MÉTODO DE PROBABILIDADES DE TRANSIÇÃO APLICADO À DEFINIÇÃO DE CAMADAS LITOLÓGICAS PARA O DESENVOLVIMENTO DE MODELOS NUMÉRICOS DE FLUXO DE ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

Rodrigo Maciel Grossi [1]
Alexandra Vieira Suhogusoff [1]
Luiz Carlos Kauffman Marasco Ferrari [1]

[1] IGc-USP - Instituto de Geociências da Universidade de São Paulo. grossirm@usp.br
CEPAS / IGc-USP - Centro de Pesquisas de Águas Subterrâneas. Rua do Lago, 562, São Paulo (SP).
suhogusoff@usp.br; luiz.ferrari@modcom.com.br

Palavras-Chave: Probabilidades de Transição e Cadeias de Markov; Camadas Litológicas; Modelagem Numérica de Fluxo de Águas Subterrâneas.

INTRODUÇÃO

A construção de modelos numéricos de fluxo de águas subterrâneas depende essencialmente da criação de condições de contorno que delimitem um domínio espacial sob o qual se aplicam padrões de estresse hídrico condizentes com o cenário de interesse. Outra função das condições de contorno, objeto em discussão neste artigo, é estabelecer regras para a distribuição de parâmetros dentro da área modelada, subdividindo o diagrama tridimensional de blocos a ser criado em camadas ou pacotes de dados representando suas diferentes litologias. Estabelecer condições de contorno apropriadas para ambientes de elevada heterogeneidade é uma etapa crucial do processo de modelagem, porque variações de muitas ordens de magnitude são comuns em parâmetros como a condutividade hidráulica, capazes de alterar de maneira drástica a direção do fluxo ao torná-lo praticamente horizontal em aquíferos, e vertical em aquitardes (Freeze & Cherry, 1975).

Quando os dados assim o permitem, análises variográficas tem trabalhado distribuições lognormais de condutividade hidráulica, ou ainda, tem utilizado simulações estocásticas para lidar com ambientes mais heterogêneos, porém suas realizações limitam-se apenas à reconstituição de ambientes de máxima entropia ou aleatoriedade (Fogg *et al.*, 2000).

Fortuitamente, recentes avanços da geoestatística de fácies descontínuas (De Marsily et al., 2005) vem se destacado por seu maior alinhamento à identificação e consequente replicação de padrões de deposição de materiais sedimentares que, apesar de complexos, são organizados (Galloway, 1996). Tratam-se das conhecidas rotinas das Probabilidades de Transição e Cadeias de Markov T(h), agora associadas à procedimentos de krigagem / simulação. Tal método divide-se em três fases de implementação. 01 - Padrões de ocorrência (t_{jk}) são identificados entre as camadas de uma sequência estratigráfica, umas em relação às outras (Davis, 1973). 02 - Padrões antes observados na direção vertical (z) são transferidos às demais direções horizontais (x, y) do plano cartesiano, sob à fundamentação da lei de correlação de Fáceis de Walther, na qual: Camadas ou Fáceis ocorrendo em conformidade em sucessões verticais assim também o fazem lateralmente, em ambientes adjacentes. 03 - Algoritmos de krigagem se encarregam de transferir os padrões identificados (assim como os estimados) ao modelo estratigráfico, o qual se submeterá à simulações de fluxo.

A equação 1 apresenta (t_{jk}) em substituição à tradicional variância espacial (γ_{jk}), sendo (*j, k*) as litologias no intervalo de amostragem (*h*), e p_j as proporções de cada litologia da base de dados (Carle, 1999).

$$2\gamma_{jk}(h) = p_j[\,2t_{jk}(0) - t_{jk}(h) - t_{jk}(-h)\,] \qquad \text{(Equação 1)}$$

Este trabalho propõem a descrição de T(h) pelo módulo Tprogs (*Transitional Probability Software*) do programa Aquaveo GMS / ModFlow, para posteriormente aplicá-lo à um estudo de caso na bacia de São Paulo, SP. Como interpretações geológicas são também necessárias à implementação desta metodologia, narram-se ainda, mesmo que brevemente, conceitos da sedimentologia pertinentes à criação do modelo conceitual.

