

Incertezas nos Modelos de Fluxo Subterrâneo

Edson Wendland

Escola de Engenharia de São Carlos – USP

ew@sc.usp.br

Jorge Rabelo

Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas – UFRB

rabelo@ufrb.edu.br

Recebido: 02/07/09 – revisado: 19/07/10 – aceito: 17/08/10

RESUMO

Os modelos de fluxo de águas subterrâneas compõem, cada vez mais, a metodologia de trabalho visando quantificar os processos físicos em sistemas aquíferos e prever seu comportamento a partir de cenários de interesse. A fundamentação teórica para aplicar tal metodologia inclui formular adequadamente um modelo conceitual e selecionar parâmetros hidráulicos para descrever a variabilidade espacial e temporal do fluxo e do nível potenciométrico no domínio estudado. Neste artigo foram levantadas as fontes de erro mais comuns na definição das unidades hidroestratigráficas, na preparação do balanço hídrico e na definição do sistema de fluxo. No desenvolvimento do modelo numérico foram discutidas as incertezas referentes à aplicação de condições de contorno, erros decorrentes da discretização geométrica e temporal do modelo, bem como da solução numérica das equações governantes. Fontes de incertezas discutidas no texto foram exemplificadas sob o contexto do Sistema Aquífero Guarani (SAG).

Palavras-chave: fontes de erro, condições iniciais e de contorno, malha.

INTRODUÇÃO

O estudo da hidrologia subterrânea impõe algumas dificuldades adicionais em relação à hidrologia de superfície por motivos intrínsecos ao meio. Estes motivos estão todos relacionados às condições naturais que estabelecem especificidades ao entendimento do comportamento do fluxo subterrâneo e sua interação com o meio. As dificuldades adicionais, entretanto, longe de estabelecerem uma impossibilidade ao seu estudo, têm representado um desafio estimulante aos pesquisadores que se dedicam a desvendá-las ao longo de décadas. Tal interesse é plenamente justificado pela importância dos recursos hídricos subterrâneos (manancial e fluxo) para as atividades sócio-econômicas e ao estudo de conseqüências ambientais.

Considerando comumente grandes extensões como objeto de estudo, bem como a variabilidade espacial do meio e o elevado custo de medições pontuais numerosas, o estudo sobre o manancial subterrâneo dá-se por um enfoque, em geral, menos hidráulico e mais hidrológico. Por estas razões está sujeito principalmente a determinações indiretas de

seus parâmetros, variáveis e condições de contorno. Assim, a hidrologia subterrânea – representada pela hidrogeologia de aquíferos – se caracteriza por abarcar um vasto e fértil campo propício à aplicação de simulações e modelos dos mais variados. A grande variabilidade natural dos parâmetros hidráulicos, teoricamente contínuos, vinculados às formações que permeiam o fluxo subterrâneo e às tensões hidrológicas, permite aos pesquisadores numerosas considerações para simplificar este ambiente real, tornando efetivamente possível seu estudo como um todo. Essas simplificações compõem as bases do modelo conceitual adotado e implementado posteriormente no modelo matemático para simular o comportamento do aquífero. A implementação destes modelos, entretanto, requer dados que possuem incertezas associadas. O sucesso atribuído à execução desses modelos tem como um de seus parâmetros principais a avaliação das incertezas envolvidas nos seus dados e previsões.

O objetivo deste texto é identificar e avaliar as fontes de incerteza e de erro, que envolvem as etapas de construção e aplicação de modelos numéricos de fluxo em aquíferos, abrangendo dados, modelo conceitual e modelo numérico. Foge ao seu

escopo a quantificação dessas incertezas. No entanto, são indicadas, ao final do texto, metodologias que abordam este tema.

FONTES DE INCERTEZA ASSOCIADAS A INFORMAÇÕES PRÉVIAS

Os conceitos de erro e incerteza possuem significados distintos, todavia, estão muito ligados entre si. A relação muito próxima entre ambos faz surgir, freqüentemente, confusão na atribuição de valores. Numa definição informal, o erro na determinação de uma grandeza significa a diferença entre o valor real (verdadeiro) da grandeza e o valor resultante de sua determinação. O valor verdadeiro de uma grandeza seria o valor obtido numa determinação perfeita. Obviamente, os valores verdadeiros são indetermináveis por natureza, o que leva a se recorrer a valores convencionalmente verdadeiros, conhecidos como “valor atribuído” ou “melhor estimativa”. A incerteza, por sua vez, caracteriza o “grau de confiança” da determinação, sendo uma indicação dos limites máximos (superior e inferior) dos erros que possam ter sido cometidos na determinação da grandeza.

Considerando o exposto, direcionaremos, nesta seção, a atenção prioritariamente às fontes de erro, entretanto, não apenas aos erros ligados às medições, mas também aos erros relacionados à concepção típica de modelos de fluxo aplicados à água subterrânea. Esses erros são discutidos a seguir, no processo de determinação de variáveis e parâmetros hidráulicos, na definição do modelo conceitual e no desenvolvimento e implementação do modelo numérico.

Incertezas relacionadas à determinação de parâmetros e dados de campo

Cargas hidráulicas

Os valores de carga hidráulica (h) sempre compõem o conjunto de informações a ser utilizado na implementação do modelo. Tratadas como variáveis, parâmetros, ou no estabelecimento de condições de contorno, são fundamentais na solução do problema direto ou em sua calibração. Em relação aos erros atribuídos à carga hidráulica, um conjunto de três circunstâncias mais significativas pode ser relatado:

- a) nas medições de cargas hidráulicas existem três fontes de erros experimentais: os decorrentes dos instrumentos de medição, de operação ao estabelecer o nível da água e a medição da elevação deste nível em relação ao nível de referência;
- b) os dados com medidas de campo dos valores de h podem refletir a presença de efeito transiente não previsto pelo modelo adotado. Tal efeito pode ser influenciado por diversos fatores como: quantidade e concentração de locais de medição, tempo decorrido na tomada das medições, valores de recarga e descarga presentes na região de fluxo, bem como valores de parâmetros hidráulicos e características geológicas;
- c) na implementação dos modelos numéricos, os valores de carga medidos pontualmente em poços ou piezômetros são atribuídos a células ou elementos da grade discretizada, representando regiões do espaço físico da área modelada. Entretanto, medidas de carga podem estar influenciadas por heterogeneidades de pequena escala, que transferidas para grandes regiões estabelecem erros na simulação das cargas. Esta fonte de erro é conhecida como efeito de escala (*scaling effect*) como discutido por Gelhar (1986).

Apenas devido às fontes circunstanciadas no item (a) acima, sob condições “ideais” de experimento, Anderson & Woessner (1992) afirmam que os erros são da ordem de poucos centímetros. Apesar disso, estudos regionais podem gerar erros muito maiores a depender da precisão dos experimentos.

Freqüentemente, os valores de h são utilizados pelos modelos a partir de mapas de nível freático, e até, simplesmente, de mapas planialtimétricos. As incertezas envolvendo os valores de h por estas fontes, principalmente em casos de grande escala, costumam ser maiores que aquelas decorrentes da determinação de h a partir de experimentos de campo, mesmo considerando-se as respectivas fontes de erro. Assim, é recomendável, principalmente quando da simulação de grandes áreas, a utilização de pontos amostrais com valores de h determinados em campo a partir de medidores de nível com auxílio de altímetros e localizadores georeferenciados. Os valores assim obtidos servem para comparar dados já existentes e permitir avaliar melhor a qualidade dos dados de carga hidráulica fornecidos ao modelo, sobretudo, estabelecendo uma melhor

qualidade a esses valores utilizados como referência no processo de calibração.

