

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE FLUXO EM AQÜÍFEROS COM ANÁLISE TRIDIMENSIONAL

Jaime J. S. P. Cabral, José Jeferson do Rêgo Silva e Múcio Valença Virães

Departamento de Engenharia Civil - UFPE
50740-530 Recife, PE - Fax (81) 271-8219
44jjspc@npd.ufpe.br, jjrs@npd.ufpe.br

RESUMO

Modelos tridimensionais aplicados à água subterrânea vêm sendo desenvolvidos em diversos países e a tendência é substituir gradativamente os modelos bidimensionais. Os métodos de obtenção de dados no campo vêm sendo aperfeiçoados de forma a permitir um melhor conhecimento das características físicas e geométricas dos aquíferos. Por outro lado os microcomputadores continuam evoluindo na sua capacidade de armazenamento e na velocidade de processamento, possibilitando a realização de modelagem acurada tridimensional com grande rapidez.

O método de elementos de contorno, também chamado de método das equações integrais, surgiu no fim da década de 70 e tem-se mostrado um poderoso instrumento de análise de diversos problemas de engenharia. Aplica-se uma transformação às equações diferenciais num domínio, de modo a se obter uma formulação integral no contorno do domínio.

No presente trabalho é mostrada a formulação matemática e são apresentadas diversas aplicações para casos de aquíferos confinados e aquíferos semiconfinados. O método de elementos de contorno mostrou-se adequado para representar bem a forma das fronteiras do aquífero, exigiu um número bem menor de pontos funcionais (incógnitas) e os resultados são bastante precisos.

INTRODUÇÃO

A modelagem computacional do escoamento subterrâneo vem sendo usada cada vez mais para a tomada de decisões no gerenciamento dos recursos hídricos do subsolo. Para aquíferos regionais, o mais comum é utilizar modelos bidimensionais, em que a dimensão vertical é desprezada utilizando-se a aproximação de Dupuit, que apresenta resultados satisfatórios nos casos em que as componentes verticais de escoamento não são significativas.

No entanto, em diversos casos não é possível desprezar a dimensão vertical e as equações que representam os processos físicos de escoamento e transporte nos aquíferos devem ser utilizadas na forma tridimensional. Isto permite realizar análises mais complexas dos lençóis subterrâneos e expande a capacidade do hidrólogo e do hidrogeólogo, de entender e gerenciar os recursos hídricos subsuperficiais.

Modelos tridimensionais aplicados a água subterrânea vêm sendo desenvolvidos em diversos países e a tendência aparente é substituir gradativamente os modelos bidimensionais. Os métodos de obtenção de dados no campo vêm sendo aperfeiçoados de forma a permitir um melhor conhecimento das características físicas e geométricas dos aquíferos. Por outro lado os microcomputadores continuam evoluindo na sua capacidade de armazenamento e na velocidade de processamento, possibilitando a realização de modelagem precisa tridimensional com grande rapidez.

McDonald & Harbaugh, do U. S. Geological Survey (1984) apresentaram um modelo 3D para água subterrânea utilizando Diferenças Finitas. Mascarenhas e Nascimento (1997) apresentaram um modelo pseudobidimensional utilizando um esquema de células para a previsão do movimento do lençol freático. Outros autores têm apresentado métodos similares para análise do fluxo subterrâneo utilizando diferentes técnicas numéricas. No presente trabalho é descrita uma forma de implementação computacional de formulação a partir das equações integrais do escoamento (Cabral, 1995).

O método de elementos de contorno, também chamado de método das equações integrais, começou a ser aplicado na engenharia no fim da década de 70 e tem-se mostrado um poderoso instrumento de análise de diversos problemas. Aplica-se uma transformação às equações diferenciais num domínio, de modo a se obter uma formulação integral no contorno do domínio.

Uma das vantagens do método sobre os outros processos consiste na redução da quantidade de dados necessários para resolver o problema em estudo, além de, em geral, apresentar uma melhor precisão numérica dos resultados.

A melhoria da precisão dos resultados é particularmente importante quando se necessita das derivadas das variáveis. Outros processos,

como o Método das Diferenças Finitas e Método dos Elementos Finitos, calculam de início só o valor das variáveis. Isto acarreta um erro relativamente grande no cálculo das derivadas, enquanto que no Método de Elementos de Contorno já se calculam diretamente o valor das variáveis e suas derivadas.

O Método de Elementos de Contorno apresenta ainda, vantagens na simulação numérica de superfícies livres, interfaces móveis, domínio infinito e problemas com singularidades.

A formulação em termos de equações integrais reduz a dimensão do problema em uma unidade, restringindo a discretização ao contorno do domínio estudado, o que reduz significativamente a massa de dados necessária a este tipo de análise. Vantagens ainda como: maior precisão nos valores obtidos nos pontos internos, tratamento de domínios infinitos modelando apenas o contorno interno e a possibilidade de empregar elementos contínuos e descontínuos numa mesma malha são inerentes aos métodos de equações integrais.

Como em qualquer outra atividade, é importante ter em mente o que se pretende com a modelagem antes do início dos trabalhos, para escolher adequadamente os modelos a serem utilizados e investir tempo e recursos compatíveis com o fim que se deseja. A presente formulação pode ser uma ferramenta útil em diversos casos para ajudar o hidrólogo ou hidrogeólogo nas suas atividades de avaliação, projeto e planejamento dos recursos hídricos subterrâneos.

FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

A distribuição de um potencial ϕ em um meio tridimensional de domínio Ω e superfície S , homogêneo e isotrópico é governada pela equação de Poisson:

$$\nabla^2 \phi(x) + b(x) = 0, \forall x \in \Omega \quad (1)$$

onde a função $b(x)$ indica a presença de fontes que representam poços de bombeamento ou recarga, expressa na seguinte forma:

$$b(x) = Q(x)/K \quad (2)$$

sendo $Q(x)$ a vazão e K a condutividade hidráulica.

No caso de ausência de fontes ($b(x) = 0$) a equação governante, portanto, se reduz à equação de Laplace indicada a seguir:

$$\nabla^2 \phi(x) = 0, \forall x \in \Omega \quad (3)$$

As condições de contorno para a solução das equações diferenciais (1) e (3) podem ser dos seguintes tipos:

Condição de Dirichlet ou essencial:
Potencial prescrito:

$$\phi(x) = \bar{\phi} \quad (4a)$$

Condição de Neumann ou natural:
Fluxo prescrito:

$$\partial \phi(x) / \partial n_y = \bar{\partial \phi(x) / \partial n_y} = \bar{q} \quad (4b)$$

Condição de Robin ou mista:
Relação potencial/fluxo prescrita:

$$a.\phi + b.q = c \quad (4c)$$

em que $\bar{\phi}$, \bar{q} , a , b e c são funções conhecidas. Observar que as duas primeiras condições de contorno são casos especiais da última, onde $b = 0$ e $a = 0$, respectivamente.

A equação de Poisson pode ser escrita na sua forma integral para o potencial $\phi(x)$, obtida a partir da fórmula de Green da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \phi(x) = & \int_S G_0(x, y) \frac{\partial \phi(y)}{\partial n_y} dS(y) \\ & - \int_S \frac{\partial G_0(x, y)}{\partial n_y} \phi(y) dS(y) \\ & - \int_{\Omega} b(x) G_0(x, y) d\Omega \end{aligned} \quad (5)$$

para todo $x \in \Omega$, onde $G_0(x, y)$ é a solução fundamental da equação de Poisson dada por:

$$G_0(x, y) = \frac{1}{4\pi r}, r = |x - y| \quad (6)$$

Na Equação (5) n_y corresponde a normal, no ponto y , considerada positiva apontando para fora do domínio Ω , $\partial/\partial n_y$ representa a derivada normal e r é a distância do ponto fonte x ao ponto campo y .