Esse relativamente recente enfoque da geoestatística e da estratigrafia quantitativa destaca que:

- Resultados consistentes superam as práticas automatizadas de interpolação usualmente utilizadas na impossibilidade de se estruturar variogramas espaciais de restritas bases de dados, comuns em cenários de investigação de passivos ambientais;
- Suas simulações honram, simultaneamente, base de dados e as expectativas do modelo deposicional (formato e razões largura / profundidade das camadas previstas para a formação em estudo). Tal conjunção de dados quantitativos e qualitativos expande a capacidade de amostragens unidirecionais (poços de investigação somente na vertical) de serem utilizadas na criação de modelos tridimensionais.

PROCEDIMENTO MATEMÁTICO APLICADO

O procedimento de identificação de padrões (t_{jk}) das probabilidades de Transição T(h) passa por quatro etapas (Figura 1, a - d), como pode ser visto em termos genéricos, porém aplicáveis para reais bases de dados. Observa-se em (a) Um poço sintético, binário, de 32 unidades de comprimento total, amostrado à intervalos fixos (Δh) e subsequentes (n^0. de passos h); Duas litologias de comprimentos constantes (A= 8 e B= 4 unidades) ocorrem intercaladas na direção vertical. (b) Frequências de Transição (F_1, F_2, F_3, ..., F_n) resultam da simples disposição matricial do somatório das ocorrências individuais no intervalo de amostragem escolhido, por exemplo ($f_{1aa(\Delta h=1)} = 8 \times 3 = 24$). (c) Matrizes de Probabilidades de Transição (T_1, T_2, $T_{3, ...}$, T_n) são resultado da divisão dos índices da matriz |F| pelo somatório em linha, por exemplo $t_{2aa} = 21/(21+2) = 91\%$. (d) Finalmente, transiogramas representam o conjunto $|T_{1,2,3,\ldots}|$, separado por seus índices {t_{AA}, t_{AB}, t_{BA}, t_{BB}}.

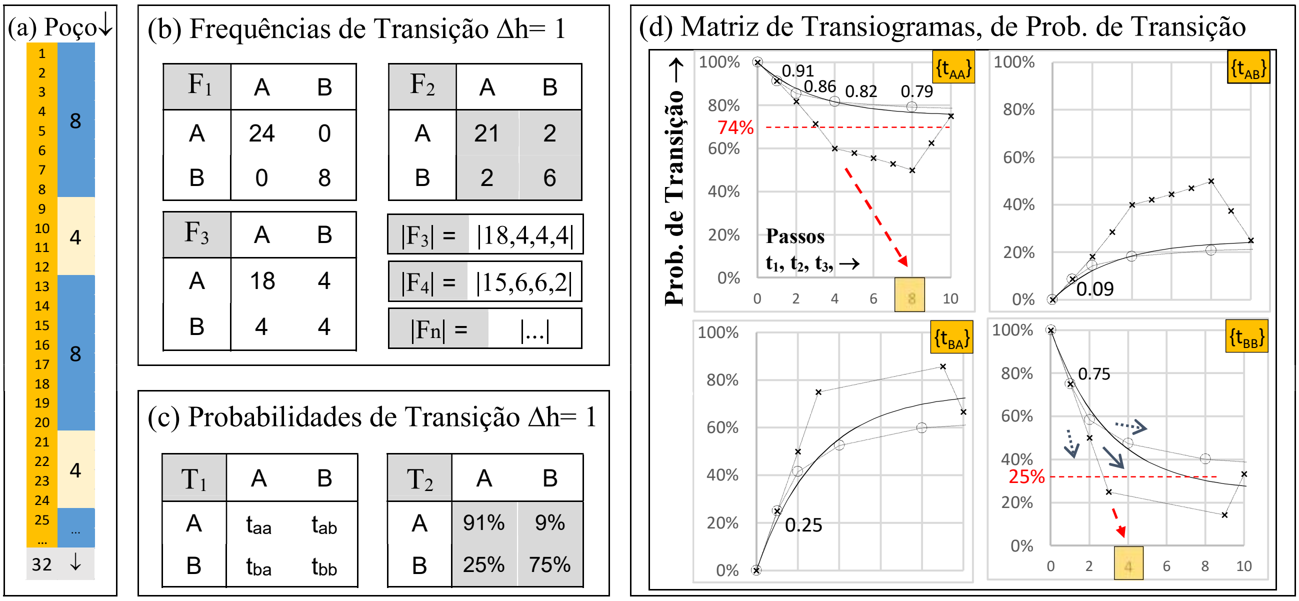

Figura 1: (a) Poço de observação; (b) Frequências; (c) Probabilidades de Transição; (d) Transiogramas e ajuste de três tipos de curvas: experimentais, independentes e condicionadas.