Fluxos

As medidas de fluxo subterrâneo são, em geral, estimativas, uma vez que, com raras exceções de medições localizadas (medições de *seepage* em rios e lagos, Cey *et al.*, 1998), fontes surgentes, fluxos de base e lateral - resultantes da contribuição de aquíferos vizinhos, Cherkauer & McBide (1988) - e fluxos através do nível freático, são todos métodos indiretos de determinação. Devido a isso, estimativas de fluxo têm sido associadas a erros maiores que as associadas a cargas hidráulicas (de Vries & Simmers, 2002). Essas são algumas das principais condições internas ou restrições nos modelos para solução do problema direto ou inverso. Os dados de fluxo, obtidos de forma indireta, podem apresentar grandes desvios entre resultados, dependendo do método usado. Entretanto, pode-se obter uma faixa de variação plausível para os mesmos. Como exemplo, pode-se citar as conclusões sobre a determinação do fluxo de base obtido a partir das técnicas indiretas, *Recur-sive Digital Filter* e *Smoothed Minima*, nos trabalhos de Nathan & McMahon (1990) e Arnold *et al.* (1995).

O fluxo através do nível freático estabelece a recarga direta do aquífero, oriunda da precipitação, e é uma das mais importantes estimativas na definição do sistema de água subterrânea. Essa variável também pode estabelecer o volume de água que ascende do aquífero diretamente à zona não-saturada e à superfície, devido à evapotranspiração. Apesar de sua importância, não existe um método universalmente reconhecido para estimá-lo. Esses métodos podem ser caracterizados em dois grandes grupos: os que são baseados em modelos de balanço hídrico do aquífero (Stoertz & Bradbury, 1989), e os que são baseados em modelos da zona não-saturada (Krishnamurthi *et al.*, 1977). A idéia geral do primeiro grupo é de que a taxa de recarga resulta de um balanço de massa entre o fluxo que entra e que sai do domínio de estudo. Nessa análise, a determinação de variáveis como precipitação, evapotranspiração, fluxo subsuperficial e variação no armazenamento têm importância fundamental. Em relação ao segundo grupo, os métodos se caracterizam por estimar a recarga a partir de dados de precipitação e infiltração local através da zona não-saturada. Adicionalmente, esses dados podem compor modelos para a zona não-saturada, teoricamente mais complexa, e que requerem mais parâmetros de campo que os modelos de zona saturada. Entre esses dados constam as informações de clima, solo e vegetação,

enquanto o modelo deve ser capaz de considerar os principais fluxos envolvidos entre a precipitação na superfície e o nível freático do aquífero (Figura 1).

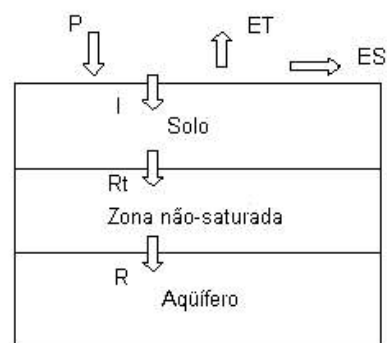


Figura 1 - Esquema conceitual de fluxo entre a superfície e o aquífero (P- precipitação, ET - evapotranspiração, ES - escoamento superficial, I - Infiltração, Rt - recarga em trânsito e R - recarga do aquífero)

Ambas as abordagens precisam de dados em quantidade e qualidade suficientes à calibração dos modelos. Assim, incertezas adicionais podem ser atribuídas à estimativa do fluxo através do nível freático:

- a) aquíferos com características comuns, apresentam, em geral, significativas variações espaciais e temporais nas taxas de recarga e descarga através do nível freático (Steenhuis *et al.*, 1985 e Stoertz & Bradbury, 1989), entretanto, devido às dificuldades de obtenção de dados que permitam estabelecer essas taxas para toda a área de interesse, é usual atribuir uma distribuição espacial uniforme da taxa de recarga a um valor percentual da precipitação anual média. Resultados da calibração de modelos de fluxo mostram, em geral, melhores resultados quando os mesmos incorporam a variação espacial da recarga por zonas, procedimento este tornado comum a partir da segunda metade da década de 1980 (Anderson & Woessner, 1992);
- b) outro aspecto a se considerar são os efeitos de escala produzidos pela inadequada discretização da malha e zoneamento dos dados de precipitação. Tal efeito pode resultar, até mesmo, em valores inversos de fluxo através de regiões do nível freático, em comparação com a estimativa realizada por

discretização da malha e zoneamento de precipitação mais adequados.

Parâmetros hidráulicos

As informações prévias acerca dos parâmetros hidráulicos condutividade hidráulica (K), transmissividade (T) e coeficientes de armazenamento (S_x) são obtidas de testes de bombeamento e recuperação, envolvendo um ou mais poços. A determinação de valores de condutividade hidráulica realizada a partir de medições hidrométricas de alcance pontual, como as decorrentes da medição direta de *seepage* (drenagem surgente) e de *slug-test* (teste por elevação pontual da carga hidráulica em tubo-teste), utilizando mini piezômetros, conduzem frequentemente a resultados com grande variação da condutividade, mesmo em áreas próximas entre si, em consequência da heterogeneidade pontual dos solos (Cey *et al.*, 1998). A interpretação dos testes de bombeamento que determina a transmissividade local T também contém erros: assume usualmente a homogeneidade e isotropia na transmissividade e possui erros na medição do rebaixamento (ou ascensão) do nível d'água no poço durante o teste. A interpretação é estabelecida por modelos teóricos que não representam corretamente as características do aquífero. Na maioria dos casos, os valores de K são obtidos indiretamente da relação $T=b.K$, em que b é a espessura do aquífero. Um dos maiores problemas, entretanto, é estabelecer a região do aquífero sob influência do teste: se o teste é de curta duração, o espaço de influência pode ser da ordem de metros, se for de duração muito maior, esta influência pode ser de quilômetros. Mesmo conhecendo-se precisamente o tempo de duração do teste, não é possível determinar o referido espaço de influência com exatidão, uma vez que outras propriedades do meio interferem nesta determinação. Cita-se, por exemplo, o coeficiente de armazenamento S_x , um parâmetro a ser determinado e também associado a incertezas, porém, sujeito a variações muito menores que as de T . Contudo, sabe-se que dentro da região sob influência do teste, T obtida por solução analítica é, para tempos longos de teste, a média geométrica das propriedades elementares do meio (Meier *et al.*, 1998). Se a permeabilidade das rochas for constituída por uma cadeia de fraturas interconectadas, o espaço no qual T é determinada pode se tornar extremamente grande ou potencialmente infinito. Sua delimitação é estimada em função da distribuição dos comprimentos da conectividade como verificado no trabalho de Bour & Davy (1998).

Os valores de T são disponíveis localmente em apenas alguns pontos do aquífero, formando um conjunto de algumas dezenas de pontos em 1000 km². Além disso, independentemente dos erros discutidos, não é surpreendente este parâmetro variar de cinco ordens de grandeza em aquíferos regionais, p.ex., de 10⁻³ a 10² m²/d. Por outro lado, é preciso determinar *a priori* os valores de transmissividade em um número muito maior de pontos para levar à solução dos problemas direto ou inverso. Assim, torna-se necessário o "tratamento" dos dados de campo. A assimetria dos valores de T , observada experimentalmente, tem levado a se considerar uma distribuição log-normal para a mesma, permitindo que $y = \log(T)$ seja usada como variável, tratando o problema de sua variação por uma abordagem gaussiana. A necessidade de se completar o conjunto de informações – principalmente os valores de carga e parâmetros hidráulicos – a serem alocados a todos os pontos requeridos pelo modelo, bem como, a necessidade de avaliar sua incerteza associada, tem levado ao uso da geoestatística, promovendo um melhor ajuste entre os resultados observados em campo e gerados pelo modelo (Montenegro, et al. 1999).