A partir do limite quando um ponto $x \in \Omega$ tende a um ponto ξ na superfície de Ω ($\xi \in S$) e considerando as propriedades de continuidade e descontinuidade dos potenciais de camada simples e dupla respectivamente, através da superfície S , a Equação (5) se torna:

$$C(\xi)\phi(\xi) = \int_S G_0(\xi, y) \frac{\partial \phi(y)}{\partial n_y} dS(y) - \int_S \frac{\partial G_0(\xi, y)}{\partial n_y} \phi(y) dS(y) - B \quad (7)$$

para todo $\xi \in S$. Observar que na Equação (5) a integral ao longo de Ω não introduz nenhuma incógnita já que $b(x)$ é uma função conhecida, correspondendo ao bombeamento pretendido no aquífero, representado por B na Equação (7). Os núcleos dos operadores integrais acima são fracamente singulares, isto é, $O(1/r^\alpha)$ com $0 < \alpha < n$ num domínio de integração no espaço n -dimensional ($n = 2$ neste caso). A Equação (7) pode também ser empregada em problema externos levando-se em conta apenas a orientação do vetor normal, considerado sempre positivo para fora de Ω .

O coeficiente $C(\xi)$ é dado por:

$$C(\xi) = 1 + \int_S \frac{\partial G_0(\xi, y)}{\partial n_y} dS(y)$$

que está relacionado com ângulo sólido no ponto ξ . Quando a superfície S é suave no ponto ξ o valor de $C(\xi)$ é 0,5.

A solução numérica da Equação (7) fornecerá a solução do presente problema de escoamento num meio poroso em que as condições de contorno (4) na superfície podem ser aplicadas.

IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

Assumindo que a superfície S é discretizada numa série de L elementos de contorno, a Equação (7) é escrita na forma:

$$C(\xi)\phi(\xi) = \sum_{l=1}^L \int_{S_l} G_0(\xi, y) \frac{\partial \phi(y)}{\partial n_y} dS(y) - \sum_{l=1}^L \int_{S_l} \frac{\partial G_0(\xi, y)}{\partial n_y} \phi(y) dS(y) - B \quad (8)$$

Aplicando-se a Equação (8) a todos os pontos nodais ξ (método da colocação) obtém-se um sistema de equações lineares que é resolvido após a introdução das condições de contorno pertinentes ao problema.

Neste trabalho um poço foi considerado como uma fonte ou sumidouro retilíneo com intensidade distribuída linearmente, correspondente à vazão por unidade de comprimento. Para o caso de

fonte retilínea uniformemente distribuída, a integração pode ser resolvida analiticamente, obtendo-se a expressão (Telles et al., 1994):

$$\int_{\Omega} b(x) G_0(x, y) d\Omega = \frac{b(x)}{4\pi} \ln \left\{ \frac{\sqrt{l^2 + 2d \cdot l + 4r_0^2} + l + d}{\sqrt{l^2 - 2d \cdot l + 4r_0^2} - l + d} \right\} \quad (9)$$

onde l = comprimento do filtro do poço.

$$r_0 = \sqrt{a^2 + b^2 + c^2}$$

Para um poço vertical $d = 2\bar{c}$

$$\bar{a} = x_{\text{médio}} - X(x)$$

$$\bar{b} = y_{\text{médio}} - Y(x)$$

$$\bar{c} = z_{\text{médio}} - Z(x)$$

Na modelagem tridimensional, dois tipos de elementos são comumente empregados: triangular e quadrilateral. Uma propriedade particular das formulações numéricas baseadas em equações integrais é a colocação dos nós funcionais dentro dos elementos, ao invés de posicioná-los nos seus bordos. Estes elementos, chamados descontínuos por gerarem descontinuidade das funções entre os elementos, não invalidam a técnica numérica, pelo contrário, fornecem uma possibilidade de atender as condições de continuidade mais altas exigidas para funções densidades em operadores integrais com singularidades mais fortes. Elementos descontínuos facilitam não só o emprego de diferentes elementos numa mesma malha como também a modelagem de cantos, evitando descontinuidade do vetor normal nos pontos de colocação. A biblioteca de elementos disponíveis para este trabalho consiste de elementos triangular e quadrilateral, com geometria linear ou quadrática, ordem de interpolação constante, linear ou quadrática, contínuos e descontínuos em qualquer combinação. Com exceção do elemento constante, os demais elementos são isoparamétricos. Para a determinação das funções de interpolação destes elementos descontínuos é necessário portanto, definir a posição dos nós funcionais dentro do elemento. Estas funções encontram-se bem detalhadas nas referências Rêgo Silva (1994) e Rêgo Silva et al. (1993).

Após a discretização do contorno e aproximação dos valores do potencial $\phi(x)$ e do fluxo

$\partial\phi(x)/\partial n$ em cada elemento, através das funções de interpolação Φ e dos valores nodais, as integrais na Equação (8) devem ser calculadas em cada elemento S_i . Admitindo um sistema de coordenadas local (η_1, η_2) para o mapeamento dos elementos, as integrais na Equação (8) são escritas na seguinte forma:

$$g^n = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} G_0(\eta) \Phi^n(\eta) J(\eta) d\eta_1 d\eta_2 \quad (10)$$

$$h^n = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \frac{\partial G_0(\eta)}{\partial \eta_y} \Phi^n(\eta) J(\eta) d\eta_1 d\eta_2 \quad (11)$$

onde $J(\eta) = J(\eta_1, \eta_2)$ é o Jacobiano da transformação, possivelmente não linear. Considerando que o Jacobiano $J(\eta_1, \eta_2)$ e as funções de interpolação $\Phi^n(\eta_1, \eta_2)$ são regulares, o comportamento das integrais (10) e (11) depende principalmente da solução fundamental $G_0(\xi, y)$ e sua derivada normal, respectivamente. Neste caso, de fato, os núcleos dos operadores integrais acima são fracamente singulares quando o ponto campo y tende ao ponto fonte ξ .

Na integração singular as integrais (10) e (11) são então calculadas na seguinte forma:

$$g^n = \sum_{t=1}^T \int_{\theta_1}^{\theta_2} \int_0^{\rho(\theta)} G_0 \Phi^n \rho d\rho d\theta \quad (12)$$

$$h^n = \sum_{t=1}^T \int_{\theta_1}^{\theta_2} \int_0^{\rho(\theta)} \frac{\partial G_0}{\partial \eta_y} \Phi^n \rho d\rho d\theta \quad (13)$$

efetuando-se uma transformação de coordenadas polares em que o Jacobiano (ρ) elimina a singularidade fraca, onde T corresponde ao número de triângulos em que o elemento é dividido para o emprego de coordenadas polares, dependendo do seu tipo de continuidade.

No caso do elemento triangular, para a integração singular, equações análogas às Equações (10) e (11) são também empregadas, procedendo-se de forma similar. A única diferença do elemento quadrilateral é a definição da equação do contorno externo $\rho(\theta)$.

Quando as integrais (12) e (13) são regulares, ou seja, quando o ponto fonte encontra-se fora dos limites do elemento, a quadratura de Gauss é empregada conjuntamente com uma seleção automática do número de pontos de integração. Esta seleção baseia-se na distância mínima relativa do

ponto fonte ξ ao elemento campo, isto é, quanto menor esta distância maior o número de pontos de integração. Portanto, para melhorar a eficiência da integração quando o ponto fonte encontra-se muito próximo do elemento campo (integração quase-singular), emprega-se a transformação de coordenadas proposta por Telles (1987), obtendo-se uma melhor precisão com um menor número de pontos de integração.