Proporções médias ($p_A = 74\%$ e $p_B = 25\%$) ocorrem no patamar das curvas da diagonal principal (t_{AA}, t_{BB}) estabilizando-se no infinito ($\Delta h_{1,2,3,\ldots} \rightarrow \infty$). Comprimentos médios ($L_A$=8 e L_B=4 unidades) ocorrem na extensão dessas curvas até o eixo das abscissas, para o intervalo de amostragem tendendo a zero ($0 \leftarrow \Delta h$).

São três os possíveis ajustes das curvas dos transiogramas (indicadas pelas setas em t_{BB} da Figura 1d):

- Curvas experimentais são traçadas diretamente do conjunto de dados originais |T|, normatizados de |F|.
- Curvas independentes advêm da potenciação cadenciada de T_2 (Δh=1), processo a ser descrito (Figura 2).
- Curvas condicionadas representam o ajuste capaz de efetivamente delinear o comportamento dos dados ou a continuidade do fenômeno espacial sob análise à qualquer distância de amostragem, como uma curva contínua ou de extensão fracionada / decimal (h) (Carle, 1999).

Durante o processo interpretativo, as curvas contínuas que mais se ajustam às curvas experimentais são avaliadas, variando-se intervalos iniciais de observação ([re]amostragens Δh=1, 2, 3...). E de uma única equação matemática que descreve simultaneamente, e a passos contínuos, todas as curvas condicionadas, assim como suas inferências nas outras direções (x, y), realiza-se o processo de krigagem / simulação.

Na Figura 2, voltando-se ao traçado das curvas independentes, observa-se a matriz $|T_2(\Delta h \to 0)|$ passando por um processo de crescente potenciação / exponenciação (T^1, T^2, T^4) até atingir sua máxima potência (T^e), o qual culmina pela estabilização das grandezas entre os índices de cada matriz original $|T_2|$.

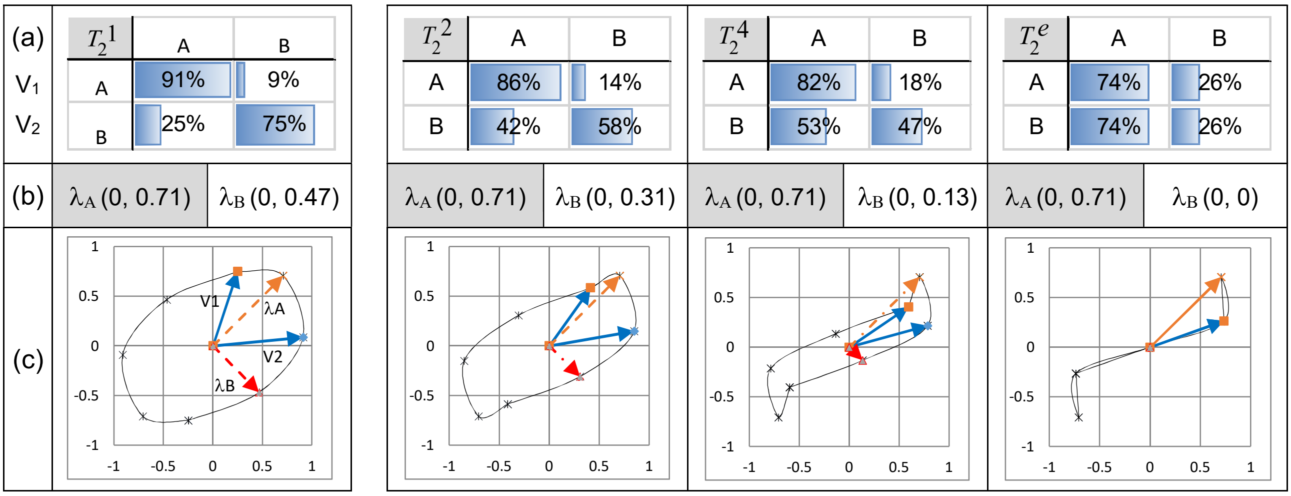

Figura 2: Potenciação de $|T_2(\Delta h=1)|$. (a)Matrizes originais (b) Autovalores (c) Resultado em planta 2D.