Regime transiente

Nas simulações transientes, torna-se necessário estabelecer o valor de armazenamento para cada ponto da malha. As cargas hidráulicas variam como resultado da transferência de água armazenada no meio poroso, daí a necessidade do modelo em especificar o parâmetro que descreve a capacidade do aquífero em transferir água do armazenamento. Esta capacidade, conhecida como armazenamento, é representada por um dos parâmetros seguintes: *armazenamento específico* (S_s), *coeficiente de armazenamento* (S) ou *rendimento específico* (S_y). Numa descrição sucinta dos mesmos, o coeficiente de armazenamento específico (S_s), usado em modelos tri-dimensionais, é igual ao volume de água liberado do armazenamento por unidade de declínio na carga hidráulica; o coeficiente de armazenamento (S), usado em modelos bi-dimensionais, assumindo valores verticais médios, é igual ao volume de água liberado do armazenamento por unidade de área por unidade de declínio na carga hidráulica, sendo $S=b.S_s$; o rendimento específico (S_y), utilizado em aquíferos livres, é igual ao volume de água liberado do armazenamento por unidade de área por unidade de declínio na carga hidráulica. S e S_s indicam o volume de água liberado pela compressão da matriz do aquífero e

expansão da água, enquanto S_y indica a água drenada pelo efeito gravitacional em resposta ao declínio do nível freático.

Os valores de armazenamento obtidos de situações de campo não são facilmente determinados, e os valores S e S_y obtidos de testes de bombeamento, sobretudo os de S_y (Neuman, 1979), são sujeitos a erros. Contudo, a variação de qualquer dos parâmetros de armazenamento é pequena comparada à variação da carga hidráulica (Tabela 1 a 3). Devido a esses aspectos, o armazenamento é, na prática, estabelecido como uniforme em cada unidade hidroestratigráfica de um aquífero ou camada confinante, apresentando distribuição por zonas. Assim, a sua atribuição, uniforme ou estabelecida a partir de zonas, requer uma investigação iterativa entre os resultados do modelo numérico e as características observáveis e estimadas do aquífero.

Tabela 1 - Faixas de valor de condutividade hidráulica para diversos materiais (adaptado de Heath, 1983)

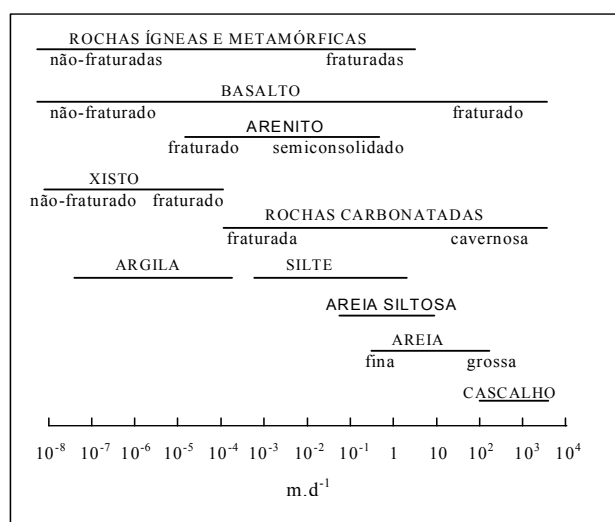


Tabela 2 - Valor de armazenamento específico para diversos materiais (adaptado de Domenico, 1972)

| Material | Armazenamento específico S_s (m^{-1}) |
|-------------------|---------------------------------------------|
| Argila | $2,0 \times 10^{-2} - 9,2 \times 10^{-4}$ |
| Areia pouco densa | $1,0 \times 10^{-3} - 4,9 \times 10^{-4}$ |
| Areia densa | $2,0 \times 10^{-4} - 1,3 \times 10^{-4}$ |
| Cascalho arenoso | $1,0 \times 10^{-4} - 4,9 \times 10^{-5}$ |
| Rocha fissurada | $6,9 \times 10^{-5} - 3,3 \times 10^{-6}$ |
| Rocha sã | menor que $3,3 \times 10^{-6}$ |

Tabela 3 - Valor de rendimento específico para diversos materiais (adaptado de Morris & Johnson, 1967)

| Material | Rendimento específico S_y (-) |
|-----------------|---------------------------------|
| Arenito fino | 0,02 – 0,40 |
| Arenito médio | 0,12 – 0,41 |
| Areia fina | 0,01 – 0,46 |
| Areia média | 0,16 – 0,46 |
| Areia grossa | 0,18 – 0,43 |
| Cascalho fino | 0,13 – 0,40 |
| Cascalho médio | 0,17 – 0,44 |
| Cascalho grosso | 0,13 – 0,25 |
| Silte | 0,01 – 0,39 |
| Argila | 0,01 – 0,18 |
| Xisto | 0,22 – 0,33 |
| Rocha calcárea | 0,00 – 0,36 |

Erros na definição do modelo conceitual

O objetivo do modelo conceitual é o de simplificar a situação real, considerando processos hidrológicos mais simplificados, que permitam uma representação mais uniforme da geometria do aquífero e das formações geológicas, que compõe as unidades hidroestratigráficas. Teoricamente, entretanto, quanto mais fiel for o modelo conceitual ao sistema de campo, mais preciso poderá ser o seu modelo numérico, sendo crítica a relação entre simplificação e precisão; falhas nas predições de modelos numéricos são frequentemente atribuídas a erros no modelo conceitual. Esquemáticamente, os erros atribuídos à construção do modelo conceitual podem ser identificados em três momentos: definindo as unidades estratigráficas, preparando o balanço hídrico e definindo o sistema de fluxo.

- a) *Definindo as unidades hidroestratigráficas:* as informações geológicas oriundas de mapas geológicos, mapas de seções transversais, construção de poços, juntamente com as informações das propriedades hidrogeológicas, e eventualmente testes geofísicos, permitem definir as unidades hidroestratigráficas. No processo de definição das unidades hidroestratigráficas, várias formações geológicas podem ser combinadas em uma única unidade estratigráfica ou uma formação geológica pode ser, p.ex., dividida em duas dessas unidades: aquífero e camada confinante. Entretanto, para que estas unidades definidas representem corretamente o

comportamento do aquífero, é necessário que os parâmetros hidráulicos correspondentes sejam conhecidos. Na prática, muitas vezes esses dados são escassos e com elevada estimativa de erro associada.

- b) *Preparando o balanço hídrico*: todo o sistema de fluxo (entradas e saídas) mais a variação no armazenamento, esperado para o domínio relacionado ao aquífero, deve compor o modelo conceitual. Assim, uma estimativa de cada uma das contribuições de fluxo deve ser realizada, priorizando os dados com menor incerteza e resumindo um balanço hídrico para mensurar inicialmente esses fluxos e a variação no armazenamento hídrico do sistema aquífero. Como discutido na seção 0, as determinações de fluxo em aquíferos estão associadas, em geral, a grandes fontes de incerteza. Enquanto a estimativa de alguns fluxos pode ser realizada por diversos métodos, como o fluxo de base, outras, como a contribuição lateral de fluxo de aquíferos vizinhos, são em geral estimadas pelo resultado do balanço hídrico. Durante o processo de calibração, este balanço hídrico, com as estimativas iniciais de campo, será comparado com o balanço hídrico calculado pelo modelo.
- c) *Definindo o sistema de fluxo*: o sistema hidroestratigráfico representa o cerne do modelo conceitual. É através dele que se estima o movimento de água subterrânea com base em informações hidrológicas tais como precipitação, evapotranspiração, drenagem superficial (escoamento em rios) e *runoff* (escoamento total, incluindo as partes sobre o terreno e internamente ao mesmo), bem como pelos valores de carga hidráulica, para estabelecer o sistema geral do nível d'água. Tal sistema permite estimar as direções do fluxo subterrâneo. Uma forma muito utilizada para diminuir as incertezas sobre o sistema de fluxo é a análise química da água. Dentre os métodos para inferir e mensurar a direção de fluxo (Swenson, 1968) (Krabbenhoft *et al.*, 1990) citam-se os que utilizam medidas de concentração de íons, comumente: Ca^{+2} , Mg^{+2} , $\text{Na}^+ \text{SO}_4^{-2}$, HCO_3^- e Cl^- ; de temperatura da água e pH.