Na integração regular o elemento triangular é mapeado num quadrilateral através da transformação de coordenadas a seguir:

$$\eta_1 = 2(\gamma_1 + \gamma_2) - 1 \quad \eta_2 = \frac{\gamma_2 - \gamma_1}{\gamma_2 + \gamma_1}$$

e vice-versa:

$$\gamma_1 = \frac{1}{4}(\eta_1 + 1)(1 - \eta_2), \quad \gamma_2 = \frac{1}{4}(\eta_1 + 1)(1 + \eta_2)$$

Esta mudança de coordenadas significa que o nó ($\gamma_1 = \gamma_2 = 0$) do elemento triangular é transformado no lado $\eta_1 = -1$ do elemento quadrilateral em que o elemento triangular é mapeado, conforme mostrado na Figura 3. Dessa forma, na integração regular sobre o elemento triangular as integrais são transformadas na forma:

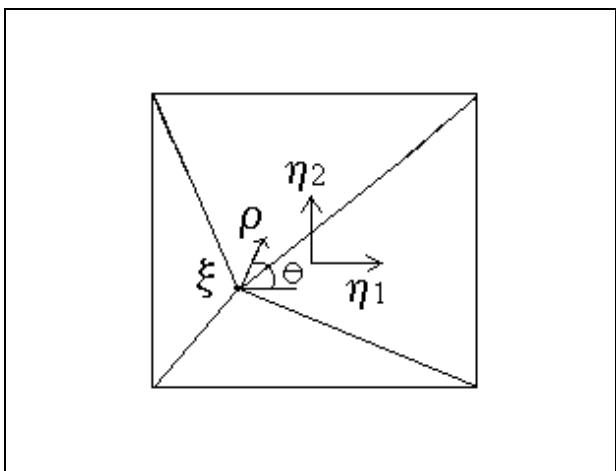
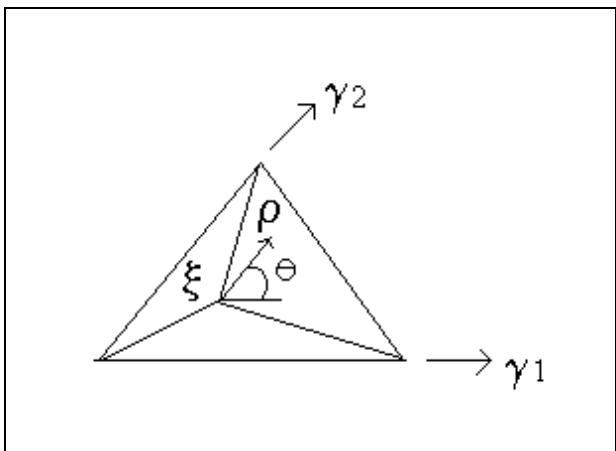
$$\int_0^{1-\gamma_2} \int_0^1 f(\gamma_1, \gamma_2) d\gamma_1 d\gamma_2 = \frac{1}{8} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f(\eta_1, \eta_2) (\eta_1 + 1) d\eta_1 d\eta_2 \quad (14)$$

O objetivo desta transformação é empregar o mesmo procedimento numérico para elementos quadrilaterais e triangulares na integração regular e quase-singular. Em ambos os casos este mapeamento tem demonstrado ser bastante eficiente.

APLICAÇÕES

Elemento filtrante

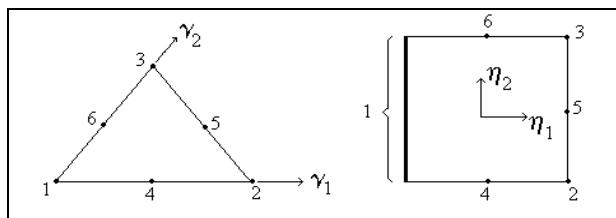
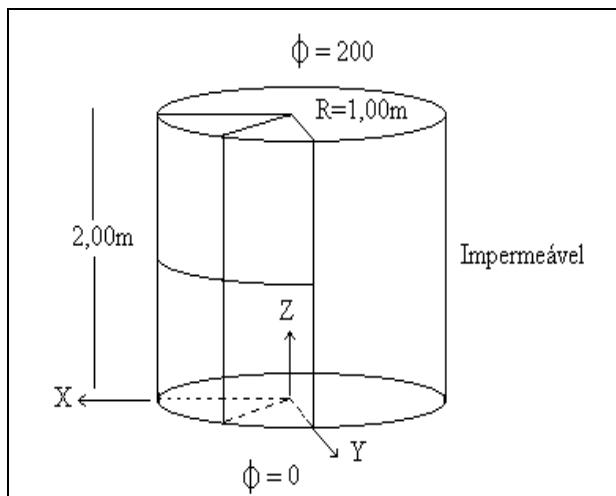
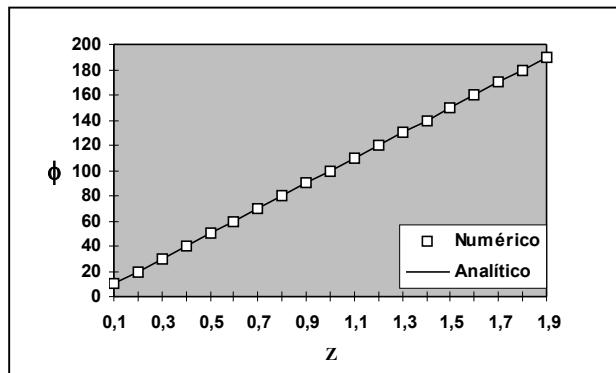
Aqui o exemplo consiste da análise do escoamento vertical em um cilindro preenchido por material poroso, que pode apresentar diversas aplicações industriais, como filtros para retenção de impurezas. Na Figura 1 está representada a geometria do problema e a malha adotada, que é composta por 8 elementos quadráticos: 4 triangulares e 4 quadrangulares, correspondendo a 51 nós funcionais.

**Figura 1. Elemento quadrilateral.****Figura 2. Elemento triangular.**

A parede lateral do cilindro foi considerada impermeável (fluxo normal igual a zero) e adotou-se um potencial hidráulico de 200,0 m numa extremidade do filtro e de 0,0 m na outra. Na Figura 5 estão indicados os valores do potencial hidráulico ao longo do eixo do cilindro.

Aquífero rectangular com dois poços simétricos

Neste exemplo é analisado um aquífero homogêneo, isotrópico e de espessura constante, confinado nas faces superior e inferior por rochas impermeáveis. Foram utilizados dois poços na posição $x = -50$ m e $x = +50$ m, sendo um poço de bombeamento e outro de recarga. A Figura 6 mostra a geometria do problema e a malha empregada, que consiste de 22 elementos quadrangulares quadráticos.

**Figura 3. Mapeamento do elemento triangular.****Figura 4. Elemento filtrante.****Figura 5. Potencial no filtro.**

Adotou-se no contorno do aquífero uma carga hidráulica de 200,0 m e considerou-se o topo e a base impermeáveis. A Figura 7 mostra os resultados obtidos para um plano na cota 25,0 metros.

Aquífero semiconfinado

Neste exemplo foi analisado um aquífero homogêneo, isotrópico, de espessura constante e com dimensões $l = 200$ m, $a = 1000$ m e $b = 1000$ m, onde na face superior possui uma

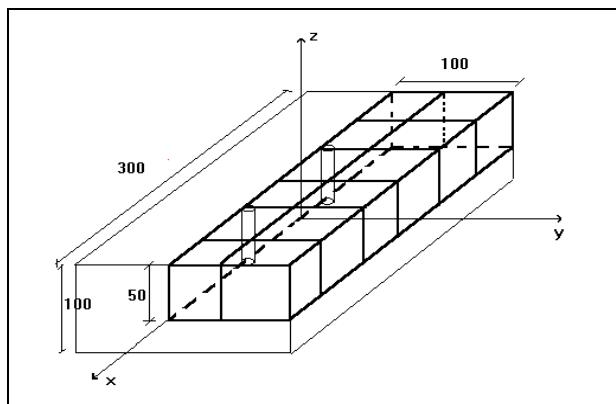


Figura 6. Aqüífero confinado com poço de injeção e de bombeamento.

