

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

P. A. QUENTAL – pauloamental@gmail.com (CICEGe-DCT-FCT-Universidade Nova de Lisboa)

J. A. ALMEIDA – ja@fct.unl.pt (CICEGe - DCT - FCT - Universidade Nova de Lisboa)

*Resumo:* Procede-se à implementação de uma metodologia que faz a integração otimizada entre os modelos geológicos estocásticos de alta resolução (modelos geoestatísticos) e os modelos de simulação de águas subterrâneas (modelo hidrogeológico). A solução apresentada centra-se na realização de um modelo geológico alta resolução, tirando partido dos algoritmos geoestatísticos e posterior adaptação optimal (upscaling) para uma malha de maior dimensão. Numa primeira etapa realiza-se a construção de um modelo geológico 3D das litologias por simulação sequencial da indicatriz (SSI), introduzindo 2 condicionantes, que são uma das inovações deste trabalho: i) correcção às médias locais, respeitando a complexidade geológica da área e a ocorrência vertical de litogrupos, e ii) histograma das transições entre litogrupos na direcção vertical. Na segunda etapa faz-se a adaptação / simplificação optimal do modelo. Para tal, definiram-se as principais unidades hidrogeológicas de forma conceptual. Seguidamente aplicou-se a simplificação através de uma aplicação informática inovadora que foi desenvolvida, programada e testada, baseada no método de optimização *Simulated Annealing*. São assim obtidos localmente os limites para cada uma das unidades hidrogeológicas e uma matriz de parâmetros hidráulicos (transmissividade, porosidades e coeficientes de armazenamento) que podem ser utilizados directamente no modelo de fluxo. A metodologia proposta foi implementada aos terrenos subjacentes da antiga fábrica da SPEL, no concelho do Seixal. Para além do desenvolvimento dos modelos geológico e hidrogeológico do local, foram feitos testes sintéticos do fluxo da água subterrânea no MODFLOW.

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

*Introdução:* Os métodos geoestatísticos permitem determinar com precisão a distribuição espacial e/ou temporal de determinado fenómeno natural, que evidencia correlação (SOARES, 2000). Através da determinação do comportamento de corpos geológicos, os métodos estocásticos ostentam grande importância nas ciências da Terra, nomeadamente na construção de modelos geológicos 3D. Estes modelos são uma ferramenta poderosa para a compreensão da geologia, permitindo integrar várias fontes de informação (MATIAS, 2010). Os modelos geológicos representam um salto qualitativo entre um modelo conceptual criado a partir de mapas geológicos 2D e perfis, conjugados com pontos de dados específicos como por exemplo sondagens, e um modelo conceptual que se entende robusto, baseado em métodos matemáticos complexos como os geoestatísticos. No entanto, a criação destes MG3D não se deve basear única e exclusivamente nos métodos matemáticos, apoiando-se numa análise pericial da geologia. Um modelo conceptual hidrogeológico deve respeitar este compromisso, evitando-se assim falta de compreensão entre a estrutura geológica e a sua relação com a hidrogeologia. Um dos problemas relacionados com a geração de modelos hidrogeológicos com base nos modelos geoestatísticos ou estocásticos prende-se com a realização de uma discretização pormenorizada da realidade geológica. A um modelo conceptual cujo grau de detalhe se apresente elevado, os modelos de simulação de fluxo respondem com incapacidade de cálculo. A necessidade de simplificação da realidade geológica pode levar a resultados irreais e a outputs de modelos de fluxo pouco fiáveis. É este problema que o presente trabalho se propõe ultrapassar, apresentando uma metodologia que permite a criação de um modelo geológico 3D de pormenor, propondo condicionamentos ao algoritmo de simulação, e a adaptação para modelo de fluxo. Esta adaptação é realizada através de métodos estocásticos, determinando com precisão limites entre unidades hidrogeológicas e estabelecendo os parâmetros hidráulicos das mesmas.