Erros no desenvolvimento do modelo numérico

Na sua grande maioria, os modelos matemáticos utilizados na simulação e análise de sistemas de

água subterrânea são resolvidos por aproximações baseadas nos métodos numéricos de *diferenças finitas* (MDF) e *elementos finitos* (MEF). Pode-se, portanto, identificar erros associados ao modelo numérico decorrentes da solução numérica das equações diferenciais parciais (EDP), que representam o movimento de fluxo no meio subterrâneo. Esses erros apresentam-se atuando conjuntamente, o que, em geral, dificulta a identificação dos mesmos. Entretanto, para avaliar a qualidade da solução numérica, torna-se importante identificar as principais fontes de erro relacionadas ao modelo numérico.

Erros de modelagem

Nas representações do fluxo subterrâneo através de um modelo numérico, estes erros são representados por simplificações nas EDPs, tais como a suposição de que alguns coeficientes são constantes e que termos podem ser desprezados. Como exemplo, está a consideração de que $T = \text{cte}$ em períodos de tempo durante a simulação de problemas transientes.

Os modelos de água subterrânea podem ser caracterizados de diversas formas, quanto à sua dimensionalidade (uma, duas ou três dimensões), temporalidade (estacionário ou transiente), uniformidade (isotrópico ou anisotrópico), homogeneidade (homogêneo ou heterogêneo), sistema de confinamento (confinado, livre, semiconfinado ou drenante), etc. Como variadas combinações entre essas características principais são possíveis, quanto mais geral e representativo das condições de campo for o modelo concebido, maiores serão as necessidades por condições auxiliares (contorno e iniciais). Condições iniciais ou de contorno especificadas incorretamente, por "falta" ou "excesso", frequentemente fazem com que a solução não seja única ou fisicamente plausível, representando uma importante componente dos erros de modelagem.

Nos modelos de fluxo subterrâneo, as condições de contorno representam restrições hidrogeológicas definidas matematicamente por três conhecidos tipos de condição (Figura 2):

- a) *carga especificada* (condição de 1º tipo ou de Dirichlet), para a qual as cargas hidráulicas são conhecidas ou atribuídas, $h = h_0$, aplicável principalmente para representar a carga em pontos do aquífero, podendo coincidir com o nível de corpos d'água (rios, lagos, etc);

- b) *fluxo especificado* (condição de 2º tipo ou de Neumann), para a qual o fluxo normal, q , através do contorno é conhecido,

$$q = -K \frac{\partial h}{\partial \bar{n}} \quad (1)$$

(caso unidimensional), aplicável, entre outros, na representação de divisores de água do aquífero, fluxo lateral oriundo de aquíferos vizinhos e fluxo de saída do aquífero na região de exutório da bacia;

- c) *fluxo dependente de carga*, ou carga-dependente (condição de 3º tipo, Robin ou mista), para a qual o fluxo através do contorno é calculado em função de um valor de carga conhecido. Sua caracterização matemática é dada pela definição da combinação linear das duas condições anteriores,

$$K \frac{\partial h}{\partial x} + \alpha h = \beta \quad (2)$$

Essa expressão representa a situação de fluxo dependente da diferença de cargas entre o aquífero (h) e sua correspondente vizinhança externa, carga fonte (h_o), separadas por uma camada ou interface semipermeável, em que $\alpha = -K'/B'$ e $\beta = -h_o K'/B'$, sendo K' e B' , respectivamente, a condutividade hidráulica e espessura da camada semipermeável (Bear, 1979). Assim, em situações práticas, a expressão 2 é substituída pela expressão equivalente,

$$q = \frac{(h_o - h)}{\sigma'} \quad (3)$$

em que $\sigma' = B'/K'$ representa a resistência hidráulica da camada. Esse fluxo é também conhecido como *leakage* (drenança) e essa condição é utilizada na prática para representar diversas situações, como o fluxo entre aquíferos drenantes separados por camadas semipermeáveis, fluxo de base ao longo de corpos d'água tendo como interface semipermeável o sedimento dos respectivos leitos, drenos e evapotranspiração dependente do nível freático.

Todas as opções mencionadas para representar condições de contorno podem ser utilizadas também no interior do domínio para simular fontes ou contornos internos (por exemplo, para simular rios, lagos drenos, etc, localizados no interior da

malha). Segundo Anderson & Woessner (1992), a distinção entre as condições de contorno e condições internas, para o caso de cargas especificadas, é por vezes tênue. Como exemplo, o caso de um rio que atravessa o domínio do problema, simulado por uma condição interna totalmente penetrante, significa, na prática, o estabelecimento de dois domínios que podem ser tratados de forma independente pela condição de contorno do 3º tipo. Entretanto, caso o rio não esteja em condição inteiramente penetrante, ele será mais apropriadamente simulado no interior do domínio como condição interna atribuída como fonte.

Características e incertezas envolvendo aplicações das três condições de contorno

Após o estabelecimento do modelo conceitual, as condições de contorno a serem especificadas possuem incertezas não apenas quanto a sua intensidade ou valor, mas também quanto a sua distribuição espacial. Assim, é preferível utilizar as condições de contorno físicas visíveis, como extensão de corpos d'água, afloramentos impermeáveis etc. Esses contornos físicos são mais facilmente especificados espacialmente e as correspondentes inferências quantitativas feitas pelas condições de contorno hidráulicas menos sujeitas a erros. As demais condições de contorno, como os fluxos do sistema sinalizados pela topografia, são características transitórias que podem variar localmente ou mesmo desaparecer completamente com a variação de condições hidrológicas, embora os divisores de aquíferos regionais sejam, em geral, mais permanentes que os demais contornos hidráulicos (Zheng *et al.* 1988).

Ressalvas são feitas à simulação de rios em modelos regionais utilizando a condição de contorno de 1º tipo, como no trabalho de Jorgensen (1989), no qual tal procedimento levou a erros significativos na determinação de cargas hidráulicas nas zonas vizinhas aos rios.

Apesar de um modelo conceitual, ocasionalmente, poder ser inteiramente especificado por condições de 2º tipo (ver modelo representado pela Figura 2 (a), ignorando-se a condição de contorno em "P"), esse procedimento inviabiliza a unicidade na solução das equações diferenciais governantes. De forma mais direta, significa que a solução do problema estacionário fica sem uma referência de elevação para o cálculo dos valores de carga hidráulica, sendo necessário pelo menos um ponto de contorno com a condição de carga especificada.

Para a simulação de corpos d'água parcialmente penetrantes pode-se usar a condição de

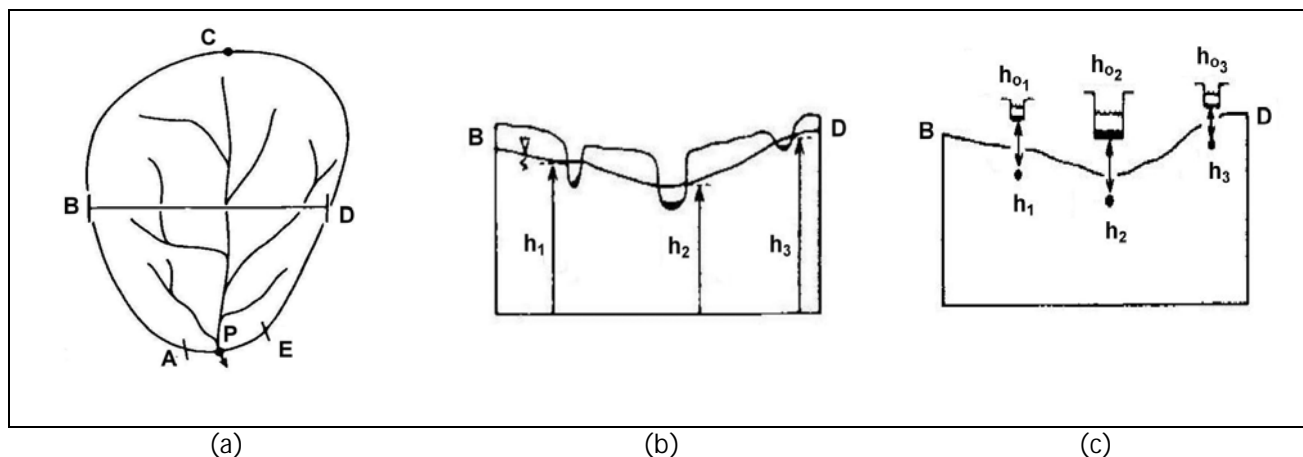


Figura 2 - Condições de contorno de um aquífero na bacia:

- (a) A bacia de um aquífero delimitada pelo perímetro ABCDE, coincidente com o divisor de águas do aquífero, ao longo do qual é especificada a condição de contorno de fluxo nulo. No trecho AE é aplicada a condição de fluxo especificado de saída do aquífero, e em P pode ser utilizada a condição de carga especificada no rio.
- (b) Aplicação da condição de carga especificada coincidente com o nível dos rios (seção transversal BD da bacia).
- (c) Aplicação da condição de fluxo dependente da carga para representar o efeito de drenança nos rios parcialmente penetrantes (seção transversal BD da bacia).

contorno de carga-dependente, *leakage* (equação 0). Esta opção, entretanto, requer a atribuição da característica hidráulica de cada trecho ao longo do corpo d'água, além da especificação dos respectivos valores de carga hidráulica da fonte, para cada ponto da malha. Nos casos em que se pode utilizar ambas as condições de contorno, apesar da aparente vantagem da condição de 1º tipo em relação à de 3º tipo, a melhor escolha só é estabelecida após a calibração do modelo.

Aplicação de condições iniciais

As condições iniciais constituem o segundo grupo de condições auxiliares a serem definidas durante o procedimento de construção de modelos transientes as quais, igualmente às condições de contorno, estão associadas a incertezas. As condições iniciais são representadas pela distribuição de carga hidráulica para todo o sistema no início da simulação e fornecem um cenário do estado estacionário calibrado do aquífero, servindo como referência inicial à evolução das simulações transientes. Segundo Franke *et al.* (1987), a relevância da qualidade destes dados calibrados é de que o modelo hidrológico e seus parâmetros estarão consistentes entre si e a resposta do modelo nos primeiros intervalos de tempo refletirá corretamente a propagação das tensões hidrológicas. Por outro lado, um aspecto a se considerar é quanto ao nível de interação entre

as tensões hidrológicas no domínio do aquífero e as condições de contorno estabelecidas inicialmente e consideradas constantes num período de tempo. Ao longo do período de simulação, deve-se verificar as possíveis mudanças no fluxo ou cargas nas seções, tidas como contorno do aquífero modelado, devido à ação de tensões hidrológicas, como o bombeamento de poços. Essas tensões impostas ao sistema podem causar, p.ex., um deslocamento no divisor de águas do aquífero efetivamente considerado pelo modelo. Segundo Anderson & Woessner (1992), nestes casos, a solução pode apresentar grandes diferenças se o contorno é fixado na antiga posição do divisor de águas do aquífero a partir da imposição da condição de fluxo nulo (condição de 2º tipo). De modo geral, isso vale para os casos nos quais as tensões hidrológicas internas se propagam até os contornos. Uma sugestão apresentada por Marsily (1986) para avaliar essa influência, é checar as variações das taxas de fluxo através dos contornos

com condições de carga especificada, $\frac{\partial q}{\partial t} \Big|_{h_0}$, e checar as variações temporais de carga nos contornos

com condições de fluxo especificado, $\frac{\partial h}{\partial t} \Big|_{q_0}$. As

variações devem indicar valores nulos ou muito baixos ao longo de todo o período simulado, compro-

vando a manutenção das características gerais do sistema.

Erros de discretização geométrica e temporal

A solução numérica não gera soluções contínuas como as analíticas, mas sim valores para pontos determinados. Trata-se, portanto, de uma etapa fundamental na solução numérica de um problema específico a escolha dos pontos para os quais a solução será obtida. Isso é determinado pela discretização do domínio do modelo representado pela malha. O ajuste deficiente entre partes do domínio modelado e a malha adotada impõem dificuldades maiores quando da atribuição de valores, p.ex. fluxo, aos respectivos pontos desse domínio. Nesse processo, é comum a determinação de valores em pontos da malha a partir da interpolação de valores vizinhos. Como exemplo, a Figura 3 ilustra uma malha comumente utilizada no MDF, onde a fronteira F não está alinhada às linhas $x = \text{cte}$ e $y = \text{cte}$ do sistema de coordenadas cartesianas; o cálculo da componente de fluxo q normal à F no ponto P exige interpolações, tendo como informação valores de pontos adjacentes a P , introduzindo imprecisões que podem diminuir a qualidade da solução numérica.

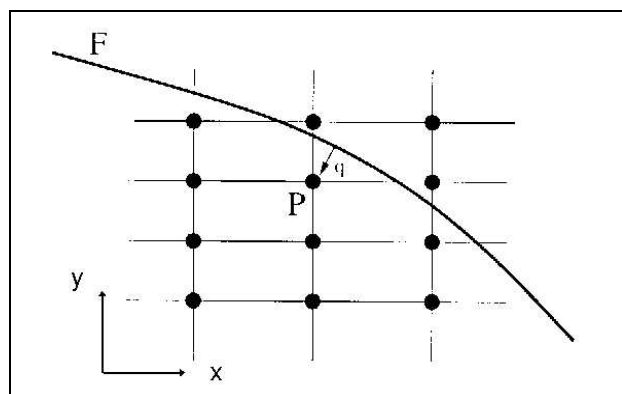


Figura 3 - Fronteira não alinhada ao sistema de coordenadas

O refinamento da malha é, em geral, o procedimento comumente utilizado para minimizar este problema, com o respectivo aumento do custo computacional da solução numérica. Entretanto, em se tratando de um domínio com contorno bastante irregular, o MEF permite o uso de *malhas não-estruturadas* estabelecendo um melhor ajuste entre a malha e o domínio. As *malhas estruturadas* introduzem dificuldades quando a geometria do problema apresenta apêndices que não permitem que o do-

mínio físico seja mapeado em um único bloco. A Figura 4 mostra exemplos dessas malhas que, em uma rápida definição, podem ser descritas por possuírem os vértices, cada qual, com vizinhança local isomorfa - caso de *malhas estruturadas* (Figura 4b). Em duas dimensões corresponde, na maior parte dos casos, a uma grade quadrada deformada por alguma transformação de coordenadas. As malhas *não-estruturadas* (Figura 4a) podem apresentar vizinhos locais arbitrariamente variados. Em geral, correspondem a triangulações com vizinhança local não-isomórfica.

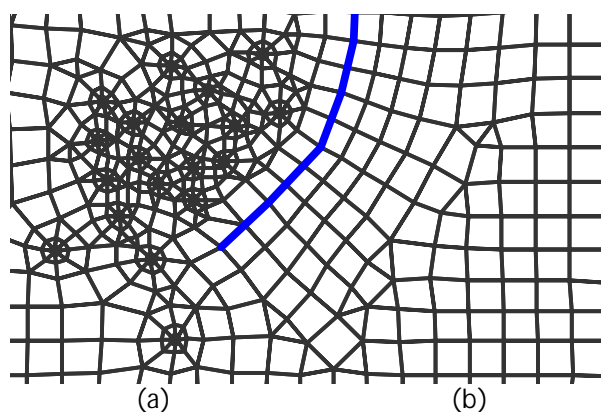


Figura 4 - Exemplo de malha bi-dimensional: (a) não-estruturada e (b) estruturada

A escolha da malha também pode influir decisivamente na qualidade da solução numérica. Um exemplo disto é a utilização de dois pontos muito próximos numa malha onde a distância média entre os pontos é significativamente maior, podendo induzir a erros significativos na solução final do problema. Matematicamente, isso é interpretado como a inclusão de uma quase-singularidade na matriz (dois pontos com mesma equação), dificultando a solução do sistema de equações. Este efeito ocorre, a princípio, com malhas não-estruturadas, entretanto, códigos automatizados para geração de malhas dispõem de diversas técnicas com o objetivo de minimizar a ocorrência do exemplo mencionado.