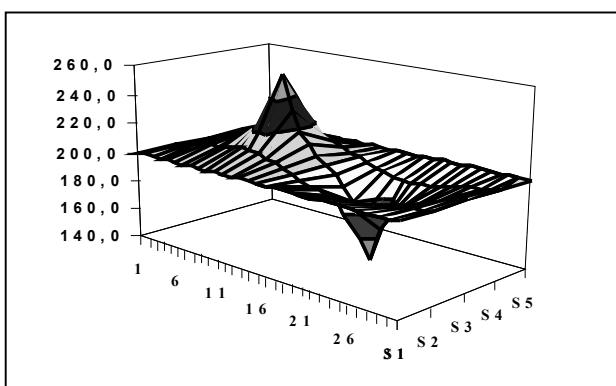


Figura 7. Carga hidráulica no aquífero.

camada semiconfinante de espessura $e = 50$ m com condutividade hidráulica $k = 10^{-06}$ m/s e confinado na face inferior e laterais (norte e sul) por rochas impermeáveis apresentando nas laterais (leste e oeste) uma carga hidráulica de $\phi_1 = 900$ m e $\phi_2 = 850$ m, respectivamente, além disso sendo alimentado por um aqüífero de carga hidráulica de $\phi_0 = 1500$ m sobre a camada semiconfinante. A Figura 8 mostra a geometria do problema, destacando a camada semiconfinante. A Figura 9 indica a malha empregada que consiste de 140 elementos quadrangulares lineares, com 677 pontos nodais.

A análise dos resultados obtidos comparados com a solução analítica correspondente é apresentada na Tabela 1. Para comparação dos resultados foi utilizada a solução analítica proposta por Bear (1979; pág. 179).

Aqüífero semiconfinado com poço

Este exemplo corresponde a um aqüífero de forma cilíndrica com condutividade hidráulica

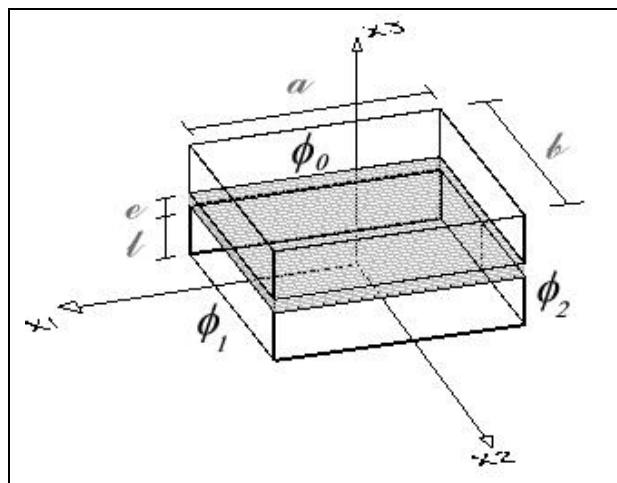


Figura 8. Geometria do problema; aqüífero semiconfinado sotoposto a um aqüífero livre, com camada semipermeável entre elas.

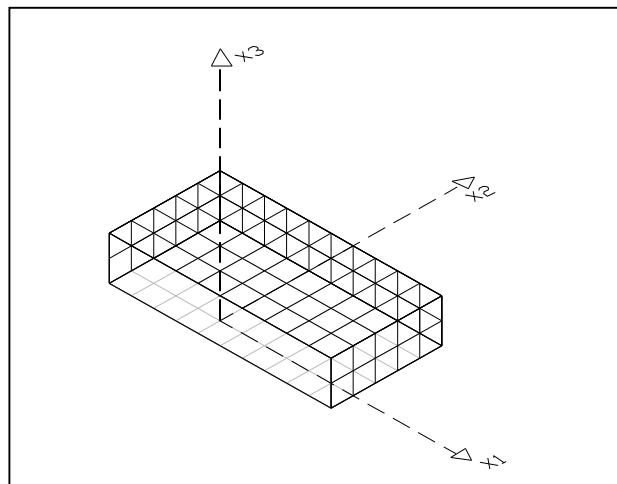


Figura 9. Malha utilizada.

$k = 10^{-04}$ m/s no qual considerou-se a existência de um poço no seu centro, conforme indicado na Figura 10. Adotou-se na face superior uma camada semiconfinante de 40 m com condutividade hidráulica $k' = 10^{-05}$ m/s, acima da qual admitiu-se um aqüífero de carga hidráulica 200 m. A face inferior do aqüífero cilíndrico foi considerada impermeável.

A Figura 10 mostra a malha empregada, que consiste de 54 elementos quadráticos sendo 4 triangulares e 50 quadrangulares. Devido a simetria do problema, apenas $\frac{1}{4}$ do aqüífero foi discretizado. A Tabela 4 mostra os resultados numéricos comparados com os resultados da fórmula analítica proposta por Bear (1979; pág. 313).

Tabela 1. Comparação entre solução analítica e numérica para pontos internos do aquífero semiconfinado.

Eixo X (m)	Analítico (m)	Numérico (m)	Erro %
-450	866,34	865,46	0,10
-400	881,10	879,92	0,13
-350	894,31	892,99	0,15
-300	906,00	904,58	0,16
-250	916,21	914,71	0,16
-200	924,96	923,39	0,17
-150	932,27	930,65	0,17
-100	938,16	936,51	0,18
-50	942,65	940,98	0,18
0	945,74	944,06	0,18
50	947,45	945,79	0,17
100	947,77	946,14	0,17
150	946,71	945,13	0,17
200	944,28	942,74	0,16
250	940,45	939,00	0,15
300	935,22	933,85	0,15
350	928,58	927,33	0,13
400	920,51	919,40	0,12
450	910,99	910,17	0,09

Tabela 2. Comparação entre solução analítica e numérica no aquífero semiconfinado com poço no centro.

Raio (m)	Analítico (m)	Numérico (m)	Erro %
1	195,69	195,86	0,09
2	196,24	196,42	0,09
4	196,79	196,97	0,09
6	197,12	197,29	0,09
8	197,34	197,52	0,09
10	197,52	197,70	0,09
20	198,07	198,25	0,09
40	198,61	198,78	0,09
60	198,91	199,08	0,09
80	199,11	199,28	0,09
100	199,26	199,42	0,08
200	199,66	199,68	0,01

ANÁLISE DE PERFORMANCE COMPUTACIONAL

Em todo método numérico, a discretização é um fator importante. A precisão dos resultados e o tempo de processamento dependem de uma malha adequada. A seguir são apresentados al-

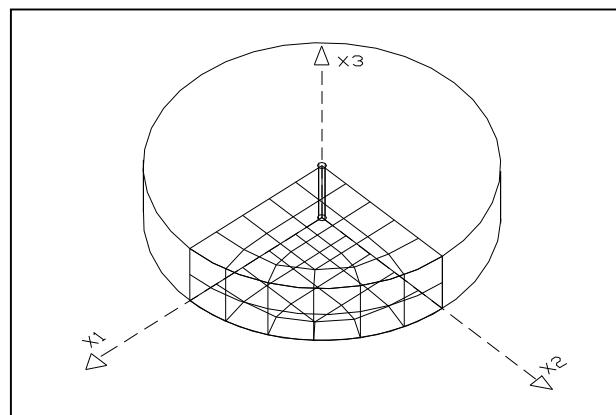


Figura 10. Malha utilizada na análise do aquífero semiconfinado com poço no centro.

guns resultados de análise de várias malhas, de precisão e dos tempos computacionais.

