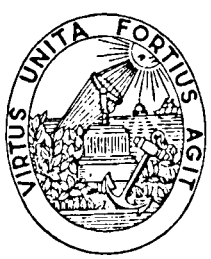
MANUEL MARIA PACHECO FIGUEIREDO

# SIMULAÇÃO ESTOCÁSTICA DE ESCOAMENTOS EM AQUÍFEROS REGIONAIS POROSOS

*ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS HIDROGEOLÓGICOS POR MODELAÇÃO INVERSA*

Volume I




**FACULDADE DE ENGENHARIA**

**UNIVERSIDADE DO PORTO**

**2000**

MANUEL MARIA PACHECO FIGUEIREDO

# SIMULAÇÃO ESTOCÁSTICA DE ESCOAMENTOS EM AQUÍFEROS REGIONAIS POROSOS

*ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS HIDROGEOLÓGICOS POR MODELAÇÃO INVERSA*

Dissertação para Doutoramento em Engenharia Civil
na Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

Volume I

Faculdade de Engenharia

**FACULDADE DE ENGENHARIA**
**UNIVERSIDADE DO PORTO**
**2000**

626(043)/FIGm/SIM
UNIVERSIDADE DO PORTO
Faculdade de Engenharia
BIBLIOTECA
N.º 51934
CDU 62.6(043)
Data 6 / 4 / 2001

À minha mulher Teresa
e aos meus filhos Luís e Filipa

# RESUMO

A simulação do escoamento da água num aquífero regional poroso, confinado ou não confinado, implica a resolução da equação diferencial que o rege. Para o efeito exige-se o conhecimento prévio, entre outros dados, das propriedades hidrogeológicas – transmissividade e coeficiente de armazenamento nos aquíferos confinados ou conductividade hidráulica e porosidade drenável nos aquíferos não confinados – e da alimentação superficial efectiva do aquífero. Num contexto estocástico, as transformadas logarítmicas das propriedades hidrogeológicas podem ser representadas por funções aleatórias multivariadas normais, isotrópicas e estacionárias caracterizadas por um reduzido número de parâmetros. A alimentação superficial efectiva pode ser quantificada por uma fracção, constante no espaço e no tempo, da precipitação total. Nesta tese é apresentada uma metodologia inversa estocástica que, recorrendo a algumas medições pontuais das propriedades hidrogeológicas e a leituras periódicas de níveis piezométricos, estima a alimentação efectiva e os dois primeiros momentos condicionados das transformadas logarítmicas das propriedades hidrogeológicas.

A metodologia inversa estocástica desenvolve-se em duas fases. Na primeira, resolvendo o problema inverso estocástico, estimam-se simultaneamente os parâmetros que caracterizam as funções aleatórias que representam as transformadas logarítmicas das propriedades hidrogeológicas, a alimentação superficial efectiva do aquífero e a variância dos erros de medição piezométrica. A formulação do problema inverso apoia-se na maximização da função de verosimilhança dos resíduos das observações (estimador de máxima verosimilhança) e na integração numérica pelo método dos elementos finitos das aproximações de primeira ordem da equação diferencial do escoamento e das equações diferenciais das perturbações. Na segunda fase são calculadas, por cokrigagem, as distribuições espaciais estimadas das referidas transformadas logarítmicas e as respectivas covariâncias de estimação.

Finalmente, são apresentados dois exercícios de aplicação desta metodologia nos quais se comparam os campos "reais" das propriedades hidrogeológicas e da piezometria com os correspondentes campos estimados e se quantificam as respectivas variâncias de estimação.

# ABSTRACT

The simulation of groundwater flow in a regional porous aquifer, whether confined or unconfined, always implies solving the differential equation which rules it. For that purpose it is necessary to have an a priori knowledge of, among other data, the hydrogeological properties — transmissivity and storage coefficient for confined aquifers, and hydraulic conductivity and drainage porosity for unconfined aquifers — and of the superficial effective recharge (or abstraction). In a stochastic framework, the log-transforms of the hydrogeological properties can be represented by stationary isotropic multivariate normal random functions characterised by a small number of parameters. The superficial effective recharge can be assessed as a percentage, constant in both space and time, of the total precipitation. This thesis presents a stochastic inverse methodology which, taking into account some measurements of the piezometric head and of the hydrogeological properties, estimates the superficial effective recharge (or abstraction) and the first and second conditional moments of the log-transforms of the hydrogeological properties.

This stochastic inverse methodology has two stages. In the first stage, by solving the stochastic inverse problem, the set of parameters which characterise the random functions representing the log-transforms of the hydrogeological properties, the superficial effective recharge (or abstraction) and the variance of head measurement errors are simultaneously estimated. The formulation of the inverse problem is based on the maximisation of the likelihood function of the residuals of the observations (maximum likelihood estimator) and involves the numerical integration, by means of the finite element method, of first-order approximations of differential mean flow equation and differential perturbation equations. In the second stage, and by means of cokriging, are estimated the spatial distribution of those log-transforms and their covariances of estimation.

Finally, this methodology is applied to two synthetic cases where comparisons between "real" and estimated hydrogeological properties and piezometric fields are presented, as well as their variances of estimation.

# RÉSUMÉ

La simulation de l'écoulement de l'eau dans un aquifère régional poreux, confiné ou pas, implique la résolution de l'équation différentielle qui le régit. Ceci exige la connaissance préalable, entre autres données, des proprietés hidrogéologiques – transmissivité et coefficient de stockage, pour les aquifères confinés, ou conductivité hidraulique et porosité drainable, pour les aquifères non confinés – et de l'alimentation superficielle effective de l' aquifère. Dans un contexte stochastique, les transformées logarithmiques des proprietés hidrogéologiques peuvent être representées par des fonctions aléatoires multivariées normalles, isotropiques et stationnaires caractérisées par un nombre réduit de paramêtres. L'alimentation superficielle effective peut être quantifiée par une fraction, constante dans l'espace et le temps, de la précipitation totale. Dans cette thèse, on présente une méthodologie stochastique inverse qui, basée sur quelques mesures ponctuelles des proprietés hidrogéologiques et sur des lectures périodiques des niveuax piesométriques, estime l'alimentation effective et les deux premiers moments conditionnés des transformées logarithmiques des proprietés hidrogéologiques.

La méthodologie stochastique inverse se déroule en deux phases. Dans la première, en résolvant le problème stochastique inverse, on estime simultanément les paramêtres caractérisant les fonctions aléatoires qui représentent les transformées logarithmiques des proprietés hidrogéologiques, l'alimentation superficielle effective de l' aquifère et la variance des erreurs de la prise de mesures piesométrique. La formulation du problème inverse s'apuit sur la maximisation de la fonction de vraissemblance des résidus des observations (estimateur du maximum de vraisemblance) et sur l'intégration numérique par la méthode des éléments finis des approximations au première ordre de l'équation différentielle de l'écoulement et des équations différentielles des perturbations. Dans la deuxième phase, on calcule, en utilisant la cokrigage, les distribuitions spacialles estimées des transformées logarithmiques mentionées ci-dessus et les covariances des estimées respectives.

Pour conclure, deux exercices d'application de cette méthodologie sont présentés, sur lesquels on compare les champs "réels" des proprietés hidrogéologiques et de la piesométrie avec les champs estimés correspondants et on quantifie les variances des estimées respectives.

# AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos os que me ajudaram a realizar este trabalho e, de um modo especial:

- aos meus orientadores, os Professores Ferreira Lemos e Luís Ribeiro. O Professor Ferreira Lemos teve um papel importante na escolha do âmbito da tese, no estímulo à minha decisão um pouco tardia – a decisão, não o estímulo – de iniciar a sua preparação e no apoio sempre prestado ao longo do tempo, em particular quando precisei de ultrapassar os prazos a que estava obrigado. O Professor Luís Ribeiro contribuiu de um modo substancial para a compreensão de algumas matérias que me eram completamente novas e teve um papel relevante no estabelecimento dos objectivos essenciais da tese. Não esqueço, e devo sublinhá-lo, que quando convidado para co-orientar a preparação desta tese, anuiu de imediato, pese embora a inexistência de um conhecimento anterior;

- ao amigo e colega na Secção de Hidráulica Recursos Hídricos e Ambiente, Professor Paulo Avilez Valente, pela permanente disponibilidade para a troca de impressões e pelos inúmeros conselhos relativamente a aspectos matemáticos, numéricos e computacionais do meu trabalho;

- ao amigo de longa data, colega de curso e docente da Secção de Estruturas, Professor Álvaro Azevedo, pelo "curso intensivo" sobre optimização que me proporcionou ao longo das nossas conversas, o qual me permitiu escrever o algoritmo de minimização da função objectivo do estimador de máxima verosimilhança;

- à Secção de Hidráulica Recursos Hídricos e Ambiente, na pessoa dos sucessivos Coordenadores, Professores Álvares Ribeiro, Malafaya-Baptista e Ferreira Lemos pelo apoio e confiança revelados ao longo do tempo de preparação da tese;

- ao Instituto de Hidráulica e Recursos Hídricos, na pessoa do Presidente da Direcção, Professor Veloso Gomes, pela disponibilidade de meios materiais e pela colaboração dos seus funcionários;

- ao Centro de Informática Professor Correia de Araújo (CICA) da FEUP, pelos meios computacionais disponibilizados e pela ajuda amavelmente prestada na resolução de problemas operacionais;

- ao Dr. Peixinho de Cristo da Direcção Regional do Ambiente do Centro, Coimbra, pelo acesso aos dados relativos ao aquífero de Leirosa – Monte Real;

- e ao Departamento de Civil da FEUP, pela compreensão revelada relativamente à ultrapassagem dos prazos a que me tinha comprometido.

# ÍNDICE GERAL

*Volume I:*

**RESUMO**

**AGRADECIMENTOS**

**ÍNDICE GERAL**

**PREÂMBULO**

*CAPÍTULO 1*: **INTRODUÇÃO**

*CAPÍTULO 2*: **ESCOAMENTOS EM MEIOS SUBTERRÂNEOS. LEIS FÍSICAS**

| | | |
|---|---|---|
| **2.1** | **Considerações gerais** | **2.1** |
| **2.2** | **Meio poroso "contínuo"** | **2.2** |
| **2.3** | **Algumas definições** | **2.3** |
| 2.3.1 | Porosidade total | 2.4 |
| 2.3.2 | Porosidade seccional | 2.5 |
| 2.3.3 | Superfície específica | 2.5 |
| 2.3.4 | A água no solo. Água adsorvida e água livre | 2.6 |
| 2.3.5 | Porosidade efectiva | 2.6 |
| 2.3.6 | Teor de humidade e coeficiente de saturação | 2.7 |
| 2.3.7 | Porosidade drenável | 2.8 |
| 2.3.8 | Carga hidráulica e cota piezométrica | 2.10 |
| **2.4** | **Equações gerais da Mecânica dos Fluidos** | **2.11** |
| 2.4.1 | Equação de continuidade. Expressão geral | 2.12 |
| 2.4.2 | Equação da continuidade. Expressão válida para meios porosos | 2.14 |
| 2.4.3 | Equações de equilíbrio dinâmico. Lei de Darcy generalizada | 2.17 |
| 2.4.4 | Lei de Darcy generalizada para meios anisotrópicos | 2.24 |
| **2.5** | **Aquíferos regionais. Equações diferenciais** | **2.28** |
| 2.5.1 | Aquíferos regionais não confinados | 2.31 |
| 2.5.2 | Aquíferos regionais confinados | 2.38 |

2.5.3 Condições iniciais e condições fronteira em aquíferos regionais 2.58

## *CAPÍTULO 3*: INTEGRAÇÃO NUMÉRICA DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS. MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

**3.1 Equações diferenciais. Aproximação à solução 3.1**

**3.2 Método dos Resíduos Pesados 3.4**
3.2.1 Introdução 3.4
3.2.2 Aproximação por resíduos pesados 3.6
3.2.3 O Método de Bubnov-Galerkin 3.8
3.2.4 Solução de equações diferenciais pelo Método dos Resíduos Pesados 3.9
3.2.5 Aplicação do Método dos Resíduos Pesados ao escoamento em aquíferos regionais 3.19

**3.3 Método dos Elementos Finitos 3.23**
3.3.1 Introdução 3.23
3.3.2 Funções de aproximação 3.25
3.3.3 Funções de aproximação globais 3.26
3.3.4 Funções de aproximação locais 3.28
3.3.5 Aproximação à solução de equações diferenciais. Formulação fraca 3.30
3.3.6 Critérios de continuidade 3.31
3.3.7 Método de Bubnov-Galerkin 3.31

**3.4 Integração em ordem ao tempo 3.34**
3.4.1 O sistema de equações 3.34
3.4.2 Métodos de integração em ordem ao tempo 3.42
3.4.3 O parâmetro $\theta$ e o incremento $\Delta t$ da integração em ordem ao tempo 3.44
3.4.4 Problemas com equações diferenciais não lineares 3.50

## *CAPÍTULO 4*: A GEOESTATÍSTICA E A HIDROGEOLOGIA ESTOCÁSTICA

**4.1 Introdução 4.1**

**4.2 A Geoestatística 4.4**
4.2.1 Variáveis regionalizadas 4.5
4.2.2 Variáveis aleatórias 4.7

**4.3 Funções aleatórias 4.10**
4.3.1 Inferência estatística das funções aleatórias 4.15
4.3.2 Funções aleatórias estacionárias 4.16
4.3.3 Funções aleatórias multivariadas normais 4.19
4.3.4 Transformação de variáveis 4.20
4.3.5 Funções aleatórias intrínsecas ou de incrementos estacionários 4.25
4.3.6 Funções aleatórias não intrínsecas 4.28
4.3.7 Algumas considerações sobre inferência estatística, estacionaridade e ergodicidade 4.28

**4.4 Análise estrutural das funções aleatórias** **4.32**
4.4.1 O semivariograma e a covariância 4.32
4.4.2 O semivariograma experimental 4.35
4.4.3 Semivariogramas teóricos 4.36

**4.5 Propriedades do semivariograma** **4.44**
4.5.1 Escalas de variabilidade e sobreposição de semivariogramas 4.44
4.5.2 A anisotropia e o semivariograma 4.45
4.5.3 O semivariograma na proximidade da origem 4.46
4.5.4 O semivariograma a grandes distâncias 4.49
4.5.5 Algumas considerações sobre a estimação do semivariograma 4.50

**4.6 Distribuições condicionadas** **4.55**
4.6.1 Vectores aleatórios 4.55
4.6.2 Vectores aleatórios multivariados normais 4.56
4.6.3 Funções aleatórias multivariadas normais condicionadas 4.59
4.6.4 Estimação de momentos condicionados de funções aleatórias estacionárias multivariadas normais com média conhecida 4.64
4.6.5 Estimação de momentos condicionados de funções aleatórias intrínsecas multivariadas normais 4.70
4.6.6 Distribuições condicionadas de funções aleatórias multivariadas normais correlacionadas 4.74

**4.7 Estimação de distribuições espaciais por métodos geoestatísticos** **4.83**
4.7.1 Krigagem simples de funções aleatórias estacionárias com média conhecida 4.84
4.7.2 Krigagem ordinária de funções aleatórias estacionárias com média desconhecida 4.89
4.7.3 Krigagem ordinária de funções aleatórias intrínsecas 4.93
4.7.4 Algumas considerações sobre a krigagem 4.99
4.7.5 Cokrigagem de funções aleatórias com média conhecida 4.101
4.7.6 Cokrigagem de uma função aleatória estacionária, com média conhecida ou não 4.108
4.7.7 Algumas considerações sobre a cokrigagem 4.112

*CAPÍTULO 5*: **HIDROGEOLOGIA ESTOCÁSTICA. SIMULAÇÃO DIRECTA**

**5.1 Introdução** **5.1**

**5.2 Algumas considerações sobre a diferenciação e integração de funções aleatórias** **5.3**

**5.3 Métodos de simulação directa estocástica** **5.6**
5.3.1 Método espectral 5.9
5.3.2 Método numérico de desenvolvimentos em série 5.18

**5.4 Método das simulações de Monte-Carlo** **5.23**
5.4.1 Realizações de uma função aleatória 5.25
5.4.2 Método de simulação sequencial gaussiana 5.27

5.4.3 Método de recozimento simulado 5.31
5.4.4 Simulações de Monte-Carlo não condicionadas 5.34
5.4.5 Simulações de Monte-Carlo condicionadas 5.48

**5.5 Método das perturbações 5.62**
5.5.1 Considerações iniciais 5.62
5.5.2 Aquíferos confinados. Equações diferenciais 5.79
5.5.3 Aquíferos não confinados. Equações diferenciais 5.88
5.5.4 Valor esperado e covariância do nível piezométrico 5.98
5.5.5 Integração numérica da equação diferencial dos valores esperados 5.103
5.5.6 Integração numérica da equação diferencial das perturbações de $H$ e $Y$ 5.133
5.5.7 Integração numérica da equação diferencial das perturbações de $H$ e $G$ 5.150
5.5.8 Exemplos de aplicação do método das perturbações. Comparação com simulações de Monte-Carlo não condicionadas. 5.160
5.5.9 Exemplos de aplicação do método das perturbações. Comparação com simulações de Monte-Carlo condicionadas. 5.168

**5.6 Simulação directa estocástica. Exercícios 5.183**
5.6.1 Aquífero confinado 5.183
5.6.2 Aquífero não confinado 5.251

*Volume II:*

# ÍNDICE GERAL

## *CAPÍTULO 6*: O PROBLEMA INVERSO ESTOCÁSTICO. ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS HIDROGEOLÓGICOS

**6.1 Considerações gerais 6.1**

**6.2 O problema inverso estocástico 6.15**
6.2.1 Introdução 6.15
6.2.2 Transferência de informação 6.21
6.2.3 Função de densidade de probabilidade dos resíduos 6.24
6.2.4 O estimador de máxima verosimilhança 6.25
6.2.5 Outros estimadores 6.30

**6.3 A função objectivo do estimador de máxima verosimilhança 6.33**
6.3.1 Introdução 6.33
6.3.2 Os parâmetros do problema inverso estocástico 6.33
6.3.3 O vector dos resíduos 6.36
6.3.4 A matriz de covariância dos resíduos 6.39
6.3.5 O cálculo da função objectivo 6.49

**6.4 A optimização da função objectivo 6.51**
6.4.1 Introdução 6.51

6.4.2 Métodos de optimização 6.56
6.4.3 Método de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno. Algoritmo numérico de optimização 6.66
6.4.4 O gradiente da função objectivo 6.75
6.4.5 A sensibilidade do modelo às variações dos seus parâmetros. Equações diferenciais. Integração numérica 6.76
6.4.6 Derivadas da matriz de covariância dos resíduos em ordem aos parâmetros do modelo e aos parâmetros estatísticos 6.106
6.4.7 Sensibilidade, às variações dos parâmetros do modelo, das perturbações de *H* geradas pelas perturbações de *Y*. Integração numérica 6.116
6.4.8 Sensibilidade, às variações dos parâmetros do modelo, das perturbações de *H* geradas pelas perturbações de *G*. Integração numérica 6.166
6.4.9 Programa de cálculo da função objectivo e do respectivo gradiente 6.201

**6.5 A estimação das propriedades hidrogeológicas e as respectivas covariâncias 6.203**

**6.6 A incerteza da solução do problema inverso 6.214**

**6.7 Algumas considerações sobre a metodologia inversa estocástica 6.229**

**6.8 Exemplos de aplicação 6.238**
6.8.1 Aquífero confinado 6.239
6.8.2 Aquífero não confinado 6.318

*CAPÍTULO 7*: **CONCLUSÃO**

**SIMBOLOGIA**

**REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

# PREÂMBULO

Após quase década e meia de actividade profissional como engenheiro civil, a par com a actividade docente na Secção de Hidráulica, Recursos Hídricos e Ambiente (HRHA) da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto (FEUP), as exigências da carreira académica colocaram a questão da preparação da tese de doutoramento e, em particular, da selecção do assunto a estudar. Nessa ocasião, entendeu-se avisado o aproveitamento do capital de conhecimento entretanto adquirido na preparação e realização das "provas de aptidão pedagógica e capacidade científica", nomeadamente no desenvolvimento de um modelo numérico de elementos finitos para a simulação do escoamento (local) em meios porosos incompressíveis, saturados ou não saturados. Por outro lado, sendo a leccionação e a investigação da Secção de HRHA tradicionalmente orientadas para a gestão e o tratamento dos recursos hídricos superficiais, pareceu oportuna a aposta num tema do domínio, igualmente relevante, das águas subterrâneas. Neste mesmo sentido foram os conselhos do Professor Ferreira Lemos, autor de uma tese de doutoramento neste âmbito – *No Domínio da Hidráulica das Rochas* – e orientador da presente tese, e do Professor Álvares Ribeiro, então Coordenador da Secção de HRHA da FEUP.

Uma vez feita a opção pelo estudo das águas subterrâneas, a problemática da gestão deste recurso, tanto no aspecto quantitativo como no qualitativo, afigurou-se muito apelativa. Mas implicava, também, a abordagem de um conjunto de problemas relativamente complexos tais como a elaboração de modelos de simulação (escoamento e transporte), a formulação do problema de optimização (definição do objectivo e das restrições) e a respectiva resolução. Rapidamente ficou evidente que a primeira dificuldade a enfrentar residia nos modelos de simulação e, em particular, na obtenção da informação necessária – em quantidade e qualidade – à sua implementação, nomeadamente a relativa às propriedades físicas dos domínios a estudar e sobre as condições iniciais e de fronteira das equações diferenciais a integrar. De facto, apesar das leis que regem os fenómenos em causa – escoamento e transporte – serem bem conhecidas e os métodos numéricos para as resolver estarem disponíveis, a insuficiência deste tipo de informação confere um carácter incerto aos resultados dos modelos de simulação, tornando-os instrumentos de utilidade questionável.

Por muito exaustivas que sejam as campanhas de recolha de dados de campo, a informação obtida acaba por ser, inevitavelmente, escassa e dispersa. Assim, não resta outra alternativa que não seja a de lidar com a incerteza e procurar incorporá-la nos resultados dos modelos de simulação. Uma vez assumida esta inevitabilidade e estando subjacente a ideia da gestão de um recurso hídrico (dimensão regional), a par com o facto de o modelo de escoamento da água ser a base sobre a qual assenta posteriormente a modelação do transporte de substâncias, tomou-se a decisão de começar pelo estudo da simulação directa estocástica do escoamento em aquíferos regionais porosos. Para o efeito desenvolveram-se e programaram-se os algoritmos numéricos de dois métodos: o das *perturbações* e o das *simulações de Monte-Carlo*. Em fase posterior do trabalho, e na sequência de uma sugestão do Professor Luís Ribeiro, co-orientador desta tese, procurou-se aplicar estes modelos ao aquífero de Leirosa – Monte Real localizado numa região próxima do litoral compreendida entre a foz do Mondego e a foz do Liz. As informações então disponíveis resumiam-se aos registos de furos de sondagem realizados nesta zona, alguns ensaios de bombagem, registos de extracções realizadas pela empresa que explora este aquífero e leituras piezométricas de periodicidade variável. Um estudo realizado na década de sessenta revelava tratar-se de um aquífero não confinado, contido numa formação do tipo arenoso, recarregado exclusivamente por infiltração da água da chuva e isolado de qualquer outra formação permeável. A simulação de escoamentos não permanentes neste aquífero implicava o conhecimento, entre outros dados, das propriedades hidrogeológicas (conductividade hidráulica e porosidade drenável) e da recarga efectiva. Para a determinação das primeiras existiam os já referidos dados – escassos e dispersos – e a quantificação da segunda passava pela estimação da fracção de precipitação efectivamente infiltrada. A percepção de que os dados disponíveis dificilmente permitiriam uma modelação com um grau de incerteza aceitável, apesar da relativa simplicidade do caso (fronteiras impermeáveis, extracções conhecidas, recarga por infiltração da água precipitada, etc.), conduziu ao abandono do problema e motivou a opção pelo estudo e desenvolvimento de uma metodologia que pudesse realizar, num contexto estocástico, a estimação das referidas grandezas: a *modelação inversa estocástica*. A partir desse momento, esta matéria extremamente aliciante passou a constituir o tema central da presente tese de doutoramento.

A pesquisa e a leitura das publicações mais relevantes sobre a modelação inversa estocástica permitiram constatar ter-se verificado uma grande evolução ao longo da década de oitenta, após o que se registou uma relativa estagnação durante a primeira metade da década

seguinte, período durante o qual os principais investigadores orientaram os seus esforços para o estudo do transporte de substâncias em meios subterrâneos. Da bibliografia consultada ressalta o facto da modelação inversa ser quase exclusivamente dirigida para a estimação de uma única propriedade hidrogeológica – a transmissividade – para escoamentos em regime permanente, evitando-se o problema da estimação da propriedade hidrogeológica presente na parcela da equação diferencial do escoamento que contém a derivada em ordem ao tempo. Constitui uma das poucas excepções o artigo de Dagan e Rubin (1988) onde se apresenta uma metodologia para a estimação simultânea da transmissividade, do coeficiente de armazenamento e da recarga de um aquífero, num contexto estocástico. Mas a metodologia proposta por estes autores, e que foi posteriormente aplicada a um aquífero na região de Rio Maior[1] com a colaboração do Doutor Lobo Ferreira[2], assenta numa resolução analítica do problema inverso que é suportada por um conjunto de hipóteses simplificadoras que lhe retiram a possibilidade de uma aplicação generalizada.

O artigo destes dois importantes autores, mais pela ideia do que pelo método apresentado, constituiu o estímulo determinante para o desenvolvimento de uma metodologia mais geral que permitisse encontrar a solução para problemas idênticos ao colocado pelo já referido aquífero de Leirosa – Monte Real, isto é, que realizasse, num contexto estocástico, a estimação simultânea das propriedades hidrogeológicas e da recarga (ou perda) efectiva de aquíferos regionais porosos confinados ou não confinados e que dispensasse algumas das hipóteses simplificadoras consideradas por Dagan e Rubin (1988). As abordagens de Hoeksema e Kitanidis (1984 e 1985b), de Sun e Yeh (1992a) e de Sun (1994) à problemática da modelação inversa estocástica contribuíram fortemente para a estruturação geral da metodologia apresentada nesta tese. As diversas equações diferenciais que lhe dão corpo são integradas numericamente, proporcionando-lhe a flexibilidade necessária à aplicação a qualquer aquífero, independentemente da complexidade da geometria e das condições iniciais e de fronteira.

As publicações acima referidas assumiram um papel decisivo na preparação desta tese. Mas foram igualmente importantes os trabalhos de outros autores, tanto na aquisição dos conhecimentos essenciais à formulação da metodologia proposta como durante a fase de

---

[1] Rubin et al. (1990).

[2] Actual responsável pelo Grupo de Investigação de Águas Subterrâneas (GIAS) do Laboratório Nacional de Engenharia Civil (LNEC).

redacção da tese. Assim, importa mencionar Marsily (1986) relativamente aos princípios fundamentais do escoamento, Samper e Carrera (1990), Dagan (1989) e Gelhar (1993) no domínio da Geoestatística e da Hidrogeologia Estocástica e, ainda, Fletcher (1987) e Azevedo (1994) na concepção e desenvolvimento do algoritmo de minimização da função objectivo do problema inverso estocástico. Em muitos outros trabalhos se encontraram ideias, definições, abordagens alternativas, etc., cuja enumeração seria extensa e, certamente, incompleta.

Concluída esta breve descrição das circunstâncias que motivaram a fixação do objectivo central desta tese e dos principais trabalhos e publicações consultados, julga-se pertinente admitir que, durante o período de tempo consumido na elaboração da formulação matemática das várias "peças" que constituem a metodologia inversa estocástica e no desenvolvimento e programação dos correspondentes algoritmos numéricos, a dúvida quanto ao êxito da tarefa encetada esteve sempre presente. Afinal, porque razão não se encontravam outros trabalhos com idêntico objectivo? A modelação inversa estocástica em regime não permanente teria ou não solução? Seria um exagero procurar estimar simultaneamente as propriedades hidrogeológicas e a recarga (ou perda) efectiva de um aquífero a partir de algumas medições dessas propriedades e de leituras periódicas dos níveis piezométricos? Existiriam limitações de ordem computacional? Ou seria o tema pouco interessante – mesmo em regime permanente – e por este motivo os principais investigadores teriam orientado os seus esforços para a problemática do transporte de substâncias contaminantes? A dúvida instalada foi-se atenuando à medida que os primeiros testes foram sendo realizados e os resultados obtidos se revelavam bastante animadores. De facto, o conjunto de exercícios e testes efectuados permite concluir que a modelação inversa estocástica em regime não permanente é possível, embora dependa da quantidade e qualidade da informação disponível. Contudo, convém referir que a aplicação a um aquífero razoavelmente bem discretizado da metodologia desenvolvida implica um esforço computacional tão elevado que poderá desencorajar a sua utilização num problema concreto. Por este motivo, a optimização dos algoritmos numéricos e/ou a reformulação destes com o auxílio das equações de estado adjunto serão, sem dúvida, algumas das próximas tarefas a equacionar. Paralelamente, e no que respeita à viabilidade e oportunidade desta temática, é com um misto de alívio e satisfação que se regista o seu regresso, nos anos mais recentes, em artigos publicados por importantes autores.

Finalmente, uma justificação para a organização do texto desta tese, em particular para o conteúdo dos primeiros capítulos onde são apresentadas matérias relativamente consolidadas tais como a dedução das equações diferenciais, a exposição do método dos elementos finitos, a revisão de conceitos da estatística multivariada, a introdução à geoestatística, etc. É tradição da Secção de HRHA da FEUP relativamente às teses de mestrado e doutoramento que estas exponham os temas tratados desde os seus fundamentos. Trata-se de um procedimento discutível visto que os eventuais interessados nas matérias versadas poderiam ser remetidos para as adequadas referências bibliográficas. Mas, atendendo à dificuldade real de aceder em tempo útil à bibliografia indicada nessas teses, ao facto de a variedade de temas abrangidos pela área científica em causa minimizar o risco de repetição das matérias de natureza básica e, por fim, à vantagem de produzir uma exposição completa dos assuntos, optou-se por cumprir a tradição. Acresce, ainda, que grande parte das matérias básicas acima referidas não fazem parte dos conteúdos das disciplinas do tronco comum da licenciatura em Engenharia Civil pelo que a sua exposição implicou um estudo cuidado, com óbvia vantagem para a formação teórica do autor desta tese.

*CAPÍTULO 1*

# INTRODUÇÃO

Gerir um recurso hídrico implica ter os meios para prever, ou simular, a resposta deste às diversas intervenções, naturais ou artificiais, a que poderá ser submetido. No caso particular de um aquífero, significa ter a capacidade para estimar o seu comportamento, tanto do ponto de vista quantitativo como do qualitativo, face às recargas naturais, extracções, contaminações, etc. Um modelo numérico, que reproduza tão bem quanto possível a resposta do aquífero, constitui uma ferramenta indispensável para a sua gestão.

A elaboração de um modelo numérico, quantitativo e qualitativo, assenta nas leis físicas que regem o escoamento e o transporte de substâncias em meios porosos, nos métodos numéricos para as resolver (diferenças finitas, elementos finitos, etc.), nos dados que caracterizam fisicamente o aquífero (geometria, propriedades hidrogeológicas, etc.) e ainda na definição das condições de escoamento e transporte nas fronteiras do domínio representativo do aquífero.

As equações diferenciais que regem o escoamento e o transporte, e as respectivas condições fronteira, são conhecidas. Os métodos numéricos para as integrar são de utilização corrente e os meios de cálculo computacional cada vez mais poderosos. As maiores dificuldades residem na caracterização física do aquífero e na quantificação das condições nas fronteiras deste face á variabilidade que o meio natural apresenta.

O movimento da água e das substâncias através dos solos é influenciado não só pela distribuição espacial e temporal das alimentações e extracções como também pela natureza dos materiais atravessados. As características destes materiais contribuem para definição das propriedades hidrogeológicas do meio natural que estão presentes nas leis físicas acima referidas. Gelhar (1993), para além dos exemplos que apresenta, refere os trabalhos de vários autores (Freeze, 1975; Delhomme, 1979; Warrick and Nielson, 1980; Gelhar, 1986) que realizaram e tabelaram numerosas medições dessas propriedades para diversos tipos de aquíferos e solos. Ainda segundo Gelhar (1993), esses trabalhos permitem concluir que a variação espacial das propriedades hidrogeológicas constitui a regra, e não a excepção, e que

essas variações podem ser de várias ordem de grandeza para um mesmo aquífero ou tipo de solo.

A variabilidade natural, a dimensão do domínio e a ordem de grandeza espacial e temporal do problema a estudar impõem a consideração de vários tipos de escalas espaciais e temporais. De facto, para alguns tipos de problemas, variações das propriedades hidrogeológicas a uma escala inferior ao metro ou variações temporais de algumas horas podem produzir alterações significativas nas variáveis do problema. Já noutros problemas, apenas são significativas variações das propriedades hidrogeológicas a uma escala da ordem das centenas de metros ou variações temporais de meses ou anos. Por exemplo, na exploração de um aquífero para o abastecimento de água, a variação diária do caudal extraído ou as precipitações diárias não têm impacto no comportamento global do aquífero. Para este efeito são mais significativos os respectivos valores mensais ou anuais. No estudo da contaminação das águas subterrâneas a unidade de tempo significativa pode ser a dezena de anos ou até muito superior no caso de substâncias radioactivas. Para aquíferos com áreas da ordem de vários quilómetros quadrados não tem interesse considerar variações das propriedades hidrogeológicas da ordem da dezena de metros. De facto, nestes casos as variáveis em jogo são ponderadas temporal e espacialmente pelo que o correspondente efeito de suavização introduzido esconde as variações a pequena escala associadas à heterogeneidade natural.

Uma sucinta abordagem das escalas espaciais que caracterizam o meio natural e os fenómenos de escoamento e transporte é apresentada por Dagan (1989). De acordo com este autor são três as *escalas espaciais fundamentais*. A primeira, *L*, caracteriza a *dimensão do domínio* do escoamento ou transporte e é subdividida em três grandezas básicas: a laboratorial, a local e a regional. A primeira respeita à dimensão das amostras utilizadas para o estudo laboratorial dos fenómenos acima referidos, geralmente unidimensionais, e tem uma ordem de grandeza de $10^0$ metros. A segunda respeita à espessura dos aquíferos ou a dimensão equivalente no plano horizontal. A esta escala, com uma ordem de grandeza de $10^1$ a $10^2$ metros, os fenómenos de escoamento e transporte são tridimensionais e a heterogeneidade manifesta-se principalmente em variações de permeabilidade associadas à estratificação de formações sedimentares. A terceira escala, regional, respeita à dimensão no plano horizontal do aquífero e apresenta uma ordem de grandeza de $10^3$ a $10^5$ metros, substancialmente superior à espessura do aquífero. Tal como refere este autor, esta é a escala relevante para o estudo da exploração de um aquífero e respectivo balanço hídrico. O mesmo

sucede para o estudo de contaminações difusas ou da propagação de plumas de contaminação em largos períodos de tempo. A segunda escala fundamental, $I$, caracteriza a heterogeneidade de uma determinada propriedade do meio poroso. É a *escala de correlação*, ou seja, a distância a partir da qual a referida propriedade deixa de estar correlacionada. A ordem de grandeza relativa destas duas escalas fundamentais é muito importante. Por exemplo, a verificação de que $I$ é muito inferior a $L$ e a hipótese de estacionaridade estatística fundamentam o conceito de ergodicidade que permite inferir a estrutura probabilística de uma *função aleatória* à custa da caracterização estatística da única realização disponível que é o meio natural. Finalmente, a terceira escala fundamental, $D$, respeita à *dimensão da região* do domínio relativamente ao qual as *propriedades* ou as *variáveis* são *ponderadas*. Esta dimensão pode ser a definida pelos dispositivos ou técnicas de medição, ou ainda pelas necessidades e objectivos inerentes à modelação do problema. No caso da coluna laboratorial, as velocidades são ponderadas relativamente à secção transversal. Os piezómetros e poços de bombagem funcionam como dispositivos de ponderação à escala local. À escala regional, $D$, tanto pode estar associada a um ponto, no caso do piezómetro ou do poço de bombagem, como ao domínio completo caso este seja interpretado como uma unidade para efeito de balanço global.

Ainda segundo Dagan (1989), a hierarquia das três escalas espaciais fundamentais tem um papel importante na análise dos fenómenos. No caso particular da escala regional, $D$ apresenta uma ordem de grandeza muito inferior a $I$ ($D << I$) uma vez que o estudo do escoamento e do transporte se baseia nos valores pontuais das variáveis e propriedades interessadas. Como consequência, a "ponderação pontual" das propriedades não esconde nem suaviza as heterogeneidades espaciais destas, dando origem à incerteza quanto à sua distribuição espacial na medida em que são apenas conhecidas nos pontos de medição.

Assim, os problemas a larga escala – espacial e temporal – como são alguns dos exemplos acima referidos, enfrentam a dificuldade de as medições das propriedades se realizarem durante períodos de tempo relativamente curtos e interessarem apenas uma pequena área em redor dos locais onde são efectuadas. Um dos desafios que se coloca é o de usar essas informações, limitadas no espaço e no tempo, e prever o comportamento a larga escala de um aquífero. O outro é o de avaliar a inevitável incerteza associada a essas previsões ou simulações.

Particularizando, a identificação da geometria do aquífero depende do conhecimento da geologia do local, área ou região interessados. Por muito exaustivos que sejam os trabalhos de reconhecimento geológico, este assenta num conjunto discreto de observações. O mesmo sucede com os ensaios para a determinação das propriedades hidrogeológicas do aquífero. Logo, tanto as observações como os ensaios constituem apenas uma pequena amostra da realidade heterogénea que é o meio subterrâneo pelo que a resposta do modelo numérico construído com base nesta informação – discreta, dispersa e quase sempre escassa – é inevitavelmente afectada por um determinado grau de incerteza. O desafio da simulação (com um modelo numérico) do escoamento da água ou do transporte de solutos num aquífero está, então, no tratamento da informação disponível, na incorporação desta no modelo e na previsão de resultados com uma estimativa da incerteza associada, isto é, na *modelação* dos fenómenos num contexto *estocástico*.

Em termos mais precisos, a modelação estocástica pode ser entendida como a dedução e resolução das equações dos momentos estatísticos (*valor esperado* e *variância*) das variáveis de estado do escoamento e do transporte (*cota piezométrica* e *concentração*), tendo em conta os momentos estatísticos que caracterizam a estrutura heterogénea das propriedades hidrogeológicas. Uma abordagem alternativa da modelação estocástica consiste na resolução numérica das equações diferenciais do escoamento ou do transporte para um grande número de realizações das propriedades hidrogeológicas cuja variabilidade natural se pretende incorporar no modelo. A partir do conjunto dos resultados obtidos são calculados os momentos estatísticos acima referidos, histogramas, funções de distribuição de probabilidade, etc. A variância, calculada por um qualquer destes processos, permite quantificar o grau de variabilidade dos resultados em torno dos valores esperados e é a medida mais simples da incerteza associada aos resultados.

Face à dificuldade em abordar todos os tipos de aquíferos, ou sistemas aquíferos, e tratar todas as informações necessárias à elaboração de um modelo – seria demasiada presunção – o trabalho que aqui se introduz orientou-se, por um lado, para a *modelação* do escoamento e, por outro, para a *estimação* das propriedades hidrogeológicas e da alimentação superficial, num contexto *estocástico*, tendo em mente os *aquíferos regionais porosos*, *confinados* e *não confinados*.

Com a finalidade de situar o problema do escoamento da água nos aquífero porosos, confinados ou não, o *Capítulo 2* é dedicado à apresentação das respectivas equações diferenciais e condições fronteira associadas. Embora se trate de matéria razoavelmente estabelecida e muito bem exposta por diversos autores, entre os quais se destacam Bear (1972 e 1979), Freeze e Cherry (1979) e Marsily (1986)[1], optou-se por uma abordagem relativamente detalhada de modo a evidenciar a diferença entre as condições em que se verificam os escoamentos nos aquíferos confinados e nos aquíferos não confinados, pese embora a semelhança das respectivas equações diferenciais.

A integração das equações diferenciais é realizada pelo Método dos Elementos Finitos (MEF). Embora no domínio da Hidrogeologia (ou Hidrologia Subterrânea) seja tradicional o recurso ao Método das Diferenças Finitas (MDF), afigura-se-nos que o MEF constitui uma ferramenta mais poderosa e flexível. O respectivo corpo teórico é apresentado no *Capítulo 3*, merecendo particular atenção a formulação de *resíduos pesados* que será repetidamente utilizada na dedução das equações algébricas que realizam a integração das diversas equações diferenciais em ordem às coordenadas espaciais e ao tempo.