Ainda da Figura 2, da álgebra linear qualquer matriz $|T_2|$ pode ser reconstruída em formato canônico por seus autovalores ($\lambda_{A,B}$) e autovetores. Tal abordagem é elucidativa ao se observar todo o conjunto como distâncias físicas no plano cartesiano (Davis, 1973), ambos os vetores (a) $V_1(t_{11}, t_{12})$ e $V_2(t_{21}, t_{22})$ e suas correlacionados componentes singulares (b) λ_A, λ_B, derivados da matriz original $|T_2|$. De forma que percurso ao longo da citada potenciação pode ser observado pelo achatamento cadenciado de elipses imaginárias (c) ligando todos os pontos. O leitor que comparar as Figuras 1 e 2 inadvertidamente encontrará os mesmos dados representando as curvas independentes. Por exemplo, $t_2(aa)^{1,2,4,8,\ldots,e}$ = 91%, 86%, 82%, 79%, e finalmente 74%.

O foco da metodologia não está na krigagem/simulação, mas no ajuste de curvas condicionadas (contínuas ou explícitas (Te)), aos dados observados (na direção vertical, por exemplo). Sendo seus resultados dependentes ainda da interpretação geológica do ambiente sedimentar via aplicação de coeficientes de Walther (Langousis *et al.*, 2018) para transposição das estimativas (z) nas direções (x) e (y).

Fundamenta-se o traçado das curvas contínuas pelo teorema de Bayes da probabilidade condicional. Sustenta esse teorema que novas informações alteram os resultados de novas estimativas, portanto o procedimento de análise (desenho da curva teórica) a cada novo metro de sondagem precisa de um mecanismo que considere o crescente aporte de informações. As curvas condicionais possibilitam a identificação de padrões de comportamento, evitando a aleatoriedade das curvas independentes. Destacando, por exemplo, a maior probabilidade de BB ocorrer dentro da base de dados ABBABBBABBBB.

Equações 2 e 3 comparam formato canônico $T(\Delta h)$ e curvas contínuas $Te(h)$, este último pelo processo de potenciação [exp(.)]. Sendo Z_0 e Z_1 matrizes de coeficientes e componentes espectrais e $\lambda_{i(A)}$ igual a θ_k.

$$T(\Delta h) = \sum_{i=A}^{B} \exp(\lambda_i \Delta h) Z_0$$

(Equação 2)

$$Te(h) = \sum_{k=1}^{K} \theta_k (\Delta h)^{h/\Delta h} Z_1$$

(Equação 3)

$$T = \begin{bmatrix} t_{AB} & t_{AK} \\ t_{KA} & t_{KK} \end{bmatrix}$$

(Resultado)

A Matriz de Coeficientes Espectrais ($Z0_{(AB)}$) é calculada com facilidade por procedimentos internos também da álgebra linear. Porém a Matriz de Componentes Espectrais ($Z1_{(AB)}$) depende ainda da interpolação

Lagrangiana (Agterberg, 1974, p. 406), capaz de estimar autovalores λ_m intrinsicamente relacionados aos passos contínuos (h), dentro de qualquer intervalo discreto Δh (entre h_1 e h_2). A equação 4 mostra Z_1 como uma razão dos produtórios λ_m (à semelhança dos somatórios), sendo R uma matriz derivada de $T_2(0 \leftarrow \Delta h)$.

$$Z_{1(A,B)} = \frac{\prod_{m \neq i} (\lambda_m I - R)}{\prod_{m \neq i} (\lambda_m - \lambda_i)} \qquad \text{(Equação 4)}$$

Assim a potenciação é feita não mais pelos índices originais (t_{2AB}) porém por autovalores, ou seja, as curvas condicionadas conseguem acessar os padrões ou tendências (reais) à serem considerados na krigagem.