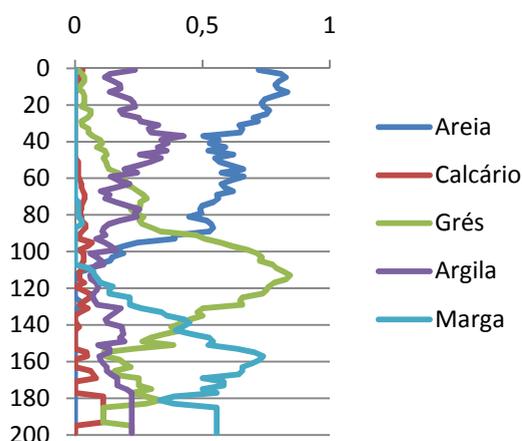
*Descrição do caso de estudo e enquadramento geológico e hidrogeológico:* A área que é objecto de estudo no presente trabalho situa-se na margem esquerda do rio Tejo, mais propriamente no concelho do Seixal, e diz respeito à zona onde, entre 1949 e 1998, a Sociedade Portuguesa de Explosivos (SPEL) desenvolveu produção de explosivos para fins militares. Durante os cerca de 50 anos de actividade, a SPEL produziu compostos orgânicos, tóxicos e potencialmente cancerígenos, entre os quais ácido sulfúrico, ácido nítrico e nitratos de tolueno, trinitrotolueno (TNT) e dinitrotolueno (DNT). A água utilizada para esta actividade foi depositada em lagoas escavadas nas areias não impermeabilizadas (AMARAL et al., 2009). As águas destes aquíferos têm diversos fins, destacando-se a utilização para consumo humano, agricultura e indústria. O principal malefício para a Saúde Pública centra-se na

ingestão directa da água contaminada do aquífero livre. Existe também grande possibilidade de ingestão de alimentos contaminados, tendo em conta que a mesma água é utilizada para fins agrícolas.

A área em estudo situa-se na Bacia do Baixo Tejo. Ao longo do tempo, esta bacia teve uma evolução complexa, resultando da interacção entre as diversas oscilações do nível do mar e os movimentos tectónicos a que esteve sujeita. A estes junta-se as diversas alterações do clima que se fez sentir, fazendo também variar o tipo de sedimentos que enchem a bacia. A Bacia do Baixo Tejo gerou-se no ciclo orogénico alpino (RIBEIRO et al., 1979). Geomorfologicamente, é uma depressão alongada na direcção NE-SW que se encontra ladeada a W e N pelas formações mesozóicas da orla ocidental, a NE e E pelo substrato hercínico e a sul comunica com o Atlântico na península de Setúbal. Em resposta aos grandes movimentos de subsidência, ocorreu nesta bacia sedimentação intensa. A depressão encontra-se preenchida por depósitos paleogénicos e neogénicos, em grande parte recobertos por depósitos quaternários. A sedimentação que se verificou na bacia foi caracterizada pela alternância entre sedimentação continental, sedimentação de fácies salobra e sedimentação marinha, atestando assim a sucessão de ciclos regressivos e transgressivos que ocorreram principalmente durante o Neogénico – no total foram 7 ciclos para o período do Miocénico e pelo menos um ciclo para o Pliocénico (PAIS, 2004)

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

*Tratamento dos dados:* Os dados utilizados no presente estudo são 81 logs de sondagens da área da SPEL. Numa fase inicial procedeu-se a uma análise aos dados das mesmas, identificando várias litologias que foram agrupadas em litogrupos dominantes: i) Areia, ii) Calcário, iii) Arenito, iv) Argila e v) Marga. Na fase da análise estatística foi possível identificar, através da criação do Gráfico 1, que os litogrupos apresentam um comportamento distinto em profundidade, verificando-se zonas onde determinado litogrupo era dominante. Assim decidiu-se dividir o volume em estudo em quatro zonas diferentes, e obteve-se a Tabela 1. Esta diz respeito às proporções de cada litogrupo em cada uma das áreas definidas e serviu de condicionante ao algoritmo da SSI.