Foi escolhido um meio poroso, em forma de um cilindro para comparação com solução analítica conhecida. Utilizou-se um poço totalmente penetrante no meio do cilindro. Adotou-se a face superior e a face inferior como impermeáveis.

Devido a simetria do problema o programa permite discretizar apenas uma parte do meio poroso. Discretizou-se apenas um octante do cilindro. Foram utilizados 6 elementos quadráticos sendo 2 triangulares e 4 quadrangulares. A Figura 11 mostra a malha utilizada. A parede lateral do cilindro foi considerada com um potencial hidráulico de 400,0 m. Para comparação dos resultados utilizou-se a solução analítica:

$$\Delta h = \frac{Q}{2\pi T} \ln \frac{r}{r_e}$$

onde Δh é o rebaixamento, Q é a vazão de bombeamento, T é a transmissividade, r é o raio do ponto desejado e r_e é o raio do cilindro.

Como neste exemplo a carga hidráulica só varia radialmente não dependendo da altura do aquífero, resolveu-se avaliar a performance computacional do software em questão para considerações da proporção altura/largura dos aquíferos, dos elementos da malha, avaliação da precisão, tempo de processamento e refinamento da malha. Seguem-se os resultados obtidos.

Adequação da malha às condições do aquífero

Foram desenvolvidas 4 malhas semelhantes a do exemplo anterior, isto é, representando 1/8

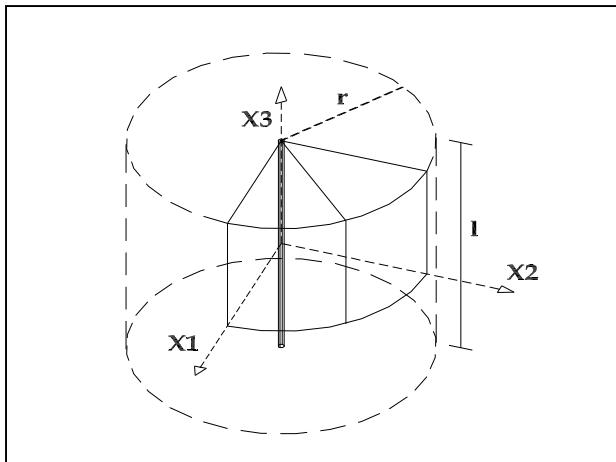


Figura 11. Malha utilizada na discretização de um octante do cilindro.

do aqüífero e pertencentes ao octante positivo. Nestas, os 19 pontos avaliados situavam-se a 1/8 do comprimento do poço padronizando assim a altura destes pontos evitando possíveis problemas de singularidade por estarem muito perto do contorno. As malhas foram numeradas por ordem de complexidade da mais grosseira para a mais refinada.

Nas malhas da Figura 12, aplicadas ao exemplo de um poço em uma ilha circular, alterou-se a altura da malha, ou seja, variou-se a altura do aqüífero e o comprimento do poço. A proporção altura/largura do aqüífero resulta também da variação das proporções dos elementos da malha. Isto então gerou a necessidade de que, para cada alteração da altura, uma nova malha teria que ser construída. Estas 4 malhas desenvolvidas serão mostradas a seguir. Os resultados obtidos encontram-se na Tabela 3 com 32 pontos na integração de Gauss.

Para aqüíferos de espessura pequena em relação às dimensões horizontais é necessário refinar a malha para evitar problemas de falta de precisão devido ao ponto fonte estar muito próximo do elemento.

Verifica-se no entanto que ao se refinar a malha o erro percentual reduz-se bastante, podendo chegar até a precisão desejada.

Estudo da proporção altura/largura do elemento

A proporção altura/largura dos elementos é de fundamental importância na construção da malha. Esta proporção influencia diretamente na precisão do resultado final.

Neste estudo da proporção do elemento tem-se como objetivo definir o limiar da altura/largura do elemento na construção de malhas no método de elemento de contorno. Como a intenção do trabalho era verificar as influências da variação da proporção do elemento, escolheu-se a malha 1 como objeto de estudo por trabalhar com um menor volume de informações.

Fez-se, então, para uma mesma largura a variação da altura do elemento. Os resultados obtidos se encontram na Tabela 4. Foi avaliado então o erro percentual local.

Da Tabela 4 podem ser obtidas duas conclusões. A primeira refere-se ao fato que até uma relação de altura/largura 1:2 os resultados foram muito bons, no entanto para uma relação altura/largura da ordem de 4 vezes ou maior o erro percentual já ficou bastante grande, de modo que tomamos como norma para cada elemento a altura, no máximo, o dobro da largura.

A outra conclusão é que para pontos internos muito próximos da superfície houve um grande erro percentual (última linha da Tabela 4). Acredita-se que este erro deve-se ao fato de se haver usado uma malha pobre com elementos muito grandes e o ponto interno ter ficado relativamente muito próximo do elemento. Esta aproximação com o contorno apresentou problemas de singularidade. Para evitar este problema recomenda-se que a distância do ponto interno até a superfície não seja menor que a dimensão do elemento.

Número de pontos de integração

A boa precisão aliada à pouca quantidade de dados na discretização do problema são vantagens do MEC.

Nas análises anteriores os resultados foram obtidos com 32 pontos na integração de Gauss, pois assim, estaríamos garantindo uma boa integração elevando a precisão dos resultados.

Aparentemente, ao aumentar o número de pontos na integração de Gauss espera-se o melhoramento na precisão dos resultados obtidos, já que cada elemento terá sua contribuição melhor avaliada. Contudo a precisão dos resultados obtidos de cada malha também varia com o número de elementos desta. Estuda-se aqui, então, o comportamento da precisão com relação ao número de elementos e ao número de pontos de integração. O gráfico da Figura 13 mostra a diferença entre a precisão entre 2 malhas (malha 2 e malha 4) com número de elementos diferentes e mostra a variação do erro com o aumento do número de pontos na integração de Gauss.