Assim como a construção da malha, a discretização do tempo pode influenciar fortemente a solução em modelos transientes. Esta discretização corresponde à escolha do intervalo de tempo, (Δt) , que separa os instantes de cada solução numérica para o conjunto total de pontos da malha. Em termos ideais, é desejável o menor espaçamento nodal

(Δx) e o menor intervalo de tempo (Δt) para que a representação numérica se aproxime melhor da representação analítica da equação diferencial governante. Na prática, entretanto, é mais viável a utilização de intervalos de tempo maiores, baseados inicialmente em critérios de estabilidade da solução numérica. A escolha de Δt pode também ser influenciada pelas necessidades específicas do código computacional a ser utilizado. Uma sugestão apresentada por Marsily (1986), aplicável ao MDF, é a de iniciar atribuindo a Δt o máximo valor para a formulação explícita (formulação menos estável que a implícita), que para a simulação bi-dimensional de um aquífero confinado, homogêneo e isotrópico vale

$$\frac{T}{S} \left[\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2} \right] \leq \frac{1}{2} \quad (4)$$

em que T e S são os parâmetros de transmissividade e armazenamento, Δx e Δy os espaçamentos da malha nas direções ortogonais x e y . Outros aspectos da modelagem, como o interesse em determinar a solução logo após o início da aplicação de tensões hidrológicas, contribuem para estabelecer o valor de Δt nas simulações. Resultados obtidos de simulações transientes que chegam próximas de situações estacionárias podem, em geral, utilizar maiores intervalos de tempo. Tal procedimento decorre da melhor aproximação entre as soluções numérica e analítica verificadas para um maior número de intervalos de tempo de simulação. Apesar dos modelos de fluxo serem pouco susceptíveis a oscilações em relação a modelos de transporte, a escolha inadequada de Δt pode provocar a obtenção de resultados com oscilações que não correspondem à realidade (Anderson & Woessner, 1992).

Considerando-se o exposto, a prudência em relação à definição de Δt sugere uma investigação a partir dos resultados obtidos da simulação desejada. O maior valor obtido de Δt , para o qual não gere variações significativas nos resultados, pode ser tomado como o melhor valor.

Erros na solução numérica

Os erros referentes à solução numérica estão associados aos processos de *aproximação numérica*, *convergência* e *arredondamento*, inerentes às técnicas numéricas de solução. Associados à aproximação numérica estão os erros incorridos no processo de representação das equações diferenciais parciais em

equações algébricas que, p.ex., no MDF representa o erro de truncamento das séries de Taylor empregadas na representação dessas equações. Nessa representação, aumentando-se a ordem de aproximação – p.ex. de $O(\Delta x)$ para $O(\Delta x)^2$ – reduz-se esses erros, entretanto, o aumento continuado da ordem não garante a melhoria da qualidade da solução numérica, uma vez que isso torna a solução numérica mais sujeita a instabilidades, a depender do grau de refinamento da discretização geométrica utilizada. Os erros de convergência são definidos como a diferença entre a solução fornecida pelos métodos numéricos iterativos e a solução exata das equações algébricas. Diminuindo-se a tolerância do critério de convergência, pode-se reduzir esses erros com o aumento do custo computacional no cálculo da solução numérica. Os erros de arredondamento, devido à representação finita dos números pelo computador, têm, contudo, seu efeito minimizado pela utilização de precisão aumentada na representação aritmética desses números, procedimento esse tornado viável, devido às atuais configurações comumente disponíveis de *hardware* dos computadores.

Aplicação de elementos de modelagem – aspectos de incerteza

Como forma de exemplificar aspectos de incerteza dos elementos que compõem os modelos de fluxo de água subterrânea é considerado o Sistema Aquífero Guarani (SAG), localizado no centro leste da América do Sul, com extensão de 1,2 milhão de km^2 , cabendo à porção brasileira 70% dessa área, localizada ao longo da Bacia do Rio Paraná (Figura 5).

Uma das principais fontes de incerteza na construção desses modelos corresponde à recarga do aquífero (Wendland et al., 2007; Rabelo e Wendland, 2009). No exemplo em questão, a recarga natural ocorre segundo dois mecanismos principais: por meio de infiltração direta das águas de chuva, na área de afloramento, e de forma retardada em parte da área confinada, por infiltração vertical (drenança) ao longo de descontinuidades das rochas do pacote confinante, onde a carga piezométrica favorece os fluxos descendentes. A disposição geral das áreas sujeitas a essas duas formas de recarga no SAG é apresentada na Figura 5. As sub-bacias nessas zonas consideradas de afloramento, contudo, apresentam comumente alguma parcela de condição mista de recarga decorrente de camadas confinantes (Corrêa, 1995). Tal condição é estabelecida pela presença intercalada de rochas confinantes, caracterizadas por rochas basálticas fraturadas da

Formação Serra Geral sobre o Aquífero Guarani, majoritariamente composto por rochas sedimentares da Formação Botucatu sobreposto à Formação Pirambóia. Contudo, fora das referidas zonas de afloramento do Aquífero Guarani encontram-se, freqüentemente, zonas onde o nível da superfície potenciométrica é superior ao topo dos reservatórios sedimentares, invertendo o fluxo. Assim, as rochas vulcânicas da Formação Serra Geral funcionam também como reservatórios, além de seu caráter de barreira hidráulica (Rosa Filho *et al.*, 2003). Considerando-se essas possibilidades de fluxo, tem-se que o comportamento hidráulico do Aquífero Guarani estabelece incertezas ainda na elaboração do modelo conceitual, devido à distribuição das referidas formações geológicas. A minimização deste problema caminha no sentido de se conhecer melhor a conexão hidráulica entre os Aquíferos Serra Geral e Guarani, estudo realizado principalmente através da aplicação de métodos hidroquímicos, isotópicos ou geofísicos (Portela Filho *et al.*, 2002).

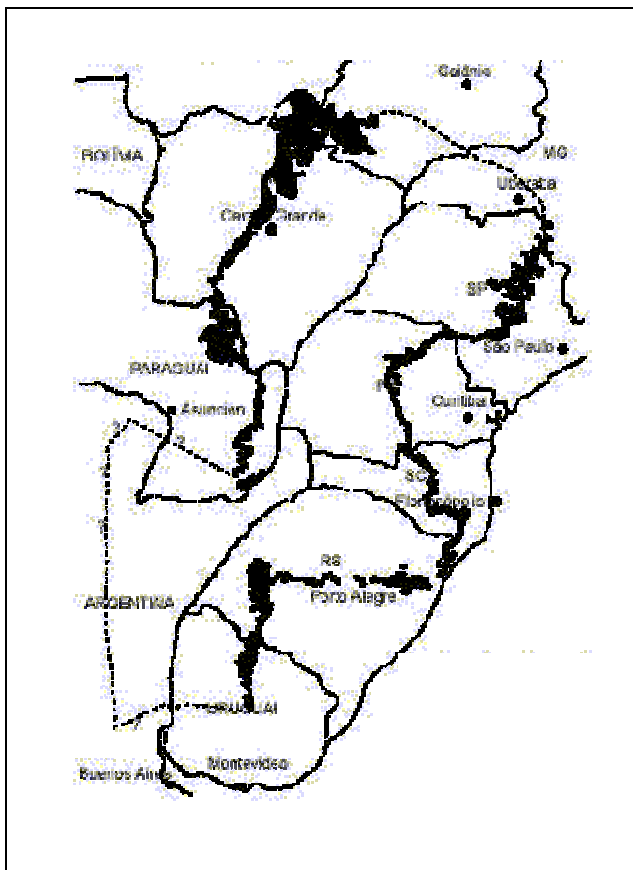


Figura 5 - Localização do Aquífero Guarani e a distribuição de suas áreas de afloramento (bordas escuras).