Cumprida a etapa inicial de expor as equações que regem os escoamentos nos meios subterrâneos porosos e um método de integração numérica das mesmas, segue-se uma análise mais detalhada dessas equações face à variabilidade espacial dos parâmetros hidrogeológicos. Estes são representados por *funções aleatórias*, cuja definição e caracterização probabilística é então apresentada. À Geoestatística, sua definição e aplicação à Hidrogeologia, é em grande parte dedicado o *Capítulo 4*. A inferência estatística e a análise estrutural das funções aleatórias são referidas com algum detalhe. Neste contexto, o semivariograma é tratado com particular atenção na medida em que é o mais poderoso instrumento de análise estrutural de uma função aleatória. As funções aleatórias multivariadas normais, a respectiva caracterização probabilística através da função de densidade de probabilidade, a conveniência da sua utilização nos casos particulares das funções aleatórias estacionárias e intrínsecas e a transformação de variáveis são também referidas com algum cuidado. As distribuições condicionadas das funções aleatórias multivariadas normais e, em particular, a quantificação

[1] Marsily (1986) constituiu o principal suporte teórico para a redacção do *Capítulo 2*. É considerado por diversos autores um excelente texto de apresentação dos princípios fundamentais e das equações que regem o escoamento e o transporte de substâncias em meios subterrâneos porosos. Inclui, também, uma introdução aos princípios básicos da Geoestatística e da Hidrogeologia Estocástica.

dos momentos condicionados de primeira e segunda ordem ocupam um lugar significativo neste capítulo, possibilitando o estabelecimento de um contraponto às expressões dos estimadores geoestatísticos *krigagem* e *cokrigagem*. Estes métodos de estimação, a respectiva fundamentação teórica e as covariâncias dos erros de estimação, constituem a parte final do quarto capítulo, onde são especialmente tratados os estimadores para as funções aleatórias estacionárias, com média conhecida ou não, e para as funções aleatórias intrínsecas. Em resumo, neste capítulo procura-se dar uma visão global dos métodos disponíveis para a representação (estimação) das propriedades hidrogeológicas, tendo em consideração a sua variabilidade espacial, e a avaliação da incerteza associada a essa representação.

O *Capítulo 5* é dedicado à apresentação da simulação directa dos escoamentos em aquíferos regionais porosos, confinados ou não, num contexto estocástico. Dois métodos são analisados com algum detalhe: o *método das simulações de Monte-Carlo* e o *método das perturbações*. O primeiro assenta na resolução numérica da equação diferencial do escoamento para um grande número de realizações das propriedades físicas dos aquíferos. Os resultados obtidos, em cada ponto e em cada instante da discretização dos domínios espacial e temporal do problema, são armazenados e submetidos a posterior tratamento estatístico. Por exemplo, podem ser determinados, nesses pontos e instantes, os dois primeiros momentos estatísticos da variável de estado. Ainda no âmbito deste método são descritas duas técnicas para a geração das realizações das propriedades dos aquíferos. Embora não constituam o assunto central do presente trabalho, as simulações de Monte-Carlo são aqui apresentadas porque, para além de conceptualmente simples, permitem efectuar alguns exercícios de comparação de resultados com o método das perturbações.

A definição das funções aleatórias como a soma do respectivo valor esperado com a flutuação, ou *perturbação*, em torno deste, e a introdução desta definição na equação diferencial do escoamento dão lugar às duas equações diferenciais que caracterizam o método das perturbações: uma, idêntica à original, é escrita para os valores esperados das variáveis em jogo e a outra relaciona as perturbações dessas variáveis. A dedução destas equações diferenciais implica a adopção de algumas simplificações que, por sua vez, são geradoras de erros nas relações entre os valores esperados das variáveis do problema. Tratando-se de uma matéria que envolve as condições de validade do próprio método das perturbações e relativamente à qual é de esperar significativos avanços nos próximos tempos, entendeu-se oportuno verter para o texto algumas considerações baseadas nas contribuições mais recentes

de alguns destacados autores. O quinto capítulo prossegue, depois, com a dedução das expressões algébricas que materializam a integração numérica, pelo MEF, das equações diferenciais dos valores esperados e das perturbações sobre as quais assentam as relações matriciais entre os momentos estatísticos de segunda ordem (covariâncias) da variável de estado e das funções que representam as propriedades hidrogeológicas dos aquíferos. No final do capítulo são resolvidos dois exemplos pelos métodos das simulações de Monte-Carlo e das perturbações, o primeiro idealizado para um aquífero confinado e o segundo para um não confinado, e efectuadas as análises críticas aos respectivos resultados.

Terminado o quinto capítulo, fica evidente que a simulação directa estocástica de um escoamento num aquífero carece, entre outros dados, da melhor estimação possível das propriedades físicas deste e da quantificação das respectivas estruturas de covariância. No *Capítulo 6* é proposta uma metodologia para estimar, simultaneamente, a distribuição espacial das propriedades hidrogeológicas e a recarga (ou extracção) superficial efectiva dos aquíferos regionais porosos com base num conjunto discreto de observações dessas propriedades e do nível piezométrico. Uma vez que a esta metodologia está associada uma abordagem inversa à da simulação directa, isto é, a determinação das propriedades do aquífero sendo conhecida a variável de estado do problema, é lhe frequentemente atribuída a designação de modelação inversa. Quando, num contexto estocástico, (*i*) as referidas propriedades são representadas por funções aleatórias caracterizadas por um reduzido número de parâmetros, (*ii*) a quantificação (estimação) destes é realizada com base no tratamento probabilístico das diferenças entre as observações das propriedades hidrogeológicas e, em particular, do nível piezométrico e as correspondentes respostas do modelo e (*iii*) os momentos de primeira e segunda ordem das propriedades hidrogeológicas são calculados à custa do estabelecimento de correlações cruzadas entre estas e a variável de estado, a correspondente metodologia toma a designação de *modelação inversa estocástica* (ou metodologia inversa estocástica). A fundamentação teórica da metodologia proposta e, em particular, a apresentação e descrição pormenorizada dos diversos aspectos que a configuram – e que suportam a elaboração do algoritmo numérico que a materializa – ocupam a maior parte do sexto capítulo e constituem o tema nuclear desta tese. A finalizar o capítulo, são apresentados dois exercícios de aplicação desta metodologia, um para cada tipo de aquífero.

*CAPÍTULO 2*

# ESCOAMENTOS EM MEIOS SUBTERRÂNEOS. LEIS FÍSICAS


2.1 Considerações gerais 2.1

2.2 Meio poroso "contínuo" 2.2

2.3 Algumas definições 2.3
2.3.1 Porosidade total 2.4
2.3.2 Porosidade seccional 2.5
2.3.3 Superfície específica 2.5
2.3.4 A água no solo. Água adsorvida e água livre 2.6
2.3.5 Porosidade efectiva 2.6
2.3.6 Teor de humidade e coeficiente de saturação 2.7
2.3.7 Porosidade drenável 2.8
2.3.8 Carga hidráulica e cota piezométrica 2.10

2.4 Equações gerais da Mecânica dos Fluidos 2.11
2.4.1 Equação de continuidade. Expressão geral 2.12
2.4.2 Equação da continuidade. Expressão válida para meios porosos 2.14
2.4.3 Equações de equilíbrio dinâmico. Lei de Darcy generalizada 2.17
2.4.4 Lei de Darcy generalizada para meios anisotrópicos 2.24

2.5 Aquíferos regionais. Equações diferenciais 2.28
2.5.1 Aquíferos regionais não confinados 2.31
2.5.2 Aquíferos regionais confinados 2.38
2.5.3 Condições iniciais e condições fronteira em aquíferos regionais 2.58


## 2.1 Considerações gerais

Os solos e as rochas são um meio natural composto, no caso mais geral, por três fases: sólida, líquida e gasosa. No caso dos *meios porosos*, as partículas minerais (grãos) constituem o esqueleto sólido e os vazios (poros) existentes entre os grãos, interligados ou não, são ocupados por água, por ar ou por ambos os fluidos. A designação de *meios fissurados* é aplicada às rochas que apresentam fissuras, segundo planos orientados em várias direcções, que dividem a rocha em blocos e formam um conjunto de vazios mais ou menos interligados. Analogamente aos meios porosos, estes espaços são ocupados por água, por ar ou por ambos. O escoamento da água, e o transporte de substâncias, através destes meios é fortemente condicionado pelas características (dimensões, forma, interligação, orientação, etc.) dos poros ou fissuras. Estas características reflectem-se em dois parâmetros hidrogeológicos fundamentais presentes nas leis físicas que regem estes fenómenos: a *porosidade* e a *permeabilidade*.

Na unidade hídrica especialmente visada por este trabalho, o aquífero poroso, considera-se que os vazios estão totalmente preenchidos por água e que a estrutura sólida é rígida ou ligeiramente deformável.

## 2.2 Meio poroso "contínuo"

As leis que regem o escoamento e o transporte num meio poroso baseiam-se numa concepção contínua deste. De facto, as diversas variáveis presentes nas equações de conservação da massa, de equilíbrio dinâmico e de estado não são interpretadas como grandezas pontuais, mas antes como grandezas *macroscópicas* ponderadas relativamente a regiões do domínio poroso suficientemente grandes para conterem um grande número poros e passagens entre estes. Assim, o valor pontual de uma qualquer grandeza física é entendido como a média dessa grandeza numa região, de dimensão apropriada, envolvente do ponto. Este modo de proceder suaviza a irregularidade do meio poroso, permitindo a representação contínua deste. Idêntico procedimento está na base das equações da Mecânica dos Fluidos quando se efectua uma ponderação das variáveis a uma escala de grandeza superior à molecular. De facto, a cada nível de abordagem de um problema está implícita uma ponderação baseada na diferença de escalas, isto é, cada variável é ponderada em relação a uma dimensão suficientemente grande para "esconder" uma variabilidade a pequena escala que não interessa analisar à escala a que o problema é colocado. Como adiante se verificará, este procedimento é novamente adoptado na formulação das equações para os aquíferos regionais quando as diversas variáveis e propriedades são ponderadas, ou integradas, em relação à espessura do aquífero, perdendo a sua representação vertical[1].

Nesta definição de variável macroscópica está implícita uma ponderação *espacial* relativamente a uma região que é designada por *volume elementar representativo*[2]. Este volume deverá ter, simultaneamente, uma dimensão muito superior à dos poros e muito inferior à do domínio de estudo. Também se admite que os valores das grandezas macroscópicas são independentes da dimensão do volume elementar representativo.

---

[1] Secções 2.5.1 e 2.5.2.
[2] Bear (1972).

Dagan (1989) apresenta uma abordagem alternativa para a dedução das equações, a abordagem *estatística*. Nesta, o comportamento das variáveis ao nível microscópico é interpretado, não como determinístico, mas como sendo aleatório. A ponderação estatística é realizada relativamente ao conjunto das realizações da variável. Contudo, a natureza apenas fornece uma realização de cada variável pelo que se coloca o problema da inferência estatística a partir de uma única realização da função aleatória. Esta inferência é possível para a hipótese da estacionaridade estatística, a partir da qual se admite obter os parâmetros estatísticos por uma ponderação espacial, em alternativa à ponderação relativa ao conjunto das realizações imaginárias. Este procedimento, baseado na equivalência entre ponderações espaciais e estatísticas, fundamenta-se na hipótese da *ergodicidade*, que admite que uma realização de uma função aleatória estacionária contém todos os estados do conjunto das realizações dessa função. Deste modo, a definição de grandeza macroscópica num contexto estatístico acaba por se confundir com a obtida por ponderação espacial relativamente ao volume representativo elementar. Dagan (1989) estabelece uma relação quantitativa entre a dimensão da região de ponderação e o raio dos grãos, ligeiramente superior a 50, para o caso teórico de um meio poroso tridimensional constituído por esferas de igual raio. Cumprida esta relação estará, ainda segundo Dagan (1989), assegurada a independência da ponderação espacial relativamente à dimensão da respectiva região.

Face ao exposto, continua a fazer sentido a dedução das equações fundamentais do escoamento e transporte em meios porosos do modo tradicional, em que as diversas variáveis ou propriedades são interpretadas como macroscópicas e definidas com base na ponderação espacial no volume elementar representativo centrado em cada ponto do domínio. É o que se fará neste trabalho. A abordagem estatística fica reservada para as equações respeitantes aos aquíferos de dimensão regional.

## 2.3 Algumas definições

Nas leis que regem os fenómenos tratados por este trabalho estão presentes, explícita ou implicitamente, algumas variáveis ou propriedades, cuja definição é aqui revista de uma forma sucinta.

### 2.3.1 Porosidade total

A *porosidade* total, $\omega$, é uma grandeza adimensional que mede a proporção entre o volume de vazios (poros) e o volume total do solo

$$\omega = \frac{\text{volume dos vazios}}{\text{volume total de solo}} = \frac{V_V}{V_T} = \frac{V_V}{V_V + V_S} \tag{2.1}$$

A diferença 1-$\omega$ é conhecida como compacidade. Outro parâmetro relacionado com a porosidade é o *índice de vazios*, $e$, definido por

$$e = \frac{\text{volume dos vazios}}{\text{volume sólido}} = \frac{V_V}{V_S} \tag{2.2}$$

O índice de vazios pode ser expresso à custa da porosidade e vice-versa

$$e = \frac{\omega}{1-\omega} \tag{2.3}$$

$$\omega = \frac{e}{1-e} \tag{2.4}$$

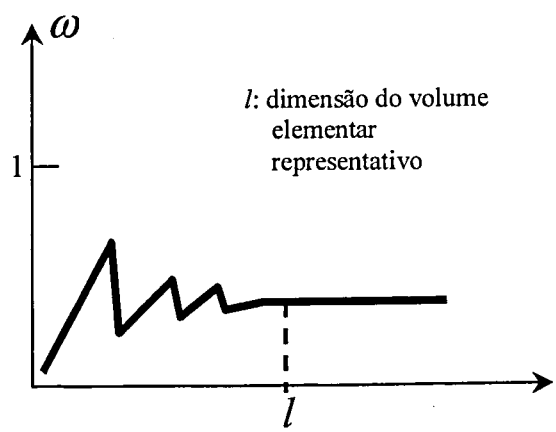



Figura 2.1 - Definição do volume elementar representativo.

Tal como se antecipou no sub-capítulo anterior, a porosidade deve ser calculada para um "volume total de solo" representativo elementar, suficientemente grande para conter um elevado número de vazios e assegurar que as flutuações de um poro para outro são insignificantes e, simultaneamente, suficientemente pequeno relativamente ao domínio em estudo.

A dimensão do volume elementar representativo (Figura 2.1), definida pelo seu raio, se for esférico, ou pela aresta, se for um cubo, pode ser extraída do gráfico que relaciona a grandeza ponderada, neste caso $\omega$, com a referida dimensão, $l$. Ao aumentar a região de ponderação espacial, as oscilações do gráfico vão-se estabilizando até se atingir um patamar . O início do patamar será a dimensão mínima do volume elementar representativo. Contudo, importa referir que poder-se-á dar o caso de não se alcançar um patamar perfeitamente horizontal. De facto, haverá situações em que após o desaparecimento das oscilações bruscas, o gráfico apresenta uma tendência crescente ou decrescente, embora suave. Será o caso das grandezas que variam muito rapidamente.

### 2.3.2 Porosidade seccional

Relativamente a uma secção produzida no meio poroso é possível definir a porosidade seccional, $\omega_s$, como o quociente

$$\omega_s = \frac{\text{área dos vazios da secção}}{\text{área total da secção}} = \frac{A_V}{A_T} = \frac{A_V}{A_V + A_S} \tag{2.5}$$

Se a dimensão e a distribuição dos vazios for totalmente aleatória, $\omega_s$ é independente da orientação da secção considerada e tem o mesmo valor que a porosidade total.

### 2.3.3 Superfície específica

A superfície específica, $S_{sp}$, é definida por

$$S_{sp} = \frac{\text{área intersticial dos vazios}}{\text{volume total de solo}} = \frac{S_V}{V_T} \tag{2.6}$$

O valor deste parâmetro cresce com a diminuição da dimensão dos grãos do solo. Segundo Marsily (1986), para um meio poroso ideal constituído por esferas de raio $R$, organizadas num arranjo cúbico, a superfície específica é expressa por

$$S_{sp} = \frac{\pi}{2R} \quad (\mathrm{m}^2/\mathrm{m}^3) \tag{2.7}$$

### 2.3.4 A água no solo. Água adsorvida e água livre

Devido à polarização eléctrica das partículas minerais dos solos, parte da água presente nos solos encontra-se fortemente ligada às partículas e grãos, constituindo aquilo que se designa por *água adsorvida*. Por oposição, a água que não fica sujeita às forças de atracção molecular toma a designação de *água livre*. É esta parcela da água que circula nos solos, por acção da gravidade ou de gradientes de pressão.

O fenómeno da adsorção aumenta com a superfície específica, $S_{sp}$. Nas argilas, a adsorção da água é particularmente significativa, reduzindo substancialmente a parcela de água com possibilidade de circular. Este facto justifica a introdução de uma nova definição relativa à porosidade.

### 2.3.5 Porosidade efectiva

A água adsorvida, uma vez que não circula, pode ser entendida como fazendo parte da fase sólida do meio poroso. Por outro lado, há que considerar a existência de poros do tipo "dead-end" ou bolha que, pela sua posição no interior do meio poroso, não se encontram nas "condutas" de circulação da água ao nível microscópico. Assim, o volume de vazios

disponível para o movimento da água fica reduzido. A *porosidade efectiva* ou *cinemática*, $\omega_c$, é então definida pelo quociente adimensional

$$\omega_c = \frac{\text{volume de água móvel}}{\text{volume total de solo}} = \frac{V_{am}}{V_T} \tag{2.8}$$

sendo $\omega_c < \omega$. Trata-se de uma definição de porosidade conceptualmente ligada ao problema do escoamento em meios porosos saturados, enquanto que (2.1) representa a percentagem do volume de solo que pode ser ocupada pela fase líquida. A diferença entre estas duas porosidades é designada por capacidade de retenção do solo saturado (Figura 2.3).

### 2.3.6 Teor de humidade e coeficiente de saturação

O *teor de humidade* do solo, $\theta$, é medido por um coeficiente adimensional definido pelo quociente

$$\theta = \frac{\text{volume de água no solo}}{\text{volume total de solo}} = \frac{V_a}{V_T} \tag{2.9}$$

Quando o solo está saturado, isto é, quando a água ocupa totalmente os vazios entre as partículas e grãos do solo, o teor de humidade é igual à porosidade total. Nos solos não saturados o teor de humidade é uma fracção da porosidade e pode ser quantificado à custa de um outro parâmetro adimensional, o *coeficiente de saturação* $S_w$

$$S_w = \frac{\text{volume de água no solo}}{\text{volume de vazios no solo}} = \frac{V_a}{V_V} \tag{2.10}$$

que mede a fracção do volume de vazios ocupado pela água. Assim, o teor de humidade pode ser expresso pelo produto do coeficiente de saturação pela porosidade total (2.11).

$$\theta = S_w \omega \tag{2.11}$$

### 2.3.7 Porosidade drenável

Em princípio, e de acordo com a expressão (2.10), o coeficiente de saturação pode ter zero como valor mínimo. Contudo, tal não ocorre, uma vez que o limite mínimo de $S_w$ é condicionado pela presença da água adsorvida e ainda pela capacidade de retenção capilar dos solos não saturados que impede a circulação da água por acção exclusivamente gravítica. Assim, a fracção da porosidade que pode ser drenada por acção exclusivamente gravítica é designada por *porosidade drenável*[3], $\omega_d$ (Figura 2.4). É a diferença entre a porosidade total e o valor de estabilização do teor de humidade no gráfico que relaciona as pressões efectivas negativas (pressões capilares) com o teor de humidade (Figura 2.2). A porosidade drenável é, regra geral, inferior à porosidade efectiva, pelo que o volume de água disponível para o escoamento em condições saturadas é superior ao que é cedido pelo meio poroso quando este é drenado em condições exclusivamente gravíticas.

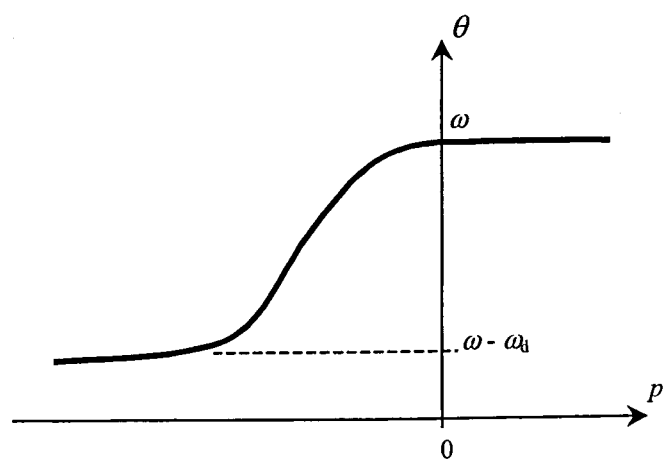



Figura 2.2 – Gráfico que relaciona o teor de humidade com a pressão efectiva.

[3] Na literatura de língua inglesa $\omega_d$ é designada por "specific yield".

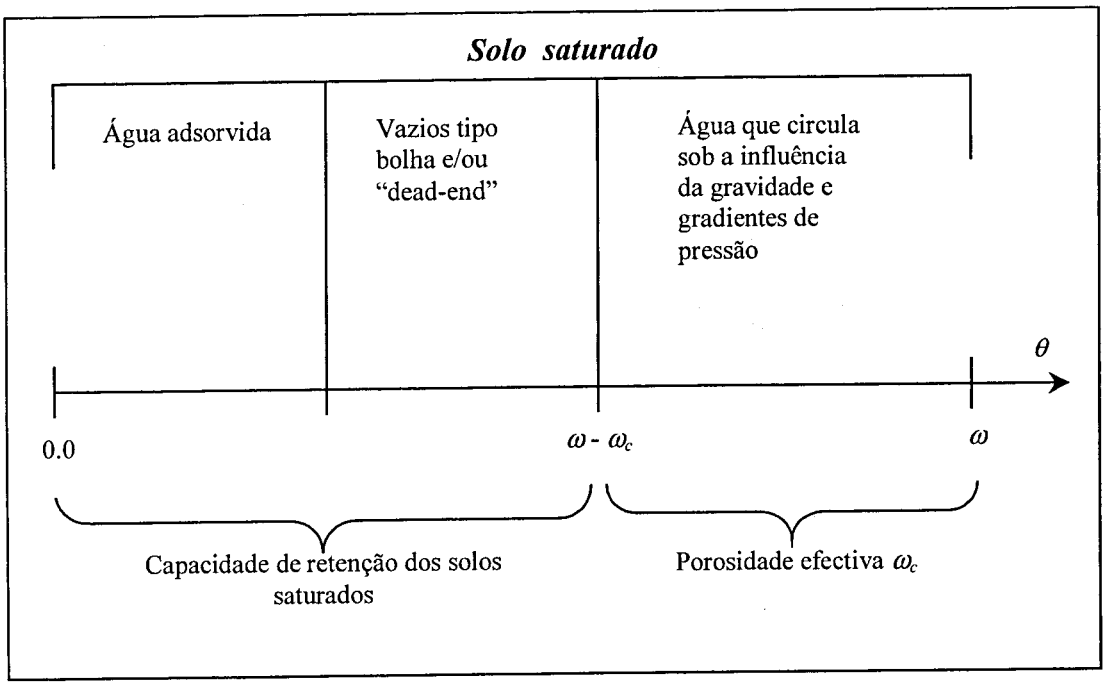



Figura 2.3 - Componentes da porosidade. Circulação da água em solos saturados. Adaptado de Marsily (1986).

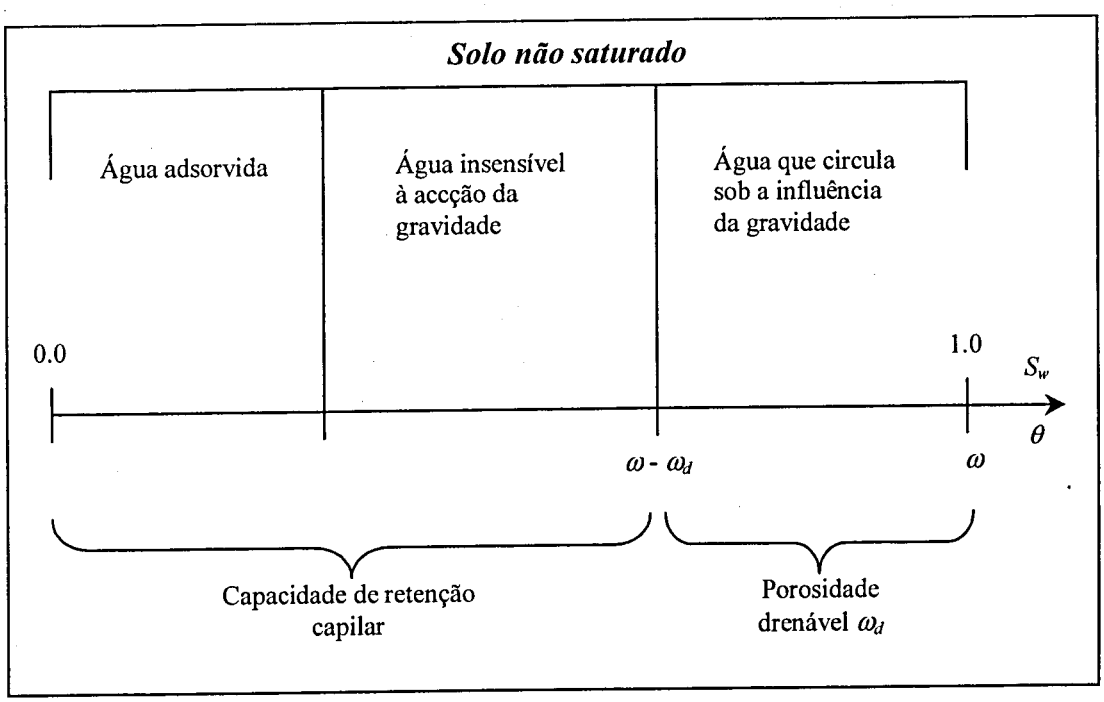



Figura 2.4 – Componentes da porosidade. Solos não saturados. Adaptado de Marsily (1986).

A porosidade drenável é um parâmetro importante para os aquíferos não confinados, relativamente aos quais $\omega_d$ significa o volume de água cedido por unidade de área de aquífero, quando se verifica um abaixamento unitário do respectivo nível freático.

### 2.3.8 Carga hidráulica e cota piezométrica

Num ponto qualquer, a *carga hidráulica* de um fluido incompressível, sujeito apenas à acção gravítica, é definida por

$$H = z + \frac{p}{\gamma} + \frac{v^2}{2g} \qquad \text{ou} \qquad H = z + \frac{p}{\rho g} + \frac{v^2}{2g} \tag{2.12}$$

sendo:

- $z$ a *cota* da partícula fluida em relação a um plano horizontal de referência e corresponde à energia potencial de posição da partícula, por unidade de peso;

- $p/\gamma$ a energia potencial de pressão da partícula fluida, por unidade de peso. Tem a dimensão de um comprimento e é designada por *altura piezométrica*;

- $v^2/2g$ a energia cinética da partícula fluida, por unidade de peso. Também tem a dimensão de um comprimento e é designada por *altura cinética*.

De acordo com o Teorema de Bernoulli, a carga hidráulica, $H$, representa a energia mecânica total da partícula fluida, por unidade de peso, e decresce na direcção e sentido do escoamento. Se este não existir, $H$ permanece constante em todos os pontos do domínio. Nos escoamentos em meios porosos, tanto as velocidades de percolação como as velocidades reais das partículas fluidas são tão baixas que tornam o valor da altura cinética desprezável. Assim, a carga hidráulica resume-se à soma das primeiras duas parcelas de (2.12), também designada por *cota piezométrica*, e mede o *nível piezométrico*[4] do escoamento

[4] Ao longo deste texto, alguma comodidade de linguagem é responsável pelo uso indistinto das designações de carga hidráulica, cota piezométrica ou nível piezométrico.

$$H = z + \frac{p}{\gamma} \qquad \text{ou} \qquad H = z + \frac{p}{\rho g} \tag{2.13}$$

Deste modo, carga hidráulica e cota piezométrica[5] têm o mesmo significado para os escoamentos em meios porosos e, geralmente, medem o nível piezométrico relativamente ao nível médio das águas do mar, à semelhança das cotas topográficas.

## 2.4 Equações gerais da Mecânica dos Fluidos

A resolução de um problema de Mecânica dos Fluidos requer, em geral, a determinação de seis variáveis fundamentais: a massa volúmica $\rho$, a pressão $p$, a temperatura $\theta$ e as três componentes ($v_x$, $v_y$, $v_z$) do campo de velocidades $\vec{\mathbf{v}}$. Estas variáveis são função das coordenadas espaciais e do tempo. As correspondentes equações fundamentais, expressas em coordenadas de Euler, são: a *equação de continuidade*, as *equações de equilíbrio dinâmico*, a *equação de estado do fluido* e a *equação de balanço de energia.*

A equação de balanço de energia, que rege a propagação de calor no fluido, não é habitualmente considerada no estudo dos escoamentos em meios porosos, uma vez que se admite que a temperatura da água é praticamente constante devido à enorme inércia térmica do meio. Como consequência, a temperatura é eliminada da lista das variáveis a determinar e a equação de estado, isotérmica, apenas relaciona a pressão com a massa volúmica.

A equação de continuidade, as equações de equilíbrio dinâmico e a equação de estado, adequadamente trabalhadas, conduzem às leis que regem o escoamento nos meios porosos, nomeadamente os aquíferos regionais que são objecto de particular análise neste trabalho. Nas secções seguintes, as equações fundamentais acima referidas são apresentadas com algum detalhe, assim como a respectiva aplicação aos problemas em apreço.

---

[5] Em alguma literatura, esta grandeza também é designada por *potencial hidráulico*.

### 2.4.1 Equação de continuidade. Expressão geral[6]

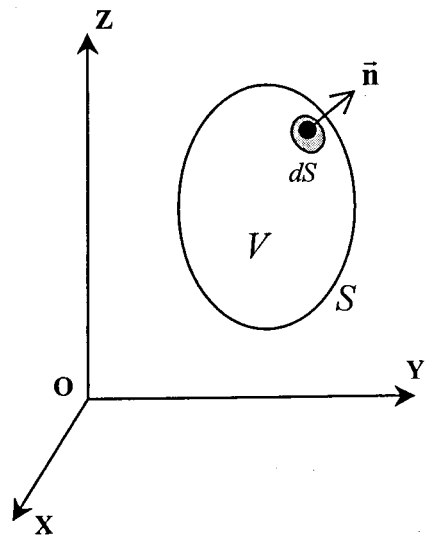



Figura 2.5 – Região de controlo para a dedução da equação de continuidade

A equação de continuidade, ou de conservação da massa, traduz o princípio geral de conservação da massa e escreve-se como uma equação de balanço aplicada a um volume ou região de controlo, $V$, definido por uma superfície, $S$, fixa relativamente a um dado sistema de eixos (Figura 2.5). A expressão geral da equação de balanço impõe que a diferença entre a quantidade de massa que sai e a que entra, num determinado intervalo de tempo, seja igual à diminuição de massa no interior do volume de controlo nesse mesmo intervalo de tempo

$$\boxed{M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = \Delta M_{\text{interior}}} \tag{2.14}$$

A massa elementar $dm$ que atravessa uma área elementar $dS$ da superfície $S$, na unidade de tempo, é dada por

$$dm = \rho\, \vec{\mathbf{v}} \mid \vec{\mathbf{n}}\, dS \tag{2.15}$$

para um versor da normal à superfície, $\vec{\mathbf{n}}$, dirigido para o exterior do volume de controlo. Atendendo ao produto interno presente em (2.15), o fluxo de massa é positivo quando esta sai

---

[6] A dedução da expressão geral da equação de continuidade aqui apresentada segue de perto a que se encontra em Novais-Barbosa (1985a).

da região de controlo. Assim, a primeira parcela de (2.14), referida à unidade de tempo, é definida por

$$M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = \int_S \rho \vec{\mathbf{v}} \mid \vec{\mathbf{n}}\, dS \tag{2.16}$$

A massa contida no interior do volume de controlo é expressa por

$$M = \int_V \rho\, dV \tag{2.17}$$

e a respectiva diminuição na unidade de tempo

$$\Delta M_{\text{interior}} = -\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\, dV \tag{2.18}$$

Substituindo (2.16) e (2.18) em (2.14) e tendo em consideração que os limites de integração são fixos, logo independentes do tempo, obtém-se

$$\int_S \rho \vec{\mathbf{v}} \mid \vec{\mathbf{n}}\, dS + \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = 0 \tag{2.19}$$

O Teorema de Ostrogradsky iguala o fluxo de um vector, ao longo de uma superfície fechada, ao integral da divergência desse vector estendido ao volume limitado pela superfície. Este Teorema, aplicado à primeira parcela de (2.19), permite rescrever esta equação

$$\int_V \left[ \operatorname{div}(\rho \vec{\mathbf{v}}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} \right] dV = 0 \tag{2.20}$$

Finalmente, e uma vez que o volume de controlo $V$ é arbitrário, a anulação do integral implica que o respectivo argumento também seja nulo

$$\boxed{\operatorname{div}(\rho \vec{\mathbf{v}}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0} \tag{2.21}$$

É esta a expressão geral da equação de continuidade. É uma equação local, absolutamente geral, válida para qualquer fluido de viscosidade newtoniana ou não newtoniana.

### 2.4.2 Equação da continuidade. Expressão válida para meios porosos

A equação de continuidade (2.21) é válida, ao nível microscópico, para a água no interior dos vazios do meio poroso. Contudo, a interpretação macroscópica de variáveis e propriedades e o facto de a água não ocupar a totalidade do domínio impõem uma reformulação da equação. Para o efeito, esta é novamente deduzida, seguindo os passos da secção anterior, mas com as adaptações apropriadas.

A massa de fluido que sai ou entra na região de controlo atravessa apenas a fracção da superfície que a limita correspondente aos vazios do meio poroso. Essa fracção é definida, em princípio, pela porosidade seccional, $\omega_s$, que se admite ser idêntica à porosidade total. Contudo, e tendo presente o exposto em 2.3.5, deve-se considerar um valor inferior, correspondente à porosidade efectiva, $\omega_c$. Assim, a massa elementar $dm$ que atravessa uma área elementar "representativa" $dS$, na unidade de tempo, é dada agora por

$$dm = \rho\, \vec{\mathbf{u}} \mid \vec{\mathbf{n}}\, \omega_c\, dS \quad \text{ou} \quad dm = \rho\, \omega_c\, \vec{\mathbf{u}} \mid \vec{\mathbf{n}}\, dS \tag{2.22}$$

sendo $\vec{\mathbf{u}}$ a velocidade média da água no interior das "condutas" do meio poroso. A primeira parcela de (2.14), referida à unidade de tempo, é definida por

$$M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = \int_S \rho\, \omega_c\, \vec{\mathbf{u}} \mid \vec{\mathbf{n}}\, dS \tag{2.23}$$

O elemento de "volume representativo" é ocupado pela água na parcela respeitante à porosidade. Assim, a massa de água contida no interior do volume de controlo é expressa por

$$M = \int_V \rho\, \omega\, dV \tag{2.24}$$

e a respectiva diminuição na unidade de tempo

$$\Delta M_{\text{interior}} = -\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\,\omega\,dV \tag{2.25}$$

Substituindo (2.23) e (2.25) na equação de balanço (2.14) e atendendo a que os limites de integração não dependem do tempo, obtém-se

$$\int_S \rho\,\omega_c\,\vec{\mathbf{u}}\,|\,\vec{\mathbf{n}}\,dS + \int_V \frac{\partial(\rho\,\omega)}{\partial t}\,dV = 0 \tag{2.26}$$

Recorrendo novamente ao Teorema de Ostrogradsky

$$\int_V \left[\operatorname{div}(\rho\,\omega_c\,\vec{\mathbf{u}}) + \frac{\partial(\rho\,\omega)}{\partial t}\right] dV = 0 \tag{2.27}$$

e à anulação do argumento de (2.27), obtém-se a equação de continuidade para meios porosos saturados

$$\boxed{\operatorname{div}(\rho\,\omega_c\,\vec{\mathbf{u}}) + \frac{\partial(\rho\,\omega)}{\partial t} = 0} \tag{2.28}$$

Nesta equação, as variáveis e propriedades têm o significado macroscópico anteriormente referido e os respectivos valores são interpretados como ponderações espaciais ou estatísticas, conforme a abordagem utilizada na dedução da equação. Como consequência, a simbologia utilizada na equação (2.28) para as diversas grandezas deveria reflectir essa interpretação ($\langle\rho\rangle$, $\langle\omega_c\rangle$, $\langle\omega\rangle$ e $\langle\vec{\mathbf{u}}\rangle$). Contudo, tal não se fez em benefício da simplicidade das expressões e, também, porque se reserva essa simbologia para o estudo das equações diferenciais estocásticas.

Relativamente à expressão (2.28) da equação de continuidade, válida para meios porosos saturados, há ainda dois problemas que justificam particular atenção. O primeiro respeita ao campo de velocidades. Em coerência com a noção de meio poroso contínuo, a

velocidade é definida como o volume de água que atravessa, na unidade de tempo, a unidade de área normal à direcção do escoamento. É a *velocidade de percolação*. Trata-se de uma velocidade fictícia porque a água não atravessa a totalidade da unidade de área, mas apenas os vazios desta. As trajectórias reais são muito tortuosas, sendo impossível determinar a velocidade da água ao nível microscópico. Apenas se pode estimar a velocidade média real $\vec{\mathbf{u}}$ (2.22). Esta grandeza está relacionada com a velocidade de percolação, $\vec{\mathbf{U}}$, pela seguinte expressão

$$\vec{\mathbf{U}} = \omega_c \, \vec{\mathbf{u}} \tag{2.29}$$

O outro problema relacionado com (2.28) reside na necessidade de prever mais uma parcela para a equação de continuidade. De facto, esta equação foi deduzida a partir de um balanço de massa de fluido aplicado a uma região de controlo, $V$, fechada por uma fronteira, $S$. Mas no estudo dos escoamentos em meios porosos é necessário prever a existência de *extracções* ou *recargas* (pontuais ou difusas) que não se realizam através da fronteira do domínio, mas directamente *de* ou *para* pontos ou sub-regiões do interior do domínio. É, por exemplo, o caso dos poços de bombagem ou de recarga dos aquíferos. Assim, à equação (2.28) deve ser acrescentada a parcela $\rho q$ que representa a massa de fluido extraída, na unidade de tempo e por unidade de volume, em cada ponto do domínio. A adição desta parcela e a introdução da definição de velocidade de percolação (2.29) dão origem à versão "final" da equação de continuidade para o escoamento de fluidos em meios porosos *saturados* (2.30).

$$\boxed{\operatorname{div}(\rho \vec{\mathbf{U}}) + \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \rho q = 0} \tag{2.30}$$

A adaptação desta equação ao escoamento em meios porosos *não saturados* implica uma pequena modificação da segunda parcela. A porosidade total, $\omega$, que é igual ao teor de humidade, $\theta$, para os meios saturados é substituída pela expressão (2.11), ficando a equação de continuidade com o seguinte aspecto

$$\operatorname{div}(\rho \vec{\mathbf{U}}) + \frac{\partial (\rho S_w \omega)}{\partial t} + \rho q = 0 \tag{2.31}$$

### 2.4.3 Equações de equilíbrio dinâmico. Lei de Darcy generalizada

As equações de equilíbrio dinâmico de Navier-Stokes resultam da aplicação das equações gerais da Dinâmica do Sistema de Partículas ao movimento de um fluido. Estas equações traduzem o princípio de que o sistema de forças (exteriores e de "inércia") que actua sobre um determinado corpo ou volume se encontra em equilíbrio (2.32). Não são consideradas as forças interiores por constituírem um sistema em equilíbrio, atendendo ao princípio de igualdade de acção e reacção.

$$\sum \vec{\mathbf{F}}_{\text{exteriores}} + \sum \vec{\mathbf{F}}_{\text{"inércia"}} = \vec{\mathbf{0}} \tag{2.32}$$

As "forças de inércia" correspondem ao simétrico do produto da massa de um ponto material, ou de um volume elementar, pelo vector aceleração nesse ponto. As forças exteriores podem ser divididas em:

- *forças de volume* ou *de massa*, resultantes de atracções ou repulsões exercidas sobre o meio fluido. São proporcionais ao volume ou massa de fluido correspondentes a cada elemento de volume. Actuam independentemente da existência ou não de fluido exterior ao elemento de volume. No fenómeno em estudo resumem-se à acção da gravidade;

- *forças de superfície* ou *de contacto*, resultantes de acções exercidas, ao longo da superfície envolvente do elemento de volume, pelo fluido que se encontra no exterior sobre o do interior desse elemento de volume.