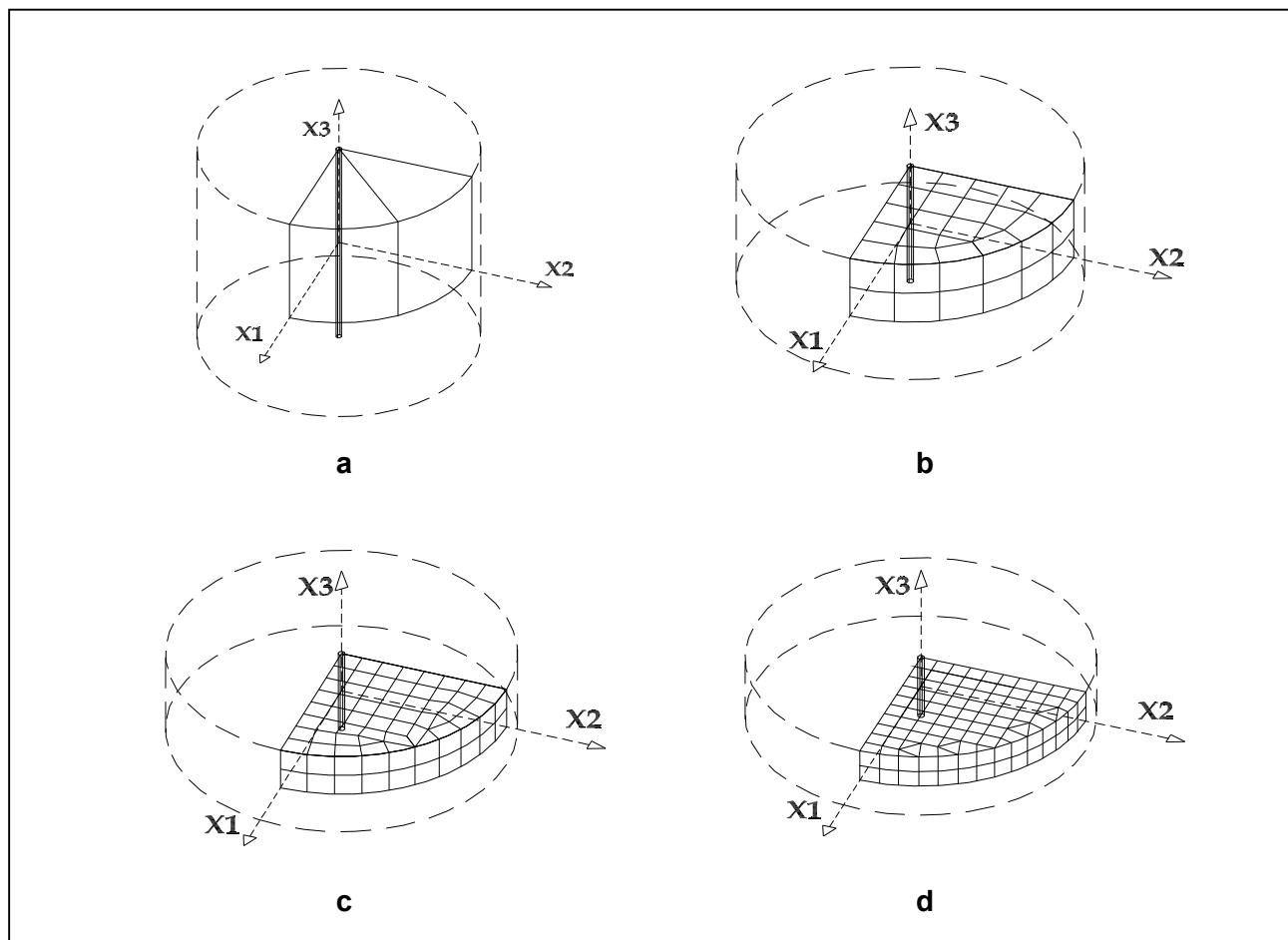


Figura 12. a. malha1, poço de 160 m, com 24 nós funcionais; b. malha2, poço de 80 m, com 162 nós funcionais; c. malha 3, poço de 50 m, com 336 nós funcionais; d. malha 4, poço de 40 m, com 634 nós funcionais.

Configurações das malhas:

Malha 4 → 110 elementos com 634 nós funcionais;

Malha 2 → 33 elementos com 162 nós funcionais.

Observa-se que o refinamento da malha (passando de 162 para 634 incógnitas) melhorou a precisão, apesar do erro percentual já ser bastante pequeno mesmo para a malha mais grosseira. Além disso, nota-se que a precisão com 4 pontos de integração já é muito boa, e praticamente não melhora com o aumento dos pontos de integração.

Tempo de processamento

O tempo de processamento em análises numéricas é um fator de influência nos custos de

um projeto. É importante então que, para um bom método, sua precisão seja suficiente para o que será aplicado, não deixando a desejar no tempo de cálculo da máquina.

Levando-se isto em consideração avaliou-se o tempo de processamento da máquina com relação aos pontos de integração de Gauss e ao número de nós funcionais.

Estas análises foram feitas com um Pentium-pro de 200 MHz com 32Mbytes de memória RAM; todas as malhas foram rodadas nas mesmas condições de processamento da máquina citada, ou seja, mesmo descanso de tela, com nenhum outro arquivo atuante, etc.

Para a avaliação do tempo de processamento *versus* número de pontos de integração foi obtido o tempo de processamento através de uma subrotina criada para o software em questão. O número de pontos de integração foi alterado no próprio software para 4,8,16,25 e 32 pontos avaliando-se as três seguintes malhas:

Tabela 3. Comparação numérico/analítico com 32 pontos na integração de Gauss para quatro malhas diferentes.

Raio (m)	Solução Analítica	Malha 1	Erro %	Malha 2	Erro %	Malha 3	Erro %	Malha 4	Erro %
5	352,32	352,97	0,18	352,42	0,03	352,32	0,00	352,29	0,01
10	363,35	364,00	0,18	363,45	0,03	363,36	0,00	363,32	0,01
15	369,81	370,44	0,17	369,89	0,02	369,81	0,00	369,77	0,01
20	374,39	375,01	0,17	374,46	0,02	374,39	0,00	374,35	0,01
25	377,94	378,55	0,16	378,00	0,02	377,94	0,00	377,91	0,01
30	380,84	381,45	0,16	380,88	0,01	380,85	0,00	380,81	0,01
35	383,29	383,90	0,16	383,31	0,01	383,30	0,00	383,27	0,01
40	385,42	386,03	0,16	385,41	0,00	385,43	0,00	385,40	0,01
45	387,29	387,91	0,16	387,25	0,01	387,30	0,00	387,27	0,00
50	388,97	389,61	0,16	388,89	0,02	388,98	0,00	388,95	0,00
55	390,49	391,15	0,17	390,36	0,03	390,50	0,00	390,47	0,00
60	391,87	392,55	0,17	391,69	0,04	391,88	0,00	391,86	0,00
65	393,14	393,86	0,18	392,93	0,06	393,16	0,00	393,14	0,00
70	394,32	395,09	0,19	394,07	0,06	394,34	0,00	394,33	0,00
75	395,42	396,25	0,21	395,16	0,07	395,44	0,00	395,44	0,00
80	396,45	397,33	0,22	396,20	0,06	396,47	0,00	396,47	0,01
85	397,41	398,53	0,28	397,21	0,05	397,43	0,00	397,44	0,01
90	398,32	402,64	1,08	398,18	0,04	398,34	0,00	398,35	0,01
95	399,18	447,20	12,03	399,05	0,03	399,13	0,01	399,20	0,00

Tabela 4. Avaliação do erro percentual para diversas relações altura/largura dos elementos para poços de comprimento L (malha 1 com 32 pontos na integração de Gauss).

Raio (m)	Sol. Analí- tica	L=160 m Malha 1	Erro %	L=120 m Malha 1	Erro %	L=80 m Malha 1	Erro %	L=40 m Malha 1	Erro %	L=20 m Malha 1	Erro %
5	352,32	352,99	0,19	352,97	0,18	351,90	0,12	362,84	2,98	408,96	16,07
10	363,35	364,02	0,18	363,99	0,18	362,90	0,12	373,60	2,82	420,66	15,77
15	369,81	370,47	0,18	370,43	0,17	369,32	0,13	379,64	2,66	423,90	14,63
20	374,39	375,03	0,17	374,99	0,16	373,89	0,13	384,88	2,80	418,91	11,89
25	377,94	378,58	0,17	378,54	0,16	377,29	0,17	390,45	3,31	469,85	24,32
30	380,84	381,47	0,17	381,45	0,16	380,21	0,17	388,83	2,10	437,78	14,95
35	383,29	383,92	0,16	383,91	0,16	382,59	0,18	390,61	1,91	411,07	7,25
40	385,42	386,05	0,16	386,02	0,16	384,85	0,15	396,67	2,92	476,44	23,62
45	387,29	387,93	0,17	387,86	0,15	386,94	0,09	396,77	2,45	427,88	10,48
50	388,97	389,62	0,17	389,52	0,14	388,60	0,09	394,03	1,30	415,30	6,77
55	390,49	391,16	0,17	391,06	0,15	389,87	0,16	397,34	1,75	454,50	16,39
60	391,87	392,57	0,18	392,51	0,16	391,07	0,20	402,09	2,61	498,93	27,32
65	393,14	393,87	0,19	393,86	0,18	392,45	0,18	403,67	2,68	473,31	20,39
70	394,32	395,10	0,20	395,12	0,20	393,99	0,09	406,01	2,96	431,14	9,34
75	395,42	396,26	0,21	396,26	0,21	395,87	0,11	411,27	4,01	521,92	31,99
80	396,45	397,34	0,22	397,35	0,23	396,83	0,10	405,36	2,25	435,06	9,74
85	397,41	398,53	0,28	398,35	0,23	397,84	0,11	403,92	1,64	448,83	12,94
90	398,32	402,64	1,08	399,47	0,29	399,35	0,26	401,79	0,87	396,96	0,34
95	399,18	447,19	12,03	401,83	0,66	407,30	2,03	402,81	0,91	408,68	2,38
Proporção largura/altura	1: 1	1: 1,25		1: 2		1: 4		1: 8			

1. Malha 4 → 110 elementos com 634 nós funcionais;
2. Malha 3 → 73 elementos com 336 nós funcionais;
3. Malha 2 → 33 elementos com 162 nós funcionais.