**Gráfico 1 - Distribuição dos litogrupos em profundidade**

		Litogrupo				
		1	2	3	4	5
Profundidade (m)	0;50	0,694	0,004	0,054	0,246	0
	51;100	0,512	0,023	0,282	0,173	0,004
	101;150	0,031	0,023	0,630	0,108	0,206
	151;200	0	0,039	0,205	0,162	0,593

**Tabela 1 - Proporções de cada litogrupo por intervalos de profundidade**

A última fase do tratamento dos dados consistiu na criação de matrizes de transições dos litogrupos entre suportes consecutivos, para cada uma das regiões definidas anteriormente. Aquando do processo de simulação, estas tabelas serão tomadas em conta para fazer o condicionamento.

A título de exemplo apresenta a Tabela 2, que corresponde às transições entre os troços dos dados experimentais da região 1 (0 - 50m). Através da sua análise é possível afirmar que a probabilidade de um nó  $x_2$ , antecedido por um nó  $x_1$  cuja informação é “Areia”, ser novamente “Areia” é de cerca de 92%. Do

mesmo modo, a probabilidade de um nó  $x_n$ , precedido por um nó  $x_{n-1}$  cuja informação é “Argila”, ser novamente “Argila” é de cerca de 75%, enquanto a probabilidade de ser “Areia” é de cerca de 21%. Foram calculadas mais 3 tabelas que serviram para condicionar as restantes áreas.

**Tabela 2 - Tabela das transições entre os dados experimentais na região 1 (0 – 50m)**

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

**Resultados:** Os resultados foram obtidos através do processo de SSI, condicionado às médias locais e histograma das transições. Calcularam-se 30 imagens simuladas e a partir destas uma imagem média, equivalente a uma imagem estimada. Esta apresentou-se como uma boa representação da geologia e foi utilizada no restante processo de adaptação. Como anteriormente referido, os modelos hidrogeológicos são limitados no que diz respeito à quantidade de blocos de informação para a realização de cálculos. Deste modo há necessidade de modificar a dimensão dos blocos no simulador de fluxo, reduzindo os milhões que compunham o modelo geológico de alta resolução, para apenas umas centenas de milhares. A resolução deste problema encontra-se no correcto *upscaling* da informação do modelo geológico para o modelo de simulação dinâmica, minimizando a perda de informação. A adaptação do modelo geológico de alta resolução foi realizada através do método de optimização *Simulated Annealing* (SA). Com base na bibliografia (RIBEIRO, 2009) foram determinados 5 unidades hidrogeológicas:

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

Tendo em conta o modelo conceptual das 5 unidades hidrogeológicas em profundidade, e a resolução horizontal do modelo geológico, optou-se por fazer a simplificação optimal do modelo geológico geoestatístico para 5 camadas. Para esta simplificação optimal foi desenvolvida, programada e testada uma aplicação informática inovadora baseada no método de optimização *Simulated Annealing* e que se descreve nas secções seguintes em mais detalhe. Os resultados são apresentados sob a forma de matrizes 3D com os parâmetros hidráulicos (permeabilidade, coeficientes de armazenamento e porosidades) que podem ser utilizados directamente no modelo de fluxo. Estas matrizes foram finalmente importadas para o software *Visual MODFLOW* tendo-se efectuado alguns testes sintéticos de extracção de forma a testar o comportamento da circulação da água lateralmente e em profundidade no modelo hidrogeológico criado, e cujos resultados se apresentam seguidamente.

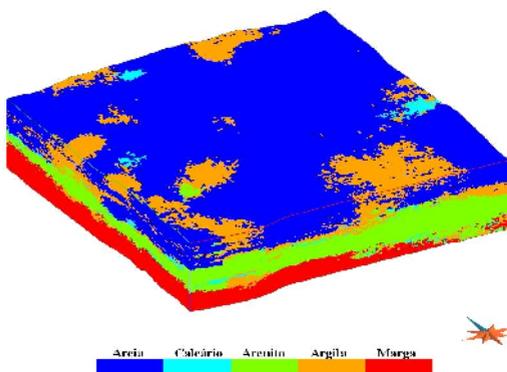


Figura 1 - Modelo Geológico 3D

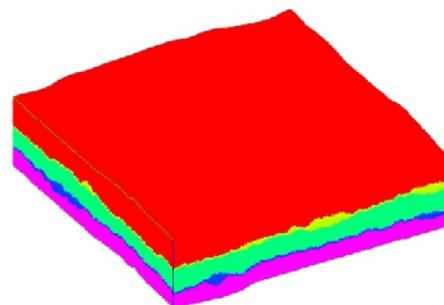


Figura 2 - Modelo Geológico de baixa resolução (após processamento SA)