O equilíbrio dinâmico de um volume de fluido, $V$, limitado por uma superfície fluida[7] fechada, $S$, escreve-se

[7] Superfície que ao longo do tempo é constituída sempre pelas mesmas partículas de fluido.

$$\int_V \rho \vec{\mathbf{G}}(\vec{\mathbf{x}}_V, t)\, dV + \int_S \vec{\mathbf{T}}(\vec{\mathbf{x}}_S, \vec{\mathbf{n}}, t)\, dS - \int_V \rho \vec{\mathbf{a}}(\vec{\mathbf{x}}_V, t)\, dV = \vec{\mathbf{0}} \tag{2.33}$$

sendo:

- $\vec{\mathbf{G}}(\vec{\mathbf{x}}_V, t)$ a força gravítica por unidade de massa, num ponto do volume, no instante $t$;
- $\vec{\mathbf{T}}(\vec{\mathbf{x}}_S, \vec{\mathbf{n}}, t)$ a tensão na "faceta" de um ponto da superfície fluida, definida pelo versor da normal a $S$, no instante $t$;
- $\vec{\mathbf{a}}(\vec{\mathbf{x}}_V, t)$ a aceleração num ponto do volume, no instante $t$.

O desenvolvimento de (2.33) permite obter a versão de Euler das equações de Navier-Stokes[8], válida em coordenadas de Euler para fluidos de viscosidade newtoniana, compressíveis ou incompressíveis

$$\frac{\partial \vec{\mathbf{v}}}{\partial t} + (\vec{\mathbf{v}} \mid \vec{\nabla})\, \vec{\mathbf{v}} = \vec{\mathbf{G}} - \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} p + \nu \nabla^2 \vec{\mathbf{v}} + \frac{\nu}{3} \vec{\nabla} (\operatorname{div} \vec{\mathbf{v}}) \tag{2.34}$$

Estas equações são válidas ao nível microscópico dos poros. A adaptação aos escoamentos em meios porosos passa pela interpretação macroscópica das variáveis, à semelhança do que se fez para a equação de continuidade, e pela introdução de algumas simplificações.

A primeira simplificação respeita ao primeiro membro de (2.34) que representa a expressão de Euler da aceleração, $\vec{\mathbf{a}} = d\vec{\mathbf{v}}/dt$. Atendendo a que na maior parte dos casos as velocidades e os respectivos números de Reynolds são muito baixos, o escoamento pode ser considerado *laminar* e as forças de inércia desprezáveis face às restantes. Assim, o primeiro membro da igualdade (2.34) é considerado nulo.

Outra simplificação reside na hipótese de se admitir que o fluido, a água, se comporta como incompressível. De acordo com Novais-Barbosa (1985a), independentemente de o

---

[8] Novais-Barbosa (1985a).

escoamento ser permanente ou não permanente, esta hipótese é válida desde que o quociente da velocidade, $v$, pela velocidade de propagação do som no fluido, $C$, seja significativamente inferior à unidade. Este quociente, designado por Mach, não deverá ultrapassar 0.2 a 0.3. Nos escoamentos em meios porosos, esta condição é largamente verificada face à substancial discrepância das velocidades em causa[9]. Admitindo-se que o fluido é incompressível, a equação de continuidade impõe que a divergência do vector velocidade seja nula, o que conduz à eliminação da última parcela do segundo membro de (2.34).

As duas simplificações acima referidas dão origem á versão das equações de equilíbrio dinâmico válidas para escoamentos em meios porosos

$$\vec{\mathbf{0}} = \vec{\mathbf{G}} - \frac{1}{\rho}\vec{\nabla} p + \nu \nabla^2 \vec{\mathbf{v}} \tag{2.35}$$

Convém frisar que esta expressão também é válida para fluidos compressíveis. De facto, o que se fez foi apenas admitir, nas condições acima referidas, que os fluidos compressíveis se comportam como incompressíveis.

A terceira parcela do segundo membro de (2.35) representa as tensões de natureza viscosa geradas durante o escoamento. Estas tensões originam as forças resistentes, por unidade de massa, que o meio poroso opõe ao escoamento. E a perda de carga do escoamento não é mais do que o trabalho realizado por estas forças resistentes. Assim, tendo presente que para os escoamentos laminares a perda de carga é directamente proporcional à primeira potência da velocidade, a parcela de (2.35) em análise pode ser rescrita à custa da velocidade real média $\vec{\mathbf{u}}$

$$\nu \nabla^2 \vec{\mathbf{v}} = -c\, \nu\, \vec{\mathbf{u}} \tag{2.36}$$

e de uma constante de proporcionalidade, $c$. O sinal negativo resulta de as forças resistentes terem o sentido contrário à velocidade. Introduzindo (2.36) em (2.35), esta fica

---

[9] A velocidade de propagação do som na água é de 1425 m/s, à temperatura de 10 °C.

$$\vec{\mathbf{0}} = \vec{\mathbf{G}} - \frac{1}{\rho}\vec{\nabla} p - c\nu\,\vec{\mathbf{u}} \tag{2.37}$$

Tendo em conta que a força gravítica por unidade de massa é definida por

$$\vec{\mathbf{G}} = \vec{\nabla}(-g\,z) \tag{2.38}$$

e que a velocidade média real da água pode escrita à custa da velocidade de percolação (2.29), a equação (2.37) fica

$$\vec{\mathbf{0}} = \vec{\nabla}(-g\,z) - \frac{1}{\rho}\vec{\nabla} p - c\nu\frac{\vec{\mathbf{U}}}{\omega_c} \tag{2.39}$$

Resolvendo (2.39) em ordem à velocidade de percolação, obtém-se

$$\vec{\mathbf{U}} = -\frac{\omega_c}{c\mu}(\vec{\nabla} p + g\rho\vec{\nabla} z) \tag{2.40}$$

sendo $\mu$, o coeficiente de viscosidade dinâmica, relacionado com $\nu$ pela expressão

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \tag{2.41}$$

A expressão (2.40), que estabelece uma relação entre a velocidade de percolação e os gradientes gravítico e de pressão, está na base de uma generalização vectorial da conhecida lei de Darcy (2.42).

Em meados do século passado, Henry Darcy estudou o escoamento da água através de colunas de areia e verificou que o caudal por unidade de área da secção transversal da coluna era directamente proporcional à perda de carga e inversamente proporcional ao comprimento da coluna utilizada nas experiências

$$\boxed{\frac{Q}{A} = K\frac{\Delta H}{L}} \tag{2.42}$$

Esta equação pode ser rescrita à custa dos valores absolutos da velocidade de percolação, $U$, e do *gradiente hidráulico*, $i = \Delta H/L$

$$|U| = K|i| \tag{2.43}$$

O coeficiente de proporcionalidade, $K$, tem as dimensões de uma velocidade, depende das características do meio poroso e do fluido e é designado por *conductividade hidráulica* ou *permeabilidade*. Esta versão escalar da lei de Darcy (2.43) é perfeitamente compatível com a expressão vectorial (2.40) obtida a partir das equações de equilíbrio dinâmico de Navier-Stokes. Este facto é mais evidente se se proceder a algumas modificações em (2.40). A primeira modificação consiste na substituição do quociente $\omega_c/c$ por um outro coeficiente de proporcionalidade, $k$, cujas dimensões deverão ser o quadrado do comprimento, face à análise dimensional de (2.40). A outra modificação assenta, novamente, na hipótese de a água se comportar como incompressível, pelo que a massa volúmica pode estar dentro ou fora do operador gradiente. Introduzindo a primeira modificação em (2.40), esta fica

$$\vec{\mathbf{U}} = -\frac{k}{\mu}(\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z) \tag{2.44}$$

Com a segunda modificação, acompanhada de um arranjo à custa da definição de carga hidráulica (2.13), obtém-se

$$\vec{\mathbf{U}} = -\frac{k\,g\,\rho}{\mu}\vec{\nabla}H \tag{2.45}$$

onde $k$ é o coeficiente de *permeabilidade intrínseca*. Comparando (2.45) com (2.43) conclui-se que

$$K = \frac{k\,g\,\rho}{\mu} \tag{2.46}$$

pelo que (2.45) toma o aspecto final

$$\bar{\mathbf{U}} = -K\,\bar{\nabla}H \tag{2.47}$$

que é, então, a generalização vectorial da lei de Darcy. Analisando (2.46) conclui-se que a conductividade hidráulica depende do meio poroso, através de $k$, e da viscosidade da água. Esta, por sua vez, é função da temperatura. A este propósito, convém salientar que embora se tenha admitido que os escoamentos em meios porosos se dão em condições isotérmicas, Marsily (1986) recomenda alguma prudência no estudo de aquíferos superficiais relativamente aos quais a variação de temperatura entre o verão e o inverno pode ter uma influência significativa na conductividade hidráulica. Conforme refere este autor a título exemplificativo, um abaixamento de temperatura de 25 °C para 5 °C produz uma redução de $K$ na ordem de 40%.

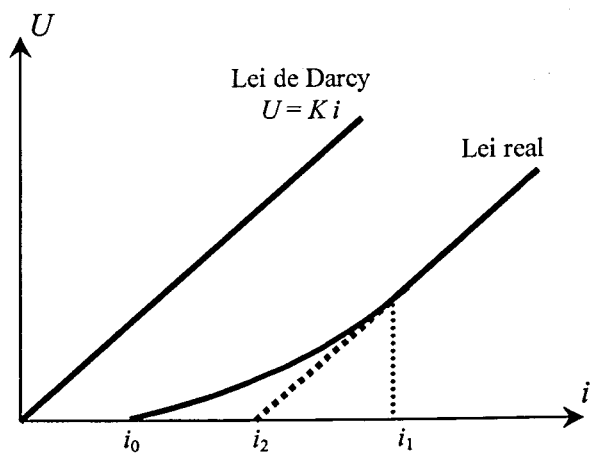



Figura 2.6 – Gradientes hidráulicos fracos

Na dedução da lei de Darcy generalizada admitiu-se o regime laminar para o escoamento. Este regime caracteriza-se por uma relação linear entre a velocidade e o gradiente hidráulico. Em geral, esta hipótese é válida. Contudo, poderão existir algumas situações limite, para as quais não se verifique a lei de Darcy. Uma das situações corresponde a valores muito baixos do gradiente hidráulico. É o que sucede nos solos argilosos compactos, onde a circulação da água só se verifica a partir de um valor mínimo, $i_0$. Para valores

sucessivamente crescentes do gradiente a velocidade vai aumentando até que se atinge o valor de $i_1$, acima do qual a lei de Darcy é válida (Figura 2.6).

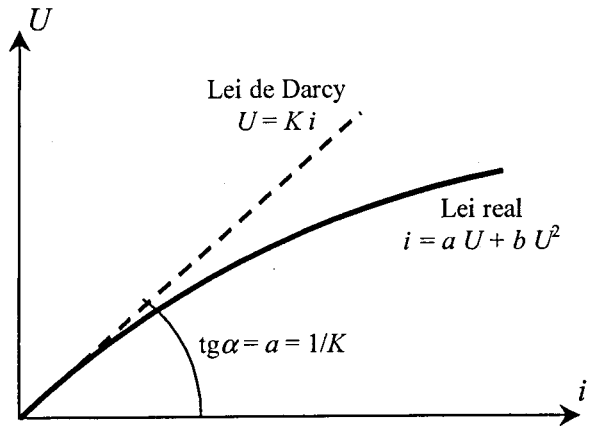



Figura 2.7 – Gradientes hidráulicos elevados

Outra situação de perda de validade da lei de Darcy ocorre para gradientes hidráulicos muito elevados (Figura 2.7). A velocidade real das partículas fluidas é elevada e o escoamento perde as características laminares. A perda de carga resulta não só das forças de natureza viscosa mas também das forças de inércia. Para estes casos, é habitualmente apresentada a seguinte relação entre o gradiente hidráulico e a velocidade

$$i = aU + bU^2 \tag{2.48}$$

À medida que a velocidade aumenta, $bU^2$ ganha importância em (2.48), e a relação entre $i$ e $U$ afasta-se progressivamente da lei de Darcy (Figura 2.7).

Estas questões colocam o problema da definição dos limites de validade da lei de Darcy, em particular do superior. De modo a estabelecer este limite à custa das características do meio poroso é definido o "número de Reynolds para meios porosos"

$$R_e' = \frac{U\,d}{\nu} \tag{2.49}$$

onde $d$ é o diâmetro médio dos grãos do solo ou o diâmetro efectivo[10] $d_{10}$. Embora esta definição seja semelhante à do número de Reynolds para condutas de secção circular, os respectivos valores não devem ser confundidos, pois apresentam ordens de grandeza muito diferentes no que respeita ao limite superior do regime laminar. Na literatura sobre esta matéria considera-se que o valor crítico de $R_e'$, acima do qual a lei de Darcy perde validade, depende do tipo de solo e está compreendido entre 1 e 10, se se tomar para $d$ o valor médio do diâmetro dos grãos. Para valores entre 10 e 100 verifica-se o regime de transição para o turbulento ($R_e' > 100$). Na prática, segundo Marsily (1986), o valor crítico não é atingido. Constituem excepção os aquíferos cársicos e as zonas na imediata na vizinhança dos poços. Este último caso é pouco relevante na medida em que se verifica na "caixa de brita" em torno do furo.

### 2.4.4 Lei de Darcy generalizada para meios anisotrópicos

Retomando a equação que define o campo das velocidades de percolação como directamente proporcional aos gradientes dos campos de pressão e gravítico

$$\vec{\mathbf{U}} = -\frac{k}{\mu}(\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z) \tag{2.44}$$

no caso dos fluidos considerados compressíveis, ou a equação que relaciona o campo das velocidades de percolação com o gradiente hidráulico

$$\vec{\mathbf{U}} = -\frac{k\,g\,\rho}{\mu}\vec{\nabla}H \tag{2.45}$$

para os fluidos incompressíveis, observa-se que nestas generalizações vectoriais da lei de Darcy está implícita a homogeneidade e isotropia do meio poroso, isto é, que a permeabilidade intrínseca, $k$, tem o mesmo valor qualquer que seja o ponto ou direcção do meio considerados. Contudo, a experiência demostra que tal não sucede no meio natural. De

[10]O diâmetro efectivo, $d_{10}$, é a dimensão do peneiro que só deixa passar 10% dos grãos do solo.

facto, a estratificação dos solos sedimentares leva a que a permeabilidade na horizontal seja superior à vertical. O mesmo sucede nos aquíferos de natureza aluvionar. Uma vez que, nos meios porosos com estas características, a água tende a seguir as direcções de maior permeabilidade, os vectores velocidade e gradiente hidráulico nem sempre são colineares.

Assim, enquanto que a isotropia se caracteriza pela mesma relação entre cada uma das componentes do vector velocidade e a respectiva componente do gradiente hidráulico, já nos meios porosos anisotrópicos existe uma relação diferente para cada componente vectorial

$$\begin{aligned} U_x &= -k_x \frac{g\rho}{\mu}\frac{\partial H}{\partial x} \\ U_y &= -k_y \frac{g\rho}{\mu}\frac{\partial H}{\partial y} \\ U_z &= -k_z \frac{g\rho}{\mu}\frac{\partial H}{\partial z} \end{aligned} \tag{2.50}$$

que podem ser expressas sob forma matricial

$$\vec{\mathbf{U}} = -\frac{g\rho}{\mu}\boldsymbol{k}\cdot\vec{\nabla}H \tag{2.51}$$

para fluidos incompressíveis, ou

$$\vec{\mathbf{U}} = -\frac{1}{\mu}\boldsymbol{k}\cdot(\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z) \tag{2.52}$$

para os compressíveis, sendo $\boldsymbol{k}$ a matriz de permeabilidade intrínseca

$$\boldsymbol{k} = \begin{bmatrix} k_x & 0 & 0 \\ 0 & k_y & 0 \\ 0 & 0 & k_z \end{bmatrix} \tag{2.53}$$

para solos cujas direcções principais de permeabilidade coincidam com os eixos coordenados. Quando não for o caso, terá de se escrever a matriz com a apresentação mais geral

$$\boldsymbol{k} = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix} \tag{2.54}$$

sendo

$$\begin{aligned} k_{xy} &= k_{yx} \\ k_{xz} &= k_{zx} \\ k_{yz} &= k_{zy} \end{aligned} \tag{2.55}$$

uma vez que $\boldsymbol{k}$ é uma matriz simétrica relativamente à diagonal principal. O elemento genérico $k_{ij}$ representa a componente $i$ da velocidade "provocada" por uma componente unitária $j$ do gradiente hidráulico. No caso mais geral dos meios anisotrópicos, cada uma das componentes do vector velocidade recebe "contribuições" das três componentes do gradiente hidráulico.

As direcções para as quais o vector velocidade é colinear com o gradiente hidráulico designam-se por *direcções principais de permeabilidade*. Isto é

$$\boldsymbol{k} \cdot \vec{\mathbf{u}} = \alpha \vec{\mathbf{u}} \tag{2.56}$$

ou

$$(\boldsymbol{k} - \alpha \mathbf{I}) \cdot \vec{\mathbf{u}} = \vec{\mathbf{0}} \tag{2.57}$$

A resolução deste sistema de equações lineares homogéneas (2.57) impõe a anulação do determinante

$$\det(\boldsymbol{k} - \alpha \mathbf{I}) = 0 \tag{2.58}$$

As raízes desta equação de 3° grau, os valores próprios, são os *coeficientes de permeabilidade intrínseca principais* e os vectores próprios a eles associados são as *direcções principais de permeabilidade*, mutuamente ortogonais.

Nos solos sedimentares, com estratificação horizontal, existe a permeabilidade vertical, $k_z$, e a permeabilidade horizontal, $k_x = k_y$. A relação de anisotropia, $k_x/k_z$, pode oscilar entre 1 e 100.

Para os fluidos considerados incompressíveis não é habitual a utilização da expressão (2.51) para definir o campo de velocidades de percolação. É mais frequente o recurso a uma expressão com a *matriz de conductividade hidráulica*, **K**, que não é mais do que a matriz de permeabilidade intrínseca multiplicada por $g\rho/\mu$

$$\vec{\mathbf{U}} = -\mathbf{K} \cdot \vec{\nabla} H \tag{2.59}$$

pelo que tudo o que se expôs relativamente a $\boldsymbol{k}$ se aplica a **K**.

## 2.5 Aquíferos regionais. Equações diferenciais

Tal como é referido no *Capítulo 1*, este trabalho visa o estudo e modelação dos escoamentos em *aquíferos regionais*. Antes de se proceder à apresentação da dedução das equações que regem o escoamento nestas formações naturais, importa precisar alguns conceitos e definições:

- *aquífero*: é uma camada, formação ou grupo de formações naturais constituídas por solos ou rochas permeáveis, saturadas com água e com um grau de permeabilidade tal que permite uma extracção de água em quantidade economicamente rentável. Na prática, é uma camada de rocha ou solo permeável, mais ou menos espessa, saturada de água, limitada superior, inferior e lateralmente. Uma camada nestas condições, mas não saturada, não é considerada como sendo um aquífero. Refira-se ainda, que a um aquífero não corresponde, necessariamente, uma única unidade geológica, litográfica ou estratigráfica. De facto, duas camadas ou zonas contíguas de diferentes materiais podem constituir um único aquífero, desde que não estejam separadas por uma camada ou zona de baixa permeabilidade, através da qual o fluxo seja muito pequeno;

- *aquífero regional*: aquífero cujas dimensões horizontais excedem substancialmente a dimensão vertical. Tal como já se referiu no *Capítulo 1*, as primeiras têm uma ordem de grandeza de $10^3$ a $10^5$ metros, enquanto que a última oscila entre $10^1$ e $10^2$ metros. No estudo do comportamento deste tipo de aquíferos, os problemas colocam-se a uma escala muito superior à local (por exemplo: o estudo da variação da piezometria face às recargas naturais ou artificiais, à exploração de poços de bombagem, etc.). As variáveis e propriedades são ponderadas relativamente à espessura, pelo que são consideradas unicamente dependentes das coordenadas horizontais e do tempo, e como consequência, os aquíferos regionais têm uma representação bidimensional.

Nos aquíferos regionais, os "valores pontuais" das variáveis e propriedades correspondem a quantidades ponderadas relativamente a regiões com uma ordem de grandeza

da espessura do aquífero (escala local) e que é significativamente inferior às dimensões horizontais do aquífero (escala regional).

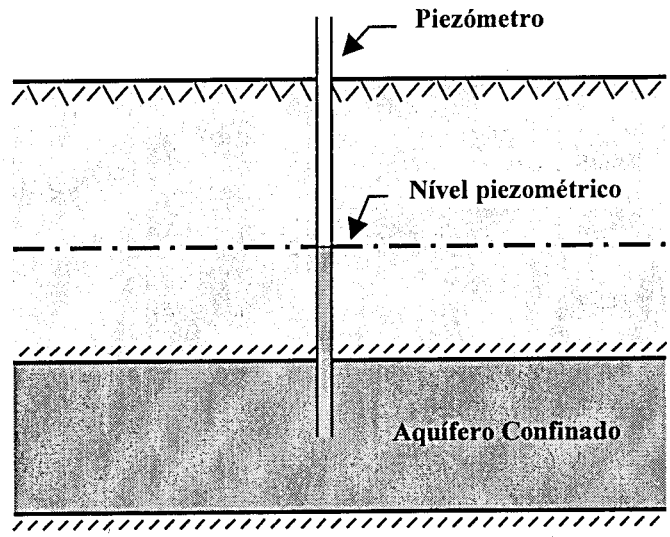



Figura 2.8 – Aquíferos confinados.

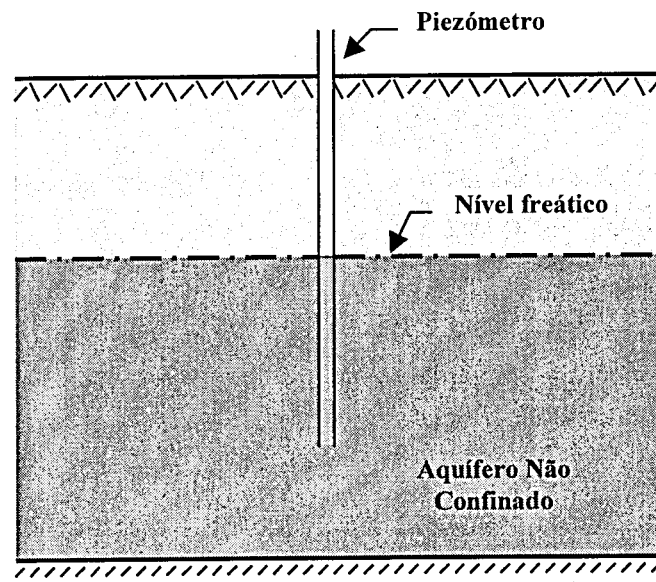



Figura 2.9 – Aquíferos não confinados.

Relativamente aos aquíferos, sejam regionais ou de dimensão inferior, há uma importante distinção a estabelecer entre os *confinados* e os *não confinados*. Embora os escoamentos nestes aquíferos sejam regidos por equações de aspecto idêntico, os fenómenos em jogo são algo diferentes assim como as abordagens utilizadas para as respectivas deduções. Precisando as definições:

- *aquífero confinado*: é um aquífero limitado inferior e superiormente por formações impermeáveis, ou muito pouco permeáveis, e no qual a carga hidráulica (ou cota piezométrica) ultrapassa o limite superior do aquífero, local onde a pressão da água é superior à atmosférica. Por outras palavras, quando um poço ou um piezómetro são executados de modo a alcançar e penetrar o aquífero, o nível da água nesses dispositivos sobe acima da cota da base da formação impermeável superior. Se o nível da água ultrapassar a cota do terreno diz-se que o aquífero é artesiano;

- *aquífero não confinado*: é um aquífero onde a superfície piezométrica[11] coincide com o nível freático, acima do qual se encontra uma zona parcialmente saturada. Esta zona, que não se considera como pertencendo ao aquífero, pode ser constituída pela mesma formação geológica. A fronteira superior do aquífero é variável (tal como a espessura deste) e com a pressão da água igual à atmosférica. A fronteira inferior é geralmente impermeável ou muito pouco permeável.

Nas secções seguintes são deduzidas e apresentadas as equações gerais que regem os escoamentos nestes dois tipos de aquíferos, assim como as respectivas adaptações à representação bidimensional dos aquíferos regionais. As equações fundamentais aplicáveis são a equação de continuidade

$$\boxed{\operatorname{div}(\rho \vec{\mathbf{U}}) + \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \rho q = 0} \tag{2.30}$$

a lei de Darcy generalizada, válida para fluidos compressíveis

$$\boxed{\vec{\mathbf{U}} = -\frac{1}{\mu} \boldsymbol{k} \cdot (\vec{\nabla} p + g \rho \vec{\nabla} z)} \tag{2.52}$$

ou para fluidos incompressíveis

[11] A superfície piezométrica é uma superfície imaginária que passa pelo nível da água nos piezómetros. É uma abstracção teórica para os aquíferos confinados, mas coincide com o nível freático nos aquíferos não confinados.

$$\boxed{\vec{\mathbf{U}} = -\mathbf{K} \cdot \vec{\nabla} H} \tag{2.59}$$

e a equação de estado, isotérmica, do fluido

$$\boxed{\rho = \rho_0 \, e^{\beta_f (p - p_0)}} \tag{2.60}$$

Estas três leis, em conjunto, dão lugar à equação diferencial do escoamento com uma única variável a determinar, a *carga hidráulica* ou *cota piezométrica*. Uma vez conhecida a *variável de estado*, $H$, é possível calcular as restantes quatro ($\vec{\mathbf{U}}$ e $\rho$) à custa das equações (2.59) e (2.60). Para a dedução da equação respeitante aos aquíferos não confinados admite-se a incompressibilidade da água e do meio poroso, enquanto que para os aquíferos confinados é combinada a teoria de consolidação de Terzaghi (porosidade variável, água incompressível, esqueleto sólido do meio poroso incompressível) com a hipótese da compressibilidade da água e do esqueleto sólido do meio poroso.

Nestas equações e nas que serão deduzidas nas secções seguintes, as variáveis intervenientes são, de um modo geral, funções das coordenadas espaciais e temporal. Sempre que, pelo menos, uma das variáveis depender do tempo, o escoamento diz-se *não permanente* (ou *variável* ou *transitório*[12]) e a respectiva equação diferencial apresenta parcelas com derivadas em ordem ao tempo. Pelo contrário, quando todas as variáveis em jogo forem independentes do tempo, o escoamento diz-se *permanente* e as eventuais parcelas com derivadas em ordem ao tempo são nulas.

### 2.5.1 Aquíferos regionais não confinados

Para o estudo destes aquíferos é desprezada a compressibilidade da água e do meio poroso, pelo que tanto $\rho$ como $\omega$ são considerados constantes. A carga hidráulica (ou cota

[12] Alguns autores consideram incorrectas estas designações alternativas para o regime não permanente, visto que as reservam para fenómenos rapidamente variados como é o caso do choque hidráulico (golpe de aríete) em escoamentos em pressão.

piezométrica) corresponde à cota da superfície livre (nível freático), pelo que variações de $H$ implicam iguais variações do nível freático e os correspondentes aumentos ou diminuições da água armazenada no aquífero. A subida do nível freático produz a saturação do meio poroso acima deste. Pelo contrário, a descida significa a drenagem desse mesmo meio. O volume de água que está em jogo é o drenável por acção exclusivamente gravítica e corresponde à parcela dos vazios definida pela porosidade drenável, $\omega_d$. De modo a escrever a equação de continuidade para uma região que contenha a superfície livre, móvel, o elemento de volume desenvolve-se segundo a vertical, tendo uma base de área, $dS$, e perímetro, $dL$, elementares, formando assim um prisma ou um cilindro de base infinitesimal e altura finita, compreendida entre a base impermeável do aquífero e, por exemplo, a superfície da formação (Figura 2.10).

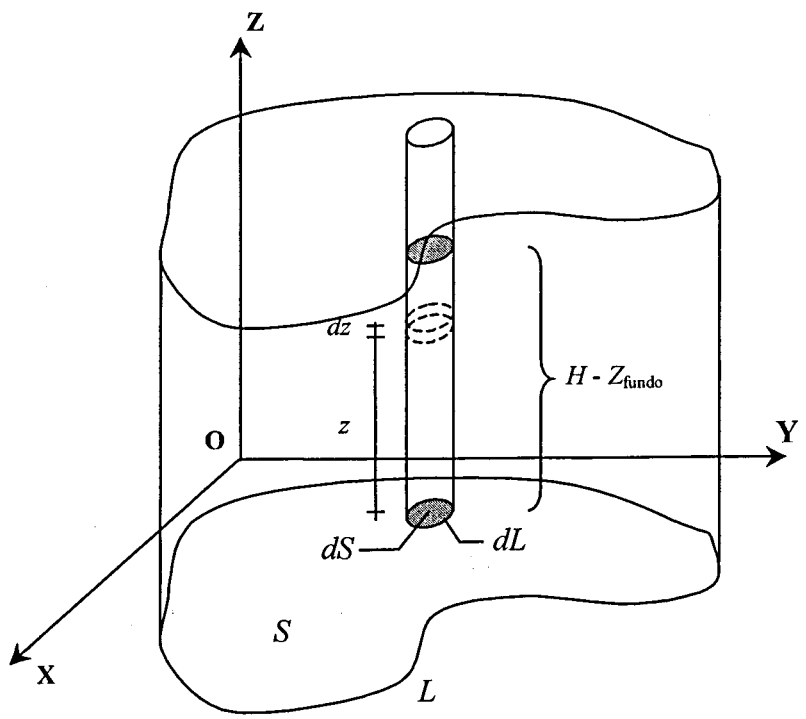



Figura 2.10 – Aquíferos não confinados. Região de controlo para a dedução da equação de continuidade.

Esta região elementar ajusta-se às hipóteses habitualmente associadas a este tipo de aquífero, onde o escoamento é basicamente horizontal. Assim, admite-se que:

- o vector velocidade de percolação é horizontal, $\vec{\mathbf{U}} \equiv (U_x, U_y, 0)$, e paralelo a si próprio ao longo de uma qualquer recta vertical (hipótese de Dupuit);

- a direcção vertical é uma direcção principal de permeabilidade, hipótese que associada à anterior impõe que o gradiente hidráulico tenha componente nula segundo a vertical $(\partial H/\partial z = 0)$. Como consequência, a carga hidráulica depende unicamente das coordenadas horizontais e do tempo: $H \equiv H(x,y,t)$. O problema passa a bidimensional e $H$ representa a carga hidráulica em qualquer ponto de uma recta vertical e é igual à cota da superfície livre (nível freático).

Com base nestas hipóteses retome-se a equação de continuidade na sua versão de equação de balanço

$$M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = \Delta M_{\text{interior}} \tag{2.14}$$

e rescreva-se o primeiro membro de (2.14)

$$M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = \int_{\Gamma} \rho\, \omega_c\, \vec{\mathbf{u}} \mid \vec{\mathbf{n}}\, d\Gamma + \int_{\Omega} \rho\, q\, d\Omega \tag{2.61}$$

sendo $\Omega$ o volume de controle contido no interior da superfície $\Gamma$. Tendo presente a região elementar definida na Figura 2.10, os elementos de superfície e de volume são

$$d\Gamma = dz\, dL \quad \text{e} \quad d\Omega = dz\, dS \tag{2.62}$$

que uma vez introduzidos em (2.61), juntamente com a definição de velocidade de percolação (2.29), dão lugar a

$$M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = \int_L \left[ \int_{Z_{\text{fundo}}}^{H} \rho\, \bar{\mathbf{U}} \mid \vec{\mathbf{n}}\, dz \right] dL + \int_S \rho \left[ \int_{Z_{\text{fundo}}}^{H} q\, dz \right] dS \tag{2.63}$$

$$M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = \int_L \left[ \int_{Z_{\text{fundo}}}^{H} \rho\, (U_x, U_y, 0) \Big| (n_x, n_y, n_z)\, dz \right] dL + \int_S \rho\, Q\, dS \tag{2.64}$$

representando $Q$ o caudal extraído por unidade de área de aquífero (m/s). Como o volume de controlo é fixo a integração segundo $z$ deveria ser efectuada entre a base e o topo da região elementar. Mas como só há fluxo no trecho saturado e o vector velocidade não tem

componente segundo $z$, o limite superior de integração é a superfície livre, definida por $H$. Desenvolvendo (2.64)

$$M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = \int_L \left[ \int_{Z_{\text{fundo}}}^{H} \rho (U_x n_x + U_y n_y)\, dz \right] dL + \int_S \rho Q\, dS \tag{2.65}$$

e introduzindo (2.59) para a hipótese de os eixos segundo $x$ e $y$ corresponderem às direcções principais de permeabilidade horizontais

$$M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = \int_L \left[ \int_{Z_{\text{fundo}}}^{H} \rho \left(-K_x \frac{\partial H}{\partial x} n_x - K_y \frac{\partial H}{\partial y} n_y\right) dz \right] dL + \int_S \rho Q\, dS \tag{2.66}$$

e tendo em conta que a massa volúmica é constante e o gradiente hidráulico não depende de $z$, obtém-se

$$\begin{aligned} M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = &-\int_L \rho \frac{\partial H}{\partial x} n_x \left[ \int_{Z_{\text{fundo}}}^{H} K_x\, dz \right] dL - \int_L \rho \frac{\partial H}{\partial y} n_y \left[ \int_{Z_{\text{fundo}}}^{H} K_y\, dz \right] dL + \\ &+ \int_S \rho Q\, dS \end{aligned} \tag{2.67}$$

ou ainda

$$M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = \int_L \rho \left( -T_x \frac{\partial H}{\partial x} n_x - T_y \frac{\partial H}{\partial y} n_y \right) dL + \int_S \rho Q\, dS \tag{2.68}$$

se for introduzida a definição de *transmissividade* como sendo o integral da conductividade hidráulica segundo a vertical

$$T_x = \int_{Z_{\text{fundo}}}^{H} K_x\, dz \qquad e \qquad T_y = \int_{Z_{\text{fundo}}}^{H} K_y\, dz \tag{2.69}$$

Retomando a expressão (2.68) e condensando-a sucessivamente

$$M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = \int_L \rho\,(-\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H)\,|\,\vec{\mathbf{n}}\,dL + \int_S \rho\,Q\,dS \tag{2.70}$$

$$M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = \int_L \rho\,\vec{\mathbf{q}}\,|\,\vec{\mathbf{n}}\,dL + \int_S \rho\,Q\,dS \tag{2.71}$$

sendo

$$\vec{\mathbf{q}} = -\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H \tag{2.72}$$

onde $\vec{\mathbf{q}}$ representa o vector "caudal de percolação" (fluxo de água por unidade de comprimento, medido este em projecção horizontal) e $\mathbf{T}$ é a matriz de transmissividade. É o volume de água que atravessa, na unidade de tempo, uma secção vertical do aquífero, normal à direcção do escoamento, com comprimento unitário e altura igual à espessura do aquífero. Se se admitir que a velocidade de percolação não varia com $z$, tal como se fez para o gradiente hidráulico, $\vec{\mathbf{q}}$ é o produto de $\vec{\mathbf{U}}$ pela espessura do aquífero, $H - Z_{\text{fundo}}$.

Finalmente, aplicando o Teorema de Ostrogradsky a (2.71), o primeiro membro da equação de balanço (2.14) fica

$$M_{\text{sai}} - M_{\text{entra}} = \int_S \text{div}\,(\rho\,\vec{\mathbf{q}})\,dS + \int_S \rho\,Q\,dS \tag{2.73}$$

enquanto que o segundo membro de (2.14)

$$\Delta M_{\text{interior}} = -\frac{\partial}{\partial t}\int_\Omega \rho\,\omega_d\,d\Omega \tag{2.74}$$

é escrito para a porosidade drenável, $\omega_d$, uma vez que é a parcela da água que se move por acção gravítica. Introduzindo em (2.74) o elemento de volume definido em (2.62), resulta sucessivamente

$$\Delta M_{\text{interior}} = -\frac{\partial}{\partial t}\int_S \left[\rho\,\omega_d \int_{Z_{\text{fundo}}}^{H} dz\right] dS \tag{2.75}$$

$$\Delta M_{\text{interior}} = -\frac{\partial}{\partial t}\int_S \rho\,\omega_d\,(H - Z_{\text{fundo}})\,dS \tag{2.76}$$

ou ainda

$$\Delta M_{\text{interior}} = -\int_S \frac{\partial}{\partial t}[\rho\,\omega_d\,(H - Z_{\text{fundo}})]dS \tag{2.77}$$

atendendo a que os limites de integração não dependem do tempo. Retomando a equação de balanço (2.14) e introduzindo-lhe as expressões (2.73) e (2.77) obtém-se sucessivamente

$$\int_S \text{div}\,(\rho\,\vec{\mathbf{q}})\,dS + \int_S \rho\,Q\,dS + \int_S \frac{\partial}{\partial t}[\rho\,\omega_d\,(H - Z_{\text{fundo}})]dS = 0 \tag{2.78}$$

$$\int_S \left\{\text{div}\,(\rho\,\vec{\mathbf{q}}) + \frac{\partial}{\partial t}[\rho\,\omega_d\,(H - Z_{\text{fundo}})] + \rho\,Q\right\}dS = 0 \tag{2.79}$$

Anulando o argumento do integral

$$\text{div}\,(\rho\,\vec{\mathbf{q}}) + \frac{\partial}{\partial t}[\rho\,\omega_d\,(H - Z_{\text{fundo}})] + \rho\,Q = 0 \tag{2.80}$$

e realizando as simplificações permitidas pelo facto de $\rho$ ser constante e $Z_{\text{fundo}}$ não depender do tempo, obtém-se

$$\text{div}\,\vec{\mathbf{q}} + \omega_d\frac{\partial H}{\partial t} + Q = 0 \tag{2.81}$$

Com o objectivo de rescrever esta equação diferencial apenas em função da variável de estado, $H$, retoma-se e desenvolve-se a expressão (2.72) com base na já referida hipótese de as direcções principais de permeabilidade coincidirem com os eixos coordenados

$$\vec{\mathbf{q}} = \begin{Bmatrix} q_x \\ q_y \end{Bmatrix} = -\begin{bmatrix} T_x & 0 \\ 0 & T_y \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} \partial H/\partial x \\ \partial H/\partial y \end{Bmatrix} = -\begin{Bmatrix} T_x\, \partial H/\partial x \\ T_y\, \partial H/\partial y \end{Bmatrix} \tag{2.82}$$

para substituir em (2.81) o vector $\vec{\mathbf{q}}$ expresso por (2.82)

$$\boxed{-\frac{\partial}{\partial x}\left(T_x \frac{\partial H}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(T_y \frac{\partial H}{\partial y}\right) + \omega_d \frac{\partial H}{\partial t} + Q = 0} \tag{2.83}$$

Esta equação diferencial é não linear porque as transmissividades são função da variável de estado, $H$, uma vez que resultam da integração, segundo $z$, das conductividades hidráulicas. Ao analisar as respectivas expressões em (2.69) observa-se que o limite superior de integração é a carga hidráulica. Admitindo que $K$ não varia com $z$, estes integrais produzem as seguintes expressões

$$T_x = \int_{Z_{\text{fundo}}}^{H} K_x\, dz = K_x (H - Z_{\text{fundo}}) \qquad \text{e} \qquad T_y = \int_{Z_{\text{fundo}}}^{H} K_y\, dz = K_y (H - Z_{\text{fundo}}) \tag{2.84}$$

que podem ser introduzidas em (2.83)

$$\boxed{-\frac{\partial}{\partial x}\left[K_x (H - Z_{\text{fundo}}) \frac{\partial H}{\partial x}\right] - \frac{\partial}{\partial y}\left[K_y (H - Z_{\text{fundo}}) \frac{\partial H}{\partial y}\right] + \omega_d \frac{\partial H}{\partial t} + Q = 0} \tag{2.85}$$

dando lugar a uma equação diferencial (2.85) que exibe de uma forma evidente a não linearidade acima referida. Por vezes admite-se que a transmissividade varia pouco[13] com $H$, o que permite a utilização de (2.83) como equação diferencial linear. Outra justificação para admitir que **T** é constante fundamenta-se na hipótese de a permeabilidade ser superior em profundidade, pelo que uma subida do nível freático não implicará um aumento significativo no valor da transmissividade.

[13] Se as variações de $H$ forem pequenas quando comparadas com $(H\text{-}Z_{\text{fundo}})$.

### 2.5.2 Aquíferos regionais confinados[14]

Antes de iniciar a dedução da equação que rege o escoamento em aquíferos confinadas convém rever alguns conceitos básicos da Mecânica dos Solos que serão utilizados adiante. Assim, para um meio poroso formado por partículas e grãos sem coesão e saturado de água, a tensão total, $\sigma$, num dado ponto é composta por duas parcelas: a tensão a que é efectivamente sujeito o esqueleto sólido do meio, $\overline{\sigma}$, e a pressão da água, $p$

$$\sigma = \overline{\sigma} + p \tag{2.86}$$

Quando a um solo é aplicada uma carga, esta, nos primeiros instantes, é quase totalmente absorvida pela fase líquida do solo, verificando-se o correspondente aumento da pressão da água, também designada por *pressão neutra, p*. A transferência da carga para o esqueleto sólido, com o consequente aumento da *tensão efectiva*, $\overline{\sigma}$, está dependente da maior ou menor capacidade do solo para drenar a água. De facto, o aumento da pressão neutra provoca uma situação de desequilíbrio hidráulico e o gradiente induzido gera um escoamento que tende a "expulsar" a água da zona de solo mais carregada e a repor a pressão neutra anterior à aplicação da carga. Em simultâneo com a diminuição de $p$ dá-se o correspondente aumento de $\overline{\sigma}$ e a compressão do solo à custa da diminuição dos vazios intersticiais, isto é da porosidade. À compressão do solo, nestas condições, dá-se a designação de *consolidação*. A teoria da consolidação de Terzaghi parte do princípio que a água e os grãos do solo são incompressíveis, pelo que a consolidação se deve unicamente à diminuição da porosidade, fruto de um rearranjo dos grãos do solo, e que existe uma relação linear entre as tensões efectivas e a variação de volume. Fenómeno idêntico nas consequências mas distinto na causa é o que sucede quando se explora intensamente um aquífero, produzindo uma redução significativa da pressão neutra e os correspondentes aumento da tensão efectiva e compressão do solo. No domínio da Hidrogeologia este fenómeno é conhecido por *subsidência*.