Como era de se esperar os gráficos mostram que, quanto maior o número de nós funcionais, maior o tempo de processamento. Na Figura 14, para 8 pontos de integração verifica-se que a malha com 162 incógnitas foi rodada em 1 min 36 seg enquanto a malha com 634 incógnitas

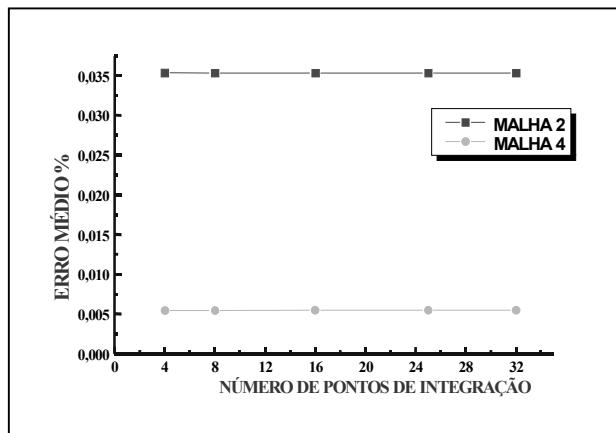


Figura 13. Relação erro percentual médio versus número de pontos na integração de Gauss para a malha 2 (33 elementos) e a malha 4 (110 elementos).

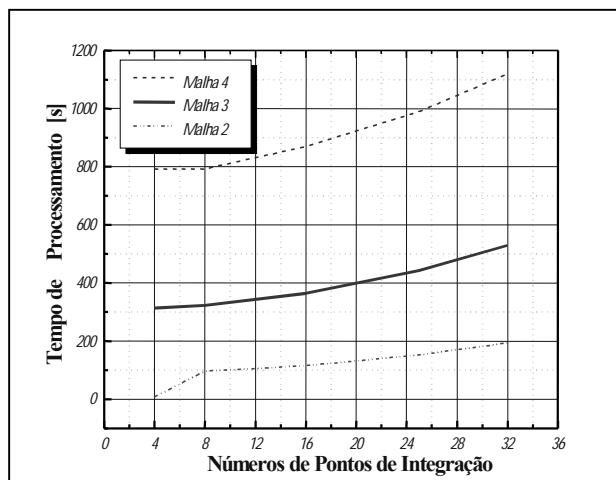


Figura 14. Gráfico do tempo de processamento versus números de pontos de integração para três diferentes malhas.

foi rodada em 13 min 11 seg, um tempo razoável para uma alta precisão. Na Figura 15 fica visível o aumento do tempo de processamento com o aumento das incógnitas, estas com precisão fornecida com 4 pontos na integração.

Refinamento de malha

Este estudo deve-se à necessidade de melhorar os resultados quando a precisão desejada não foi atingida por uma determinada malha por um problema de singularidade (dados a serem obtidos estarem muito próximos do contorno) ou, ainda, por um problema de escassez local de elementos.

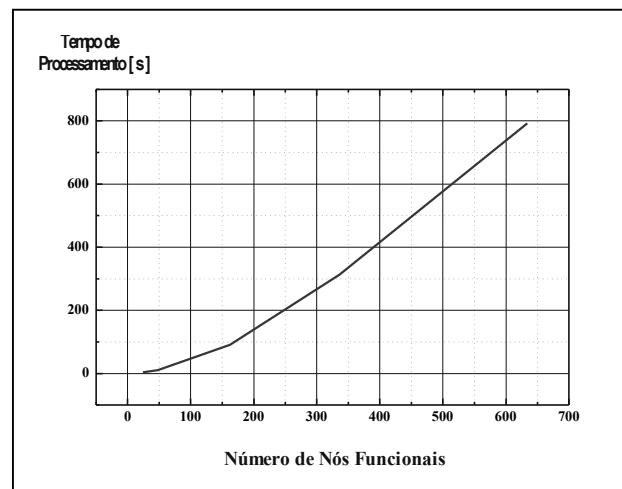


Figura 15. Gráfico do tempo de processamento versus números de nós funcionais (incógnitas) utilizando quatro pontos de integração de Gauss.

A partir dos estudos das proporções de altura/largura dos elementos, foi proposto o refinamento da malha 1 com um poço de 40 m de profundidade que possuía um erro médio percentual de 2,36%. Esta malha foi denominada malha 1A e a malha refinada foi chamada de malha 1B. A Figura 16 mostra as malhas estudadas e a Tabela 5 mostra o resultado do erro percentual obtido.

Observa-se que o refinamento de malha neste caso melhora significativamente a precisão dos resultados.

Em termos práticos, quando o refinamento da malha melhora substancialmente os resultados significa que a malha anterior era muito grosseira. Se após o refinamento os resultados não mudarem, a malha está adequada.

COMPARAÇÃO COM O MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS

Os resultados obtidos com o programa de elementos de contorno foram comparados com os resultados de diferenças finitas através do software MODFLOW do U. S. Geological Survey (McDonald & Harbaugh, 1984).

O programa MODFLOW, simula o escoamento de água subterrânea através da matriz po-rosa do subsolo utilizando o Método das Diferenças Finitas (MDF). O modelo simula o escoamento tridimensional, e o domínio de estudo é subdividido em células dispostas em linhas, colunas e camadas, onde as células ativas apresentam interconexão hidráulica com as células vizinhas.

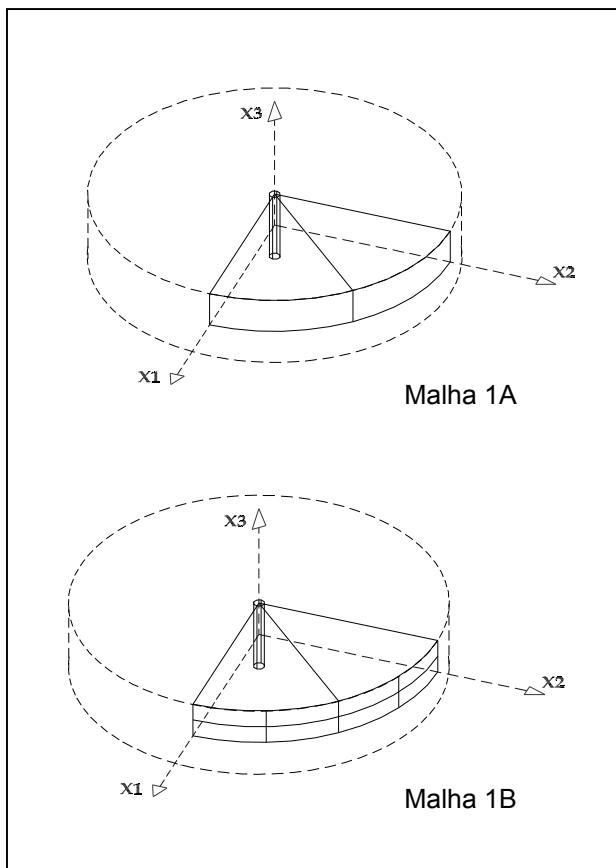


Figura 16. Malha 1A - Configuração: 2 elementos triangulares e 2 quadrangulares, poço de 40 m, com 24 nós funcionais; malha 1B - configuração: 2 elementos triangulares e 8 quadrangulares, poço de 40 m, com 54 nós funcionais.