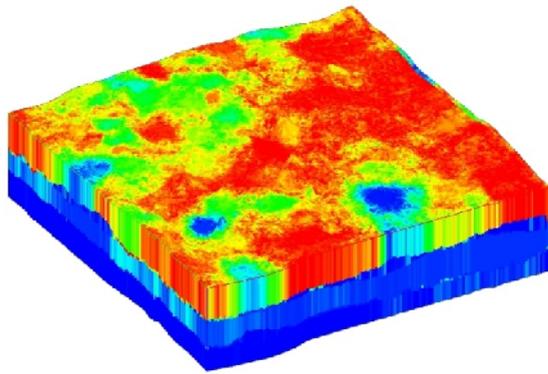


Figura 3 – Matriz de parâmetros hidráulicos (permeabilidade horizontal)

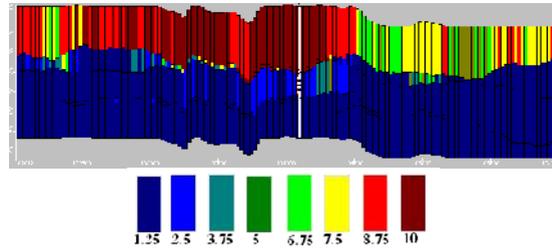


Figura 4 - Exemplo de permeabilidade horizontal (m/d),  $x=112012.5$  (perfil sobre-elevado 5 vezes)

Os resultados obtidos após a execução do SA mostraram-se bastante satisfatórios e realistas e que no caso das argilas não têm continuidade lateral. Este facto é incompatível com os simuladores de fluidos de diferenças finitas como é o caso do MODFLOW. Assim existiu a necessidade de realizar um pós processamento aos resultados, impondo a continuidade lateral de todas as camadas. Dado que as propriedades (permeabilidade e porosidade) são calculadas com base no mapa médio de litogrupos, o prolongamento artificial das camadas não apresenta consequências nos resultados da simulação. A última fase deste estudo centrou-se na realização de testes sintéticos de extracção de água no modelo hidrogeológico gerado, apenas com o objectivo de analisar o reflexo da metodologia empregue, avaliação do comportamento dinâmico em profundidade do sistema de camadas e lentículas de argila. Os resultados obtidos são muito promissores.

### Referências

- Amaral, H., Fernandes, J., Berg, M., Schwarzenbach, R. P., & Kipfer, R., 2009. - *Assessing TNT and DNT groundwater contamination by compound-specific isotope analysis and 3H-3H groundwater dating: A case study in Portugal*. Chemosphere 77, 805-812.
- Matias, F., 2010 – *Modelação 3D de um Subsector das Mineralizações Auríferas de Casas Novas, Montemor-o-Novo*, Tese de mestrado, FCT-UNL, 121pp
- Pais, J., 2004 – *The Neogene of the Lower Tagus Basin (Portugal)*. Revista Espanhola de Paleontologia, 19 (2): 229-243
- Ribeiro, A., Antunes, M. T., Ferreira, M. P., Rocha, R. B., Soares, A. F., Zbyszewsky, G., Moitinho de Almeida, F., Carvalho, D., & Monteiro, J. H., 1979 - *Introduction à la Géologie Générale du Portugal*. Serviços Geológicos de Portugal, Lisboa.
- Ribeiro, M.M.M.S, 2009 - *The cenozoic aquifer system of the Lower Tagus Basin: a description of the hydrogeological situation in the Almada region (Portugal)*. Hydrogeology Journal, 17(4), 999-1009.
- Soares, A., 2000 – *Geoestatística para as ciências da terra e do ambiente*, IST press, 206 p.