O escoamento em aquíferos confinados envolve hipóteses mais complexas do que as de Terzaghi. Contudo, e à semelhança de Marsily (1986), optou-se por começar pela teoria de

[14] A dedução da equação diferencial para aquíferos confinados aqui apresentada segue de perto a que se encontra em Marsily (1986).

Terzaghi como primeira aproximação ao problema. As hipóteses em que se fundamenta são as seguintes:

a) o escoamento da água respeita a lei de Darcy;

b) a conductividade hidráulica não varia durante o processo de consolidação (o que não é totalmente verdadeiro, uma vez que a diminuição da porosidade reflecte-se no valor de $K$ – ver expressão (2.40));

c) a água e os grãos do solo são incompressíveis e compressibilidade do solo resulta exclusivamente da diminuição da porosidade;

d) a compressibilidade do solo é elástica, isto é, existe uma relação linear entre a variação das tensões efectivas e diminuição de volume do solo.

Durante o processo de consolidação, a carga a que o solo está sujeito, como por exemplo o peso das camadas superiores, permanece constante, o mesmo sucedendo às tensões totais. A equação de estado do solo é então

$$\sigma = \overline{\sigma} + p = \text{constante} \tag{2.87}$$

pelo que

$$d\sigma = 0 \quad \Rightarrow \quad d\overline{\sigma} + dp = 0 \tag{2.88}$$

No seguimento da hipótese d) a variação da tensão efectiva está relacionada com a variação relativa de volume do solo através da seguinte expressão

$$d\overline{\sigma} = -\frac{1}{\alpha}\frac{dV_T}{V_T} \tag{2.89}$$

onde $\alpha$ é o *coeficiente de compressibilidade volumétrica* do solo (SI: $m^2/N$ ou $Pa^{-1}$). O volume total do solo é a soma do volume dos vazios com o volume dos grãos sólidos

$$V_T = V_V + V_S \tag{2.90}$$

e a variação do volume do solo

$$dV_T = dV_V \tag{2.91}$$

é igual à variação do volume de vazios, atendendo à hipótese c). Com o objectivo de encontrar uma relação entre a variação da porosidade e a variação relativa do volume de solo retome-se a definição de porosidade

$$\omega = \frac{V_V}{V_T} = \frac{V_V}{V_V + V_S} \tag{2.92}$$

e derive-se em ordem ao volume de vazios, $V_V$

$$\frac{d\omega}{dV_V} = \frac{1}{V_V + V_S} - \frac{V_V}{(V_V + V_S)^2} = \frac{V_S}{V_V + V_S} \cdot \frac{1}{V_V + V_S} = (1-\omega)\frac{1}{V_T} \tag{2.93}$$

Explicitando (2.93) em ordem a $d\omega$ e tendo em conta (2.91)

$$d\omega = (1-\omega)\frac{dV_T}{V_T} \tag{2.94}$$

e introduzindo as igualdades (2.88) e (2.89) obtém-se

$$d\omega = (1-\omega)\,\alpha\, dp \tag{2.95}$$

Considerando as derivadas locais, em coordenadas de Euler, tem-se finalmente uma expressão

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = (1-\omega)\,\alpha \frac{\partial p}{\partial t} \tag{2.96}$$

para a derivada da porosidade em ordem ao tempo, presente na equação de continuidade (2.30). Retomando esta equação, eliminando $\rho$ que é constante e introduzindo (2.96), obtém-se

$$\operatorname{div}\vec{\mathbf{U}} + (1-\omega)\alpha\frac{\partial p}{\partial t} + q = 0 \tag{2.97}$$

que combinada com a lei de Darcy generalizada

$$\vec{\mathbf{U}} = -\frac{1}{g\rho}\mathbf{K}\cdot(\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z) \tag{2.98}$$

dá lugar à equação da consolidação

$$\boxed{-\operatorname{div}(\mathbf{K}\cdot\vec{\nabla}p) + g\rho(1-\omega)\alpha\frac{\partial p}{\partial t} + g\rho q = 0} \tag{2.99}$$

se se tiver em conta que $\rho$ é constante e que $\operatorname{div}(\vec{\nabla}z) = 0$. A resolução de (2.99) permite determinar a evolução de $p$ e também de $\overline{\sigma}$, recorrendo a (2.87). Admitindo que a compactação do solo se dá apenas na direcção vertical, o que permite igualar a variação relativa de volume, $\Delta V_T/V_T$, à variação relativa de espessura, $\Delta l/l$, esta última pode ser quantificada com o auxílio de (2.89)

$$\frac{\Delta l}{l} = \frac{\Delta V_T}{V_T} = -\alpha\Delta\overline{\sigma} \tag{2.100}$$

Importa salientar que, embora a hipótese d) sobre a qual assenta a dedução de (2.99) admita uma relação elástica entre a variação das tensões efectivas e a variação relativa de volume do solo, o fenómeno não é reversível, isto é, a eliminação das causas da consolidação (carga aplicada ao solo) ou da subsidência (extracção de água) não geram uma expansão que reponha a espessura inicial das camadas de solo interessadas. Nos solos argilosos a expansão é de aproximadamente 1/10 da compactação. Para solos de maior granolumetria (ex:

arenosos) a hipótese elástica está mais próxima da realidade, embora a compressibilidade destes solos seja substancialmente menor, o que retira importância ao fenómeno. Marsily (1986) apresenta uma tabela com a ordem de grandeza do coeficiente de compressibilidade do solo, $\alpha$, extraída de Freeze e Cherry (1979), e que aqui se reproduz (Tabela 2.1).

| | | | |
|---|---|---|---|
| Argilas | $10^{-6}$ | a | $10^{-8}$ |
| Areias | $10^{-7}$ | a | $10^{-9}$ |
| Seixos | $10^{-8}$ | a | $10^{-10}$ |
| Rochas fissuradas | $10^{-8}$ | a | $10^{-10}$ |
| Rochas não fissuradas | $10^{-9}$ | a | $10^{-11}$ |

Tabela 2.1 – Valores de $\alpha$ ($m^2/N$ ou $Pa^{-1}$)

A abordagem teórica completa que fundamenta a equação que rege os escoamentos em aquíferos confinados acrescenta mais algumas hipóteses relativamente à da consolidação de Terzaghi, em particular a admissão da compressibilidade da água e dos grãos do solo. Esta última tem particular importância no que respeita à equação de continuidade, uma vez que a compressibilidade do meio poroso implica, relativamente à região de controlo (fixa) da equação de continuidade, um fluxo de água e de partículas sólidas através da superfície exterior da referida região. Como se pode constatar do já exposto, este tratamento rigoroso da equação de continuidade não está presente no estudo dos aquíferos não confinados, onde se considera a matriz sólida incompressível, nem na teoria de consolidação de Terzaghi, onde se já se admite a compressibilidade do meio poroso, embora exclusivamente devida à redução de porosidade[15]. Assim, tem de se escrever a equação de continuidade para a fase líquida

$$\operatorname{div}(\rho \vec{\mathbf{U}}) + \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \rho q = 0 \tag{2.30}$$

e para a fase sólida do meio poroso

[15] A compressibilidade do solo, mesmo que exclusivamente resultante da diminuição da porosidade, já implica o fluxo das fases líquida e sólida através da superfície exterior de uma região de controlo fixa.

$$\operatorname{div}(\rho_S \vec{\mathbf{U}}_S) + \frac{\partial[\rho_S (1-\omega)]}{\partial t} = 0 \tag{2.101}$$

onde $\vec{\mathbf{U}}_S$ é uma velocidade fictícia das partículas sólidas, análoga à velocidade de percolação da água, $\vec{\mathbf{U}}$. Assim, $\vec{\mathbf{U}}_S$ pode ser definida como a velocidade que as partículas teriam se ocupassem a totalidade do meio poroso. Esta velocidade pode ainda ser relacionada com a velocidade média real das partículas, $\vec{\mathbf{u}}_S^*$, pela seguinte expressão

$$\vec{\mathbf{u}}_S^* = \frac{\vec{\mathbf{U}}_S}{1-\omega} \tag{2.102}$$

Substituindo (2.102) em (2.101) a equação de continuidade para a fase sólida fica

$$\operatorname{div}[\rho_S (1-\omega) \vec{\mathbf{u}}_S^*] + \frac{\partial[\rho_S (1-\omega)]}{\partial t} = 0 \tag{2.103}$$

Por outro lado, a lei de Darcy (2.52) traduz uma relação entre velocidade da água, medida relativamente à fase sólida do meio poroso, e os gradientes de pressão e gravítico. Ao rescrever (2.52) com a velocidade de percolação substituída pelo produto da porosidade[16] pela velocidade média real da água

$$\vec{\mathbf{u}}^* = -\frac{1}{\omega \mu} \boldsymbol{k} \cdot (\vec{\nabla} p + g \rho \vec{\nabla} z) \tag{2.104}$$

obtém-se uma expressão em que esta velocidade, $\vec{\mathbf{u}}^*$, é considerada simultaneamente uma velocidade *relativa* e uma velocidade *absoluta*, porque estava implícita, aquando da sua dedução, a ideia de que a matriz sólida não de movia. Se, pelo contrário, esta se mover, o segundo membro de (2.104) deve ser interpretado rigorosamente, isto é, como a velocidade relativa entre a água e os grãos do solo. Assim, no primeiro membro deve ser colocada a

[16] Em bom rigor, deveria ser utilizada a porosidade cinemática, $\omega_c$.

diferença entre a velocidade da água (velocidade absoluta) e a velocidade dos grãos e partículas do solo (velocidade de transporte)[17]

$$\vec{\mathbf{u}}^* - \vec{\mathbf{u}}_S^* = -\frac{1}{\omega\mu}\boldsymbol{k}\cdot(\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z) \tag{2.105}$$

Passando a porosidade para o primeiro membro, obtém-se a expressão da lei de Darcy generalizada

$$\vec{\mathbf{U}} - \omega\vec{\mathbf{u}}_S^* = -\frac{1}{\mu}\boldsymbol{k}\cdot(\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z) \tag{2.106}$$

Introduzindo esta equação, resolvida em ordem a $\vec{\mathbf{U}}$, na equação de continuidade da fase líquida (2.30), esta fica

$$\mathrm{div}(\rho\omega\vec{\mathbf{u}}_S^*) - \mathrm{div}\left[\frac{\rho}{\mu}\boldsymbol{k}\cdot(\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z)\right] + \frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \rho q = 0 \tag{2.107}$$

Desenvolvendo a primeira parcela de (2.107)

$$\mathrm{div}(\rho\omega\vec{\mathbf{u}}_S^*) = \vec{\nabla}(\rho\omega)\,|\,\vec{\mathbf{u}}_S^* + \rho\omega\vec{\nabla}\,|\,\vec{\mathbf{u}}_S^* \tag{2.108}$$

e tendo em conta a derivada substancial de $\rho\omega$

$$\frac{d(\rho\omega)}{dt} = \frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho\omega)\,|\,\vec{\mathbf{u}}_S^* \tag{2.109}$$

a primeira parcela de (2.107) pode ser rescrita

$$\mathrm{div}(\rho\omega\vec{\mathbf{u}}_S^*) = \frac{d(\rho\omega)}{dt} - \frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \rho\omega\vec{\nabla}\,|\,\vec{\mathbf{u}}_S^* \tag{2.110}$$

---

[17] Velocidades absoluta, relativa e de transporte são conceitos da Cinemática do Movimento Relativo.

levando a que (2.107) tome os sucessivos aspectos

$$\frac{d(\rho\omega)}{dt} - \frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \rho\omega\vec{\nabla} \mid \vec{\mathbf{u}}_S^* - \operatorname{div}\left[\frac{\rho}{\mu}\boldsymbol{k}\cdot(\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z)\right] + \tag{2.111}$$

$$+\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \rho q = 0$$

$$\frac{d(\rho\omega)}{dt} + \rho\omega\vec{\nabla} \mid \vec{\mathbf{u}}_S^* - \operatorname{div}\left[\frac{\rho}{\mu}\boldsymbol{k}\cdot(\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z)\right] + \rho q = 0 \tag{2.112}$$

Por outro lado, desenvolvendo a primeira parcela da equação de continuidade da fase sólida (2.103), esta fica

$$\vec{\nabla}[\rho_S(1-\omega)] \mid \vec{\mathbf{u}}_S^* + [\rho_S(1-\omega)]\vec{\nabla} \mid \vec{\mathbf{u}}_S^* + \frac{\partial[\rho_S(1-\omega)]}{\partial t} = 0 \tag{2.113}$$

Calculando a derivada substancial de $\rho_S(1-\omega)$

$$\frac{d[\rho_S(1-\omega)]}{dt} = \frac{\partial[\rho_S(1-\omega)]}{\partial t} + \vec{\nabla}[\rho_S(1-\omega)] \mid \vec{\mathbf{u}}_S^* \tag{2.114}$$

explicitando (2.114) em ordem à segunda parcela do segundo membro e introduzindo em (2.113) obtém-se sucessivamente

$$\frac{d[\rho_S(1-\omega)]}{dt} - \frac{\partial[\rho_S(1-\omega)]}{\partial t} + [\rho_S(1-\omega)]\vec{\nabla} \mid \vec{\mathbf{u}}_S^* + \frac{\partial[\rho_S(1-\omega)]}{\partial t} = 0 \tag{2.115}$$

$$\frac{d[\rho_S(1-\omega)]}{dt} + [\rho_S(1-\omega)]\vec{\nabla} \mid \vec{\mathbf{u}}_S^* = 0 \tag{2.116}$$

que pode ser escrita em ordem à divergência de $\vec{\mathbf{u}}_S^*$

$$\vec{\nabla} \mid \vec{\mathbf{u}}_S^* = \frac{-1}{\rho_S (1-\omega)} \cdot \frac{d[\rho_S (1-\omega)]}{dt} \tag{2.117}$$

e introduzida na segunda parcela de (2.112)

$$\frac{d(\rho\,\omega)}{dt} - \frac{\rho\,\omega}{\rho_S (1-\omega)} \cdot \frac{d[\rho_S (1-\omega)]}{dt} - \mathrm{div}\left[\frac{\rho}{\mu}\boldsymbol{k} \cdot (\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z)\right] + \rho\, q = 0 \tag{2.118}$$

Desenvolvendo e simplificando as duas primeiras parcelas de (2.118) obtém-se finalmente

$$-\mathrm{div}\left[\frac{\rho}{\mu}\boldsymbol{k} \cdot (\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z)\right] - \frac{\rho\,\omega}{\rho_S} \cdot \frac{d\rho_S}{dt} + \omega\frac{d\rho}{dt} + \frac{\rho}{1-\omega} \cdot \frac{d\omega}{dt} + \rho\, q = 0 \tag{2.119}$$

Tendo-se chegado a este ponto, o próximo objectivo consiste em tratar (2.119) de modo a obter uma equação equivalente escrita em função da variável de estado. Para o efeito é necessário desenvolver $d\rho/dt$, $d\rho_S/dt$ e $d\omega/dt$. Para a primeira das derivadas recorre-se à equação de estado (isotérmica) da água

$$\rho = \rho_0\, e^{\beta_l (p - p_0)} \tag{2.60}$$

para obter a derivada $d\rho/dt$

$$\frac{d\rho}{dt} = \rho\,\beta_l \frac{dp}{dt} \tag{2.120}$$

em função de $dp/dt$ ,sendo $\beta_l$ o *coeficiente de compressibilidade* do fluido[18].

Com a finalidade de rescrever $d\rho_S/dt$ e $d\omega/dt$ em função de $dp/dt$ recorre-se à equação de estado da fase sólida e ao reconhecimento de que o volume de vazios e o volume

[18]Para a água, $\beta_l = 5\times10^{-10}$ m$^2$/N ou Pa$^{-1}$.

de grãos sólidos depende não só das tensões efectivas, $\overline{\sigma}$, mas também das pressões neutras, $p$. Entre a pressão neutra e o volume dos grãos existe a seguinte relação

$$dp = -\frac{1}{\beta_S}\frac{dV_S}{V_S} \tag{2.121}$$

onde $\beta_S$ é o *coeficiente de compressibilidade* dos grãos sólidos[19]. Uma vez que as variações de volume não alteram a massa de cada grão, o produto $\rho_S V_S$ é constante, logo

$$d\rho_S V_S + \rho_S dV_S = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d\rho_S}{\rho_S} = -\frac{dV_S}{V_S} \tag{2.122}$$

o que permite rescrever (2.121)

$$dp = -\frac{1}{\beta_S}\frac{dV_S}{V_S} = \frac{1}{\beta_S}\frac{d\rho_S}{\rho_S} \tag{2.123}$$

Assumindo que $V_T$, $V_S$ e $V_V$ são funções lineares de $\overline{\sigma}$ e de $p$ e tendo presente a igualdade

$$\sigma = \overline{\sigma} + p \tag{2.124}$$

é possível escrever as seguintes três expressões[20]

$$\frac{dV_T}{V_T} = -C\, d\sigma + \alpha\, dp \tag{2.125}$$

$$\frac{dV_V}{V_V} = -C_P\, d\sigma + \alpha_P\, dp \tag{2.126}$$

$$\frac{dV_S}{V_S} = -C_S\, d\sigma + \alpha_S\, dp \tag{2.127}$$

---

[19] Para o quartzo, $\beta_S \approx 2\times10^{-11}$ m$^2$/N ou Pa$^{-1}$.
[20] Marsily (1986).

onde figuram seis coeficientes de compressibilidade ($C$, $\alpha$, $C_P$, $\alpha_P$, $C_S$ e $\alpha_S$) relacionados do seguinte modo

$$C = \alpha + \beta_S \tag{2.128}$$

$$C_P = \frac{\alpha}{\omega} \tag{2.129}$$

$$\alpha_P = \frac{\alpha}{\omega} - \beta_S \tag{2.130}$$

$$\alpha_S = \frac{\omega}{1-\omega}\beta_S \tag{2.131}$$

$$C_S = \frac{\beta_S}{1-\omega} \tag{2.132}$$

Uma vez apresentados estes coeficientes e respectivas relações retoma-se a procura de expressões equivalentes a $d\rho_S/dt$ e $d\omega/dt$ em função de $dp/dt$. Começando por $d\omega/dt$, explora-se a definição de porosidade para escrever

$$V_S = (1-\omega)V_T \tag{2.133}$$

que, uma vez diferenciada, dá sucessivamente lugar a

$$dV_S = (1-\omega)\,dV_T - d\omega\, V_T \tag{2.134}$$

$$\frac{dV_S}{V_T} = (1-\omega)\frac{dV_T}{V_T} - d\omega \tag{2.135}$$

$$\frac{V_S}{V_T}\frac{dV_S}{V_S} = (1-\omega)\frac{dV_T}{V_T} - d\omega \tag{2.136}$$

$$d\omega = (1-\omega)\left(\frac{dV_T}{V_T} - \frac{dV_S}{V_S}\right) \tag{2.137}$$

Combinando $d\sigma = 0$ com (2.125) e (2.127) obtém-se

$$d\omega = (1-\omega)(\alpha-\alpha_S)\,dp \tag{2.138}$$

que dividida por *dt* permite obter a relação entre as derivadas substanciais pretendida

$$\frac{d\omega}{dt} = (1-\omega)(\alpha-\alpha_S)\frac{dp}{dt} \tag{2.139}$$

Para encontrar a expressão de $d\rho_S/dt$ em função de $dp/dt$, retoma-se (2.122)

$$d\rho_S\, V_S + \rho_S\, dV_S = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{d\rho_S}{\rho_S} = -\frac{dV_S}{V_S} \tag{2.122}$$

que combinada com $d\sigma = 0$ e (2.127) permite escrever

$$d\rho_S = -\rho_S\,\alpha_S\,dp \tag{2.140}$$

a qual, por sua vez, dividida por *dt* dá lugar à expressão pretendida

$$\frac{d\rho_S}{dt} = -\rho_S\,\alpha_S\frac{dp}{dt} \tag{2.141}$$

Estando encontradas as expressões para as derivadas substanciais de $\rho$, $\rho_S$ e $\omega$ pode-se retomar a equação (2.119) e introduzir nela as referidas expressões [(2.120), (2.141) e (2.139)] e ainda a relação (2.131), ficando

$$-\operatorname{div}\left[\frac{\rho}{\mu}\boldsymbol{k}\cdot(\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z)\right] + \rho\,\omega\left(\beta_l - \beta_S + \frac{\alpha}{\omega}\right)\frac{dp}{dt} + \rho\,q = 0 \tag{2.142}$$

ou ainda

$$-\operatorname{div}\left[\mathbf{K}\cdot(\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z)\right] + \rho\,\omega\,g\left(\beta_l - \beta_S + \frac{\alpha}{\omega}\right)\frac{dp}{dt} + \rho\,g\,q = 0 \tag{2.143}$$

depois de multiplicar (2.142) por $g$. O coeficiente

$$S_S = \rho\,\omega\,g\left(\beta_l - \beta_S + \frac{\alpha}{\omega}\right) \tag{2.144}$$

presente em (2.143) é designado por *coeficiente de armazenamento específico* (SI: $m^{-1}$). Os valores deste coeficiente variam entre $10^{-2}$ $m^{-1}$, para argilas muito compressíveis, e $10^{-7}$ $m^{-1}$, para rochas duras e de baixa porosidade[21].

A equação diferencial que rege os escoamentos em aquíferos confinados é obtida a partir de (2.143), após a introdução de algumas simplificações e modificações[22], nomeadamente a substituição da derivada substancial pela local e a adopção da carga hidráulica, $H$, como variável de estado

$$H = z + \frac{p}{\rho\,g} \quad \Rightarrow \quad p = \rho\,g(H - z) \tag{2.145}$$

Introduzindo a expressão de $p$ (2.145) em (2.143) e admitindo que a variação de $\rho$ é mais significativa no tempo do que no espaço, pode-se extrair a massa volúmica da água do operador divergência e obter uma nova apresentação para a primeira parcela de (2.143)

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}\left[\mathbf{K}\cdot(\vec{\nabla}p + g\rho\vec{\nabla}z)\right] &\cong -\rho\,g\operatorname{div}\left[\mathbf{K}\cdot\vec{\nabla}\left(\frac{p}{\rho\,g} + z\right)\right] = \\ &= -\rho\,g\operatorname{div}(\mathbf{K}\cdot\vec{\nabla}H) \end{aligned} \tag{2.146}$$

A derivada substancial de $p$ pode ser confundida com a derivada local

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\partial p}{\partial t} + \vec{\nabla}p \mid \vec{\mathbf{u}}_S^* \quad \cong \quad \frac{\partial p}{\partial t} \tag{2.147}$$

---

[21] Marsily (1986).
[22] Marsily (1986) refere-se-lhes como sendo " ... not theoretically very elegant."

uma vez que a derivada de transporte, $\vec{\nabla} p \mid \vec{\mathbf{u}}_S^*$, é desprezável, quando comparada com a local, atendendo à pequena grandeza de $\vec{\mathbf{u}}_S^*$. Introduzindo (2.144), (2.146) e (2.147) em (2.143) obtém-se

$$-\rho\, g\, \mathrm{div}\,(\mathbf{K}\cdot\vec{\nabla} H)+S_S\frac{\partial p}{\partial t}+\rho\, g\, q=0 \tag{2.148}$$

Resta substituir $\partial p/\partial t$ por expressão equivalente, em função de $H$. Para o efeito deriva-se (2.145) em ordem ao tempo

$$\frac{\partial p}{\partial t}=\frac{\partial[\rho\, g\,(H-z)]}{\partial t}=g(H-z)\frac{\partial \rho}{\partial t}+\rho\, g\frac{\partial H}{\partial t} \tag{2.149}$$

introduz-se a versão de (2.120) para derivadas locais

$$\frac{\partial p}{\partial t}=g(H-z)\rho\,\beta_l\frac{\partial p}{\partial t}+\rho\, g\frac{\partial H}{\partial t} \tag{2.150}$$

e explicita-se em ordem à parcela com a derivada de $H$

$$\rho\, g\frac{\partial H}{\partial t}=[1+\rho\, g\,\beta_l(z-H)]\frac{\partial p}{\partial t} \tag{2.151}$$

Nesta expressão, $\rho\, g\,\beta_l(z-H)$ tem uma grandeza desprezável quando comparada com a unidade[23], pelo que fica

$$\rho\, g\frac{\partial H}{\partial t}\cong\frac{\partial p}{\partial t} \tag{2.152}$$

Substituindo esta expressão em (2.148) e dividindo-a por $\rho\, g$ obtém-se finalmente

---

[23] A título de exemplo considere-se uma altura piezométrica de 1000 metros de coluna de água. O produto em causa toma o valor de $-5\times10^{-3}$.

$$-\operatorname{div}(\mathbf{K}\cdot\vec{\nabla}H)+S_S\frac{\partial H}{\partial t}+q=0 \tag{2.153}$$

a equação diferencial que rege os escoamentos em aquíferos confinados. É válida para uma representação tridimensional dos aquíferos confinados. Mas, visto que este trabalho está orientado para uma análise bidimensional de aquíferos regionais, a equação (2.153) tem de ser integrada segundo a vertical, à semelhança do que se fez para os aquíferos regionais não confinados.

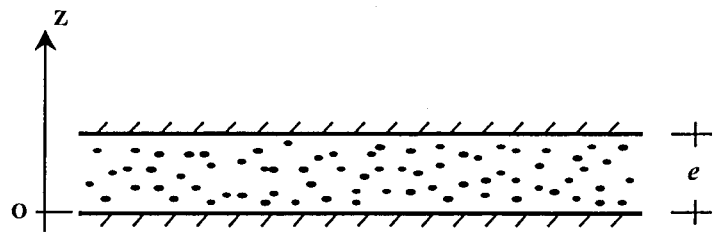



Figura 2.11 – Aquífero confinado de espessura constante.

Considere-se, então, um aquífero confinado por dois estratos impermeáveis ou pouco permeáveis (Figura 2.11) e admita-se que o escoamento é paralelo aos estratos confinantes. Para realizar a integração segundo a vertical admitam-se as seguintes hipóteses:

i) os estratos confinantes são planos e paralelos e a espessura do aquífero é constante;

ii) uma das direcções principais de permeabilidade é normal aos estratos confinantes, isto é paralela ao eixo segundo $z$. Os eixos segundo $x$ e $y$, paralelos aos estratos confinantes, deverão ser considerados coincidentes com as outras duas direcções principais de permeabilidade;

iii) o gradiente hidráulico no plano $oxy$ não depende de $z$, isto é

$$\frac{\partial^2 H}{\partial x\,\partial z}=\frac{\partial^2 H}{\partial y\,\partial z}=0 \tag{2.154}$$

iv) a variação da carga hidráulica na unidade de tempo, $\partial H/\partial t$, não depende de $z$, isto é, o gradiente hidráulico, $\vec{\nabla} H$, e a derivada local, $\partial H/\partial t$, são constantes ao longo de qualquer recta paralela a $z$.

Com base nestas quatro hipóteses realiza-se a integração segundo $z$

$$-\int_0^e \left[ \frac{\partial}{\partial x}\left( K_x \frac{\partial H}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y}\left( K_y \frac{\partial H}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z}\left( K_z \frac{\partial H}{\partial z} \right) \right] dz + \int_0^e S_S \frac{\partial H}{\partial t} dz + \int_0^e q\, dz = 0 \qquad (2.155)$$

Como os limites de integração são constantes, logo não dependem de $x$ e $y$, as derivadas parciais em ordem a estas coordenadas podem passar para fora dos integrais

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left( \int_0^e K_x \frac{\partial H}{\partial x} dz \right) - \frac{\partial}{\partial y}\left( \int_0^e K_y \frac{\partial H}{\partial y} dz \right) - \int_0^e \frac{\partial}{\partial z}\left( K_z \frac{\partial H}{\partial z} \right) dz + \\ + \int_0^e S_S \frac{\partial H}{\partial t} dz + \int_0^e q\, dz = 0 \qquad (2.156)$$

De acordo com a hipótese iii), $\partial H/\partial x$ e $\partial H/\partial y$ também podem passar para fora dos integrais em ordem a $z$

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left[ \left( \int_0^e K_x dz \right) \frac{\partial H}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial y}\left[ \left( \int_0^e K_y dz \right) \frac{\partial H}{\partial y} \right] - \int_0^e \frac{\partial}{\partial z}\left( K_z \frac{\partial H}{\partial z} \right) dz + \\ + \int_0^e S_S \frac{\partial H}{\partial t} dz + \int_0^e q\, dz = 0 \qquad (2.157)$$

permitindo retomar a definição de transmissividade já apresentada em (2.69)

$$T_x = \int_0^e K_x\, dz \qquad \text{e} \qquad T_y = \int_0^e K_y\, dz \qquad (2.158)$$

que introduzida em (2.157) dá lugar a

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(T_x\frac{\partial H}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(T_y\frac{\partial H}{\partial y}\right)-\int_0^e\frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial H}{\partial z}\right)dz+$$

$$+\int_0^e S_S\frac{\partial H}{\partial t}dz+\int_0^e q\,dz=0 \tag{2.159}$$

Uma vez efectuada a integração, a terceira parcela de (2.159) fica

$$-\int_0^e\frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial H}{\partial z}\right)dz=-\left[K_z\frac{\partial H}{\partial z}\right]_0^e=-\left(K_z\frac{\partial H}{\partial z}\right)_{z=e}+\left(K_z\frac{\partial H}{\partial z}\right)_{z=0} \tag{2.160}$$

As duas parcelas do segundo membro da igualdade (2.160) representam as velocidades normais às fronteiras, superior e inferior, do aquífero confinado. Se os estratos confinantes forem completamente impermeáveis, são nulas. Caso contrário, devem ser consideradas como sendo os caudais de água trocados com os referidos estratos, por unidade de área de aquífero medida segundo as superfícies de contacto. Considerando o versor da normal aos estratos com a mesma direcção e sentido que o eixo dos $z$, definem-se

$$F_{\text{superior}}=-\left(K_z\frac{\partial H}{\partial z}\right)_{z=e}\qquad\text{e}\qquad F_{\text{inferior}}=\left(K_z\frac{\partial H}{\partial z}\right)_{z=0} \tag{2.161}$$

sendo $F_{\text{superior}}$ e $F_{\text{inferior}}$ os caudais cedidos, por unidade de área, através dos estratos confinantes. Introduzindo estas definições em (2.159), esta fica

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(T_x\frac{\partial H}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(T_y\frac{\partial H}{\partial y}\right)+\int_0^e S_S\frac{\partial H}{\partial t}dz+\int_0^e q\,dz+F_{\text{superior}}+F_{\text{inferior}}=0 \tag{2.162}$$

Na terceira parcela de (2.162), a integração é efectuada depois de $S_S$ e $\partial H/\partial t$ serem postos em evidência, fora do integral (de acordo com a hipótese iv), $\partial H/\partial t$ não depende de $z$)

$$\int_0^e S_S\frac{\partial H}{\partial t}dz=S_S\left(\int_0^e dz\right)\frac{\partial H}{\partial t}=S_S\,e\frac{\partial H}{\partial t}=S\frac{\partial H}{\partial t} \tag{2.163}$$

sendo $S$,

$$S = \rho\, \omega\, g\, e\left(\beta_l - \beta_S + \frac{\alpha}{\omega}\right) \tag{2.164}$$

o *coeficiente de armazenamento* do aquífero confinado. Este coeficiente, adimensional, representa o volume de água extraído, por unidade de área de aquífero, quando a carga hidráulica sofre uma redução unitária. Introduzindo esta definição em (2.162) e integrando $q$ segundo $z$, à semelhança do que se fez para os aquíferos não confinados, obtém-se a equação

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(T_x \frac{\partial H}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(T_y \frac{\partial H}{\partial y}\right) + S\frac{\partial H}{\partial t} + F_{\text{superior}} + F_{\text{inferior}} + Q = 0 \tag{2.165}$$

As três últimas parcelas do primeiro membro de (2.165) têm idêntico significado, pelo que podem ser fundidas numa só, $Q$

$$\boxed{-\frac{\partial}{\partial x}\left(T_x \frac{\partial H}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(T_y \frac{\partial H}{\partial y}\right) + S\frac{\partial H}{\partial t} + Q = 0} \tag{2.166}$$

Aquíferos Confinados

Está assim encontrada a equação diferencial bidimensional que rege o escoamento em aquíferos confinados. É uma equação idêntica à que rege o escoamento em aquíferos não confinados, como se pode concluir por comparação com (2.83).

$$\boxed{-\frac{\partial}{\partial x}\left(T_x \frac{\partial H}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(T_y \frac{\partial H}{\partial y}\right) + \omega_d \frac{\partial H}{\partial t} + Q = 0} \tag{2.83}$$

Aquíferos Não Confinados

Dois aspectos fundamentais distinguem estas equações, escritas para sistemas de eixos coincidentes com as direcções principais de permeabilidade. O primeiro consiste no facto de (2.83) ser uma equação diferencial não linear[24], ao contrário de (2.166), onde a

[24] Recorde-se que $T_x$ e $T_y$ dependem de $H$ nos aquíferos não confinados, como demonstra (2.69).

transmissividade é constante[25]. A outra diferença reside nos coeficientes que multiplicam $\partial H/\partial t$. Embora em termos práticos possuam o mesmo significado, o volume de água extraído por unidade de área de aquífero quando a carga hidráulica sofre uma redução unitária, têm uma ordem de grandeza muito diferente[26] e representam fenómenos distintos. De facto, enquanto que nos aquíferos não confinados a água fornecida pelo aquífero provém da parcela dos vazios do meio poroso drenados por gravidade[27] quando se verifica um abaixamento do nível freático, já nos aquíferos confinados a cedência de água resulta fundamentalmente da descompressão da água[28] e da redução do volume dos vazios[29], ambas geradas pela diminuição de pressão que acompanha o abaixamento da carga hidráulica. A compressibilidade dos grãos do solo tem uma influência desprezável na formação do valor de $S$, uma vez que $\beta_S$ tem uma grandeza cerca de vinte e cinco vezes inferior a $\beta_l$.

Tendo presente o significado de $\omega_d$ e $S$ é possível avaliar, em cada momento, a reserva de água disponível num determinado aquífero. Para um aquífero não confinado, a reserva é determinada pela diferença entre o nível freático actual e o nível a que é aceitável rebaixá-lo, multiplicada pela área do aquífero e por $\omega_d$. Para um aquífero confinado, o raciocínio é idêntico. A reserva é dada pela diferença entre superfícies piezométricas, a actual e aquela a que se pode rebaixar a carga hidráulica, multiplicada pela área e por $S$. Tendo em conta as ordens de grandeza da porosidade drenável, $\omega_d$ , e do coeficiente de armazenamento, $S$, conclui-se que, para o mesmo rebaixamento da carga hidráulica, um aquífero não confinado fornece muito mais água do que um confinado.

A equação diferencial (2.166) que rege o escoamento em aquíferos confinados foi obtida por integração segundo $z$ da equação (2.153), com base em algumas hipóteses. Uma delas admite que a espessura do aquífero é constante. Não sendo provável que esta hipótese se verifique nas formações naturais, é de esperar uma variação espacial da transmissividade. Outra contribuição para esta variabilidade reside no facto da conductividade hidráulica também não ser constante, tanto para aquíferos confinados como para os não confinados. O

---

[25]Nos aquíferos confinados a transmissividade não varia com $H$, pelo que é constante relativamente ao tempo.
[26]$S$ toma valores entre $5\times10^{-2}$ e $1\times10^{-5}$ (Marsily, 1986).
[27]Representada por $\omega_d$.
[28]Representada por $\beta_l$.
[29]Representada por $\alpha$.

tratamento mais detalhado destas questões é um dos objectivos do presente trabalho e será retomado em capítulos posteriores.

Outra hipótese simplificativa, que foi sendo considerada na dedução das equações diferenciais, consistiu na suposição de que as direcções principais de permeabilidade coincidiam com os eixos coordenados, nomeadamente os eixos segundo $x$ e $y$. Como as equações diferenciais bidimensionais deduzidas, (2.83) ou (2.85) e (2.166), são válidas para qualquer par de eixos ortogonais, importa rescrevê-las na forma mais geral, recorrendo às matrizes de conductividade e ou de transmissividade:

- aquíferos não confinados

$$-\operatorname{div}\left[(H-Z_{\text{fundo}})\,\mathbf{K}\cdot\vec{\nabla}H\right]+\omega_d\frac{\partial H}{\partial t}+Q+\sum_{i=1}^{N_w}Q_{w,i}\,\delta(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i)=0 \qquad (2.167)$$

ou ainda, para os casos em que a transmissividade não tem variações significativas com $H$

$$-\operatorname{div}\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H\right)+\omega_d\frac{\partial H}{\partial t}+Q+\sum_{i=1}^{N_w}Q_{w,i}\,\delta(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i)=0 \qquad (2.168)$$

- aquíferos confinados

$$-\operatorname{div}\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H\right)+S\frac{\partial H}{\partial t}+Q+\sum_{i=1}^{N_w}Q_{w,i}\,\delta(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i)=0 \qquad (2.169)$$

sendo $Q_{w,i}$ as $N_w$ extracções (ou recargas) pontuais nos pontos do domínio de coordenadas $\vec{\mathbf{x}}_i$.

### 2.5.3 Condições iniciais e condições fronteira em aquíferos regionais

A aplicação destas equações diferenciais a um determinado domínio (aquífero) e a respectiva resolução requerem a prévia definição das condições iniciais, isto é, do valor de $H$ no instante inicial do período de tempo a estudar. É também necessário conhecer, ao longo do tempo, as condições do escoamento na fronteira do domínio, as quais podem ser de três tipos:

a) condição fronteira principal (Dirichlet): o valor da variável de estado, $H$, é previamente definido, podendo ser constante ou variável ao longo do tempo. Esta condição é imposta no trecho de fronteira onde $H$ é independente das condições do escoamento no aquífero, $\Gamma_{\text{Dirichlet}}$, e verifica-se, por exemplo, no contacto com um lago ou com um rio. Num trecho de fronteira nestas condições o valor de $H$ depende do nível da água no lago ou no rio. Num aquífero regional, um curso de água que comunique directamente com um aquífero, através da fronteira deste, pode ser interpretado como uma condição fronteira deste tipo;

b) condição fronteira secundária (Neumann): o valor da primeira derivada da variável de estado na direcção normal à fronteira, $\partial H/\partial n$, constante ou variável com o tempo, é previamente definido, o que é equivalente a quantificar o caudal escoado através da fronteira, por unidade de comprimento desta, $q_n$

$$q_n = -\left[(H - Z_{\text{fundo}})\,\mathbf{K}\cdot\vec{\nabla}H\right]|\,\vec{\mathbf{n}} \qquad \text{(aquíferos não confinados)} \qquad (2.170)$$

$$q_n = -\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H\right)|\,\vec{\mathbf{n}} \qquad \text{(aquíferos confinados)} \qquad (2.171)$$

para $\vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Neumann}}$. Este tipo de condição verifica-se nos trechos de fronteira impermeáveis, onde $q_n = 0$, ou naqueles que comunicam com a superfície e onde a capacidade de infiltração da água é superior à precipitação (caso contrário tem-se uma condição fronteira principal). Uma vala que comunique com o aquífero e a

partir da qual seja extraído um determinado volume de água na unidade de tempo também pode ser considerada uma condição fronteira deste tipo[30];

c) condição fronteira mista (Cauchy): é definida uma relação linear, constante ou variável com o tempo, entre a variável de estado e a sua primeira derivada na direcção normal à fronteira, o que é equivalente a estabelecer uma relação linear entre $H$ e $q_n$

$$H - a\,q_n + b = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad q_n = \frac{H}{a} + \frac{b}{a} \tag{2.172}$$

para $\vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Cauchy}}$. Quando um aquífero comunica com um curso de água ou um lago através de um estrato de menor permeabilidade que impede que o valor de $H$ na fronteira seja igual ao nível da água no curso de água ou no lago está instalada uma condição fronteira deste tipo, onde o fluxo é directamente proporcional à diferença $H_{\text{rio}} - H_{\text{aquífero}}$, ou $H_{\text{lago}} - H_{\text{aquífero}}$, à permeabilidade e inversamente proporcional à espessura do estrato em causa. Conhecendo o nível da água no rio ou lago, a permeabilidade e a espessura do estrato é possível determinar o valor dos coeficientes $a$ e $b$ presentes em (2.172).