O MODFLOW é estruturado de forma modular, onde cada módulo é relacionado com alguma característica do aqüífero, com as condições de contorno ou com a própria sequência de simulação computacional. As incógnitas são colocadas no centro da célula e o sistema de equações é resolvido por métodos iterativos.

Quanto maior o número de células no método das diferenças finitas, melhor a precisão dos resultados, porém aumenta a complexidade da malha e o tempo de processamento. As Tabelas 1 e 2 mostram resultados obtidos com diferenças finitas para malhas de 20x20, 60x60 e 180x180 (linhaXcoluna), para comparação com o método de elemento de contorno e com a solução analítica do problema. Foi utilizado o exemplo de um poço numa ilha circular cuja solução analítica foi descrita na seção anterior.

A Tabela 6 mostra a comparação dos resultados entre o MDF e o MEC. Observou-se que,

quanto maior o número de células melhor a precisão do MDF. No entanto, mesmo assim, a precisão ainda fica bem inferior à precisão obtida com o MEC.

COMENTÁRIOS FINAIS

A análise tridimensional de um aqüífero representa de maneira mais adequada as características do escoamento, evitando as hipóteses simplificadoras utilizadas na análise bidimensional. O presente artigo mostra a formulação matemática e a implementação computacional do programa tridimensional de análise de fluxo subterrâneo, utilizando o método de elemento de contorno.

No método de elementos de contorno as equações diferenciais representativas do fluxo no aqüífero são transformadas para equações integrais que se aplicam ao contorno. No caso tridimensional, as equações integrais se aplicam à superfície que envolve o meio poroso subterrâneo e esta superfície é discretizada em elementos.

A equação dos poços perfurados no aqüífero é aplicada na forma analítica, no ponto exato que se deseja, melhorando a representação computacional do problema físico.

Recomenda-se que na proporção de malhas retangulares, uma das dimensões do retângulo seja, no máximo, o dobro de outra dimensão.

O cálculo de pontos internos muito próximos à superfície pode causar problema de singularidade. Recomenda-se que a distância do ponto interno até à superfície não seja menor que a dimensão do elemento.

A utilização de 4 pontos de Gauss mostrou-se suficiente, não sendo necessário aumentar o número de pontos de integração.

Foram apresentadas diversas aplicações para casos de aqüíferos confinados e aqüíferos semiconfinados. O método de elementos de contorno mostrou-se adequado para representar a forma das fronteiras do aqüífero, exigiu um número bem menor de pontos funcionais (incógnitas) e os resultados são bastante precisos.

Comparado com o método das diferenças finitas o MEC apresentou-se muito mais preciso, mesmo com uma pequena quantidade de elementos.

Tabela 5. Avaliação do erro percentual no refinamento da malha.

Raio (M)	Solução Analítica	Poço 40 m (Malha 1A)	Erro (%)	Poço 40 m (Malha 1B)	Erro (%)
5	352,32	362,84	2,98	358,39	1,72
10	363,35	373,60	2,82	369,16	1,60
15	369,81	379,64	2,66	375,21	1,46
20	374,39	384,88	2,80	380,46	1,62
25	377,94	390,45	3,31	386,02	2,14
30	380,84	388,83	2,10	384,48	0,96
35	383,29	390,61	1,91	386,31	0,79
40	385,42	396,67	2,92	392,38	1,81
45	387,29	396,77	2,45	392,56	1,36
50	388,97	394,03	1,30	389,94	0,25
55	390,49	397,34	1,75	393,32	0,73
60	391,87	402,09	2,61	398,12	1,60
65	393,14	403,67	2,68	399,81	1,70
70	394,32	406,01	2,96	402,26	2,01
75	395,42	411,27	4,01	407,62	3,09
80	396,45	405,36	2,25	401,84	1,36
85	397,41	403,92	1,64	400,69	0,82
90	398,32	401,79	0,87	398,22	0,03
95	399,18	402,81	0,91	398,87	0,08
Erro Médio			2,36		1,32

Tabela 6. Comparaçao dos erros percentuais entre o MEC e MDF.

Distância do poço (Eixo X)	Solução Analítica	Método das diferenças finitas, número de células e erro percentual						MEC e erro percentual	
		400	Erro	3600	Erro	32400	Erro	73	Erro
5,00	352,321	369,851	4,975	358,910	1,870	354,360	0,579	352,327	0,002
15,00	369,806	376,596	1,836	371,839	0,550	370,500	0,188	369,813	0,002
25,00	377,936	381,886	1,045	379,124	0,314	378,373	0,116	377,946	0,003
35,00	383,292	386,005	0,708	384,117	0,215	383,616	0,085	383,303	0,003
45,00	387,291	389,311	0,521	387,908	0,159	387,550	0,067	387,303	0,003
55,00	390,485	392,052	0,401	390,960	0,122	390,699	0,055	390,496	0,003
65,00	393,144	394,389	0,317	393,515	0,094	393,323	0,046	393,153	0,002
75,00	395,421	396,433	0,256	395,712	0,073	395,570	0,038	395,427	0,001
85,00	397,413	398,272	0,216	397,652	0,060	397,531	0,030	397,414	0,000
95,00	399,184	400,000	0,205	399,426	0,061	399,272	0,022	399,123	0,015

REFERÊNCIAS

- BEAR, J. (1979). *Hydraulic of groundwater*, McGraw Hill, New York.
- CABRAL, J. J. S. P. (1995). Simulação Computacional de Água Subterrânea Utilizando o Mét. de Elem. de Contorno, Rev. ABAS, p11-36.
- MASCARENHAS, F. C. B. & NASCIMENTO, E. A. (1997). Modelagem Numérica de Fluxo de Água Subterrânea em Aquífero Não-Confinado, A Água em Revista – Revista Técnica e Informativa da CPRM, Ano V, novembro nº 9.
- McDONALD, M. G. & HARBAUGH, A. W. (1984). A Modular Tridimensional Finite Difference Groundwater Flow Model, U. S. Geological Survey.
- RÊGO SILVA, J. J. (1994). *Acoustic and Elastic Wave Scattering using Boundary Elements*, Computational Mechanics Publications, Southampton (UK) and Boston (USA).
- RÊGO SILVA, J. J., WROBEL, L. C. & TELLES, J. C. F. (1993). A new family of continuous/discontinuous three dimensional boundary elements with application to acoustic wave propagation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 36, p1661-1679.
- TELLES, J. C. F. (1987). A self-adaptive coordinate transformation for efficient numerical evaluation of general boundary element

integrals. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24, p959-973.
TELLES, J. C. F.; MANSUR, W. J.; WROBEL, L. C.
(1994). *Manual do Programa Procat*, relatório
COPPETEC ET - 15206, Rio de Janeiro.

Three-Dimensional Analysis of Simulated Flows in Aquifers

ABSTRACT

Three-dimensional models have been developed in several countries and in a few years they could replace the traditional two dimensional models. New technologies for data acquisition and field measurements provide better information on aquifer geometry and physical characteristics. On the other hand, the growing capacity of personal computers enables fast, accurate three-dimensional modelling.

The Boundary Elements Method (Integral Equation Method) has proved to be a powerful tool for engineering analysis. A mathematical transformation is applied to the aquifer differential equation and an integral equation is obtained.

This work presents the mathematical formulation and several applications for confined and leaky aquifers. The Boundary Elements Method is suitable to represent aquifer geometry; it requires less unknowns and results are very precise.