E ao transformar dados discretos (Δh) em contínuos (h), tal formulação remete também à oportuna assimetria do modelo estratigráfico, destacada entre $t_{jk}(h)$ e $t_{jk}(-h)$ na Equação 1 (De Marsily et al., 2005). Sendo este um aspecto de interesse para a reprodução de tendências texturais de depósitos sedimentares, como, por exemplo a granodecrescência ascendente (*finning upward*) de camadas intercaladas mais grossas na base e gradativamente mais finas no topo, explicada pelas variações sazonais e consequente transporte seletivo primeiro de sedimentos pesados (areias) em condições climáticas húmidas, seguidos por siltes e argilas.

RESULTADOS ESPERADOS

Fenômenos naturais, quando devidamente amostrados e caracterizados exibem um aspecto estruturado e outro aleatório (Yamamoto, 2013). Como nas análises de variância espacial, estrutura ou regiões de influência por Te(h) são repassadas para o diagrama de blocos via interpolação. Na Figura 3, seguem resultados preliminares de um site às margens do rio Pinheiros - SP, conceitualmente pensado para camadas rasas (máximo 10m de profundidade) de ambientes fluviais de baixa energia e grande continuidade lateral (x).

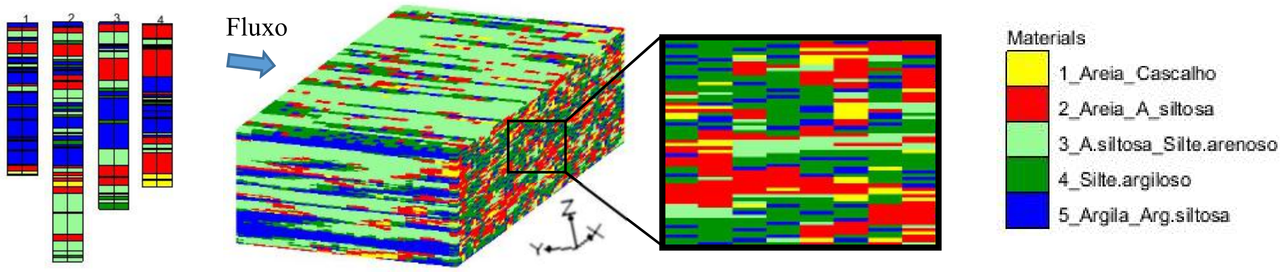

Figura 3: (a) Poços de observação 1,2 3,4; (b) Diagrama de blocos modelado com anisotropia ($x \neq y$)

Apresentou-se o método de identificação de ponderadores para krigagem da condutividade hidráulica (K). Resta averiguar, no estudo de caso, suas consequências na simulação do transporte de partículas e solutos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Agterberg, F. P. 1974.*Geomathematics.* Elsevier, Scientific Publishing Co., Amsterdam, New York, 596p.

Carle, S. F. T-PROGS. 1999. *Transition Probability Geostatistical Software* - Tutorial Version 2.1. Hydrologic Sciences Graduate Group University of California, Davis. – And precedent works until 1996.

Davis J. C. 1973. *Statistics and Data Analysis in Geology,* 2º Ed, Wiley & Son.

Fogg G. E., Carle S., et al. 2000. *Connected-network paradigm for alluvial aquifer system*; Geological Society of America, Special Paper348.

Freeze, R. A., & Cherry, J.A. (1979), *Groundwater.* Englewood Cliffs: Prentice Hall, pp.604.

Galloway W. E., Hobday D. K. 1996. *Terrigenous Clastic Depositional Systems, Applications to Fossil Fuel and Groundwater Resource*, 2nd (second) Edition Hardcover.

Langousis, A., Kaleris, V., et al. *Markov based transition probability geostatistics in groundwater applications: assumptions and limitations* - Stoch Environ Res Risk Assess (2018) 32: 2129.

Marsily de, G., Delay, F., et al. 2005 - *Dealing with spatial heterogeneity* - Hydrogeol J13:161.

Yamamoto, J. K., Landim, P. M. B. *Geoestatística, conceitos e aplicações*. SP: 215 p. 2013.