Nas equações diferenciais (2.167), (2.168) e (2.169) as parcelas que representam extracções ou recargas difusas (por unidade de área), $Q$, ou pontuais $Q_{w,i}$, também podem ser interpretadas de modo análogo às condições fronteira de Neumann e Cauchy. Tal como é possível, para um determinado conjunto de pontos no interior do domínio, impor o valor da variável de estado, $H$, à semelhança da condição fronteira de Dirichlet. Assim:

d) condição tipo Dirichlet: o valor de $H$ é imposto, constante ou variável com o tempo, para um conjunto de pontos do interior do domínio. Um curso de água que atravesse um aquífero regional e comunique directamente com este pode ser representado por uma condição deste tipo;

---

[30] $q_n$ será igual ao valor total do caudal extraído a dividir pelo comprimento da vala.

e) condição tipo Neumann para zonas ou pontos do domínio: é imposto o caudal extraído, constante ou variável com o tempo, por unidade de área, $Q$

$$Q(\vec{\mathbf{x}},t)=\begin{cases} Q_{\text{definido}} & \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Omega_{\text{Neumann}} \\ 0 & \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \notin \Omega_{\text{Neumann}} \end{cases} \tag{2.173}$$

ou pontual, $Q_{w,i}$

$$Q_{w,i}(\vec{\mathbf{x}},t)=\begin{cases} Q_{\text{definido}} & \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} = \vec{\mathbf{x}}_{i,\text{Neumann}} \\ 0 & \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \neq \vec{\mathbf{x}}_{i,\text{Neumann}} \end{cases} \qquad (i=1,\ldots,N_{w,\text{Neumann}}) \tag{2.174}$$

f) condição tipo Cauchy para zonas ou pontos do domínio: é definida uma relação linear, constante ou variável com o tempo, entre o caudal extraído e a carga hidráulica

$$H - A\cdot Q + B = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad Q = \frac{H}{A} + \frac{B}{A} \tag{2.175}$$

para extracções ou recargas por unidade de área

$$Q(\vec{\mathbf{x}},t)=\begin{cases} \dfrac{H(\vec{\mathbf{x}},t)}{A(\vec{\mathbf{x}},t)} + \dfrac{B(\vec{\mathbf{x}},t)}{A(\vec{\mathbf{x}},t)} & \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Omega_{\text{Cauchy}} \\ 0 & \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \notin \Omega_{\text{Cauchy}} \end{cases} \tag{2.176}$$

com $A$ e $B$ definidos

ou para extracções ou recargas pontuais

$$Q_{w,i}(\vec{\mathbf{x}},t)=\begin{cases} \dfrac{H_i(\vec{\mathbf{x}},t)}{A_i(\vec{\mathbf{x}},t)} + \dfrac{B_i(\vec{\mathbf{x}},t)}{A_i(\vec{\mathbf{x}},t)} & \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} = \vec{\mathbf{x}}_{i,\text{Cauchy}} \\ 0 & \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \neq \vec{\mathbf{x}}_{i,\text{Cauchy}} \end{cases} \tag{2.177}$$

com $A_i$ e $B_i$ definidos $(i=1,\ldots,N_{w,\text{Cauchy}})$

*CAPÍTULO 3*

# INTEGRAÇÃO NUMÉRICA DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS. MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS


3.1 Equações diferenciais. Aproximação à solução 3.1

3.2 Método dos Resíduos Pesados 3.4
3.2.1 Introdução 4
3.2.2 Aproximação por resíduos pesados 3.6
3.2.3 O Método de Bubnov-Galerkin 3.8
3.2.4 Solução de equações diferenciais pelo Método dos Resíduos Pesados 3.9
3.2.5 Aplicação do Método dos Resíduos Pesados ao escoamento em aquíferos regionais 3.19

3.3 Método dos Elementos Finitos 3.23
3.3.1 Introdução 23
3.3.2 Funções de aproximação 3.25
3.3.3 Funções de aproximação globais 3.26
3.3.4 Funções de aproximação locais 3.28
3.3.5 Aproximação à solução de equações diferenciais. Formulação fraca 3.30
3.3.6 Critérios de continuidade 3.31
3.3.7 Método de Bubnov-Galerkin 3.31

3.4 Integração em ordem ao tempo 3.34
3.4.1 O sistema de equações 3.34
3.4.2 Métodos de integração em ordem ao tempo 3.42
3.4.3 O parâmetro $\theta$ e o incremento $\Delta t$ da integração em ordem ao tempo 3.44
3.4.4 Problemas com equações diferenciais não lineares 3.50


## 3.1 Equações diferenciais. Aproximação à solução

Um grande número de fenómenos pode ser descrito por equações diferenciais que relacionam as diversas grandezas físicas intervenientes. Embora, frequentemente, a formulação das referidas equações seja relativamente simples, a sua aplicação prática na resolução de problemas concretos revela-se difícil, visto que a integração das equações diferenciais pela via analítica só é possível em casos simples.

Os computadores permitem a utilização de métodos numéricos para a elaboração de aproximações às soluções das equações diferenciais. Estas são tratadas de modo a adquirirem uma forma algébrica, envolvendo operações aritméticas elementares. Entre os vários métodos numéricos frequentemente utilizados destacam-se o Método das Diferenças Finitas (MDF) e o *Método dos Elementos Finitos* (MEF).

Noutros métodos, como os variacionais ou de resíduos pesados, a solução aproximada de uma equação diferencial, $u_{aprox}$, é expressa por uma combinação linear de funções de aproximação $N_i$ previamente escolhidas

$$u \approx u_{aprox} = \sum_{i=1}^{M} c_i N_i \tag{3.1}$$

e os coeficientes de combinação $c_i$ são as incógnitas do problema variacional ou de resíduos pesados. A grande desvantagem destes métodos reside na dificuldade em arranjar funções de aproximação para domínios de geometria arbitrária.

A aproximação, pelo MDF, da solução de uma equação diferencial caracteriza-se pela substituição das derivadas por quocientes de diferenças ou variações finitas, definidas a partir dos valores da solução num conjunto discreto de pontos do domínio. O sistema de equações assim gerado é resolvido após a introdução das condições iniciais e de fronteira. Este método tem algumas desvantagens, sendo de salientar a imprecisão das derivadas da solução aproximada, a dificuldade de representar domínios e fronteiras de maior complexidade geométrica e, finalmente, a necessidade de se empregar uma malha rectangular.

A aproximação pelo MEF de uma equação diferencial caracteriza-se por dois importantes aspectos:

- um domínio, geometricamente complexo, é representado (ou dividido) por um conjunto de sub-domínios geometricamente mais simples, designados por *elementos finitos*;

- no interior de cada elemento finito, as funções ou variáveis são aproximadas por uma combinação linear de polinómios. Estes são designados por *funções de aproximação*[1].

O MEF pode ser interpretado como a aplicação ao sub-domínio elemento finito de um método variacional ou de resíduos pesados. A solução aproximada de uma equação

[1] Também são designadas por funções de *forma* ou de *interpolação*.

diferencial, $u_{\text{aprox}}$, é expressa por uma combinação linear de funções de aproximação, $N_i$, e os coeficientes de combinação, $c_i$, são os valores da solução num conjunto finito de $M$ pontos do elemento, designados por *nós*. Estes poderão estar localizados na fronteira ou no interior de cada elemento.

Se, por exemplo, a solução da equação diferencial for a carga hidráulica (ou cota piezométrica), $H$, esta é aproximada no interior de um elemento pela expressão

$$H \approx H_{\text{aprox}} = \sum_{j=1}^{N_{NELM}} H_j N_j \tag{3.2}$$

sendo agora os coeficientes de combinação, $H_j$, os valores de $H$ nos $N_{NELM}$ nós do elemento.

Tanto no MDF como no MEF, os domínios espacial e temporal são discretizados, procurando-se conhecer o valor das grandezas intervenientes num número finito de pontos do espaço ou de instantes temporais. A determinação dos valores das grandezas nos restantes pontos ou instantes é realizada por processos de aproximação (ou interpolação) à custa de expressões como (3.2).

Apesar de o método numérico mais utilizado no âmbito da Hidrogeologia ser o MDF[2], afigura-se-nos que o MEF[3] apresenta algumas vantagens substanciais, nomeadamente a capacidade de lidar com geometrias complexas e permitir um maior refinamento da malha nas zonas do domínio que apresentam maior variação das grandezas intervenientes. Acresce, ainda, que os diversos tipos de elementos, com as respectivas funções de forma, permitem uma melhor aproximação às funções e variáveis cujo comportamento se pretende representar.

As aplicações à engenharia estrutural proporcionaram um grande impulso ao desenvolvimento do MEF, pelo que grande parte da literatura inicialmente produzida sobre este método reflectia uma concepção idêntica à dos métodos matriciais de análise estrutural.

---

[2] O programa MODFLOW e um conjunto de outros programas desenvolvidos em torno deste simulador contribuíram para uma aplicação generalizada do Método das Diferenças Finitas aos problemas do escoamento e transporte em meios subterrâneos.

[3] Estão igualmente disponíveis alguns programas comerciais com base no Método dos Elementos Finitos, entre os quais se pode destacar o FEFLOW.

Posteriormente, o MEF veio a ser encarado como uma técnica baseada na aproximação, por métodos variacionais ou de resíduos pesados, da solução de problemas regidos por equações diferenciais, adquirindo uma estruturação matemática mais geral e comum a todos os tipos de problemas físicos. A formulação de *resíduos pesados*, de aplicação geral, assume um papel importante no estabelecimento das equações algébricas do MEF que realizam a integração numérica das equações diferenciais em ordem às coordenadas espaciais e temporal. Por este motivo, é aqui apresentado um breve resumo desta formulação, a utilizar frequentemente ao longo deste trabalho na resolução das diversas equações diferenciais.

## 3.2 Método dos Resíduos Pesados

### 3.2.1 Introdução

Um grande número de problemas físicos é regido por uma ou mais equações diferenciais. Resolvê-las significa encontrar uma função ou funções que satisfaçam, simultaneamente, as equações diferenciais num dado *domínio* e determinadas condições na respectiva *fronteira*. O domínio, $\Omega$, é um conjunto de pontos no espaço aos quais se aplica a seguinte ideia: se um ponto P pertence ao domínio, então todos os pontos na vizinhança de P também pertencem ao domínio. A fronteira, $\Gamma$, define-se como o conjunto de pontos em cuja vizinhança existem pontos que pertencem ao domínio e outros que não pertencem. Destas definições conclui-se que o domínio é apenas constituído por pontos interiores, pois os da fronteira já não são considerados como domínio. A função que é solução de uma equação diferencial é frequentemente designada por *variável dependente*. As coordenadas espaciais dos pontos do domínio, assim como o tempo, são as *variáveis independentes*. A variável dependente, a respectiva derivada ou ainda uma relação entre estas devem ser previamente conhecidas na fronteira, constituindo as designadas *condições fronteira*. Para os problemas variáveis com o tempo, é ainda necessário estabelecer as *condições iniciais*, isto é, o valor da variável dependente em todo o domínio, no instante inicial.

O Método dos Resíduos Pesados (MRP) visa construir uma aproximação numérica a uma dada função, $u$, num domínio, $\Omega$, limitado por uma fronteira, $\Gamma$. Sendo $u$ a solução de

uma equação diferencial associada a determinadas condições fronteira, procura-se construir uma aproximação que garanta o cumprimento das condições fronteira, isto é, que seja exacta em $\Gamma$. A função $u$ é então aproximada por uma combinação linear de funções *previamente escolhidas*

$$u \approx u_{\text{aprox}} = \Phi + \sum_{i=1}^{M} c_i N_i \tag{3.3}$$

sendo:

- $\Phi$ uma função que na fronteira toma exactamente os mesmos valores de $u$, isto é, $\Phi_\Gamma = u_\Gamma$;

- $\{N_i\}$ o conjunto das $M$ funções de aproximação, linearmente independentes e com valor nulo em $\Gamma$;

- $\{c_i\}$ o conjunto dos $M$ parâmetros ou coeficientes de aproximação, a *determinar* de tal modo que a aproximação (3.3) seja a melhor possível.

Escolhidas as funções $\Phi$ e $\{N_i\}$ de acordo com os critérios acima expostos fica garantida a exactidão da aproximação na fronteira, independentemente do valor dos coeficientes de aproximação, $\{c_i\}$. As funções $\{N_i\}$ devem ser seleccionadas de modo a que ao aumento do número $M$ de funções corresponda um incremento da precisão da aproximação $u_{\text{aprox}}$. Expresso de outro modo, quando $M$ tender para infinito, $u_{\text{aprox}}$ deve tender para a solução exacta, $u$.

A determinação dos coeficientes $c_i$ pode ser realizada, por exemplo, impondo que $u_{\text{aprox}}$ seja exacta em $M$ distintos pontos do domínio. Enquanto que o número de pontos deve ser igual ao número de funções de aproximação utilizadas, já a escolha dos mesmos é arbitrária, correspondendo a cada diferente conjunto de pontos escolhidos uma diferente aproximação. Assim, ao impor que

$$u_{\text{aprox}}(\vec{\mathbf{x}}_i) = u(\vec{\mathbf{x}}_i) \quad , \quad i = 1,\ldots,M \tag{3.4}$$

obtém-se um sistema de $M$ equações lineares a $M$ incógnitas, os coeficientes $c_i$

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{f} \tag{3.5}$$

sendo $K_{ij}$ o valor da função de aproximação $N_j$ calculada no ponto $\vec{\mathbf{x}}_i$

$$K_{ij} = N_j(\vec{\mathbf{x}}_i) \qquad i, j = 1,...,M \tag{3.6}$$

e o vector dos termos independentes de (3.5) definido por

$$f_i = u(\vec{\mathbf{x}}_i) - \Phi(\vec{\mathbf{x}}_i) \qquad i = 1,...,M \tag{3.7}$$

Esta abordagem tem uma limitação evidente, a necessidade de conhecer previamente o valor de $u$ em $M$ pontos do domínio. Para ultrapassar esta dificuldade é introduzido o conceito de *resíduo pesado*, o qual serve de base a uma metodologia mais geral para a construção da função aproximada, $u_{\text{aprox}}$, e que, justamente por isso, dá o nome ao método.

### 3.2.2 Aproximação por resíduos pesados

Designa-se por erro ou *resíduo* de uma aproximação a diferença entre a solução exacta e a aproximação

$$R_\Omega = u - u_{\text{aprox}} \tag{3.8}$$

Uma vez escolhidas as funções $\Phi$ e $N_i$ e determinados os coeficientes $c_i$, $u_{\text{aprox}}$ é apenas função das coordenadas dos pontos do domínio, $\Omega$, tal como $u$. O mesmo sucede com o resíduo, $R_\Omega$, definido por (3.8).

Em benefício da precisão da aproximação, importa reduzir o erro ou resíduo. Uma hipótese aparentemente aceitável seria a de anular o erro ou resíduo médio no domínio $\Omega$. Para tal bastaria igualar a zero o integral de $R_\Omega$ estendido ao domínio

$$\int_\Omega (u - u_{\text{aprox}})\, d\Omega = \int_\Omega R_\Omega \, d\Omega = 0 \tag{3.9}$$

assegurando-se assim que os erros de sinal positivo compensariam os de sinal negativo. Contudo, a expressão (3.9) não garante uma boa aproximação[4]. De facto, não é difícil imaginar a possibilidade de existir uma aproximação geradora de grandes erros de sinal positivo que compensem grandes erros de sinal negativo. Daí que surja a ideia de anular um apropriado número de integrais estendidos ao domínio, mas agora do resíduo pesado de diversas formas

$$\int_\Omega W_i\, (u - u_{\text{aprox}})\, d\Omega = \int_\Omega W_i\, R_\Omega \, d\Omega = 0 \quad , \quad i = 1,\ldots, M \tag{3.10}$$

sendo $\{W_i\}$ o conjunto das *funções de peso*, linearmente independentes.

Em (3.9) é atribuído o mesmo peso ao resíduo em todos os pontos de $\Omega$. O que se pretende com (3.10) é atribuir ao resíduo, em cada ponto de $\Omega$, um determinado peso, ao multiplicá-lo pela função de peso, $W_i$, sendo que esta apenas depende das coordenadas em $\Omega$. Assim, a cada $W_i$ corresponde uma diferente distribuição de pesos, logo um integral do resíduo pesado de uma forma diferente. Compreende-se, então, que só uma aproximação cada vez mais ajustada à solução exacta é compatível com a anulação de sucessivos integrais do resíduo, pesado de formas diversas.

A necessidade de determinar as $M$ incógnitas, que são os coeficientes $c_i$, obriga a escrever $M$ integrais do resíduo pesado (3.10), para $M$ linearmente independentes funções de peso $W_i$. A convergência é assegurada pelo aumento do número de funções de aproximação, $N_i$, e de peso, $W_i$

---

[4] Acresce, ainda, que daria lugar a uma indeterminação face às $M$ incógnitas, os coeficientes $c_i$.

$$M \to \infty \quad \Rightarrow \quad R_\Omega \to 0 \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{3.11}$$

Substituindo a expressão da aproximação (3.3) em (3.10) obtém-se o sistema de equações lineares

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{f} \tag{3.12}$$

definido por

$$K_{ij} = \int_\Omega W_i \, N_j \, d\Omega \qquad i, j = 1,\ldots,M \tag{3.13}$$

$$f_i = \int_\Omega W_i \, (u - \Phi) \, d\Omega \qquad i = 1,\ldots,M \tag{3.14}$$

Sendo a função $u$ conhecida, o sistema de equações (3.12) é resolvido em ordem aos coeficientes $c_i$. Mas a limitação anteriormente referida está novamente presente e agravada. De facto, se em (3.7) só era necessário saber o valor de $u$ em $M$ pontos de $\Omega$, agora é necessário conhecer o comportamento de $u$ em todo o domínio. Como se verá adiante – para a resolução das equações diferenciais pelo MRP – este problema é ultrapassado por uma redefinição do conceito de resíduo.

### 3.2.3 O Método de Bubnov-Galerkin

A escolha das funções de peso, $W_i$, dá origem aos diferentes MRP. Algumas dessas escolhas são conhecidas por designações específicas. Merece particular relevo a versão de Bubnov-Galerkin do MRP, caracterizada por seleccionar um conjunto de funções de peso igual ao das funções de aproximação, isto é

$$W_i = N_i \quad , \quad i = 1,\ldots,M \tag{3.15}$$

Introduzindo esta opção em (3.13) e (3.14), o sistema de equações (3.12) fica agora definido por

$$K_{ij} = \int_{\Omega} N_i \, N_j \, d\Omega \qquad i,j = 1,...,M \tag{3.16}$$

$$f_i = \int_{\Omega} N_i \, (u - \Phi) \, d\Omega \qquad i = 1,...,M \tag{3.17}$$

Saliente-se a simetria da matriz do sistema de equações (3.16), frequentemente geradora de grande economia no esforço de cálculo computacional. Como se verá adiante, esta característica, associada ao facto de não ser necessário definir funções de peso, faz do Método de Bubnov-Galerkin a base de grande parte das aplicações de elementos finitos.

### 3.2.4 Solução de equações diferenciais pelo Método dos Resíduos Pesados

Nas secções anteriores o MRP foi introduzido como um processo de construir uma aproximação a uma função. Contudo, e como já foi salientado, a formulação apresentada não dispensa o conhecimento da solução exacta. Como a solução de uma equação diferencial não é conhecida, torna-se necessário encontrar uma nova definição para o resíduo que dispense o conhecimento da solução exacta.

Considere-se uma equação diferencial $A(u)$, escrita de uma forma genérica

$$A(u) = L(u) + p = 0 \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{3.18}$$

sendo $L(u)$ um operador diferencial linear, isto é, um operador diferencial que satisfaça a igualdade

$$L(\alpha u + \beta v) = \alpha L(u) + \beta L(v) \tag{3.19}$$

sendo $\alpha$ e $\beta$ escalares e $u$ e $v$ funções quaisquer. Em (3.18), a função $p$ é conhecida e depende das coordenadas em $\Omega$. Pretende-se encontrar uma função $u$ que satisfaça simultaneamente a

equação diferencial (3.18) e as condições fronteira associadas, $B(u)$, escritas de uma forma genérica

$$B(u) = M(u) + r = 0 \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma \tag{3.20}$$

sendo $M(u)$ um operador diferencial linear e $r$ uma função conhecida das coordenadas em $\Gamma$. Tanto $M(u)$ como $r$ tomam diferentes expressões conforme o tipo de condição fronteira:

- no trecho de fronteira com a condição de Dirichlet, é definido o valor de $u$:

$$M(u) = u \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}} \tag{3.21}$$

$$r = -u_{\text{definido}} \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}} \tag{3.22}$$

- no trecho de fronteira com a condição de Neumann, é definida a derivada de $u$ na direcção normal à fronteira:

$$M(u) = \frac{\partial u}{\partial n} \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Neumann}} \tag{3.23}$$

$$r = -\left(\frac{\partial u}{\partial n}\right)_{\text{definida}} \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Neumann}} \tag{3.24}$$

Recorrendo à combinação linear de funções de aproximação

$$u \approx u_{\text{aprox}} = \Phi + \sum_{i=1}^{M} c_i N_i \tag{3.3}$$

e escolhendo $\Phi$ e $N_i$ linearmente independentes, contínuas em $\Omega$ e respeitando as seguintes restrições

$$M(\Phi) = -r \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma \tag{3.25}$$

$$M(N_i) = 0 \qquad \text{para} \quad \bar{\mathbf{x}} \in \Gamma \quad \text{e} \quad i = 1,...,M \tag{3.26}$$

tem-se a garantia de que a aproximação é exacta na fronteira do domínio, independentemente do valor dos coeficientes de aproximação $c_i$. Estabelecida a expressão geral de $u_{\text{aprox}}$ que satisfaz de uma forma aproximada a equação diferencial (3.18), obtém-se

$$A(u_{\text{aprox}}) \approx A(u) = 0 \tag{3.27}$$

O erro ou *resíduo* é agora definido pela diferença

$$R_\Omega = A(u_{\text{aprox}}) - A(u) \tag{3.28}$$

ou ainda por

$$\boxed{R_\Omega = A(u_{\text{aprox}})} \tag{3.29}$$

visto que $A(u) = 0$.

Substituindo (3.3) em (3.18), o resíduo é expresso por

$$R_\Omega = A(u_{\text{aprox}}) = L(u_{\text{aprox}}) + p = L(\Phi) + \sum_{j=1}^{M} c_j L(N_j) + p \tag{3.30}$$

A observação de (3.30) obriga a definir um novo critério para as funções de aproximação[5]:

- as funções $\Phi$ e $N_i$ devem ser tão diferenciáveis quanto o exigido pelo operador diferencial $L(u)$, de modo a existirem as derivadas presentes em (3.30).

[5] Em determinadas situações é possível relaxar esta exigência, como se verá posteriormente.

Uma vez estabelecido o novo conceito de resíduo, importa reduzi-lo, para o que se recorre aos procedimentos anteriormente apresentados. Assim, impõe-se que $M$ integrais, estendidos ao domínio, do resíduo pesado de diferentes modos sejam nulos

$$\int_\Omega W_i \, R_\Omega \, d\Omega = 0 \quad , \quad i = 1,...,M \tag{3.31}$$

isto é

$$\int_\Omega W_i \left[ L(\Phi) + \sum_{j=1}^{M} c_j L(N_j) + p \right] d\Omega = 0 \quad , \quad i = 1,...,M \tag{3.32}$$

O número de $M$ integrais a anular é, naturalmente, igual ao número de incógnitas $c_i$, dando lugar ao sistema de equações lineares

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{f} \tag{3.33}$$

definido por

$$K_{ij} = \int_\Omega W_i \, L(N_j) \, d\Omega \qquad i,j = 1,...,M \tag{3.34}$$

$$f_i = -\int_\Omega W_i \, p \, d\Omega - \int_\Omega W_i \, L(\Phi) \, d\Omega \qquad i = 1,...,M \tag{3.35}$$

Uma vez resolvido o sistema de equações (3.33) em ordem aos coeficientes $c_i$ e os valores destes substituídos em (3.3), encontra-se finalmente construída a desejada aproximação à solução exacta da equação diferencial (3.18) associada às condições fronteira (3.20).

O recurso a funções de peso iguais às de aproximação traduz a versão de Bubnov-Galerkin do MRP

$$K_{ij} = \int_\Omega N_i \, L(N_j) \, d\Omega \qquad i,j = 1,...,M \tag{3.36}$$

$$f_i = -\int_\Omega N_i \, p \, d\Omega \; - \int_\Omega N_i \, L(\Phi) \, d\Omega \qquad i = 1,...,M \tag{3.37}$$

Por enquanto, a expressão (3.36) ainda não apresenta a simetria da matriz do sistema de equações, evidenciada em (3.16) como uma das características do método de Bubnov-Galerkin. Essa simetria é obtida para as equações diferenciais de ordem par, à custa da transferência de derivadas das funções de aproximação para as funções de peso, como se salientará oportunamente.

A aproximação (3.3) está concebida de modo a coincidir com a solução exacta na fronteira do domínio. Facilmente se compreende a dificuldade em encontrar funções de aproximação que satisfaçam as condições (3.25) e (3.26), em particular para os domínios geometricamente complexos. Acresce ainda que a função $\Phi$ teria que ser redefinida de cada vez que se modificassem as condições fronteira de um dado problema. Assim, é natural que se explore a possibilidade de construir uma aproximação liberta destas limitações

$$u \approx u_{\text{aprox}} = \sum_{i=1}^{M} c_i N_i \tag{3.1}$$

Esta expressão, em princípio, não satisfaz as condições fronteira, isto é, não é exacta na fronteira do domínio. Daí que, para além do resíduo no domínio, $R_\Omega$, também exista o resíduo na fronteira, $R_\Gamma$

$$R_\Omega = A(u_{\text{aprox}}) = L(u_{\text{aprox}}) + p = 0 \qquad \text{para} \quad \bar{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{3.38}$$

$$R_\Gamma = B(u_{\text{aprox}}) = M(u_{\text{aprox}}) + r = 0 \qquad \text{para} \quad \bar{\mathbf{x}} \in \Gamma \tag{3.39}$$

A construção da aproximação passa agora não só pela redução do resíduo no domínio mas também na fronteira. Escrevendo a anulação dos resíduos pesados no domínio e na fronteira, obtém-se

$$\int_\Omega W_i \, R_\Omega \, d\Omega + \int_\Gamma V_i \, R_\Gamma \, d\Gamma = 0 \quad , \quad i = 1,...,M \tag{3.40}$$

com $\{W_i\}$ e $\{V_i\}$ constituindo, em princípio, diferentes conjuntos de funções de peso, respectivamente no domínio e na fronteira. Introduzindo a aproximação (3.1) em (3.38) e (3.39), e substituindo estas em (3.40), obtém-se o habitual sistema de equações em ordem aos coeficientes de aproximação

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{f} \tag{3.41}$$

definido por

$$K_{ij} = \int_\Omega W_i \, L(N_j) \, d\Omega + \int_\Gamma V_i \, M(N_j) \, d\Gamma \qquad i, j = 1,..., M \tag{3.42}$$

$$f_i = -\int_\Omega W_i \, p \, d\Omega - \int_\Gamma V_i \, r \, d\Gamma \qquad i = 1,..., M \tag{3.43}$$

Este sistema de equações, associado à combinação de funções de aproximação (3.1), permite elaborar uma aproximação à solução de uma equação diferencial, sem garantir previamente o cumprimento das condições fronteira. Contudo, na prática, este processo revela-se mais complexo que o anterior, baseado em (3.3), pois requer mais coeficientes e mais funções de aproximação e de peso para alcançar resultados de rigor idêntico. Acresce, ainda, o facto de envolver integrais de contorno de derivadas de $u_{\text{aprox}}$, difíceis de calcular, em especial para fronteiras de geometria complexa.

Uma vez apresentadas as equações que materializam uma solução exacta e uma solução aproximada na fronteira, analise-se uma abordagem de compromisso, isto é, uma aproximação exacta apenas no trecho da fronteira onde o valor de $u$ é imposto, $\Gamma_{\text{Dirichlet}}$. Para o efeito retoma-se

$$u \approx u_{\text{aprox}} = \Phi + \sum_{i=1}^{M} c_i N_i \tag{3.3}$$

sendo agora:

- $\Phi$ uma função que em $\Gamma_{\text{Dirichlet}}$ toma os mesmos valores que $u$:

$$\Phi = u \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}} \tag{3.44}$$

- $\{N_i\}$ o conjunto das $M$ funções de aproximação linearmente independentes, as quais devem assumir o valor nulo em $\Gamma_{\text{Dirichlet}}$:

$$N_i = 0 \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}} \quad , \quad i = 1,...,M \tag{3.45}$$

Respeitadas estas duas condições fica assegurado o rigor da aproximação em $\Gamma_{\text{Dirichlet}}$, independentemente dos valores a determinar para os coeficientes de aproximação, $c_i$. Como no restante trecho da fronteira ainda subsiste uma diferença entre as soluções exacta e aproximada, a formulação de resíduos pesados continua a ter em conta o resíduo na fronteira $\Gamma_{\text{Neumann}}$[6]. Assim, a redução dos resíduos pesados volta a ser expressa por

$$\int_\Omega W_i \, R_\Omega \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} V_i \, R_\Gamma \, d\Gamma \; = \; 0 \quad , \quad i = 1,...,M \tag{3.46}$$

com a diferença, relativamente a (3.40), de o integral de contorno se restringir ao trecho onde a aproximação não é exacta, uma vez que na restante fronteira o resíduo é nulo. Introduzindo em (3.46) os resíduos no domínio (3.38) e na fronteira (3.39) obtém-se sucessivamente

$$\int_\Omega W_i \left[ L(u_{\text{aprox}}) + p \right] d\Omega + \int_{\Gamma_N} V_i \left[ M(u_{\text{aprox}}) + r \right] d\Gamma \; = \; 0 \quad , \quad i = 1,...,M \tag{3.47}$$

$$\begin{aligned} &\int_\Omega W_i \, L(u_{\text{aprox}}) \, d\Omega + \int_\Omega W_i \, p \, d\Omega + \\ &+ \int_{\Gamma_N} V_i \, M(u_{\text{aprox}}) \, d\Gamma + \int_{\Gamma_N} V_i \, r \, d\Gamma \; = \; 0 \quad , \quad i = 1,...,M \end{aligned} \tag{3.48}$$

Frequentemente, a primeira parcela de (3.48) é transformada numa soma de um integral estendido ao domínio com um integral de contorno[7]

---

[6] Em benefício da simplicidade da exposição é omitida a possibilidade de existir um trecho de fronteira com a condição mista de Cauchy.

[7] Teoremas de Green.

$$\int_\Omega W_i \, L(u_{\text{aprox}}) \, d\Omega = \int_\Omega C(W_i) \, D(u_{\text{aprox}}) \, d\Omega + \int_\Gamma W_i \, E(u_{\text{aprox}}) \, d\Gamma \tag{3.49}$$

sendo $C(u)$, $D(u)$ e $E(u)$ operadores diferenciais lineares, em geral de ordem inferior ao operador $L(u)$. Então a expressão (3.48) pode ser rescrita

$$\begin{aligned} &\int_\Omega C(W_i) \, D(u_{\text{aprox}}) \, d\Omega + \int_\Omega W_i \, p \, d\Omega + \int_\Gamma W_i \, E(u_{\text{aprox}}) \, d\Gamma + \\ &+ \int_{\Gamma_N} V_i \, M(u_{\text{aprox}}) \, d\Gamma + \int_{\Gamma_N} V_i \, r \, d\Gamma = 0 \quad , \quad i = 1,...,M \end{aligned} \tag{3.50}$$

Se da observação desta expressão se concluir que $E(u) \equiv M(u)$, isto é, que os operadores $E(u)$ e $M(u)$ são iguais, então, com a introdução de dois critérios na escolha das funções de peso, algumas simplificações são possíveis. São eles:

$$W_i = 0 \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}} \quad , \quad i = 1,...,M \tag{3.51}$$

$$V_i = -W_i \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Neumann}} \quad , \quad i = 1,...,M \tag{3.52}$$

Desdobrando o terceiro integral de (3.50)

$$\int_\Gamma W_i \, E(u_{\text{aprox}}) \, d\Gamma = \int_{\Gamma_D} W_i \, E(u_{\text{aprox}}) \, d\Gamma + \int_{\Gamma_N} W_i \, E(u_{\text{aprox}}) \, d\Gamma \tag{3.53}$$

a primeira parcela do segundo membro é nula, atendendo a (3.51). E introduzindo (3.52) em (3.50), esta fica

$$\begin{aligned} &\int_\Omega C(W_i) \, D(u_{\text{aprox}}) \, d\Omega + \int_\Omega W_i \, p \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} W_i \, E(u_{\text{aprox}}) \, d\Gamma - \\ &- \int_{\Gamma_N} W_i \, M(u_{\text{aprox}}) \, d\Gamma - \int_{\Gamma_N} W_i \, r \, d\Gamma = 0 \quad , \quad i = 1,...,M \end{aligned} \tag{3.54}$$

Verificando-se, então, a igualdade dos operadores diferenciais $E(u)$ e $M(u)$, a simplificação de (3.54) é possível

$$\int_\Omega C(W_i)\, D(u_{\text{aprox}})\, d\Omega + \int_\Omega W_i\, p\, d\Omega - \int_{\Gamma_N} W_i\, r\, d\Gamma = 0 \quad , \quad i = 1,\ldots,M \tag{3.55}$$

Esta expressão (3.55) não contém a integração de $u_{\text{aprox}}$ ou das suas derivadas em $\Gamma$. As condições fronteira

$$B(u) = M(u) + r = 0 \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Neumann}} \tag{3.56}$$

já se encontram incluídas no integral de contorno de (3.55) atendendo que $M(u) = -r$.

A expressão (3.55) pode ser obtida exclusivamente a partir dos integrais do resíduo pesado no domínio. Recomeçando a dedução das equações

$$\int_\Omega W_i\, R_\Omega\, d\Omega = 0 \quad , \quad i = 1,\ldots,M \tag{3.57}$$

$$\int_\Omega W_i\, L(u_{\text{aprox}})\, d\Omega + \int_\Omega W_i\, p\, d\Omega = 0 \quad , \quad i = 1,\ldots,M \tag{3.58}$$

desenvolvendo novamente o primeiro integral de acordo com (3.49),

$$\int_\Omega C(W_i)\, D(u_{\text{aprox}})\, d\Omega + \int_\Omega W_i\, p\, d\Omega + \int_\Gamma W_i\, E(u_{\text{aprox}})\, d\Gamma = 0 \quad , \quad i = 1,\ldots,M \tag{3.59}$$

explorando a identidade de operadores diferenciais $E(u) \equiv M(u)$, introduzindo a igualdade $M(u) = -r$ e escolhendo as funções de peso de acordo com o critério (3.51) obtém-se novamente

$$\boxed{\int_\Omega C(W_i)\, D(u_{\text{aprox}})\, d\Omega + \int_\Omega W_i\, p\, d\Omega - \int_{\Gamma_N} W_i\, r\, d\Gamma = 0 \quad , \quad i = 1,\ldots,M} \tag{3.55}$$

Esta equação, obtida a partir da anulação dos integrais do resíduo pesado no domínio, tem a designação de *formulação fraca* pois envolve uma transferência de diferenciação de $u_{\text{aprox}}$ para a função de peso e o aparecimento de operadores diferenciais de ordem inferior ao da equação diferencial, cuja solução se pretende aproximar. A validade desta formulação fica

evidenciada pelo facto de ter produzido uma expressão final, (3.55), igual à que foi gerada a partir da anulação dos resíduos pesados no domínio e na fronteira, salvaguardada que esteja a igualdade dos operadores diferenciais $E(u)$ e $M(u)$. É esta a formulação aplicada na dedução das equações do MEF para as diferentes equações diferenciais estudadas e integradas numericamente ao longo deste trabalho.

Substituindo a expressão da aproximação (3.3) em (3.55) obtém-se o sistema de equações

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{f} \tag{3.60}$$

definido por

$$K_{ij} = \int_{\Omega} C(W_i)\, D(N_j)\, d\Omega \qquad i,j = 1,...,M \tag{3.61}$$

$$f_i = -\int_{\Omega} C(W_i)\, D(\Phi)\, d\Omega - \int_{\Omega} W_i\, p\, d\Omega + \int_{\Gamma_N} W_i\, r\, d\Gamma \qquad i = 1,...,M \tag{3.62}$$

Na versão de Bubnov-Galerkin do MRP, estas expressões são rescritas

$$K_{ij} = \int_{\Omega} C(N_i)\, D(N_j)\, d\Omega \qquad i,j = 1,...,M \tag{3.63}$$

$$f_i = -\int_{\Omega} C(N_i)\, D(\Phi)\, d\Omega - \int_{\Omega} N_i\, p\, d\Omega + \int_{\Gamma_N} N_i\, r\, d\Gamma \qquad i = 1,...,M \tag{3.64}$$

para $W_i = N_i$ , $i = 1,...,M$ uma vez que as funções de aproximação respeitam um critério (3.45) idêntico ao definido para as funções de peso (3.51). Se os operadores diferenciais $C(u)$ e $D(u)$ forem iguais, a matriz do sistema de equações apresenta-se simétrica, com as vantagens já anteriormente referidas.

Outra vantagem da formulação fraca reside na exigência, quanto ao grau de diferenciação, a que estão sujeitas as funções de aproximação. Tal como já foi salientado, esta formulação dá lugar ao aparecimento de operadores diferenciais, de ordem inferior ao da

equação diferencial original, aplicados às funções $N_i$. Estas têm que ser apenas tão diferenciáveis quanto o exigido pelos novos operadores $C(u)$ e $D(u)$. Nos problemas tratados neste trabalho as equações diferenciais apresentam, no máximo, derivadas de segunda ordem, pelo que às funções de aproximação apenas se exige que sejam uma vez diferenciáveis.

### 3.2.5 Aplicação do Método dos Resíduos Pesados ao escoamento em aquíferos regionais

A aplicação do MRP, recorrendo à formulação fraca acima descrita, é a mais adequada em grande número de problemas, em particular aqueles que são caracterizados por equações com operadores diferenciais de ordem par, como é o caso das que regem o escoamento em aquíferos regionais. A título exemplificativo, é aqui efectuada uma aplicação desta formulação a uma das equações apresentadas no capítulo anterior

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(T_x \frac{\partial H}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(T_y \frac{\partial H}{\partial y}\right)+\omega_d \frac{\partial H}{\partial t}+Q=0 \tag{3.65}$$

Foi propositadamente escolhida uma equação que, por agora, se admite linear, embora não o seja. Em benefício da simplicidade da exposição, rescreva-se com um aspecto mais compacto

$$-\vec{\nabla}\,|\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H\right)+\omega_d \frac{\partial H}{\partial t}+Q=0 \tag{3.66}$$

recorrendo ao operador diferencial $\vec{\nabla}=(\partial/\partial x,\partial/\partial y)$. Finalmente, para encaixá-la na configuração da forma genérica (3.18), admita-se que o problema é permanente $\partial H/\partial t=0$

$$-\vec{\nabla}\,|\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H\right)+Q=0 \tag{3.67}$$

As condições fronteira associadas são

$$H=H_{\text{definido}} \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Dirichlet}} \tag{3.68}$$

$$-\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H\right)\mid\vec{\mathbf{n}}=q_n \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Neumann}} \tag{3.69}$$

A variável dependente, $H$, é aproximada de acordo com (3.3)

$$H_{\text{aprox}}=\Phi+\sum_{j=1}^{M}c_j N_j \tag{3.70}$$

e o resíduo no domínio, de acordo com (3.29), é a equação diferencial escrita para $H_{\text{aprox}}$

$$R_\Omega=-\vec{\nabla}\mid\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H_{\text{aprox}}\right)+Q \tag{3.71}$$

Anulando os $M$ integrais de $R_\Omega$ com as funções de peso iguais às de aproximação (Bubnov-Galerkin) obtém-se sucessivamente

$$\int_\Omega N_i\,R_\Omega\,d\Omega\;=\;0\quad,\quad i=1,\ldots,M \tag{3.72}$$

$$\int_\Omega N_i\left[-\vec{\nabla}\mid\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H_{\text{aprox}}\right)+Q\right]d\Omega=0\quad,\quad i=1,\ldots,M \tag{3.73}$$

$$-\int_\Omega N_i\vec{\nabla}\mid\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H_{\text{aprox}}\right)d\Omega+\int_\Omega N_i\,Q\,d\Omega=0\quad,\quad i=1,\ldots,M \tag{3.74}$$

Aplicando o primeiro teorema de Green[8] à primeira parcela de (3.74), esta equação fica

$$\begin{aligned}&\int_\Omega\vec{\nabla}N_i\mid\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H_{\text{aprox}}\right)d\Omega+\int_\Omega N_i\,Q\,d\Omega-\\&-\int_\Gamma N_i\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H_{\text{aprox}}\right)\mid\vec{\mathbf{n}}\,d\Gamma=0\quad,\quad i=1,\ldots,M\end{aligned} \tag{3.75}$$

---

[8] $\int_\Omega\alpha\vec{\nabla}\mid\vec{\mathbf{v}}\,d\Omega=-\int_\Omega\vec{\nabla}\alpha\mid\vec{\mathbf{v}}\,d\Omega+\int_\Gamma\alpha\vec{\mathbf{v}}\mid\vec{\mathbf{n}}\,d\Gamma$

Substituindo em (3.75) a expressão (3.70) da aproximação de $H$ e procedendo às reorganizações e simplificações adequadas, obtém-se

$$\int_\Omega \vec{\nabla} N_i \,|\, \left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}\Phi\right) d\Omega + \sum_{j=1}^{M} c_j \int_\Omega \vec{\nabla} N_i \,|\, \left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla} N_j\right) d\Omega + \int_\Omega N_i\, Q\, d\Omega - \\ - \int_\Gamma N_i \left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla} H_{\text{aprox}}\right) |\, \vec{\mathbf{n}}\, d\Gamma = 0 \quad , \quad i = 1,...,M \tag{3.76}$$

O integral de contorno é nulo no trecho $\Gamma_{\text{Dirichlet}}$, atendendo a que as funções $N_i$ também são nulas neste trecho (3.45). No integral relativo ao trecho $\Gamma_{\text{Neumann}}$ aplica-se a condição fronteira (3.69). Assim, as equações (3.76) tomam o aspecto

$$\int_\Omega \vec{\nabla} N_i \,|\, \left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}\Phi\right) d\Omega + \sum_{j=1}^{M} c_j \int_\Omega \vec{\nabla} N_i \,|\, \left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla} N_j\right) d\Omega + \int_\Omega N_i\, Q\, d\Omega + \\ + \int_{\Gamma_N} N_i\, q_n\, d\Gamma = 0 \quad , \quad i = 1,...,M \tag{3.77}$$

que dão origem ao sistema de equações

$$\mathbf{K}\cdot\mathbf{c} = \mathbf{f} \tag{3.78}$$

definido por

$$K_{ij} = \int_\Omega \vec{\nabla} N_i \,|\, \left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla} N_j\right) d\Omega \qquad\qquad i,j = 1,...,M \tag{3.79}$$

$$f_i = -\int_\Omega N_i\, Q\, d\Omega \; - \int_{\Gamma_N} N_i\, q_n\, d\Gamma - \int_\Omega \vec{\nabla} N_i \,|\, \left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}\Phi\right) d\Omega \\ i = 1,...,M \tag{3.80}$$

Este sistema de equações, uma vez resolvido em ordem a $c_i$, permite construir uma expressão aproximada de $H$, a solução da equação diferencial (3.67). Para o efeito, basta substituir os coeficientes $c_i$ na combinação linear de funções de aproximação previamente

escolhidas (3.70). E é precisamente neste ponto, a selecção das funções de aproximação, que reside a principal limitação à utilização deste método.