Qualquer que seja a ocorrência dessas formações, consideradas pelo modelo, é necessário estabelecer a distribuição dos respectivos parâmetros hidráulicos, p.ex. K , T e S . Na aplicação de modelos no SAG, parte desses dados está disponível, considerando-se o número de trabalhos nele realizados, dada a sua grande importância sócio-econômica. Entretanto, faz-se necessário dados de qualidade assegurada, comumente para fins de calibração do modelo ou estabelecimento de suas condições auxiliares. Assim, uma das formas práticas e usuais para determinação desses parâmetros é através do método Theis-Jacob, que utiliza as curvas de rebaixamento e recuperação obtidas de testes de bombeamento de poços, determinando diretamente os valores de T e S e estimando K pela relação $T=b.K$. Os valores de T e S obtidos por esse método não estão isentos de aproximações grosseiras devido aos passos de manipulação gráfica (Piuci & Diniz, 1985). Apesar dessas fontes de erro serem bastante reduzidas quando da utilização de aplicativos que automatizam a interpretação de testes de bombeamento baseados em métodos como o de Theis-Jacob, persistem ainda os erros decorrentes dos aspectos aproximativos inerentes a esses métodos, como discutido anteriormente. Esses aplicativos são comumente escolhidos e aplicados aos testes de bombeamento a partir de sua capacidade, adequação às características gerais do aquífero e às condições operacionais disponíveis ⁽¹⁾. Planilhas formatadas com o mesmo fim encontram-se disponíveis por meio eletrônico ⁽²⁾.

Os dados obtidos de S , contudo, são um indicador da ocorrência de formações com características predominantemente confinadas ou livres, auxiliando na definição ou reformulação das unidades hidroestratigráficas e do modelo conceitual. Isto é realizado a partir do conjunto de dados de S , verificando-se a aderência dos mesmos aos valores típicos de S_y ou S_z (Tabela 2 e Tabela 3).

A melhor condutividade hidráulica da Formação Botucatu em relação à Formação Pirambóia (Tabela 4), estabelece a necessidade de se estimar uma distribuição dos parâmetros hidráulicos ao longo da espessura do Aquífero Guarani através destas formações. Um valor médio para esses parâmetros é atribuído pelos modelos bi-dimensionais

⁽¹⁾ Disponível em 06/2009: <<http://www.ggsd.com/index.htm>>

⁽²⁾ Disponível em 06/2009: <http://water.usgs.gov/software/ground_water.htm>

horizontais, enquanto que para os modelos tri-dimensionais ou bi-dimensionais de perfil podem ser alocados valores variáveis. Qualquer que seja a opção pela dimensão do modelo aplicado, a simulação das características hidráulicas, dada à presença dessas formações, configura fontes de incerteza. Para uma caracterização mais adequada, é necessário levantar as características hidráulicas e estratigráficas da área de estudo. Entretanto quando os dados são muito localizados (pontuais), em comparação à área de estudo, mostram-se inadequados à simulação do Aquífero (Vives *et al.*, 2001), sendo um exemplo do processo conhecido como *scaling effect*.

Os modelos numéricos aplicados como modelos de fluxo de águas subterrâneas compõem, cada vez mais freqüentemente, a metodologia de trabalhos em hidrogeologia visando quantificar os processos dos sistemas aquíferos e prever seu comportamento a partir de cenários de interesse. Os meios para aplicar tal metodologia incluem formular adequadamente um modelo conceitual e selecionar parâmetros hidráulicos para descrever a variabilidade espacial e temporal do sistema de fluxos e do nível potenciométrico no domínio do modelo. Clasificadas aqui como fontes de incerteza associadas a informações prévias, esses elementos foram avaliados e sintetizados, bem como, indicadas complementações ao estudo de incertezas.

Tabela 4 - Propriedades hidráulicas das formações Botucatu e Pirambóia (adaptado de Araújo *et al.*, 1999)

| Variável | Formação Botucatu | Formação Pirambóia |
|--------------------------------------|-------------------|--------------------|
| Espessura (m) | 4-484 | 25-770 |
| Espessura média (m) | 138 | 139 |
| Porosidade (%) | 17-30 | 14-24 |
| Condutividade hidráulica média (m/d) | 8,7 | 1,9 |
| Transmissividade (m ² /d) | 2,4-552 | - |

Síntese e indicação de abordagens complementares

As cargas hidráulicas, fluxos e parâmetros hidráulicos contribuem com incertezas devido aos aspectos de medição ou estimativa de características hidráulicas e geológicas do aquífero. Sugestões foram propostas para melhorar a qualidade dos conjuntos de dados a serem utilizados pelos modelos e destacada a maior variabilidade das estimativas de fluxo, em especial, aquelas relacionadas à recarga.

Na construção dos modelos conceituais foram levantadas as fontes de erro mais comuns na definição das unidades hidroestratigráficas, na preparação do balanço hídrico e na definição do sistema de fluxo, sendo destacada a simplificação de estruturas estratigráficas devido ao desconhecimento de parâmetros hidráulicos das correspondentes camadas. A melhoria da qualidade do balanço hídrico e da definição, *a priori*, da direção do sistema de fluxos foi relacionada a dois aspectos: à priorização de componentes de fluxo de menor incerteza e à utilização de técnicas auxiliares - como as que processam análises físico-químicas da água.

No desenvolvimento do modelo numérico foram discutidas as incertezas referentes à aplicação de condições auxiliares, erros decorrentes da discretização geométrica e temporal do modelo, bem como de sua solução numérica. Características e restrições na aplicação de condições de contorno foram avaliadas, indicando a diminuição de incertezas na aplicação das mesmas quando priorizadas sua utilização sobre contornos visíveis, como corpos d'água e afloramentos, em relação aos contornos mais susceptíveis a variações hidrológicas. Ao longo das simulações transientes, tensões hidrológicas, como bombeamentos de poços, podem alterar condições de contorno e comprometer significativamente os resultados, sendo sugeridos procedimentos avaliadores desse efeito. Na discretização das malhas foram avaliadas a qualidade de sua distribuição e a capacidade de representação dos domínios, bem como sua contribuição no esforço computacional para a obtenção da solução numérica. A avaliação da qualidade da discretização temporal sugere o maior incremento de tempo, para o qual variações significativas na solução numérica não sejam geradas.

Abordagens complementares a serem investigadas

De modo complementar, a atribuição de parâmetros ao modelo de fluxo pode ter sua qualidade aumentada a partir da utilização de técnicas geoestatísticas. Dentre elas, a técnica de interpolação, *kriging*, é a mais utilizada como forma de estimar o valor de parâmetros hidráulicos para além dos locais de medição, bem como quantificar a incerteza associada a esse conjunto de dados e avaliar seu grau de anisotropia. Todos esses procedimentos são feitos a partir da análise de variância dos referidos dados. A subdivisão da hidrologia que utiliza a geoestatística com abordagem probabilística, também conhecida como hidrogeologia estocástica, permite investigar o

efeito da incerteza do conjunto de dados nas predições do modelo.

O sucesso de um modelo é avaliado principalmente pela qualidade de sua calibração, determinando o 'melhor' conjunto de parâmetros hidráulicos para uma definição de modelo conceitual. A calibração automática feita por aplicativos como o PEST (2009), contudo, em muitos casos, leva a mais de um conjunto de parâmetros que reproduz valores observados. O uso de *funções objetivo* tem sido implementado nesses aplicativos, buscando minimizar as diferenças entre os dados gerados pelo modelo e os dados de campo.

