2004.
- SUN, N.-Z. **Inverse problem in groundwater modeling**. Norwell, Massachusetts: Kluwer Acad, 1994.
- YEH, W. W.-G. Review of parameter identification procedure in groundwater hydrology: Inverse problem. **Water Resources Research**, v. 22, n. 2, p. 95-108, 1986.