As funções $\Phi$ e $N_i$ devem respeitar as condições (3.44) e (3.45). Para além da dificuldade, ou até mesmo da impossibilidade, em encontrar funções adequadas aos domínios de geometria complexa, esta formulação apresenta ainda reduzida flexibilidade na adaptação às variações das condições fronteira. De facto, uma variação dos trechos de fronteira, com os dois tipos de condição, implica a redefinição das funções de aproximação. Por outro lado, uma alteração da condição fronteira de Dirichlet obriga a rescrever $\Phi$, conforme demostra a condição (3.44).

Estas limitações excluem a utilização do MRP nos problemas práticos, resumindo-se a sua utilidade aos problemas em domínios unidimensionais. Nestes, é mais fácil obter expressões para as funções de aproximação que respeitem as condições já referidas e, por outro lado, pode-se tirar partido da vantagem que resulta de a aproximação recorrer a uma única expressão para todo o domínio. O que torna este método verdadeiramente interessante é a sua utilização como suporte teórico para o Método dos Elementos Finitos, onde as dificuldades e limitações acima referidas são definitivamente ultrapassadas.

Por vezes, as equações diferenciais são *não lineares*, isto é, não cumprem a condição (3.19). A equação (3.67), escrita para aquíferos não confinados, é uma delas. Os elementos da matriz de transmissividade, **T**, dependem do valor de $H$, a solução da equação diferencial. A aplicação do MRP é em tudo semelhante ao exposto para as equações diferenciais lineares. A única diferença reside no facto de a matriz e o vector dos termos independentes do sistema de equações dependerem da solução

$$\mathbf{K}_{(H)} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{f}_{(H)} \tag{3.81}$$

Sendo as funções de aproximação previamente escolhidas, a solução aproximada, $H_{\text{aprox}}$, é unicamente função dos coeficientes $c_i$, pelo que é mais apropriado afirmar que o sistema de equações depende das respectivas incógnitas, $c_i$

$$\mathbf{K}_{\{c\}} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{f}_{\{c\}} \tag{3.82}$$

Este tipo de problema tem de ser resolvido por um processo iterativo. O mais simples consiste em arbitrar uma solução inicial para o vector das incógnitas, $\mathbf{c}_0$, que permite calcular os elementos da matriz, $\mathbf{K}_0$, e os termos independentes $\mathbf{f}_0$. Resolvido o sistema de equações, obtém-se o vector solução $\mathbf{c}_1$. Com estes novos coeficientes, $\mathbf{K}$ e $\mathbf{f}$ são reformulados e o sistema é novamente resolvido em ordem a $\mathbf{c}_2$. O processo continua até se atingir uma convergência aceitável, de acordo com um critério preestabelecido. Pode-se controlar a convergência dos valores de $\mathbf{c}$ ou os da aproximação $\mathbf{H}_{aprox}$ resultante. O processo iterativo exposto é resumido pela seguinte expressão

$$\mathbf{K}_{n-1} \cdot \mathbf{c}_n = \mathbf{f}_{n-1} \tag{3.83}$$

## 3.3 Método dos Elementos Finitos

### 3.3.1 Introdução

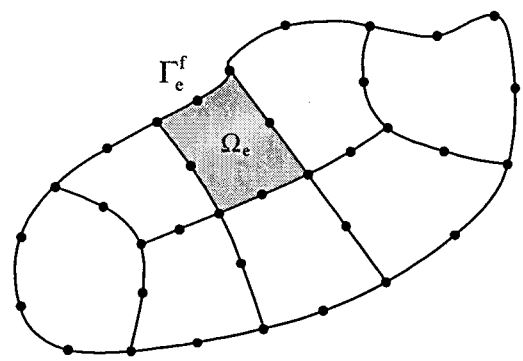



Figura 3.1 – Domínio discretizado por elementos isoparamétricos de 8 nós.

No sub-capítulo precedente foram descritas as dificuldades inerentes à aplicação do MRP na aproximação à solução de equações diferenciais, nomeadamente para os domínios de maior complexidade geométrica. O MEF ultrapassa essas dificuldades recorrendo ao artifício de dividir o domínio a estudar em sub-domínios, os *elementos finitos*, de geometria mais simples e para os quais é possível encontrar funções de aproximação que respeitem alguns dos critérios referidos no sub-capítulo anterior. Outra característica importante do MEF consiste

no facto de um conjunto discreto de pontos, no domínio e na fronteira, ser referenciado e numerado. São os *nós* da malha de elementos finitos.

O domínio de aplicação, $\Omega$, de uma ou mais equações diferenciais resulta do somatório de sub-domínios elementares finitos, $\Omega_e$, assim como a fronteira, $\Gamma$, é constituída pela associação das fronteiras dos elementos periféricos, $\Gamma_e^f$, coincidentes com $\Gamma$

$$\Omega = \sum_{e=1}^{N_E} \Omega_e \tag{3.84}$$

$$\Gamma = \sum_{e=1}^{N_E} \Gamma_e^f \tag{3.85}$$

sendo $N_E$ o número de elementos do domínio.

Numa primeira fase, o MEF procura determinar os valores da variável ou variáveis dependentes nos nós da malha. O conjunto dos valores de $u$ nos nós da malha, $\{u_i\}$, constitui o vector das incógnitas de um problema de elementos finitos. E a estas incógnitas está reservado o importante papel de constituírem os coeficientes da combinação linear de funções de aproximação

$$u \approx u_{\text{aprox}} = \sum_{i=1}^{N_N} u_i N_i \tag{3.86}$$

sendo $N_N$ o número de nós da malha. Numa segunda fase, após a determinação das incógnitas $u_i$ e recorrendo novamente às funções $N_i$, é possível definir o comportamento da variável dependente, $u$, ou das suas derivadas, em função das coordenadas em $\Omega$.

### 3.3.2 Funções de aproximação

Para além da divisão em sub-domínios, a grande diferença entre o MRP e o MEF reside na definição das funções de aproximação. Enquanto no MRP cada função $N_i$ é definida para todo o domínio, já no MEF cada uma das $N_i$ está associada a um nó e é válida para um sub-domínio de aplicação em redor desse nó.

A selecção das funções de aproximação para o MEF está subordinada a determinadas condições que podem ser resumidas do seguinte modo:

- as funções de aproximação devem ser completas, linearmente independentes, permitir uma aproximação exacta em parte da fronteira ($\Gamma_{\text{Dirichlet}}$) e satisfazer as exigências de continuidade das equações diferenciais ou de eventuais formulações fracas.

Ser completa significa que se uma função é de ordem $n$ deve conter todos os termos de ordem igual e inferior a $n$. Exemplificando com um polinómio de 3° grau

$$f(x) = a_1 + a_2 x + a_3 x^2 + a_4 x^3 \tag{3.87}$$

O termo de ordem zero, $a_1$, não deve ser omitido, pois é necessário para a aproximação a uma solução $u$ de valor constante. As funções $N_i$ têm de ser linearmente independentes uma vez que acrescentar a uma combinação linear de funções uma nova função que é combinação linear das já existentes significa, na prática, não trazer nada de novo.

As questões relativas à aproximação na fronteira e à continuidade das funções de aproximação serão tratadas nas secções seguintes com maior detalhe.

### 3.3.3 Funções de aproximação globais

Em benefício da simplicidade da exposição considere-se uma função $u(x)$ num domínio unidimensional. Divida-se o domínio $[0, L]$ em $N_E$ elementos "ligados" por $N_N$ nós $(N_N = N_E + 1)$. A aproximação pode ser realizada à custa de uma combinação linear de funções associadas aos nós. A cada nó $i$ corresponde uma função $N_i$ com as seguintes propriedades:

a) a função $N_i$ tem valor nulo em todo o domínio, excepto nos elementos ligados ao nó índice $i$; (3.88)

b) a função $N_i$ é igual à unidade no nó $i$ a que está associada e tem valor nulo nos restantes nós. (3.89)

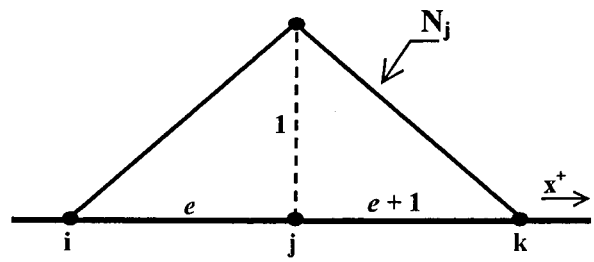



Figura 3.2- Função de aproximação global associada ao nó $j$

A função mais simples, nestas condições, varia linearmente com $x$ do modo indicado na Figura 3.2. Embora $N_j$ seja não nula só em dois elementos, designa-se por função de aproximação *global*, uma vez que abrange mais do que um elemento, em contraste com as funções de aproximação *local* cujo domínio de aplicação é o elemento.

A combinação linear de funções de aproximação escreve-se

$$u \approx u_{\text{aprox}} = \sum_{i=1}^{N_N} c_i N_i \tag{3.1}$$

Impondo que a aproximação seja exacta nos nós, isto é,

$$u_{\text{aprox}}(\vec{\mathbf{x}}_i) = u(\vec{\mathbf{x}}_i) \quad , \quad i = 1,\ldots, N_N \tag{3.90}$$

obtém-se o sistema de equações lineares

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{f} \tag{3.91}$$

sendo $K_{ij}$ o valor da função de aproximação $N_j$ calculada no nó $\vec{\mathbf{x}}_i$

$$K_{ij} = N_j(\vec{\mathbf{x}}_i) \qquad\qquad i, j = 1,\ldots, N_N \tag{3.92}$$

e o vector dos termos independentes de (3.91) definido por

$$f_i = u(\vec{\mathbf{x}}_i) \qquad\qquad i = 1,\ldots, N_N \tag{3.93}$$

Atendendo à propriedade (3.89) das funções $N_i$, a matriz **K** é uma matriz identidade e os coeficientes $c_i$ representam os valores da função $u(x)$ nos nós do domínio. A aproximação toma, então, o aspecto previsto

$$u \approx u_{\text{aprox}} = \sum_{i=1}^{N_N} u_i N_i \tag{3.86}$$

Se a aproximação é exacta em todos os nós (3.90), então também é exacta na fronteira do domínio definida pelos primeiro e último nós. Este tipo aproximação (3.86) permite uma aproximação exacta às condições fronteira de Dirichlet, desde que as funções $N_i$ possuam as propriedades (3.88) e (3.89). Esta afirmação é extensiva a domínios de ordem superior..

### 3.3.4 Funções de aproximação locais

Quando se pretende exprimir o valor de $u(x)$ no interior de um elemento, $\Omega_e$, recorrendo à expressão (3.86) constata-se que só as funções $N_i$ e $N_j$, referentes aos nós do elemento $e$, têm valor não nulo, por força da propriedade (3.88) (Figura 3.3)

$$u \approx u_{\text{aprox}} = \ldots + 0 + u_i N_i + u_j N_j + 0 + \ldots \tag{3.94}$$

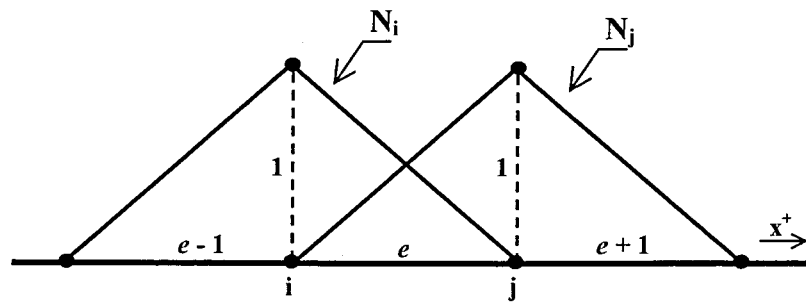



Figura 3.3 - Funções de aproximação globais do elemento $e$.

A expressão (3.94) pode ser rescrita

$$u \approx u_{\text{aprox}} = u_i N_i^e + u_j N_j^e \qquad \text{para} \quad x_i \le x \le x_j \tag{3.95}$$

onde $N_i^e$ representa a parte da função $N_i$ respeitante ao elemento $e$. Significado idêntico é atribuído a $N_j^e$ (Figura 3.4).

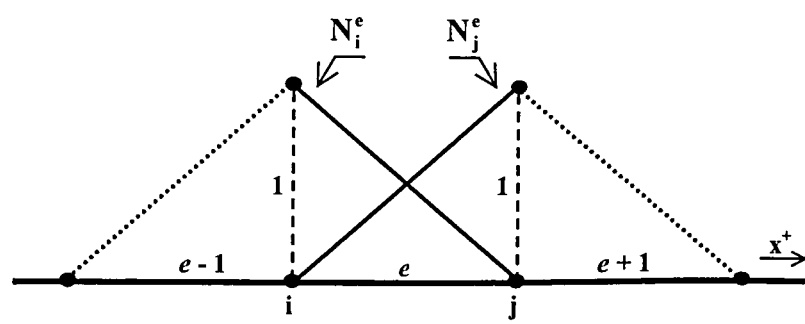



Figura 3.4 – Funções de aproximação locais do elemento $e$.

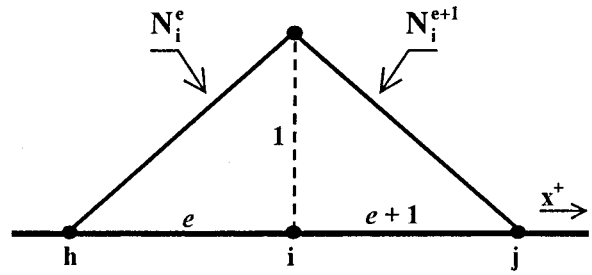



Figura 3.5 – Função de aproximação global do nó *i*.

Conclui-se, assim, que uma função de aproximação global, respeitante a um dado nó *i*, pode ser obtida pela composição das funções de aproximação locais dos elementos que contêm esse nó (Figura 3.5). Esta afirmação é igualmente generalizável a domínios de ordem superior (Figura 3.6).

É esta decomposição de funções de aproximação globais em locais, associadas a cada elemento, que permite tratar a integração das equações diferenciais ao nível do elemento.

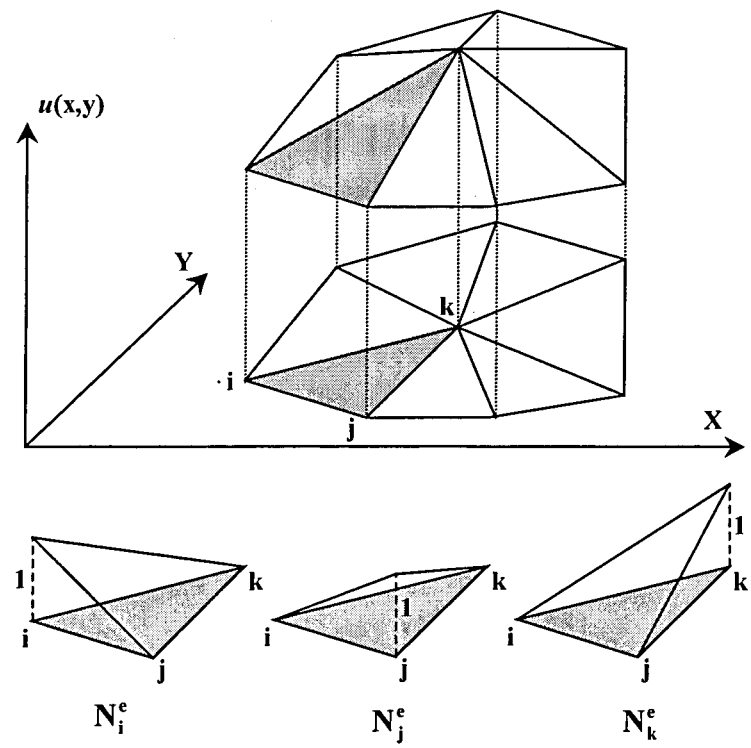



Figura 3.6 – Elemento triangular. Funções de aproximação locais.

### 3.3.5 Aproximação à solução de equações diferenciais. Formulação fraca

Na secção 3.2.4 foi deduzida a formulação fraca a partir dos integrais do resíduo pesado no domínio. Esta formulação baseia-se no pressuposto de que as funções de aproximação asseguravam uma aproximação exacta na fronteira de Dirichlet. A aproximação por elementos finitos, construída com base na expressão (3.86) e nas funções de aproximação com as propriedades (3.88) e (3.89), também é exacta nesta fronteira. Estão assim reunidas as condições para nova aplicação da formulação fraca, recomeçando pelos integrais do resíduo pesado

$$\int_\Omega W_i \, R_\Omega \, d\Omega \; = \; 0 \quad , \quad i = 1,\ldots, N_N \tag{3.96}$$

sendo $N_N$ o número de integrais, tantos quantos as incógnitas $u_i$. Repetindo os mesmos passos com base nas mesmas hipóteses, nomeadamente a identidade de operadores diferenciais $E(u) \equiv M(u)$, obtém-se

$$\int_\Omega C(W_i)\, D(u_{\text{aprox}})\, d\Omega + \int_\Omega W_i \; p \, d\Omega - \int_{\Gamma_N} W_i \; r \, d\Gamma \; = \; 0 \quad , \quad i = 1,\ldots, N_N \tag{3.97}$$

que, para $u_{\text{aprox}}$ definida por (3.86), dá origem ao sistema de equações

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{f} \tag{3.98}$$

definido por

$$K_{ij} = \int_\Omega C(W_i)\, D(N_j)\, d\Omega \qquad i, j = 1,\ldots, N_N \tag{3.99}$$

$$f_i = -\int_\Omega W_i \; p \, d\Omega \; + \int_{\Gamma_N} W_i \; r \, d\Gamma \qquad i = 1,\ldots, N_N \tag{3.100}$$

### 3.3.6 Critérios de continuidade

As funções de aproximação apresentadas, para domínios unidimensionais (Figura 3.5) e bidimensionais (Figura 3.6), revelam uma descontinuidade da primeira derivada nas fronteiras dos elementos. Como consequência, a função $u_{\text{aprox}}$ é afectada da mesma descontinuidade, pelo que importa determinar qual o grau de continuidade a exigir a uma aproximação à solução (3.86) de uma dada equação diferencial.

Para a resolução do sistema de equações gerado por (3.97) convém que os argumentos dos integrais desta expressão não assumam valores infinitos em pontos do domínio de integração. Para tal é necessário que os operadores diferenciais $C(u)$ e $D(u)$, quando aplicados às funções de peso e aproximação, tenham sempre valores finitos em todos os pontos do domínio de integração. Esta regra pode ser enunciada do seguinte modo:

- se os argumentos dos integrais em (3.97) contêm derivadas de ordem $s$, as derivadas de ordem $s$-1 das funções de aproximação e ou de peso devem ser contínuas, isto é, as funções $N_i$ e $W_i$ devem possuir um grau de continuidade $C^{s-1}$.

### 3.3.7 Método de Bubnov-Galerkin

Se a equação diferencial for de ordem par, como é o caso do escoamento em aquíferos, $C(u)$ e $D(u)$ apresentam a mesma ordem de diferenciação. Logo, as exigências de continuidade para as funções de peso e de aproximação são iguais, favorecendo a utilização do método de Bubnov-Galerkin

$$W_i = N_i \quad , \quad i = 1,...,N_N \tag{3.101}$$

que conduz ao sistema de equações (3.98) definido agora por

$$K_{ij} = \int_\Omega C(N_i)\, D(N_j)\, d\Omega \qquad\qquad i,j = 1,...,N_N \tag{3.102}$$

$$f_i = -\int_\Omega N_i\, p\, d\Omega + \int_{\Gamma_N} N_i\, r\, d\Gamma \qquad i = 1,\ldots,N_N \tag{3.103}$$

A matriz **K** do sistema de equações é simétrica, esparsa e em banda. A simetria resulta da aplicação do método de Bubnov-Galerkin (3.101), tal como se salientou anteriormente. As outras características são consequência da utilização de funções $N_i$ com as propriedades (3.88) e (3.89). De facto, como cada função $N_i$ tem valor nulo em todos os elementos que não contêm o nó $i$ a que está associada, o elemento $K_{ij}$ da matriz é nulo quando os índices $i$ e $j$ se referem a nós que não pertencem ao mesmo elemento. Estas particularidades das matrizes dos sistemas de equações gerados pelo MEF proporcionam uma redução do esforço de cálculo e do espaço de memória de computador relativamente aos sistemas de equações com matriz completa, como seria o caso da aplicação do MRP a todo o domínio.

Para o cálculo dos elementos de **K** e **f** é necessário efectuar as integrações presentes em (3.102) e (3.103). Atendendo a que um integral estendido a um determinado domínio é igual à soma dos integrais referentes aos sub-domínios em que é possível dividir o domínio total, as expressões (3.102) e (3.103) são desenvolvidas

$$K_{ij} = \int_\Omega C(N_i)\, D(N_j)\, d\Omega = \sum_{e=1}^{N_E} \int_{\Omega_e} C(N_i)\, D(N_j)\, d\Omega \qquad i,j = 1,\ldots,N_N \tag{3.104}$$

$$f_i = -\int_\Omega N_i\, p\, d\Omega + \int_{\Gamma_N} N_i\, r\, d\Gamma = -\sum_{e=1}^{N_E} \int_{\Omega_e} N_i\, p\, d\Omega + \sum_{e=1}^{N_E} \int_{\Gamma_e^{f,N}} N_i\, r\, d\Gamma \qquad i = 1,\ldots,N_N \tag{3.105}$$

pondo em evidência as contribuições de cada elemento. De um modo sucinto podem ser rescritas

$$K_i = \sum_{e=1}^{N_E} K_i^e \qquad i,j = 1,\ldots,N_N \tag{3.106}$$

$$f_i = \sum_{e=1}^{N_E} f_i^e \qquad i = 1,\ldots,N_N \qquad (3.107)$$

sendo

$$K_{ij}^e = \int_{\Omega_e} C(N_i^e)\, D(N_j^e)\, d\Omega \qquad i,j = 1,\ldots,N_N \qquad (3.108)$$

$$f_i^e = -\int_{\Omega_e} N_i^e\, p\, d\Omega + \int_{\Gamma_e^{f,N}} N_i^e\, r\, d\Gamma \qquad i = 1,\ldots,N_N \qquad (3.109)$$

as contribuições de cada um dos $N_E$ elementos finitos para a formação da matriz e do vector dos termos independentes do sistema de equações. As integrações são realizadas nos elementos finitos e as funções de aproximação $N_i^e$ utilizadas são as locais, isto é, os ramos das globais correspondentes a cada um dos elementos.

O sistema de equações (3.98) já contém as condições fronteira de Neumann, presentes no vector dos termos independentes. Mas antes de se proceder à sua resolução é necessário introduzir as condições fronteira de Dirichlet.

A imposição de determinados valores à função $u$ em alguns nós da malha de elementos finitos corresponde a definir previamente o valor de algumas das incógnitas do sistema de equações. Assim, as equações relativas a esses nós poderiam ser dispensadas e os valores dessas incógnitas substituídos nas restantes equações do sistema, originando uma redução do número de equações, logo uma diminuição do número de linhas e colunas da matriz **K** e de linhas do vector **f**. Contudo, este procedimento não é o mais adequado do ponto de vista computacional. Na prática, opta-se por modificar a matriz e o vector dos termos independentes do seguinte modo:

a) as componentes do vector dos termos independentes, correspondentes aos nós das incógnitas conhecidas, são substituídas pelos valores impostos para $u$;

b) a cada uma das restantes componentes (linhas) do vector dos termos independentes subtrai-se os produtos dos valores conhecidos de $u$ pelos correspondentes elementos de **K** da mesma linha;

c) substitui-se por zero os valores das linhas e colunas de **K** correspondentes aos nós em causa, excepto na diagonal principal onde se coloca o valor unidade.

Com este modo de proceder mantém-se a ordem e a simetria do sistema de equações e, mais importante, as condições fronteira de Dirichlet aparecem integradas na resolução do sistema de equações.

## 3.4 Integração em ordem ao tempo

### 3.4.1 O sistema de equações

Descritos os fundamentos do MEF, expondo de um modo particular problemas regidos por uma equação diferencial linear e de ordem par, muito fica por tratar. De facto, questões como as equações diferenciais de ordem ímpar[9], equações diferenciais com derivadas em ordem ao tempo, condições fronteira mistas do tipo Cauchy, escolha do tipo e número de nós por elemento, funções de aproximação e de peso, mudança de coordenadas, integração numérica e tratamento de resultados não foram abordados. O tratamento detalhado destas questões não cabe no âmbito deste trabalho, mas algumas delas serão analisadas, com a profundidade adequada, sempre que tal se justifique. Entre elas destaca-se a da integração em ordem ao tempo, que é aqui apresentada.

A título exemplificativo, e em auxílio da exposição, retome-se a equação diferencial,

$$-\bar{\nabla}\,|\left(\mathbf{T}\cdot\bar{\nabla}H\right)+\omega_d\frac{\partial H}{\partial t}+Q=0 \tag{3.66}$$

[9] A aplicação do MEF (versão de Bubnov-Galerkin) às equações diferenciais de ordem ímpar gera sistemas de equações não simétricos.

que rege o escoamento em aquíferos regionais não confinados, e as condições fronteira associadas[10]

$$H = H_{\text{definido}} \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}} \tag{3.68}$$

$$-\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H\right)\mid\vec{\mathbf{n}} = q_n \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Neumann}} \tag{3.69}$$

e aplique-se de novo a formulação de resíduos pesados, mas agora sem omitir a parcela da derivada em ordem ao tempo. Para o efeito anulem-se os $N_N$ integrais do resíduo pesado com as funções de aproximação (Bubnov-Galerkin)

$$\int_\Omega N_i\left[-\vec{\nabla}\mid\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H_{\text{aprox}}\right)+\omega_d\frac{\partial H_{\text{aprox}}}{\partial t}+Q\right]d\Omega = 0 \quad , \quad i=1,\ldots,N_N \tag{3.110}$$

$$-\int_\Omega N_i\vec{\nabla}\mid\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H_{\text{aprox}}\right)d\Omega+\int_\Omega N_i\,\omega_d\frac{\partial H_{\text{aprox}}}{\partial t}\,d\Omega+\int_\Omega N_i\,Q\,d\Omega = 0 \quad , \quad i=1,\ldots,N_N \tag{3.111}$$

Aplicando o primeiro teorema de Green à primeira parcela de (3.111), esta fica

$$\begin{aligned}&\int_\Omega\vec{\nabla}N_i\mid\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H_{\text{aprox}}\right)d\Omega+\int_\Omega N_i\,\omega_d\frac{\partial H_{\text{aprox}}}{\partial t}\,d\Omega+\int_\Omega N_i\,Q\,d\Omega-\\&-\int_\Gamma N_i\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H_{\text{aprox}}\right)\mid\vec{\mathbf{n}}\,d\Gamma = 0 \quad , \quad i=1,\ldots,N_N\end{aligned} \tag{3.112}$$

Substituindo em (3.112) a aproximação a $H$ pela combinação de funções de aproximação que caracteriza o MEF

$$H \approx H_{\text{aprox}} = \sum_{j=1}^{N_N} H_j N_j \tag{3.113}$$

---

[10] Para além destas condições fronteira, é necessário definir as condições iniciais, isto é, o valor de $H$ em todos os pontos do domínio no instante inicial ($t = 0$).

e procedendo às reorganizações e simplificações adequadas, nomeadamente a introdução das condições fronteira de Neumann (3.69), obtém-se

$$\sum_{j=1}^{N_N} H_j \int_\Omega \vec{\nabla} N_i \,|\, \left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla} N_j\right) d\Omega + \sum_{j=1}^{N_N} \frac{\partial H_j}{\partial t} \int_\Omega \omega_d N_i \, N_j \, d\Omega + \\ + \int_\Omega N_i \, Q \, d\Omega + \int_\Gamma N_i \, q_n \, d\Gamma = 0 \quad , \quad i = 1,\ldots, N_N \tag{3.114}$$

que pode ser rescrita sob a seguinte forma matricial

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{H} + \mathbf{B}\cdot\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = \mathbf{f} \tag{3.115}$$

definida por

$$A_{ij} = \int_\Omega \vec{\nabla} N_i \,|\, \left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla} N_j\right) d\Omega \qquad i,j = 1,\ldots, N_N \tag{3.116}$$

$$B_{ij} = \int_\Omega \omega_d N_i \, N_j \, d\Omega \qquad i,j = 1,\ldots, N_N \tag{3.117}$$

$$f_i = -\int_\Omega N_i \, Q \, d\Omega - \int_\Gamma N_i \, q_n \, d\Gamma = 0 \qquad i = 1,\ldots, N_N \tag{3.118}$$

A solução de uma equação diferencial deste tipo (3.66) é função das coordenadas espaciais e do tempo

$$H \equiv H(\vec{\mathbf{x}}, t) \tag{3.119}$$

e a sua resolução implica uma integração em duas fases. A primeira em ordem às coordenadas espaciais e a segunda em ordem à coordenada temporal. A primeira realiza-se pelo processo já descrito, e dá lugar à expressão (3.115), enquanto que a segunda consiste em integrar em ordem ao tempo esta equação matricial (3.115).

A integração em ordem ao tempo pode ser realizada por diferenças finitas ou pela metodologia dos elementos finitos. As expressões finais obtidas por estas duas vias alternativas são idênticas, mas a dos elementos finitos permite compreender melhor o significado do parâmetro que controla a integração. Acresce ainda a vantagem de se manter uma certa coerência teórica, uma vez que se recorre novamente aos princípios do MRP.

O tempo é assumido como um domínio unidimensional, de comprimento semi-infinito e dividido em intervalos de tempo (elementos finitos) por um conjunto discreto de instantes (nós) (Figura 3.7).

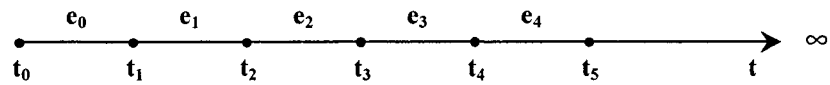



Figura 3.7 – Discretização do domínio temporal

O comportamento do vector dos valores da função a aproximar ao longo do tempo, neste caso $H$, é aproximado pela já habitual combinação de funções de aproximação

$$\mathbf{H} \approx \mathbf{H}_{\text{aprox}} = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{H}_{(k)} N_k \tag{3.120}$$

sendo $\mathbf{H}_{(k)}$ o vector dos valores de $H$ nos nós da malha de elementos finitos no instante $t_k$ e $N_k$ a função de aproximação associada a este instante. Estas funções de aproximação são definidas de modo idêntico às funções utilizadas para a aproximação espacial. Assim:

a) a função $N_k$ tem valor nulo em todo o domínio temporal, excepto nos intervalos de tempo (elementos) associados ao instante (nó) $t_k$; (3.121)

b) a função $N_k$ é igual à unidade no instante (nó) $t_k$ a que está associada e tem valor nulo nos restantes instantes (nós). (3.122)

A função mais simples nestas condições varia linearmente com o tempo

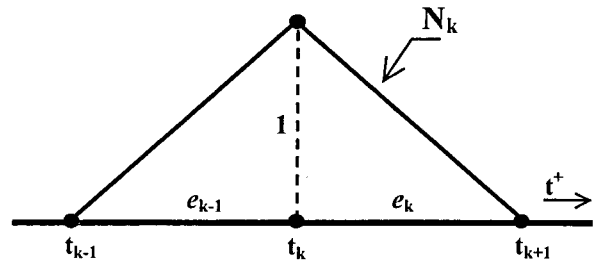



Figura 3.8 – Função de aproximação global associada ao instante (nó) $t_k$.

e, analogamente ao referido na secção 3.3.4 para as funções de aproximação espacial, o vector **H** no interior de um intervalo de tempo (elemento) $e_k$ resulta da combinação linear das funções associadas aos instantes que definem esse intervalo

$$\mathbf{H}^{(e_k)} \approx \mathbf{H}^{(e_k)}_{\text{aprox}} = \mathbf{H}_{(k)} N_k^{(e_k)} + \mathbf{H}_{(k+1)} N_{k+1}^{(e_k)} \qquad \text{para} \quad t_k \le t \le t_{k+1} \tag{3.123}$$

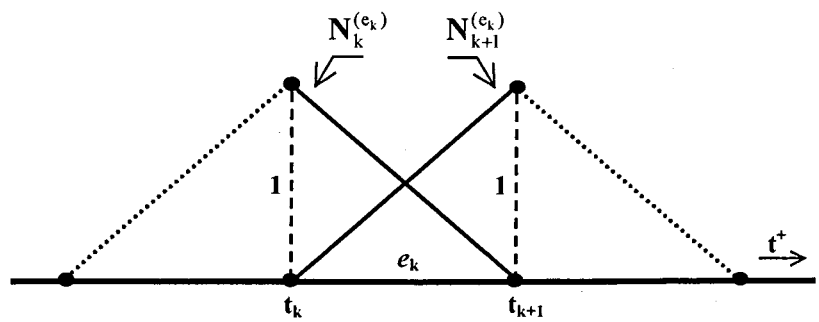



Figura 3.9 – Funções de aproximação locais do intervalo de tempo (elemento) $e_k$.

Para ajudar a definir as funções de aproximação locais do intervalo de tempo $e_k$ considere-se a coordenada temporal local, $T$, definida por

$$T = \frac{t - t_k}{\Delta t} \qquad \text{para} \quad t_k \le t \le t_{k+1} \tag{3.124}$$

sendo $\Delta t = t_{k+1} - t_k$. Atendendo à definição (3.124) esta coordenada está compreendida entre zero e a unidade $(T \in [0,1])$. Com o auxílio de $T$ as funções de aproximação locais escrevem-se

$$N_k^{(e_k)} = 1 - T \tag{3.125}$$

$$N_{k+1}^{(e_k)} = T \tag{3.126}$$

e as respectivas derivadas em ordem ao tempo

$$\frac{dN_k^{(e_k)}}{dt} = \frac{dN_k^{(e_k)}}{dT}\frac{dT}{dt} = -\frac{1}{\Delta t} \tag{3.127}$$

$$\frac{dN_{k+1}^{(e_k)}}{dt} = \frac{dN_{k+1}^{(e_k)}}{dT}\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\Delta t} \tag{3.128}$$

A aplicação do MRP ao sistema de equações diferenciais (3.115) permite escrever os integrais que anulam o resíduo pesado

$$\int_0^{\infty} W_k \left[ \mathbf{A} \cdot \mathbf{H} + \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} - \mathbf{f} \right] dt = \mathbf{0} \qquad k = 0,\ldots,\infty \tag{3.129}$$

Adoptando funções de peso $W_k$ de acordo com o seguinte critério

$$W_k = 0 \qquad \text{para} \quad t < t_k \quad \text{e} \quad t > t_{k+1} \tag{3.130}$$

isto é, cada função $W_k$ só é não nula no intervalo de tempo $e_k$, os integrais da expressão (3.129) podem ser rescritos

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} W_k \left[ \mathbf{A} \cdot \mathbf{H} + \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} - \mathbf{f} \right] dt = \mathbf{0} \qquad k = 0,\ldots,\infty \tag{3.131}$$

Assim, a cada função de peso corresponde um integral estendido a um intervalo de tempo, o que permite utilizar a aproximação de **H** expressa por (3.123). As derivadas de **H** em ordem ao tempo são calculadas com recurso a (3.127) e (3.128)

$$\frac{\partial \mathbf{H}^{(e_k)}}{\partial t} \approx \frac{\partial \mathbf{H}^{(e_k)}_{\text{aprox}}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left[\mathbf{H}_{(k)} N_k^{(e_k)} + \mathbf{H}_{(k+1)} N_{k+1}^{(e_k)}\right] = -\frac{1}{\Delta t}\mathbf{H}_{(k)} + \frac{1}{\Delta t}\mathbf{H}_{(k+1)} \qquad (3.132)$$

$$\text{para} \quad t_k \le t \le t_{k+1}$$

Por outro lado, derivando (3.124) em ordem a $t$ obtém-se a relação

$$dt = \Delta t \; dT \qquad (3.133)$$

Tendo presentes (3.123), (3.132) e (3.133) os integrais dos resíduos pesados tomam o aspecto

$$\int_0^1 W_k \left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{B}\cdot\left(\mathbf{H}_{(k+1)} - \mathbf{H}_{(k)}\right) + \mathbf{A}\cdot\left(\mathbf{H}_{(k)}(1-T) + \mathbf{H}_{(k+1)}T\right) - \mathbf{f}(t_k + T\,\Delta t)\right]\Delta t \; dT = \mathbf{0} \qquad (3.134)$$

$$k = 0,\ldots,\infty$$

Admitindo que as matrizes **A** e **B** são constantes durante o intervalo de tempo, a expressão (3.134) pode ser reorganizada

$$\left[\mathbf{B}\frac{1}{\Delta t}\int_0^1 W_k \; dT + \mathbf{A}\int_0^1 T\, W_k \; dT\right]\cdot \mathbf{H}_{(k+1)} =$$

$$-\left[-\mathbf{B}\frac{1}{\Delta t}\int_0^1 W_k \; dT + \mathbf{A}\int_0^1 (1-T) W_k \; dT\right]\cdot \mathbf{H}_{(k)} \qquad (3.135)$$

$$+\int_0^1 W_k \, \mathbf{f}(t_k + T\,\Delta t)\, dT \qquad k = 0,\ldots,\infty$$

Esta expressão permite determinar o estado do problema no fim de cada intervalo de tempo a partir das condições iniciais, ou seja, permite calcular $\mathbf{H}_{(k+1)}$ com base em $\mathrm{H}_{(k)}$, as condições finais do intervalo de tempo imediatamente anterior. Assim, começando com as condições iniciais do problema, $\mathbf{H}_{(0)}$, é possível ir calculando os sucessivos vectores dos valores de $H$ nos nós da malha ao longo do tempo.