REFERÊNCIAS

- ANDERSON, M. P.; WOESSNER, W. W. 1992. *Applied groundwater modeling – simulation of flow and advective transport*. San Diego, USA: Academic Press. 381 p.
- ARAÚJO, L. M.; FRANÇA, A. B.; POTTER, P. E. 1999. Hydrogeology of the Mercosul Aquifer System in the Paraná and Chaco-Paraná Basins, South America, and comparison with the Navajo-Nugget Aquifer System, USA. *Hydrogeology Journal*. v. 7, p. 317-336.
- ARNOLD, J. G.; ALLEN, P. M.; MUTTIAH, R.; BERNHARDT, G. 1995. *Automated base flow separation and recession analysis techniques*. *Ground Water*. v. 33, p. 1010-1018.
- BEAR, J. 1979. *Hydraulics of Groundwater*. New York: McGraw-Hill. 569 p.
- BOUR, O.; DAVY, P. 1998. *On the connectivity of three-dimensional fault networks*. *Water Resources Research*. v. 34, p. 2611-2622.
- CEY, E. E.; RUDOLPH, D. L.; PARKING, G. W.; ARAVENA, R. 1998. *Quantifying groundwater discharge to a small perennial stream in Southern Ontario, Canada*. *Journal of Hydrology*. v. 210, p. 21-37.
- CHERKAUER, D.; McBRIDE, J. 1988. *A Remotely-operated seepage meter for use in large lakes and rivers*. *Ground Water*. v. 26, p. 165-177.
- de MARSILY, G. 1986. *Quantitative Hydrogeology*. Acad. Press, 440 p.
- CORRÊA, U. M. P. 1995. *Estudo das Águas Subterrâneas das Bacias Hidrográficas dos Rios Jacaré-Guaçu e Jacaré-Pepira no Estado de São Paulo*. Dissertação de Mestrado, EESC-USP. 2 v., 107 p.
- de VRIES, J. J.; SIMMERS, I. 2002. *Groundwater recharge: an overview of processes and challenges*. *Hydrogeology Journal*. v. 10, p. 5-17.
- DOMENICO, P. A. 1972. *Concepts and Models in Groundwater Hydrology*. New York: McGraw-Hill. 405 p.
- FRANKE, O. L.; REILLY, T. E.; BENNETT, G. D. 1987. *Definition of boundary and initial conditions in the analysis of saturated ground-water flow systems; an introduction*. US Geological Survey, Techniques of Water-Resources Investigation. v. 5, 15 p.
- GELHAR, L. W. 1986. *Stochastic subsurface hydrology from theory to applications*. *Water Resources Research*. v. 22, p. 135S-145S.
- HEATH, R. C. 1983. *Basic ground-water hydrology*. US Geological Survey, Water Supply Paper 2220. 84 p.
- JORGENSEN, D. G. 1989. Accounting for intracell flow in models with emphasis on water-table recharge and stream-aquifer interaction – Part 1, problems and concepts. *Water Resources Research*. v. 25, p. 669-676.
- KRABBENHOFT, D. P.; ANDERSON, M. P.; BOESER, C. J. 1990. Estimating ground-water exchange with lakes. 2. Calibration of three-dimensional, solute transport model to a stable isotope plume. *Water Resources Research*. v. 26, p. 2455-2462.
- KRISHNAMURTHI, N.; SUNADA, D. K.; LONGENBAUGH, R. A. 1977. *Mathematical modeling of natural groundwater recharge*. *Water Resources Research*. v. 13, p. 720-724.
- MEIER, P. M.; CARRERA, J.; SANCHEZ-VILA, X. 1998. An evaluation of Jacob's method for the interpretation of pumping tests in heterogeneous formations. *Water Resources Research*. v. 34, p. 1011-1025.
- MONTENEGRO, S. M. G. L.; MONTENEGRO, A. A. A.; MACKAY, R. 1999. *Caracterização da variabilidade espacial de parâmetros hidráulicos em solos aluviais no Estado de Pernambuco*. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*. v. 4, n. 2, p. 3-20.
- MORRIS, D. A.; JOHNSON, A. I. 1967. *Summary of hydrology and physical properties of rock and soil materials*. US Geological Survey, Water Supply Paper 1839. 13 p.
- NATHAN, R. J.; McMAHON, T. A. 1990. *Evaluation of automated techniques for base flow and recession analysis*. *Water Resources Research*. v. 26, p. 1465-1473.
- NEUMAN, S. P. 1979. *Perspective on "delayed yield"*. *Water Resources Research*. v. 15, p. 899-908.
- PEST. U.S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. Disponível em: <<http://www.sspa.com/PEST/>>. Acesso em: 10 de junho de 2009
- PIUCI, J.; DINIZ, H. N. 1985. *Conhecimento do Aquífero Botucatu na Cidade de Araraquara – SP*. *Revista do Instituto Geológico*. v. 6, p. 23-44.
- PORTELA FILHO, C. V.; FERREIRA, F. J. F.; ROSA FILHO, E. F.; BUNCHMANN FILHO, A. C.; ROSTIROLLA, S. P. 2002. *Estudo preliminar da conexão entre os Aquíferos Serra Geral e Guarani com base em dados*

- aeromagnetométricos e hidroquímicos. In: XII Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas, Florianópolis - SC. Publicação em CD-ROM.
- RABELO, J. L.; WENDLAND, E. Assessment of groundwater recharge and water fluxes of the Guarani Aquifer System. *Hydrogeology Journal*, v. 17, p. 1733-1748, 2009.
- ROSA FILHO, E. F.; HINDI, E. C.; ROSTIROLLA, S. P.; FERREIRA, F. J. F.; BITTENCOURT, A. V.L. 2003. *Sistema Aquífero Guarani – Considerações preliminares sobre o Arco de Ponta Grossa no fluxo das águas subterrâneas*. *Águas Subterrâneas*. n. 17, p. 91-111.
- STEENHUIS, T. S.; JACKSON, C. D.; KUNG, S. K. J.; BRUTSAERT, W. 1985. *Measurement of groundwater recharge on Eastern Long Island*. *Journal of Hydrology*. v. 79, p. 145-169.
- STOERTZ, M. W.; BRADBURY, K. R. 1989. *Mapping recharge areas using a ground-water flow model – a case study*. *Ground Water*. v. 27, p. 220-229.
- SWENSON, F. A. 1968. *New theory of recharge to the artesian basin of the Dakotas*. *Geological Society of America Bull.* v. 79, p. 163-182.
- VIVES, L.; CAMPOS, H.; CANDELA, L.; GUARRACINO, L. 2001. *Modelación Del Acuífero Guarani*. *Boletín Geológico y Minero*. v. 112, p. 51-64.
- WENDLAND, E. C.; BARRETO, C. E. A. G.; GOMES, L. H. Water balance in the Guarani Aquifer outcrop zone based on hydrogeologic monitoring. *Journal of Hydrology* 342, p. 261-269, 2007.
- ZHENG, C.; WANG, H. F.; ANDERSON, M. P.; BRADBURY, K. R. 1988. *Analysis of interceptor ditches for control of groundwater pollution*. *Journal of Hydrology*. v. 98, p. 67-81.

tainly were discussed in the context of the Guarani Aquifer System (GAS).

Key-words: sources of error, initial and contour conditions, grid.

Uncertainties in Groundwater Flux Models

ABSTRACT

Groundwater models are increasingly used as the methodology to quantify physical processes in aquifers and to estimate behavior in different scenarios. The basic theory includes formulation of the conceptual model and definition of hydraulic parameters in order to describe the spatial and temporal variation of flux and potentiometric head in the domain. In this work the most common errors in the definition of hydrostratigraphic units, preparation of water balance and definition of the flux system were described. In numerical model development, uncertainties concerning boundary condition definition, geometric and temporal discretization, as well as numerical solution of the governing equations were presented. Examples of sources of uncer-