Uma apresentação mais simples pode ser dada a (3.135)

$$\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{B}+\Phi_k\,\mathbf{A}\right]\cdot\mathbf{H}_{(k+1)}= \\ =\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{B}-\left(1-\Phi_k\right)\mathbf{A}\right]\cdot\mathbf{H}_{(k)}+\mathbf{f}_{(k)}^{(k+1)} \qquad k=0,\ldots,\infty \tag{3.136}$$

desde que se definam o parâmetro $\Phi_k$ e o vector $\mathbf{f}_{(k)}^{(k+1)}$ de acordo com as seguintes expressões:

$$\Phi_k=\frac{\int_0^1 W_k\,T\,dT}{\int_0^1 W_k\,dT} \tag{3.137}$$

$$\mathbf{f}_{(k)}^{(k+1)}=\frac{\int_0^1 W_k\,\mathbf{f}(t_k+T\,\Delta t)\,dT}{\int_0^1 W_k\,dT} \tag{3.138}$$

Caso $\mathbf{f}_{(k)}^{(k+1)}$ não varie bruscamente com o tempo, o seu comportamento em cada intervalo de tempo pode ser aproximado pela expressão habitual

$$\mathbf{f}(t_k+T\,\Delta t)\approx\mathbf{f}_{(k)}N_k^{(e_k)}(T)+\mathbf{f}_{(k+1)}N_{k+1}^{(e_k)}(T) \qquad \text{para} \quad 0\le T\le 1 \tag{3.139}$$

Substituindo esta aproximação em (3.138) obtém-se uma expressão mais simples para $\mathbf{f}_{(k)}^{(k+1)}$

$$\mathbf{f}_{(k)}^{(k+1)}=\left(1-\Phi_k\right)\mathbf{f}_{(k)}+\Phi_k\,\mathbf{f}_{(k+1)} \tag{3.140}$$

Com estas simplificações, o sistema de equações que realiza a integração em ordem ao tempo toma o aspecto final

$$\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{B}+\Phi_k\,\mathbf{A}\right]\cdot\mathbf{H}_{(k+1)}=$$

$$=\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{B}-(1-\Phi_k)\mathbf{A}\right]\cdot\mathbf{H}_{(k)}+ \tag{3.141}$$

$$+(1-\Phi_k)\mathbf{f}_{(k)}+\Phi_k\,\mathbf{f}_{(k+1)} \qquad k=0,\ldots,\infty$$

Relembrando que a dedução das equações (3.135) e seguintes assentou na suposição da invariância das matrizes **A** e **B** ao longo de cada intervalo de tempo, importa referir que esta hipótese nem sempre é verdadeira. De facto, é o que acontece nos escoamentos em aquíferos regionais não confinados, regidos por uma equação diferencial não linear (3.66). Contudo, esta realidade não invalida a formulação apresentada, antes exigindo adequados procedimentos iterativos[11] em cada incremento da integração em ordem ao tempo.

### 3.4.2 Métodos de integração em ordem ao tempo

A integração em ordem ao tempo, a realizar com o auxílio do sistema de equações (3.141), depende do parâmetro $\Phi_k$ a calcular com a expressão (3.137) e cujo valor resulta da função de peso $W_k$ seleccionada. A cada escolha de $W_k$ corresponde um método de integração:

a) *Método da colocação pontual*[12]. Escolhendo a função de peso

$$W_k=\delta(T-\theta) \qquad \text{para} \quad k=0,\ldots,\infty \tag{3.142}$$

impõe-se a anulação dos resíduos no instante $\theta\in[0,1]$ de cada intervalo de tempo

[11] São procedimentos idênticos aos referidos no final da secção 3.2.5, uma vez que a expressão (3.141) representa um sistema de equações cuja matriz e vector dos termos independentes dependem, no caso das equações diferenciais não lineares, da solução.

[12] "The collocation point method", na literatura de língua inglesa.

$$\Phi_k = \frac{\int_0^1 \delta(T-\theta)\, T\, dT}{\int_0^1 \delta(T-\theta)\, dT} = \frac{\theta}{1} = \theta \tag{3.143}$$

b) *Método de Galerkin.* Este método caracteriza-se por utilizar como funções de peso as funções de aproximação no intervalo de tempo

$$N_k^{(e_k)} = 1 - T \tag{3.125}$$

$$N_{k+1}^{(e_k)} = T \tag{3.126}$$

que se distinguem pelo facto de a primeira atribuir mais peso aos erros nos instantes iniciais do intervalo enquanto que a segunda valoriza mais os erros nos instantes finais. É à utilização desta última função que corresponde a designação de Método de Galerkin para a integração em ordem ao tempo por elementos finitos

$$\Phi_k = \frac{\int_0^1 T \cdot T\, dT}{\int_0^1 T\, dT} = \frac{2}{3} \tag{3.144}$$

o que é o mesmo que atribuir a $\theta$ o valor de $2/3$.

c) *Método de Crank-Nicolson.* Se se optar por valorizar de igual modo o erro ao longo do intervalo de tempo, a função de peso deve tomar um valor constante qualquer

$$W_k = \eta \qquad \text{para} \quad k = 0,...,\infty \tag{3.145}$$

ficando o parâmetro $\Phi_k$

$$\Phi_k = \frac{\int_0^1 \eta \cdot T\, dT}{\int_0^1 \eta\, dT} = \frac{\eta/2}{\eta} = \frac{1}{2} \tag{3.146}$$

o que equivale a atribuir a $\theta$ o valor de $1/2$. A atribuição deste valor ao parâmetro que controla a integração em ordem ao tempo por diferenças finitas é conhecida por Método de Crank-Nicolson.

Assim, ao sistema de equações (3.141) correspondem diferentes métodos de integração em ordem ao tempo consoante o valor atribuído a $\Phi_k$ (ou a $\theta$).

### 3.4.3 O parâmetro $\theta$ e o incremento $\Delta t$ da integração em ordem ao tempo

A integração em ordem ao tempo realiza-se em sucessivos passos ou incrementos $\Delta t = t_{k+1} - t_k$. Com a finalidade de acelerar a integração e reduzir o esforço de cálculo interessa aumentar a duração dos intervalos de tempo, isto é, aumentar o passo ou incremento da integração. Contudo, de tal aumento não deverá resultar grave prejuízo do *rigor*, *estabilidade* e *convergência* da integração. É, pois, necessário estabelecer um limite para o valor de $\Delta t$, questão esta que se articula com a escolha do parâmetro $\Phi_k$ (ou $\theta$) que controla a integração.

A solução do sistema de equações diferenciais

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{H} + \mathbf{B} \cdot \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathrm{t}} = \mathbf{f} \tag{3.115}$$

pode ser expressa por uma combinação linear de vectores próprios[13]

$$\mathbf{H}_{(t)} = \sum_{i=1}^{N_N} \alpha_{(i)}\, y_i(t) \tag{3.147}$$

na qual os $N_N$ coeficientes $y_i(t)$ são função do tempo. Os $N_N$ vectores próprios $\alpha_{(i)}$ correspondem a igual número de valores próprios do problema

[13] Zienkiewics e Morgan (1983).

$$\beta \mathbf{B} \cdot \alpha + \mathbf{A} \cdot \alpha = \mathbf{0} \tag{3.148}$$

determinados pela exigência de que

$$|\beta \mathbf{B} + \mathbf{A}| = 0 \tag{3.149}$$

Às $N_N$ soluções de (3.149) $(\beta_1, \beta_2, ..., \beta_{N_N})$ correspondem outros tantos vectores próprios $(\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_{N_N})$ linearmente independentes. Considere-se o sistema de equações que realiza a integração em ordem ao tempo, mas agora com o vector **f** nulo para qualquer instante

$$\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{B} + \theta \mathbf{A}\right] \cdot \mathbf{H}_{(k+1)} = \left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{B} - (1-\theta)\mathbf{A}\right] \cdot \mathbf{H}_{(k)} \qquad k = 0, ..., \infty \tag{3.150}$$

Multiplicando ambos os membros desta igualdade pela inversa da matriz **B** e atendendo a que

$$\mathbf{H}_{(k)} = \sum_{i=1}^{N_N} \alpha_{(i)}\, y_i(t_k) \tag{3.151}$$

$$\mathbf{H}_{(k+1)} = \sum_{i=1}^{N_N} \alpha_{(i)}\, y_i(t_{k+1}) \tag{3.152}$$

obtém-se

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{N_N}\left[\frac{1}{\Delta t}\alpha_{(i)} + \theta \mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \alpha_{(i)}\right] y_i(t_{k+1}) = \\ &= \sum_{i=1}^{N_N}\left[\frac{1}{\Delta t}\alpha_{(i)} - (1-\theta)\mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \alpha_{(i)}\right] y_i(t_k) \end{aligned} \tag{3.153}$$

Por outro lado, multiplicando ambos os membros de (3.148) pela matriz inversa de **B** obtém-se

$$\mathbf{B}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \alpha = -\beta \alpha \tag{3.154}$$

que uma vez introduzida na igualdade (3.153) permite simplificá-la sucessivamente

$$\sum_{i=1}^{N_N} \left[ \frac{1}{\Delta t} \alpha_{(i)} + \theta \beta_i \alpha_{(i)} \right] y_i(t_{k+1}) = \sum_{i=1}^{N_N} \left[ \frac{1}{\Delta t} \alpha_{(i)} - (1-\theta) \beta_i \alpha_{(i)} \right] y_i(t_k) \tag{3.155}$$

$$\sum_{i=1}^{N_N} \alpha_{(i)} \left\{ \left[ \frac{1}{\Delta t} - \theta \beta_i \right] y_i(t_{k+1}) - \left[ \frac{1}{\Delta t} + (1-\theta) \beta_i \right] y_i(t_k) \right\} = \mathbf{0} \tag{3.156}$$

Os $N_N$ vectores próprios $\alpha_{(i)}$ são linearmente independentes. Para que a combinação linear destes vectores seja igual a vector nulo é necessário que os coeficientes da combinação sejam todos nulos, isto é, que

$$\left[ \frac{1}{\Delta t} - \theta \beta_i \right] y_i(t_{k+1}) - \left[ \frac{1}{\Delta t} + (1-\theta) \beta_i \right] y_i(t_k) = 0 \qquad \text{para} \quad i = 1,..., N_N \tag{3.157}$$

o que é equivalente a escrever

$$y_i(t_{k+1}) = \frac{\frac{1}{\Delta t} + (1-\theta) \beta_i}{\frac{1}{\Delta t} - \theta \beta_i} y_i(t_k) \qquad \text{para} \quad i = 1,..., N_N \tag{3.158}$$

Regra geral, neste tipo de problemas (3.115) com **f** nulo, os valores próprios são todos negativos[14] e a solução exacta decresce com o tempo. Para que a aproximação numérica (3.147) tenha o mesmo comportamento é necessário que os módulos dos coeficientes $y_i(t)$ também diminuam com o tempo

$$\left| y_i(t_{k+1}) \right| < \left| y_i(t_k) \right| \qquad \text{para} \quad i = 1,..., N_N \tag{3.159}$$

Recorrendo à expressão (3.158), esta inequação (3.159) pode ser rescrita

[14] Zienkiewics e Morgan (1983).

$$-1 < \frac{\frac{1}{\Delta t}+(1-\theta)\beta_i}{\frac{1}{\Delta t}-\theta\beta_i} < 1 \qquad \text{para} \quad i=1,...,N_N \tag{3.160}$$

O cumprimento desta condição só assegura a estabilidade da integração numérica em ordem ao tempo, permitindo oscilações numéricas em torno da solução exacta. Estas oscilações podem ser suprimidas desde que se garanta que cada um dos coeficientes $y_i(t)$ apresenta sempre o mesmo sinal ao longo dos sucessivos instantes $t_k$. Esta nova condição pode ser escrita com o auxílio de (3.158)

$$\frac{y_i(t_{k+1})}{y_i(t_k)} = \frac{\frac{1}{\Delta t}+(1-\theta)\beta_i}{\frac{1}{\Delta t}-\theta\beta_i} > 0 \qquad \text{para} \quad i=1,...,N_N \tag{3.161}$$

Em resumo, uma integração numérica em ordem ao tempo estável e convergente exige que

$$0 < \frac{\frac{1}{\Delta t}+(1-\theta)\beta_i}{\frac{1}{\Delta t}-\theta\beta_i} < 1 \qquad \text{para} \quad i=1,...,N_N \tag{3.162}$$

Explorando estas inequações é possível extrair algumas conclusões a respeito da influência de $\theta$ no comportamento da integração numérica e dos cuidados a ter na definição do incremento $\Delta t$:

a) Considere-se a parte direita da inequação (3.160) com uma pequena transformação

$$\frac{\frac{1}{\Delta t}+(1-\theta)\beta_i}{\frac{1}{\Delta t}-\theta\beta_i} = \frac{\frac{1}{\Delta t}-(1-\theta)|\beta_i|}{\frac{1}{\Delta t}+\theta|\beta_i|} < 1 \qquad \text{para} \quad i=1,...,N_N \tag{3.163}$$

suportada pela já referida hipótese de os valores próprios deste tipo de problemas serem negativos

$$\beta_i = -|\beta_i| \qquad \text{para} \quad i = 1,...,N_N \tag{3.164}$$

Esta condição (3.163) é sempre cumprida, uma vez que o numerador é menor que o denominador para valores de $\theta \in [0,1]$.

b) Considere-se agora a parte esquerda de (3.160) com a mesma transformação baseada em (3.164)

$$\frac{\frac{1}{\Delta t} + (1-\theta)\beta_i}{\frac{1}{\Delta t} - \theta\beta_i} = \frac{\frac{1}{\Delta t} - (1-\theta)|\beta_i|}{\frac{1}{\Delta t} + \theta|\beta_i|} > -1 \qquad \text{para} \quad i = 1,...,N_N \tag{3.165}$$

Simplificando esta inequação obtém-se

$$(1-2\theta)|\beta_i|\Delta t < 2 \qquad \text{para} \quad i = 1,...,N_N \tag{3.166}$$

Esta condição (3.166) é respeitada para qualquer valor de $\Delta t$, desde que

$$1 - 2\theta \leq 0 \tag{3.167}$$

que é o mesmo que adoptar

$$\theta \geq \frac{1}{2} \tag{3.168}$$

Conclui-se assim que a estabilidade da integração numérica em ordem ao tempo fica automaticamente assegurada pela selecção de $\theta$ de acordo com a restrição (3.168), independentemente da grandeza do incremento $\Delta t$ escolhido. Quando se

optar por $\theta < 1/2$ o valor do incremento $\Delta t$ deve ser definido tendo em conta a inequação (3.166) resolvida em ordem a $\Delta t$

$$\Delta t < \frac{2}{(1-2\theta)|\beta_i|} \qquad \text{para} \quad i = 1,...,N_N \tag{3.169}$$

c) Finalmente, analise-se o critério de convergência, isto é, de supressão das oscilações numéricas em torno da solução exacta (3.161)

$$\frac{\frac{1}{\Delta t} + (1-\theta)\beta_i}{\frac{1}{\Delta t} - \theta\beta_i} = \frac{\frac{1}{\Delta t} - (1-\theta)|\beta_i|}{\frac{1}{\Delta t} + \theta|\beta_i|} > 0 \qquad \text{para} \quad i = 1,...,N_N \tag{3.170}$$

Para valores de $\theta \in [0,1]$ o denominador de (3.170) é positivo. Logo, o numerador deverá ser também positivo

$$\frac{1}{\Delta t} - (1-\theta)|\beta_i| > 0 \qquad \text{para} \quad i = 1,...,N_N \tag{3.171}$$

donde resulta

$$(1-\theta)|\beta_i|\Delta t < 1 \qquad \text{para} \quad i = 1,...,N_N \tag{3.172}$$

Esta inequação é automaticamente respeitada desde que

$$1-\theta \leq 0 \tag{3.173}$$

o que é equivalente a tomar $\theta = 1$, atendendo aos limites do domínio de $\theta$. Com esta opção, as oscilações numéricas são eliminadas para qualquer incremento $\Delta t$. A utilização de um valor de $\theta$ inferior à unidade implica a escolha do incremento $\Delta t$ respeitando

$$\Delta t < \frac{1}{(1-\theta)|\beta_i|} \quad \text{para} \quad i = 1,\ldots,N_N \tag{3.174}$$

Do exposto resulta a conveniência de se escolher para o parâmetro $\theta$ um valor entre 1/2 e 1. E dentro deste intervalo de valores afigura-se como mais adequada a escolha de $\theta = 2/3$, correspondente ao Método de Galerkin para a integração numérica em ordem ao tempo. De facto, se o Método de Crank-Nicolson ($\theta = 1/2$) é o mais correcto do ponto de vista matemático, na prática revela-se bem menos rigoroso que o de Galerkin quando se utilizam incrementos $\Delta t$ cada vez maiores devido ao aparecimento de oscilações numéricas. O valor de $\theta$ no outro extremo do intervalo[15] ($\theta = 1$) garante a ausência de oscilações, mas acaba por introduzir erros não desprezáveis da integração numérica. Assim, $\theta = 2/3$ aparenta ser um bom compromisso entre o rigor ($\theta = 1/2$) e a ausência de oscilações ($\theta = 1$).

### 3.4.4 Problemas com equações diferenciais não lineares

Em alguns fenómenos, as matrizes **A** e **B** (3.115) poderão não ser constantes, uma vez que dependem da solução e esta varia com o tempo. Assim, e abstraindo do significado concreto das variáveis e da equação diferencial que está a ser utilizada em auxílio desta exposição[16], admita-se que **A** e **B** variam com a solução da equação diferencial, $H$

$$\mathbf{A} \equiv \mathbf{A}_{(H)} \equiv \mathbf{A}_{(t)} \tag{3.175}$$

$$\mathbf{B} \equiv \mathbf{B}_{(H)} \equiv \mathbf{B}_{(t)} \tag{3.176}$$

Retome-se a exposição da técnica dos resíduos pesados na integração em ordem ao tempo, imediatamente antes da simplificação permitida pela invariância de **A** e **B** então admitida

---

[15] Na literatura de língua inglesa é conhecido por "fully implicit method".

[16] De facto, nos escoamentos em aquíferos regionais não confinados só a matriz **A** é função da carga hidráulica, pelo que só esta matriz varia ao longo do tempo.

$$\int_0^1 W_k \left[ \frac{1}{\Delta t} \mathbf{B} \cdot \left( \mathbf{H}_{(k+1)} - \mathbf{H}_{(k)} \right) + \mathbf{A} \cdot \left( \mathbf{H}_{(k)} (1-T) + \mathbf{H}_{(k+1)} T \right) - \mathbf{f}(t_k + T\,\Delta t) \right] \Delta t \; dT = \mathbf{0} \qquad k = 0,\ldots,\infty \tag{3.134}$$

Utilizando a função de peso do método de colocação pontual (3.142) em (3.134), obtém-se

$$\begin{aligned} &\left[ \frac{1}{\Delta t} \mathbf{B}_{(k+\theta)} + \theta\, \mathbf{A}_{(k+\theta)} \right] \cdot \mathbf{H}_{(k+1)} = \\ &= \left[ \frac{1}{\Delta t} \mathbf{B}_{(k+\theta)} - (1-\theta) \mathbf{A}_{(k+\theta)} \right] \cdot \mathbf{H}_{(k)} + \\ &\quad + (1-\theta) \mathbf{f}_{(k)} + \theta\, \mathbf{f}_{(k+1)} \qquad k = 0,\ldots,\infty \end{aligned} \tag{3.177}$$

o sistema de equações que materializa a integração em ordem ao tempo tendo em conta (3.175) e (3.176). Trata-se de uma expressão semelhante à (3.141). A diferença reside no facto das matrizes **A** e **B** terem que ser calculadas para o instante $t = t_k + \theta\,\Delta t$ no interior de cada intervalo de tempo. Sendo **A** e **B** função de *H*, é preciso conhecer $\mathbf{H}_{(k+\theta)}$

$$\mathbf{H}_{(k+\theta)} = (1-\theta)\,\mathbf{H}_{(k)} + \theta\,\mathbf{H}_{(k+1)} \tag{3.178}$$

Como $\mathbf{H}_{(k+1)}$ ainda não foi determinado tem de se recorrer a um procedimento iterativo para realizar cada incremento da integração em ordem ao tempo. Na primeira iteração calculam-se **A** e **B** para os valores de $\mathbf{H}_{(k)}$. Nas iterações seguintes as matrizes são recalculadas para $\mathbf{H}_{(k+\theta)}$ recorrendo a (3.178). As iterações são interrompidas quando a variação de cada uma das componentes de $\mathbf{H}_{(k+1)}$, entre duas iterações consecutivas, for inferior a um erro $\varepsilon$ previamente estabelecido

$$\left| H^{j}_{i,(k+1)} - H^{j-1}_{i,(k+1)} \right| < \varepsilon \qquad \text{para} \quad i = 1,\ldots,N_N \tag{3.179}$$

iniciando-se, então, os procedimentos iterativos do incremento seguinte.

Alguma bibliografia sobre este assunto[17] refere a vantagem de calcular as matrizes **A** e **B** num instante anterior a $\theta \Delta t$, procedimento designado por "under relaxation". Os programas de cálculo desenvolvidos no âmbito deste trabalho permitem seleccionar um instante diferente, $\gamma \Delta t$, para o cálculo das matrizes do sistema de equações. Na generalidade dos problemas resolvidos foram adoptados os valores $\gamma = 0.5$ e $\theta = 0.67$ para a realização da integração numérica em ordem à coordenada temporal. Com a selecção destes valores pretende-se, por um lado, calcular as matrizes no instante teoricamente mais correcto e, por outro lado, assegurar um bom comportamento da simulação no que respeita à estabilidade e convergência.

[17] Por exemplo, Neuman (1975).

*CAPÍTULO 4*

# A GEOESTATÍSTICA E A HIDROGEOLOGIA ESTOCÁSTICA


4.1 Introdução 4.1

4.2 A Geoestatística 4.4
4.2.1 Variáveis regionalizadas 4.5
4.2.2 Variáveis aleatórias 4.7

4.3 Funções aleatórias 4.10
4.3.1 Inferência estatística das funções aleatórias 4.15
4.3.2 Funções aleatórias estacionárias 4.16
4.3.3 Funções aleatórias multivariadas normais 4.19
4.3.4 Transformação de variáveis 4.20
4.3.5 Funções aleatórias intrínsecas ou de incrementos estacionários 4.25
4.3.6 Funções aleatórias não intrínsecas 4.28
4.3.7 Algumas considerações sobre inferência estatística, estacionaridade e ergodicidade 4.28

4.4 Análise estrutural das funções aleatórias 4.32
4.4.1 O semivariograma e a covariância 4.32
4.4.2 O semivariograma experimental 4.35
4.4.3 Semivariogramas teóricos 4.36

4.5 Propriedades do semivariograma 4.44
4.5.1 Escalas de variabilidade e sobreposição de semivariogramas 4.44
4.5.2 A anisotropia e o semivariograma 4.45
4.5.3 O semivariograma na proximidade da origem 4.46
4.5.4 O semivariograma a grandes distâncias 4.49
4.5.5 Algumas considerações sobre a estimação do semivariograma 4.50

4.6 Distribuições condicionadas 4.55
4.6.1 Vectores aleatórios 4.55
4.6.2 Vectores aleatórios multivariados normais 4.56
4.6.3 Funções aleatórias multivariadas normais condicionadas 4.59
4.6.4 Estimação de momentos condicionados de funções aleatórias estacionárias multivariadas normais com média conhecida 4.64
4.6.5 Estimação de momentos condicionados de funções aleatórias intrínsecas multivariadas normais 4.70
4.6.6 Distribuições condicionadas de funções aleatórias multivariadas normais correlacionadas 4.74

4.7 Estimação de distribuições espaciais por métodos geoestatísticos 4.83
4.7.1 Krigagem simples de funções aleatórias estacionárias com média conhecida 4.84
4.7.2 Krigagem ordinária de funções aleatórias estacionárias com média desconhecida 4.89
4.7.3 Krigagem ordinária de funções aleatórias intrínsecas 4.93
4.7.4 Algumas considerações sobre a krigagem 4.99
4.7.5 Cokrigagem de funções aleatórias com média conhecida 4.101
4.7.6 Cokrigagem de uma função aleatória estacionária, com média conhecida ou não 4.108
4.7.7 Algumas considerações sobre a cokrigagem 4.112


## 4.1 Introdução

Conforme já se referiu no primeiro capítulo, nos problemas a larga escala o conhecimento "pontual" das propriedades hidrogeológicas implica uma incerteza quanto à distribuição e variabilidade espacial dessas propriedades. Um dos problemas que se coloca à Hidrologia Subterrânea reside no tratamento e caracterização dessa variabilidade e na sua

incorporação nos modelos de simulação, a par da avaliação da incerteza associada aos resultados obtidos.

Uma forma de ter em conta a variabilidade do meio natural seria a de construir modelos determinísticos tão refinados que incorporassem um levantamento exaustivo e completo da distribuição espacial de cada uma das propriedades. Em problemas reais, esta abordagem implicaria campanhas de sondagens e ensaios de campo irrealizáveis, para além da excessiva dimensão do correspondente modelo numérico, certamente incomportável para os meios computacionais disponíveis.

Uma forma alternativa de tratar a heterogeneidade das propriedades hidrogeológicas consiste em considerar estas propriedades como *funções aleatórias*. Ao admitir a natureza probabilística dos parâmetros hidrogeológicos presentes nas equações diferenciais, estas convertem-se em *equações diferenciais estocásticas* onde as variáveis dependentes (ou de estado) são *processos estocásticos*[1] a caracterizar probabilisticamente. Em rigor, a solução de uma equação diferencial estocástica deveria ser a função de distribuição de probabilidade da respectiva variável dependente (ou de estado). Na prática, procura-se quantificar os dois primeiros momentos estatísticos, o valor esperado e a covariância, já se considerando satisfatória a determinação, para cada ponto do domínio e para cada instante, do valor esperado (*média*) e de uma medida da incerteza (*variância*).

Considere-se a equação diferencial que rege o escoamento em aquíferos regionais não confinados

$$-\vec{\nabla}\cdot\left[(H-Z_{\text{fundo}})\mathbf{K}\cdot\vec{\nabla}H\right]+\omega_d\frac{\partial H}{\partial t}+Q+\sum_{i=1}^{N_w}Q_{w,i}\delta(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i)=0 \qquad (4.1)$$

ou a que rege o escoamento em aquíferos regionais confinados

[1] Segundo alguns autores, um *processo estocástico* é um fenómeno que pode ser descrito por uma ou mais funções aleatórias, dependentes ou independentes. Contudo, a definição mais comum é a de um fenómeno caracterizado por uma função aleatória dependente não só das coordenadas espaciais mas também da coordenada temporal.

$$-\vec{\nabla}\cdot\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H\right)+S\frac{\partial H}{\partial t}+Q+\sum_{i=1}^{N_w}Q_{w,i}\delta(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i)=0 \tag{4.2}$$

e as respectivas condição inicial

$$H(\vec{\mathbf{x}},t)=H_0(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{para} \quad t=0\,,\ \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega \tag{4.3}$$

e condições fronteira associadas

$$H(\vec{\mathbf{x}},t)=H_{\text{definido}}(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Dirichlet}}\ ,\ \forall t \tag{4.4}$$

$$-\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H\right)\cdot\vec{\mathbf{n}}=q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \qquad \text{para } \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Neumann}}\ ,\ \forall t \tag{4.5}$$

$$H+a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H\right)\cdot\vec{\mathbf{n}}+b(\vec{\mathbf{x}},t)=0 \qquad \text{para } \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Cauchy}}\ ,\ \forall t \tag{4.6}$$

com $q_n(\vec{\mathbf{x}},t)$, $a(\vec{\mathbf{x}},t)$ e $b(\vec{\mathbf{x}},t)$ previamente definidos.

Nestes modelos matemáticos coexistem as variáveis independentes $(x,y,t)$, a variável dependente ou *variável de estado* ($H$), as *variáveis de controlo* ($Q$, $Q_{w,i}$, $q_n$ ou $a$ e $b$) que excitam o modelo e os *parâmetros do sistema* ($T$ ou $K$, $S$ ou $\omega_d$). As equações diferenciais (4.1) e (4.2) assumem-se como estocásticas nos seguintes casos:

- quando a condição inicial ou as condições fronteira são definidas como processos estocásticos;
- quando as parcelas extracção/recarga ($Q$ e $Q_{w,i}$) da equação diferencial são processos estocásticos;
- quando os parâmetros do sistema ($T$ ou $K$, $S$ ou $\omega_d$) são funções aleatórias.

É esta última hipótese a especialmente visada por este trabalho. A variabilidade espacial das propriedades hidrogeológicas (parâmetros do sistema) é integrada nos modelos de simulação com o auxílio de uma metodologia adequada, a *Geoestatística*. A esta metodologia, que pode ser definida como "a aplicação do formalismo das funções aleatórias

ao reconhecimento e estimação de fenómenos naturais"[2], e à apresentação dos seus princípios teóricos básicos são dedicados os sub-capítulos seguintes.

## 4.2 A Geoestatística

As diversas variáveis que contribuem para a caracterização física dos aquíferos são, naturalmente, função das coordenadas espaciais, mas apresentam um grau de variação tão elevado e errático que impossibilita a respectiva representação por funções contínuas dessas coordenadas. Contudo, essa variabilidade não é completamente aleatória. De facto, se uma determinada propriedade for medida em dois locais diferentes, os valores obtidos são tão mais aproximados quanto menor for a distância entre esses locais. Isto significa que existe algum tipo de correlação espacial da propriedade, ou seja, o seu comportamento espacial pode ser caracterizado por uma componente estruturada à qual se sobrepõe uma outra errática ou aleatória. A componente estruturada é a que permite admitir que se num determinado local se mede um valor acima da média, o mais provável é que outras medições na proximidade desse local também apresentem valores elevados. A componente aleatória é a que impede que se preveja com rigor os valores dessas outras medições e é também a responsável pela incerteza associada à estimação do comportamento espacial da propriedade em causa. A uma propriedade ou variável com estas características é frequentemente dada a designação de *variável regionalizada.*

A Geoestatística permite obter não só uma estimação do comportamento espacial de uma determinada variável ou propriedade, e uma medida da incerteza associada, mas também realizações plausíveis da variável em causa. E uma vez que a Geoestatística produz uma medida da incerteza, é também um instrumento para a selecção de locais de medição adicionais que minimizem a incerteza da estimação.

Muitos fenómenos naturais apresentam as características referidas, o que explica que o formalismo das funções aleatórias seja utilizado na maioria das Ciências da Terra. A

---

[2] Matheron (1962).

aplicação dos conceitos da Geoestatística à Hidrologia Subterrânea e à Hidrogeologia remonta à década de setenta, sendo de destacar os trabalhos e publicações de Delhomme e Marsily[3].

As propriedades hidrogeológicas que caracterizam os aquíferos, e que nas equações diferenciais são representadas pelos *parâmetros do sistema*, revelam o comportamento espacial acima descrito, pelo que dificilmente podem ser representadas por funções determinísticas. Por outro lado, a incerteza resultante da variabilidade natural destas propriedades é agravada pela que é induzida pelos erros de medição produzidos pelas técnicas utilizadas[4]. Um modo de ter em conta a aleatoridade da variação espacial das propriedades hidrogeológicas, e a incerteza associada ao insuficiente conhecimento da distribuição espacial das mesmas, consiste em procurar estabelecer uma interpretação probabilística do comportamento dessas propriedades. Ou seja, cada propriedade é entendida como uma variável aleatória que pode adoptar um conjunto infinito de valores de acordo com uma determinada distribuição de probabilidade. E uma vez que a referida propriedade é função das coordenadas espaciais, a sua interpretação probabilística é a de uma função aleatória e a sua distribuição espacial é entendida como uma das infinitas realizações da função aleatória[5].

Tendo sido introduzidas, de uma forma sucinta, as ideias básicas subjacentes à Geoestatística e à sua utilização no tratamento e interpretação das propriedades físicas mais relevantes para a caracterização dos aquíferos, as secções e sub-capítulos seguintes são dedicados a uma apresentação e explicitação mais detalhada destas matérias.

### 4.2.1 Variáveis regionalizadas

Uma variável distribuída no espaço e que apresenta uma estrutura espacial de correlação diz-se que está regionalizada. Assim, se $z(\vec{\mathbf{x}})$ é o valor de uma determinada propriedade ou variável no ponto de coordenadas $\vec{\mathbf{x}}$, então $z(\vec{\mathbf{x}})$ é uma variável regionalizada.

---

[3] Nas referências bibliográficas encontram-se alguns dos trabalhos e publicações mais relevantes destes autores (de acordo com a bibliografia consultada).

[4] De facto, a utilização de medições inexactas para estimar valores das propriedades noutros pontos ou zonas dos aquíferos é geradora de uma incerteza adicional.

[5] Como se verá adiante, o conceito de função aleatória implica, do ponto de vista teórico, a admissão de uma infinidade de possíveis realizações.

Apresentada desta forma, $z(\bar{\mathbf{x}})$ é uma função descritiva sem qualquer conotação probabilística. Contudo, e tal como já foi referido, é frequente encontrar variáveis regionalizadas que apresentam, no seu comportamento espacial, uma componente estruturada e uma componente aleatória. Por outro lado, as flutuações erráticas resultantes da componente aleatória impedem a representação de $z(\bar{\mathbf{x}})$ por uma função contínua, pelo que se impõe uma outra forma de representação que contenha essas duas componentes e que seja simultaneamente consistente, do ponto de vista teórico, e simples, do ponto de vista da aplicação prática.

Segundo Samper e Carrera (1990), Matheron (1971) propôs um método, baseado na teoria das funções aleatórias, que introduz uma interpretação probabilística da variável regionalizada e requer a admissão de algumas hipóteses, como a da *estacionaridade* e a da *ergodicidade*. Mas ainda segundo Samper e Carrera (1990), a adopção duma perspectiva probabilística coloca duas questões fundamentais:

- faz sentido considerar um fenómeno natural, que é único, como uma observação ou uma realização de uma função aleatória?
- será possível a inferência estatística[6] a partir de uma só observação da função aleatória?

Uma resposta positiva a esta última questão é suportada pela introdução da hipótese da ergodicidade[7], à qual se voltará adiante. Relativamente à primeira questão importa assinalar que, embora o meio natural seja único, repetidas medições de uma determinada propriedade, num mesmo ponto, podem produzir valores diferentes devido a erros de medição. Assim, a dificuldade em medir o meio natural acrescentada à sua variabilidade fazem com que uma realidade determinística seja observada e interpretada como incerta.

---

[6] Determinação dos parâmetros estatísticos que definem a lei de probabilidade do fenómeno.
[7] Hipótese já referida em 2.2, a propósito da definição macroscópica das diversas variáveis.

### 4.2.2 Variáveis aleatórias

Antes de tratar de uma forma mais detalhada as funções aleatórias convém fazer uma breve revisão de algumas noções básicas da estatística. Assim, uma *variável aleatória* é uma variável que pode tomar diversos valores, correspondentes a outras tantas experiências, de acordo com alguma distribuição de probabilidade. A variável aleatória é habitualmente representada por uma letra maiúscula, por exemplo, $Z$, enquanto que ao valor que toma para cada experiência é atribuída a correspondente minúscula, $z$ ou $z_i$[8]. Assim, a $Z$ correspondem um conjunto de valores ou resultados de experiências $(z_i\ , i=1,...,N)$ com uma determinada probabilidade de ocorrência $(p_i\ , i=1,...,N)$.

Quando o número de possíveis ocorrências é finito, a variável aleatória é *discreta.* As probabilidades das $N$ ocorrências devem verificar as seguintes condições:

$$p_i \geq 0 \qquad \text{para} \quad i=1,...,N \tag{4.7}$$

e

$$\sum_{i=1}^{N} p_i = 1 \tag{4.8}$$

Se o número das possíveis ocorrências for infinito, a variável aleatória é *contínua.* O seu comportamento probabilístico é caracterizado pela *Função Distribuição de Probabilidade* (*FDP*) que define a probabilidade de a variável aleatória $Z$ tomar um valor igual ou inferior a $z$

$$F_Z(z) = \text{Prob}\{Z \leq z\} \quad , \quad F_Z(z) \in [0,1] \tag{4.9}$$

e que corresponde, no caso das variáveis aleatórias discretas, ao integral do histograma

$$F_Z(z_i) = \sum_{j=1}^{i} p_j \quad , \quad \text{para} \quad z_j \leq z_i \tag{4.10}$$

---

[8] Procurou-se seguir este critério ao longo do presente texto. Contudo, em alguns casos houve necessidade de o relaxar, utilizando-se o mesmo símbolo, maiúsculo ou minúsculo, para designar tanto a variável ou função aleatória como o seu valor numa determinada experiência ou realização.

A *FDP* caracteriza completamente a variável aleatória. A probabilidade de $Z$ tomar um valor no intervalo $]a,b]$ é avaliada pela diferença

$$\text{Prob}\{Z \in ]a,b]\} = F_Z(b) - F_Z(a) \tag{4.11}$$

Analogamente, a probabilidade de $Z$ exceder qualquer "valor de corte" $c$ é calculada por

$$\text{Prob}\{Z > c\} = 1 - F_Z(c) \tag{4.12}$$

O *p-quantilho* da distribuição de probabilidade de $Z$ é o valor $z_p$ definido por

$$F_Z(z_p) = p \quad , \quad \forall p \in [0,1] \tag{4.13}$$

ou seja, o valor de $z$ que tem uma probabilidade $p$ de não ser excedido. Os quantilhos de maior interesse são o $z_{0.5}$, correspondente à mediana, e os $z_{0.25}$ e $z_{0.75}$, correspondentes, respectivamente, aos quartilhos inferior e superior.

Para uma variável aleatória contínua, a *função densidade de probabilidade* (*fdp*) é a derivada da *FDP* em ordem a $z$

$$f_Z(z) = \frac{dF_Z(z)}{dz} \tag{4.14}$$

e pode ser interpretada, quando multiplicada por $dz$, como a probabilidade de $Z$ tomar um valor no intervalo elementar $]z - dz, z]$

$$f_Z(z)\, dz = F_Z(z) - F_Z(z - dz) \tag{4.15}$$

A relação entre as *FDP* e *fdp* pode ser expressa de outro modo integrando (4.14)

$$F_Z(z) = \int_{-\infty}^{z} f_Z(\tau)\, d\tau \tag{4.16}$$

Esta expressão permite concluir que $F_Z(z)$ não é mais do que o integral, entre $-\infty$ e $z$, da função de densidade de probabilidade $f_Z(z)$, razão porque $F_Z(z)$ também é conhecida por função de distribuição acumulada. Por esta razão e porque $f_Z(z)$ é sempre positiva, $F_Z(z)$ é uma função monótona crescente. Tendo presente a relação entre a *FDP* e a *fdp*, expressa alternativamente por (4.14) ou (4.16), conclui-se que $f_Z(z)$ também caracteriza completamente a variável aleatória, sendo até mais interessante do ponto de vista da representação gráfica atendendo às semelhanças conceptual e visual com o histograma.

Frequentemente, as variáveis aleatórias são caracterizadas pelos seus momentos estatísticos. O *valor esperado* (ou *média*) é o momento de primeira ordem

$$\mu_Z \equiv \langle z \rangle = E[Z] = \int_{-\infty}^{+\infty} \tau\, f_Z(\tau)\, d\tau \tag{4.17}$$

e mede a tendência central da variável. A *variância* é o momento de segunda ordem relativamente ao valor esperado

$$\sigma_Z^2 = E\left[(Z-\mu_Z)^2\right] = \int_{-\infty}^{+\infty} (\tau-\mu_Z)^2 f_Z(\tau)\, d\tau \tag{4.18}$$

e mede a dispersão dos valores de $Z$ em torno do valor esperado. Para as variáveis aleatórias discretas estes dois primeiros momentos são expressos por

$$\mu_Z \equiv \langle z \rangle = E[Z] = \sum_{i=1}^{N} p_i z_i \tag{4.19}$$

$$\sigma_Z^2 = E\left[(Z-\mu_Z)^2\right] = \sum_{i=1}^{N} p_i (z_i-\mu_Z)^2 \tag{4.20}$$

## 4.3 Funções aleatórias

Na teoria das probabilidades, um conjunto de $N$ variáveis aleatórias dependentes $Z_1$, $Z_2$, ..., $Z_N$ definem um *vector aleatório* $\mathbf{Z}=(Z_1,Z_2,...,Z_N)$ com $N$ componentes. Analogamente, quando o valor duma função das coordenadas espaciais $Z(\vec{\mathbf{x}})$ é uma variável aleatória, ao variar $\vec{\mathbf{x}}$ no espaço de $n$ dimensões, $\Re^n$, $Z(\vec{\mathbf{x}})$ define uma família de variáveis aleatórias, isto é, a cada ponto do espaço, $\vec{\mathbf{x}}_i$, corresponde uma variável aleatória, $Z(\vec{\mathbf{x}}_i)$ ou $Z_i$. Assim, uma *função aleatória* (*f.a.*) pode ser entendida como um vector aleatório com um número infinito de componentes

$$Z(\vec{\mathbf{x}})=\{Z(\vec{\mathbf{x}}_1),Z(\vec{\mathbf{x}}_2),...,Z(\vec{\mathbf{x}}_N)\}\equiv\{Z_1,Z_2,...,Z_N\} \quad \text{com} \quad N\to\infty \tag{4.21}$$

correspondentes aos valores de $Z$ nos pontos $\vec{\mathbf{x}}$ do espaço $\Re^n$. E a respectiva caracterização estatística é realizada pela *FDP* conjunta

$$F_{Z_1Z_2...Z_N}(z_1,z_2,...,z_N)=\text{Prob}\{Z(\vec{\mathbf{x}}_1)\le z_1,Z(\vec{\mathbf{x}}_2)\le z_2,...,Z(\vec{\mathbf{x}}_N)\le z_N\} \tag{4.22}$$

que pode ser definida como a probabilidade de $Z(\vec{\mathbf{x}}_1)\le z_1$, em simultâneo com $Z(\vec{\mathbf{x}}_2)\le z_2$, ... e $Z(\vec{\mathbf{x}}_N)\le z_N$. A função densidade de probabilidade conjunta é expressa por

$$f_{Z_1Z_2...Z_N}(z_1,z_2,...,z_N)=\frac{\partial^N F_{Z_1Z_2...Z_N}(z_1,z_2,...,z_N)}{\partial z_1\partial z_2...\partial z_N} \tag{4.23}$$

Analogamente às variáveis aleatórias também se pode escrever a relação integral entre as *FDP* e *fdp* conjuntas

$$F_{Z_1Z_2...Z_N}(z_1,z_2,...,z_N)=\int_{-\infty}^{z_1}\int_{-\infty}^{z_2}...\int_{-\infty}^{z_N} f_{Z_1Z_2...Z_N}(\tau_1,\tau_2,...,\tau_N)\,d\tau_1 d\tau_2...d\tau_N \tag{4.24}$$

A *FDP* marginal conjunta, $F_{Z_1Z_2...Z_{M-1}Z_{M+1}...Z_N}(z_1,z_2,...,z_{M-1},z_{M+1},...,z_N)$ é o limite para que tende a *FDP* conjunta quando $z_M\to\infty$, isto é, quando $z_M$ pode tomar um valor qualquer

no intervalo $]-\infty,+\infty[$, logo não fornecendo qualquer informação sobre $z_M$. A correspondente *fdp* marginal conjunta é definida por

$$f_{Z_1Z_2...Z_{M-1}Z_{M+1}...Z_N}(z_1,z_2,...,z_{M-1},z_{M+1},...,z_N)=\int_{-\infty}^{+\infty} f_{Z_1Z_2...Z_N}(\tau_1,\tau_2,...,\tau_N)\,d\tau_M \qquad (4.25)$$

No caso particular de o vector aleatório ter só duas componentes, $f_{Z_1Z_2}(z_1,z_2)$ pode ser representada no espaço cartesiano $(z_1,z_2,f)$ por uma superfície[9] no semi-espaço $f>0$. A *fdp* marginal conjunta, $f_{Z_1}(z_1)$, por exemplo, é a área compreendida entre $f_{Z_1Z_2}(z_1,z_2)$ e $f=0$ no plano $z_1=$ constante.

Retomando o caso geral, o vector aleatório com $N$ componentes, o momento de primeira ordem (o *valor esperado* ou *média*) de uma das componentes, por exemplo $z_M$, é determinado com o auxílio da *fdp* conjunta $f_{Z_1\ Z_N}(z_1,...,z\ )$ ou da *fdp* marginal conjunta $f_{Z_M}(z_M)$

$$\langle z_M\rangle = E[Z_M]=\int_{-\infty}^{+\infty}...\int_{-\infty}^{+\infty}\tau_M\ f_{Z_1...Z_N}(\tau_1,...,\tau_N)\,d\tau_1...d\tau_N=\int_{-\infty}^{+\infty}\tau_M\ f_{Z_M}(\tau_M)\,d\tau_M \qquad (4.26)$$

A *flutuação* ou perturbação[10] dessa componente é definida pela diferença

$$z'_M = z_M - \langle z_M\rangle \qquad (4.27)$$

O momento de segunda ordem, a *covariância* entre duas componentes do vector aleatório, é obtido pela seguinte expressão

$$C_{Z_iZ_j}\equiv C(Z_i,Z_j)=E[Z'_iZ'_j]=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}(\tau_i-\langle z_i\rangle)(\tau_j-\langle z_j\rangle)\,f_{Z_iZ_j}(\tau_i,\tau_j)\,d\tau_i\,d\tau_j \qquad (4.28)$$

---

[9] Superfície em forma de sino, se o vector aleatório for multivariado normal.

[10] A designação *perturbação* é usada adiante, quando da aplicação do método das perturbações à resolução das equações diferenciais estocásticas.

sendo $f_{Z_iZ_j}$ a *fdp* marginal conjunta das componentes $Z_i$ e $Z_j$ do vector aleatório. O *coeficiente de correlação* entre $Z_i$ e $Z_j$ é dado por

$$\rho_{Z_iZ_j} = \frac{C_{Z_iZ_j}}{\sqrt{\sigma_{Z_i}^2 \, \sigma_{Z_j}^2}} \tag{4.29}$$

sendo $\sigma_{Z_i}^2$ a *variância* de $Z_i$, o valor esperado do quadrado da flutuação de $Z_i$

$$\sigma_{Z_i}^2 \equiv \langle (z_i')^2 \rangle = E\left[(Z_i')^2\right] = \int_{-\infty}^{+\infty} (\tau - \langle z_i \rangle)^2 \, f_{Z_i}(\tau) \, d\tau \tag{4.30}$$

No caso limite de as componentes do vector aleatório serem independentes, a *fdp* conjunta é definida pelo produto das *fdp* das componentes

$$f_{Z_1Z_2...Z_N}(z_1, z_2, ..., z_N) = f_{Z_1}(z_1) \, f_{Z_2}(z_2) ... f_{Z_N}(z_N) \tag{4.31}$$

sendo nula a covariância e o coeficiente de correlação entre quaisquer duas componentes do vector aleatório atendendo a que

$$C_{Z_iZ_j} = E\left[Z_i' Z_j'\right] = \int_{-\infty}^{+\infty} (\tau_i - \langle z_i \rangle) \, f_{Z_i}(\tau_i) \, d\tau_i \int_{-\infty}^{+\infty} (\tau_j - \langle z_j \rangle) \, f_{Z_j}(\tau_j) \, d\tau_j = 0 \tag{4.32}$$

uma vez que o valor esperado da flutuação de qualquer componente, $\langle z_i' \rangle$, é nulo

$$\langle z_i' \rangle = E\left[Z_i'\right] = \int_{-\infty}^{+\infty} (\tau_i - \langle z_i \rangle) \, f_{Z_i}(\tau_i) \, d\tau_i = 0 \quad , \quad \forall i = 1, ..., N \tag{4.33}$$

Retomando o conceito de *f.a.* que a entende como um vector aleatório em que cada uma das componentes corresponde ao valor da função em cada ponto do espaço, os momentos estatísticos acima definidos apresentam-se como função das coordenadas espaciais. Assim, tem-se o valor esperado ou média da *f.a.* no ponto $\vec{\mathbf{x}}$

$$m(\vec{\mathbf{x}}) \equiv \langle z(\vec{\mathbf{x}}) \rangle = E\left[Z(\vec{\mathbf{x}})\right] = \int_{-\infty}^{+\infty} \tau \, f_{Z(\vec{\mathbf{x}})}(\tau) \, d\tau \tag{4.34}$$

a covariância entre os pontos $\vec{\mathbf{x}}_i$ e $\vec{\mathbf{x}}_j$

$$C(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j) \equiv C(Z(\vec{\mathbf{x}}_i),Z(\vec{\mathbf{x}}_j)) \equiv \langle z'(\vec{\mathbf{x}}_i)\, z'(\vec{\mathbf{x}}_j)\rangle = E\left[Z'(\vec{\mathbf{x}}_i)\, Z'(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] = \\ = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} (\tau_i - \langle z(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle)(\tau_j - \langle z(\vec{\mathbf{x}}_j)\rangle)\, f_{Z(\vec{\mathbf{x}}_i)Z(\vec{\mathbf{x}}_j)}(\tau_i,\tau_j)\, d\tau_i\, d\tau_j \tag{4.35}$$

e a variância no ponto $\vec{\mathbf{x}}$

$$\sigma^2(\vec{\mathbf{x}}) \equiv \sigma^2_{Z(\vec{\mathbf{x}})} \equiv \langle (z'(\vec{\mathbf{x}}))^2\rangle = E\left[(Z'(\vec{\mathbf{x}}))^2\right] = \int_{-\infty}^{+\infty} (\tau - \langle z(\vec{\mathbf{x}})\rangle)^2\, f_{Z(\vec{\mathbf{x}})}(\tau)\, d\tau \tag{4.36}$$

que não é mais do que a covariância entre dois pontos "coincidentes", conforme se deduz da observação das expressões (4.35) e (4.36). No estudo e caracterização estatística das *f.a.*'s também é utilizado outro momento de segunda ordem, o *semivariograma*[11] $\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)$, que é definido como a metade do valor esperado do quadrado da diferença entre os valores da *f.a.* nos pontos $\vec{\mathbf{x}}_i$ e $\vec{\mathbf{x}}_j$

$$\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j) = \frac{1}{2}\langle (z(\vec{\mathbf{x}}_i) - z(\vec{\mathbf{x}}_j))^2\rangle = \frac{1}{2} E\left[(Z(\vec{\mathbf{x}}_i) - Z(\vec{\mathbf{x}}_j))^2\right] = \\ = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} (\tau_i - \tau_j)^2\, f_{Z(\vec{\mathbf{x}}_i)Z(\vec{\mathbf{x}}_j)}(\tau_i,\tau_j)\, d\tau_i\, d\tau_j \tag{4.37}$$

A covariância e o semivariograma traduzem, segundo perspectivas opostas, a correlação entre os valores da *f.a.* em qualquer par de pontos $(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)$ do domínio. A covariância é uma medida da semelhança, enquanto que o semivariograma mede a variabilidade. De facto, quando aumenta a dispersão entre os valores da *f.a.* em dois pontos, o semivariograma cresce e a covariância decresce. Esta conclusão resulta directamente da

[11] Ou simplesmente *variograma*, a designação mais frequente. A designação semivariograma foi adoptada por influência da publicação mais consultada durante a redacção deste capítulo, Samper e Carrera (1990).

observação da relação entre $\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j)$ e $C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j)$. Esta relação é obtida desenvolvendo as definições do semivariograma, da covariância e da variância

$$2\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) = E\left[(Z_i - Z_j)^2\right] = E\left[Z_i^2\right] - 2E\left[Z_i Z_j\right] + E\left[Z_j^2\right] \tag{4.38}$$

$$\begin{aligned} C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) &= E\left[(Z_i - \langle z_i \rangle)(Z_j - \langle z_j \rangle)\right] = \\ &= E\left[Z_i Z_j\right] - E\left[Z_i\right]\langle z_j \rangle - E\left[Z_j\right]\langle z_i \rangle + \langle z_i \rangle \langle z_j \rangle \\ &= E\left[Z_i Z_j\right] - \langle z_i \rangle \langle z_j \rangle \end{aligned} \tag{4.39}$$

$$\begin{aligned} \sigma^2(\vec{\mathbf{x}}_i) &= E\left[(Z_i - \langle z_i \rangle)^2\right] = E\left[Z_i^2\right] - 2E\left[Z_i\right]\langle z_i \rangle + \langle z_i \rangle^2 \\ &= E\left[Z_i^2\right] - \langle z_i \rangle^2 \end{aligned} \tag{4.40}$$

Combinando estas três expressões obtém-se a pretendida relação

$$\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) = \frac{\sigma^2(\vec{\mathbf{x}}_i) + \sigma^2(\vec{\mathbf{x}}_j)}{2} + \frac{(\langle z(\vec{\mathbf{x}}_i) \rangle - \langle z(\vec{\mathbf{x}}_j) \rangle)^2}{2} - C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) \tag{4.41}$$

que pode ser rescrita com uma notação mais condensada

$$\gamma_{ij} = \frac{\sigma_i^2 + \sigma_j^2}{2} + \frac{(\langle z_i \rangle - \langle z_j \rangle)^2}{2} - C_{ij} \tag{4.42}$$

Daqui se conclui que, não se modificando os valores esperados e as variâncias nos dois pontos, uma diminuição da correlação entre os valores da *f.a.* implica o aumento do valor do semivariograma, isto é, uma maior dispersão relativamente a uma eventual relação linear entre os valores da *f.a.* nesses pontos[12].

[12] Journel (1989).

### 4.3.1 Inferência estatística das funções aleatórias

A caracterização estatística de uma função aleatória $Z(\vec{\mathbf{x}})$ requer o conhecimento da respectiva *FDP* conjunta ou, em alternativa, da *fdp* conjunta. Se no caso do vector aleatório com um número finito de componentes já seria tarefa complexa a determinação de uma qualquer destas leis de probabilidade, a infinidade de componentes da *f.a.* torna-a irrealizável. Acresce, ainda, o facto de existir uma só realização, o meio natural. E, como se compreende facilmente, se para uma única variável aleatória é impossível estimar a respectiva lei de probabilidade a partir de uma única realização ou experiência, o mesmo deverá acontecer para variáveis aleatórias com um número finito ou infinito de componentes, em particular, quando dessa única realização apenas se conhecem dados num conjunto discreto de pontos do domínio. Como realizar, então, a inferência estatística de uma *f.a.*? A resposta está na introdução de algumas hipóteses adicionais, cuja validade se deve procurar avaliar face aos dados disponíveis.

A primeira hipótese simplificadora consiste em supor que uma *f.a.* está probabilisticamente definida se for conhecida a *FDP* (4.22) para um número $N$ finito e arbitrário de pontos do domínio[13]. Complementarmente admite-se que, no contexto da Geoestatística linear, é suficiente o conhecimento dos momentos de primeira e segunda ordem[14].

Outra hipótese, de relevante significado, é a que admite que a *f.a.* é *estacionária*, isto é, que a respectiva *FDP* não varia com uma qualquer translação $\vec{\mathbf{r}}$ aplicada a todos os $N$ pontos do domínio para os quais está definida a *FDP*

$$F_{Z_1 Z_2 \ldots Z_N}(z_1, z_2, \ldots, z_N) = \text{Prob}\left\{Z(\vec{\mathbf{x}}_1) \le z_1, Z(\vec{\mathbf{x}}_2) \le z_2, \ldots, Z(\vec{\mathbf{x}}_N) \le z_N\right\} =$$

$$= \text{Prob}\left\{Z(\vec{\mathbf{x}}_1 + \vec{\mathbf{r}}) \le z_1, Z(\vec{\mathbf{x}}_2 + \vec{\mathbf{r}}) \le z_2, \ldots, Z(\vec{\mathbf{x}}_N + \vec{\mathbf{r}}) \le z_N\right\} \qquad (4.43)$$

$$\forall \vec{\mathbf{r}} \in \Re^n$$

---

[13] Dagan (1989).
[14] Samper e Carrera (1990).

As consequências produzidas por esta última hipótese são analisadas com detalhe na secção seguinte.

### 4.3.2 Funções aleatórias estacionárias

O facto de a *FDP* de uma *f.a.* estacionária não ser alterada por uma qualquer translação dos pontos considerados significa que só depende da posição relativa entre estes. E a mesma conclusão se retira relativamente à *fdp*, atendendo à relação diferencial/integral entre ambas. Daqui resulta que os momentos de primeira e segunda ordem anteriormente apresentados permanecem constantes com a referida translação. De facto, analisando as expressões (4.34), (4.35), (4.36) e (4.37) conclui-se que os argumentos dos respectivos integrais não são modificados pela referida translação porque tal não acontece às *fdp* marginais conjuntas[15]. Assim, e em resumo:

a) o valor esperado ou média da *f.a.* existe e é constante

$$m(\vec{\mathbf{x}}) \equiv \langle z(\vec{\mathbf{x}}) \rangle = E\left[Z(\vec{\mathbf{x}})\right] = m \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{4.44}$$

b) a covariância entre quaisquer dois pontos separados por um vector $\vec{\mathbf{h}}$ existe e depende somente do vector separação

$$C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_i + \vec{\mathbf{h}}) = E\left[Z'(\vec{\mathbf{x}}_i)\, Z'(\vec{\mathbf{x}}_i + \vec{\mathbf{h}})\right] = E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_i) - m\right)\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_i + \vec{\mathbf{h}}) - m\right)\right] =$$

$$= E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\, Z(\vec{\mathbf{x}}_i + \vec{\mathbf{h}})\right] - m^2 = C(\vec{\mathbf{h}}) \tag{4.45}$$

$$\forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \quad \text{e} \quad \forall \vec{\mathbf{h}} \in \Re^n$$

Uma vez que a covariância é indiferente à translação aplicada

---

[15] Como da primeira destas expressões (4.34) se retira que o valor esperado da *f.a.* é constante (4.44), as flutuações presentes nos argumentos dos integrais que definem a covariância e a variância também não são alteradas pela translação.

$$C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_i + \vec{\mathbf{h}}) = C(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{h}}, \vec{\mathbf{x}}_i) = E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{h}}) - m\right)\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_i) - m\right)\right] =$$

$$= E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\, Z(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{h}})\right] - m^2 = C(-\vec{\mathbf{h}}) \tag{4.46}$$

$$\forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \text{ e } \forall \vec{\mathbf{h}} \in \Re^n$$

conclui-se que

$$C(\vec{\mathbf{h}}) = C(-\vec{\mathbf{h}}) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{h}} \in \Re^n \tag{4.47}$$

c) a variância existe, é finita e não depende de $\vec{\mathbf{x}}$

$$\sigma^2(\vec{\mathbf{x}}_i) = C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_i) = C(\vec{\mathbf{0}}) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{4.48}$$

d) o semivariograma é estacionário e, tal como a covariância, só depende do vector separação $\vec{\mathbf{h}}$

$$\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_i + \vec{\mathbf{h}}) = \frac{1}{2} E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_i) - Z(\vec{\mathbf{x}}_i + \vec{\mathbf{h}})\right)^2\right] = \gamma(\vec{\mathbf{h}}) \tag{4.49}$$

$$\forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \quad \text{e} \quad \forall \vec{\mathbf{h}} \in \Re^n$$

Como o semivariograma também é indiferente à translação aplicada

$$\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_i + \vec{\mathbf{h}}) = \gamma(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{h}}, \vec{\mathbf{x}}_i) = \frac{1}{2} E\left[(Z(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{h}}) - Z(\vec{\mathbf{x}}_i))^2\right] = \gamma(-\vec{\mathbf{h}}) \tag{4.50}$$

$$\forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \quad \text{e} \quad \forall \vec{\mathbf{h}} \in \Re^n$$

conclui-se que

$$\gamma(\vec{\mathbf{h}}) = \gamma(-\vec{\mathbf{h}}) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{h}} \in \Re^n \tag{4.51}$$

A relação entre o semivariograma e a covariância (4.42) toma agora um aspecto mais simples, atendendo a que a variância e o valor esperado são constantes

$$\gamma(\vec{\mathbf{h}}) = \sigma^2 - C(\vec{\mathbf{h}}) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{h}} \in \Re^n \tag{4.52}$$

isto é, o semivariograma é igual à variância menos a covariância. Desta relação pode resultar a ideia de que a introdução do semivariograma não passa de uma redundância, visto que dá uma informação probabilística sobre a *f.a.* que já se encontra presente na covariância. Mas, na realidade, o semivariograma tem uma vantagem sobre a covariância que reside no facto de dispensar o conhecimento da média para a sua determinação, conforme demonstra a expressão (4.37). Esta vantagem é particularmente evidente quando se efectua o cálculo do semivariograma experimental.

Uma *f.a.* cujos momentos de primeira e segunda ordem satisfazem as condições descritas nas alíneas a) a d) é considerada como *estacionária de segunda ordem* ou como tendo uma estacionaridade fraca[16], uma vez que o cumprimento destas condições não garante que igualdade (4.43) seja satisfeita. Mas como as aplicações da Geoestatística são baseadas nos dois primeiros momentos, o cumprimento destas condições é suficiente para o estabelecimento da estacionaridade.

No caso geral, a covariância (4.45) e o semivariograma (4.49) dependem da grandeza e direcção do vector separação. Significa que entre pontos com o mesmo afastamento, mas definindo diferentes direcções, estes momentos podem apresentar valores distintos. Nestas condições, a *f.a.* diz-se *anisotrópica*. Uma *f.a.* é *isotrópica* se a respectiva *FDP* também for invariante a uma rotação "de corpo rígido" dos $N$ pontos que a definem. Para este caso, a covariância $C(\vec{\mathbf{h}}) \equiv C(h)$ e o semivariograma $\gamma(\vec{\mathbf{h}}) \equiv \gamma(h)$ dependem unicamente da distância entre os pontos, qualquer que seja a direcção por eles definida. Nos aquíferos regionais, a integração das equações diferenciais segundo a vertical esconde a anisotropia entre as direcções vertical e horizontal resultante da estratificação dos solos. Por este motivo e porque

[16] "Weakly stationary", na literatura de língua inglesa.

os dados de campos são habitualmente escassos, não permitindo capturar uma eventual anisotropia horizontal, é habitual considerá-los como isotrópicos.

Ao admitir que uma *f.a.* é estacionária e isotrópica introduz-se uma simplificação substancial na definição dos momentos de primeira e segunda ordem, mas fica por esclarecer se estes momentos traduzem adequadamente a correspondente lei de distribuição de probabilidade. Para ultrapassar esta dúvida é usual acrescentar mais uma hipótese: a *FDP* conjunta, definida para qualquer conjunto finito de $N$ pontos, é *multivariada normal* ou *gaussiana*.

### 4.3.3 Funções aleatórias multivariadas normais

Os vectores aleatórios multivariados normais ou gaussianos têm a *fdp* conjunta $N$-variada definida por

$$f_{Z_1 Z_2 \ldots Z_N}(z_1, z_2, \ldots, z_N) = \frac{|\mathbf{C}|^{-1/2}}{(2\pi)^{N/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{z}-\mathbf{m})^T \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{z}-\mathbf{m})\right] \tag{4.53}$$

sendo $\mathbf{z} = (z_1, z_2, \ldots, z_N)$ o vector aleatório, $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \ldots, m_N) \equiv (\langle z_1 \rangle, \langle z_2 \rangle, \ldots, \langle z_N \rangle)$ o vector dos valores esperados e $\mathbf{C}$ a matriz $N \times N$ de covariância definida por $C_{ij} \equiv C(Z_i, Z_j)$. Nas *f.a.*'s, as componentes do vector aleatório correspondem aos valores da função em $N$ pontos do domínio, $z_i \equiv z(\vec{\mathbf{x}}_i)$, pelo que os elementos da matriz de covariância também são função das coordenadas $C_{ij} \equiv C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j)$.

Da observação de (4.53) retira-se que a *fdp* é completamente caracterizada pelos momentos de primeira e segunda ordem nela presentes, o valor esperado (ou média) e a covariância. Logo, se uma *f.a.* multivariada normal for simultaneamente estacionária e isotrópica, a respectiva *fdp* fica definida pela média, *m*, e pela expressão da covariância, *C(h)*. Este facto convida a que se procure representar o comportamento de algumas propriedades dos aquíferos como estacionárias, isotrópicas e multivariadas normais. É o caso, por exemplo, da transmissividade e do coeficiente de armazenamento. Entretanto, antes de se avançar para a

definição probabilística uma *f.a.* através da média e da função de covariância, importa estabelecer que condições deve possuir uma determinada propriedade, ou a sua transformada, para que o modelo resultante destas hipóteses simplificadoras[17] seja considerado válido.

### 4.3.4 Transformação de variáveis

Pelas razões acima expostas, os modelos probabilísticos multivariados normais ou gaussianos são de grande utilidade na interpretação de funções aleatórias, a menos que se demonstre a sua inaptidão para um determinado problema.

Apesar da *fdp* multivariada normal ser caracterizada pelos dois primeiros momentos estatísticos já referidos, a expressão matricial (4.53) é pouco prática. Segundo Deutsch e Journel (1992) é preferível defini-la pelas *propriedades características*. Assim, uma *f.a.* $Y(\vec{\mathbf{x}}) = \{Y(\vec{\mathbf{x}}), \vec{\mathbf{x}} \in A\}$ é multivariada normal se e só se[18]:

a) todos os sub-conjuntos da *f.a.* $Y(\vec{\mathbf{x}}) = \{Y(\vec{\mathbf{x}}), \vec{\mathbf{x}} \in B \subset A\}$ são também multivariados normais;

b) qualquer combinação linear de um número arbitrário de $n$ componentes de $Y(\vec{\mathbf{x}})$

$$X = \sum_{i=1}^{n} w_i \, Y(\vec{\mathbf{x}}_i) \tag{4.54}$$

tem uma distribuição univariada normal, quaisquer que sejam os valores dos coeficientes da combinação $w_i$ e os pontos $\vec{\mathbf{x}}_i$ do domínio $A$;

c) a covariância nula implica total independência, isto é, se $C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) = 0$ as componentes da *f.a.* nesses pontos, $Y(\vec{\mathbf{x}}_i)$ e $Y(\vec{\mathbf{x}}_j)$ são totalmente independentes;

---

[17] Função aleatória *estacionária, isotrópica* e *multivariada normal.*

[18] As propriedades características não são independentes. Por exemplo, a referida na alínea b) é suficiente para caracterizar uma distribuição de probabilidade multivariada normal (Deutsch e Journel, 1992).

d) a *FDP* de um qualquer sub-conjunto da *f.a.* $Y(\vec{\mathbf{x}})$, condicionada por uma realização de um outro qualquer sub-conjunto da *f.a.*, é multivariada normal. Por exemplo, a *FDP* conjunta das $k$ componentes da *f.a.* $\{Y(\vec{\mathbf{x}}_i'), i=1,...,k, \vec{\mathbf{x}}_i' \in A\}$, dadas as $m$ realizações $\{y(\vec{\mathbf{x}}_j), j=1,...,m, \vec{\mathbf{x}}_j \in A\}$, é $k$-variada normal[19].

A primeira condição necessária para que uma *f.a.* $Y(\vec{\mathbf{x}})$ seja multivariada normal é que a respectiva *FDP* univariada seja normal, isto é

$$\text{Prob}\{Y(\vec{\mathbf{x}}) \leq y\} = G(y) \quad , \quad \forall y \tag{4.55}$$

sendo $G(y)$ a *FDP* normal padrão $(m_y = 0 \text{ e } \sigma_y^2 = 1)$.

É frequente as propriedades hidrogeológicas dos aquíferos apresentarem histogramas que não são nem gaussianos nem simétricos, pelo que aparentemente não poderão cumprir a condição necessária (4.55). Contudo, esta dificuldade pode ser torneada por uma adequada transformação da propriedade ou variável em causa, substituindo-a por uma nova variável que respeite a mencionada condição necessária.

A variável aleatória, $Z$, pode ser transformada noutra, $Y = \varphi(Z)$, de tal modo que a *FDP* mude de um modo pré-definido. Quando se pretende que $Y$ apresente uma *FDP* normal designa-se a transformação por normal ou gaussiana. A transformação pode ser paramétrica, caso se conheça a *FDP* de $Z$, ou não paramétrica, quando tal não sucede. No domínio da hidrogeologia é habitual admitir que as propriedades apresentam um comportamento logarítmico-normal pelo que transformação geralmente adoptada é $Y = \ln(Z)$.

A formulação geral da transformação de variáveis, gaussiana ou não, baseia-se na igualdade das funções de distribuição

$$F_Y(y_p) = F_Z(z_p) = p \quad , \quad \forall p \in [0,1] \tag{4.56}$$

---

[19] Tem particular interesse para a estimação do comportamento espacial de uma *f.a.* o caso em que $k$ = 1, pelo que é tratado detalhadamente em sub-capítulo específico.

pelo que

$$y = F_Y^{-1}[F_Z(z)] \tag{4.57}$$

sendo $F_Y^{-1}$ a inversa da *FDP* de $Y$

$$y_p = F_Y^{-1}(p) \quad , \quad \forall p \in [0,1] \tag{4.58}$$

Para obter uma transformada normal padrão toma-se $F_Y(y) \equiv G(y)$.

Nas transformações não paramétricas, o desconhecimento da *FDP* de $Z$ leva a que se a substitua pela função de *frequências acumuladas* obtida a partir dos valores da amostra de $Z$ ordenados por ordem crescente $\{z_1 \leq z_2 \leq ... \leq z_N\}$. A cada um destes valores atribui-se uma probabilidade de não ser excedido, $F_Z(z_i)$, a calcular com uma das seguintes expressões

$$F_Z(z_i) = \frac{i}{N} \tag{4.59}$$

$$F_Z(z_i) = \frac{i-0.5}{N} \tag{4.60}$$

$$F_Z(z_i) = \frac{i-0.4}{N+0.2} \tag{4.61}$$

A primeira é sugerida por Deutsch e Journel (1992) e as restantes duas por Samper e Carrera (1990). Os $N$ pontos assim determinados definem uma sucessão monótona crescente. A probabilidade de um dado valor ser excedido, $F_Z(z)$, obtém-se por interpolação entre os dois pontos imediatamente adjacentes. Para valores de $z$ inferiores a $z_1$ ou superiores a $z_N$ tem efectua-se uma extrapolação linear, normal ou de outro tipo que se entenda adequado ao problema e à expressão das frequências acumuladas utilizada. Por exemplo, para determinar a probabilidade associada a um valor de $z$ inferior a $z_1$, utilizando uma extrapolação normal, ajusta-se a média de uma distribuição normal com a mesma variância da amostra de $Z$ de

modo a igualar a probabilidade calculada para $z_1$ pela expressão das frequências acumuladas e determina-se $F_Z(z)$ com a expressão da distribuição normal assim ajustada.

Depois de se trabalhar com a transformada, é necessário, frequentemente, retornar à variável original. Para o efeito reutiliza-se, na transformação inversa, a mesma função de frequências acumuladas.

Contudo, importa salientar que se uma transformação deste tipo, $Y = \varphi(Z)$, produz uma nova variável com uma distribuição univariada normal, tal não garante que as distribuições multivariadas de $Y$ em diversos pontos sejam conjuntamente normais. Assim, é necessário acrescentar mais uma condição, a de que a *FDP* bivariada para qualquer par de valores $Y(\vec{\mathbf{x}})$, $Y(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})$, $\forall\vec{\mathbf{h}}$ seja normal. De entre os vários métodos, Deutsch e Journel (1992) sugerem que se verifique se a *FDP* experimental para qualquer par de valores da amostra $\left\{y(\vec{\mathbf{x}}_k), y(\vec{\mathbf{x}}_k+\vec{\mathbf{h}}),\ k=1,...,N(\vec{\mathbf{h}})\right\}$ é bivariada normal padrão $(m_y=0 \text{ e } \sigma_y^2=1)$, com a covariância $C_Y(\vec{\mathbf{h}})$ a calcular a partir da amostra. Para o efeito é utilizada a expressão que relaciona uma *FDP* bivariada normal padrão com a covariância $C_Y(\vec{\mathbf{h}})$

$$\text{Prob}\left\{Y(\vec{\mathbf{x}})\le y_p, Y(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})\le y_p\right\} = p^2 + \frac{1}{2\pi}\int_0^{\text{arcsen}\left(C_Y(\vec{\mathbf{h}})\right)} \exp\left(-\frac{y_p^2}{1+\text{sen}\,\theta}\right) d\theta \qquad (4.62)$$

onde $y_p = G^{-1}(p)$ é o $p$-quantilho da distribuição normal padrão. Simultaneamente, existe uma relação entre a *FDP* bivariada normal padrão e o semivariograma da indicatriz $\gamma_I(\vec{\mathbf{h}}; p)$

$$\begin{aligned}&\text{Prob}\left\{Y(\vec{\mathbf{x}})\le y_p, Y(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})\le y_p\right\} = \\ &= E\left[I(\vec{\mathbf{x}}; p)\, I(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}}; p)\right] = p - \gamma_I(\vec{\mathbf{h}}; p)\end{aligned} \qquad (4.63)$$

A indicatriz é uma função binária definida por

$$I(\vec{\mathbf{x}};p)=\begin{cases}1 & \text{se} \quad Y(\vec{\mathbf{x}})\le y_p\\ 0 & \text{se} \quad Y(\vec{\mathbf{x}})> y_p\end{cases} \tag{4.64}$$

para o valor de corte $y_p$. Se $Y(\vec{\mathbf{x}})$ é uma *f.a.*, a correspondente indicatriz também o é, e $\gamma_I(\vec{\mathbf{h}};p)$ é o semivariograma desta nova *f.a.* calculada a partir dos valores da amostra para o valor de corte $y_p$.

A verificação sugerida por Deutsch e Journel (1992) consiste em comparar as duas expressões que definem a *FDP* bivariada normal padrão, nomeadamente o segundo membro de (4.62) com o terceiro de (4.63), para diferentes $p$-quantilhos.

Relativamente a esta verificação interessa salientar que a indicatriz $I(\vec{\mathbf{x}};p)$ toma os mesmos valores independentemente de ser calculada a partir dos dados originais, $z(\vec{\mathbf{x}})$, ou dos transformados, $y(\vec{\mathbf{x}})$, uma vez que os valores de corte, $z_p$ e $y_p$, correspondem ao mesmo $p$-quantilho das respectivas *FDP* univariadas. Por outras palavras, o semivariograma da indicatriz $\gamma_I(\vec{\mathbf{h}};p)$ permanece constante para qualquer transformação monótona crescente, linear ou não. Este facto, associado à expressão (4.63), permite escrever

$$\begin{gathered}\text{Prob}\left\{Y(\vec{\mathbf{x}})\le y_p, Y(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})\le y_p\right\}=\text{Prob}\left\{Z(\vec{\mathbf{x}})\le z_p, Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})\le y_p\right\}\\ \forall p\in[0,1]\end{gathered} \tag{4.65}$$

para qualquer transformação monótona crescente $Y=\varphi(Z)$. Esta igualdade permite concluir que não há transformação que acrescente a uma determinada *f.a.* propriedades bivariadas ou multivariadas, pelo que se estas não existirem nos dados originais não é a transformação que as fará aparecer.

As duas condições apresentadas nesta secção são necessárias, mas não suficientes, para garantir que uma determinada propriedade de um aquífero, ou a respectiva transformada, tem um comportamento multivariado normal. Contudo, na impossibilidade prática de proceder a verificações idênticas às *FDP* $k$-variadas de ordem superior a dois, admite-se que

se estas duas condições não forem violadas pelos valores disponíveis na amostra de $Z(\vec{x})$, esta *f.a.* pode ser considerada multivariada normal.

Finalmente resta referir que, frequentemente, o número de dados é tão escasso que não é possível efectuar com um mínimo de rigor a verificação inerente à segunda condição apresentada[20], pelo que a decisão de admitir que uma determinada propriedade apresenta um comportamento caracterizável por uma *f.a.* multivariada normal corresponde apenas a uma expectativa que não pode ser fundamentada ou rejeitada.

### 4.3.5 Funções aleatórias intrínsecas ou de incrementos estacionários

Conforme se demonstrou anteriormente[21], as *f.a.* estacionárias possuem covariância e variância, ambas com grandeza finita. Mas existem fenómenos e *f.a.*'s que apresentam uma ilimitada capacidade de variação, relativamente aos quais não é possível definir a covariância e a variância. Samper e Carrera (1990) referem, entre outros, o nível piezométrico de um aquífero com elevados gradientes hidráulicos ou a espessura de uma determinada formação geológica. Os mesmos autores apresentam como um exemplo simples de uma *f.a.* não estacionária o processo discreto de Wiener-Levy. Trata-se de processo que só toma valores para um conjunto discreto de pontos, $\{1,2,...,k,k+1,...\}$, e que em dois pontos consecutivos estão relacionados pela expressão

$$Z_{k+1} = Z_k + \varepsilon_k \quad , \quad \forall k = 1,2,...,\infty \tag{4.66}$$

onde cada um dos incrementos, $\varepsilon_k$, é uma variável aleatória independente, com uma distribuição normal de média nula e variância unitária. De acordo com esta definição, os valores da função em dois pontos separados por uma distância $h$ estão relacionados pela seguinte expressão

---

[20] A *FDP* bivariada ser normal para qualquer par de vectores.
[21] Alíneas b) e c) da secção 4.3.2.

$$Z_{k+h} = Z_k + \varepsilon_k + \varepsilon_{k+1} + \cdots + \varepsilon_{k+h-1} = Z_k + \sum_{i=k}^{k+h-1} \varepsilon_i \tag{4.67}$$

O valor esperado de $Z_{k+h}$ é dado por

$$\langle z_{k+h} \rangle = E\left[ Z_k + \sum_{i=k}^{k+h-1} \varepsilon_i \right] = E[Z_k] + \sum_{i=k}^{k+h-1} E[\varepsilon_i] = \langle z_k \rangle \tag{4.68}$$

visto que cada um dos incrementos $\varepsilon_i$ tem média nula. A variância de $Z_+$ é expressa por

$$\begin{aligned} \sigma^2_{Z_{k+h}} = \mathrm{Var}(Z_{k+h}) = \mathrm{Var}\left( \mathrm{Z_k} + \sum_{i=k}^{k+h-1} \varepsilon_i \right) = \\ = \mathrm{Var}(Z_k) + \sum_{i=k}^{k+h-1} \mathrm{Var}(\varepsilon_i) \\ = \sigma^2_{Z_k} + h \end{aligned} \tag{4.69}$$

atendendo a que, por um lado, a variância da soma de variáveis aleatórias independentes é igual à soma das respectivas variâncias e, por outro, que as variâncias dos incrementos $\varepsilon_i$ são iguais à unidade. Da expressão (4.69) conclui-se que este processo não tem variância finita uma vez que esta cresce indefinidamente com *h*, a distância entre os pontos.

No entanto, se se analisar o comportamento dos incrementos $Z_{k+h} - Z_k$ verifica-se que têm média e variância, as quais são independentes de *k*

$$E[Z_{k+h} - Z_k] = E\left[ \sum_{i=k}^{k+h-1} \varepsilon_i \right] = \sum_{i=k}^{k+h-1} E[\varepsilon_i] = 0 \tag{4.70}$$

$$\mathrm{Var}(Z_{k+h} - Z_k) = \mathrm{Var}\left( \sum_{i=k}^{k+h-1} \varepsilon_i \right) = \sum_{i=k}^{k+h-1} \mathrm{Var}(\varepsilon_i) = h \tag{4.71}$$

O semivariograma do processo de Wiener-Levy é dado por

$$\gamma(h)=\frac{1}{2}E\left[(Z_{k+h}-Z_k)^2\right]=\frac{1}{2}E\left[\left(\sum_{i=k}^{k+h-1}\varepsilon_i\right)^2\right]=$$

$$=\frac{1}{2}E\left[\left(\sum_{i=k}^{k+h-1}\varepsilon_i-E\left[\sum_{i=k}^{k+h-1}\varepsilon_i\right]\right)^2\right]= \tag{4.72}$$

$$=\frac{1}{2}\mathrm{Var}\left(\sum_{i=k}^{k+h-1}\varepsilon_i\right)=\frac{h}{2}$$

tendo em consideração (4.70) e (4.71). O processo de Wiener-Levy exemplifica o tipo de *f.a.* que, embora não possuindo variância, tem incrementos $Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})-Z(\vec{\mathbf{x}})$ com variância finita. Assim, uma *f.a.* cujos incrementos tenham esperança matemática e variância definidas, independentemente de $\vec{\mathbf{x}}$ e para qualquer vector separação $\vec{\mathbf{h}}$, toma a designação de *função aleatória intrínseca*, com os dois primeiros momentos dos incrementos definidos por funções do vector separação

$$E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})-Z(\vec{\mathbf{x}})\right]=m(\vec{\mathbf{h}}) \tag{4.73}$$

$$\mathrm{Var}\left[Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})-Z(\vec{\mathbf{x}})\right]=g(\vec{\mathbf{h}}) \tag{4.74}$$

A função $m(\vec{\mathbf{h}})$ é a *deriva* ou *tendência* e é linear em $\vec{\mathbf{h}}$ uma vez que

$$m(\vec{\mathbf{h}}_1+\vec{\mathbf{h}}_2)=m(\vec{\mathbf{h}}_1)+m(\vec{\mathbf{h}}_2) \tag{4.75}$$

que se obtém ao tomar a esperança matemática à igualdade

$$Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}}_1+\vec{\mathbf{h}}_2)-Z(\vec{\mathbf{x}})=\left(Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}}_1+\vec{\mathbf{h}}_2)-Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}}_1)\right)+\left(Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}}_1)-Z(\vec{\mathbf{x}})\right) \tag{4.76}$$

Geralmente admite-se que $m(\vec{\mathbf{h}})=0$, o que permite rescrever (4.73) e (4.74)

$$E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})-Z(\vec{\mathbf{x}})\right]=0 \tag{4.77}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}\left[Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})-Z(\vec{\mathbf{x}})\right]&=E\left\{\left(\left[Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})-Z(\vec{\mathbf{x}})\right]-E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})-Z(\vec{\mathbf{x}})\right]\right)^2\right\}=\\&=E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})-Z(\vec{\mathbf{x}})\right)^2\right]=2\gamma(\vec{\mathbf{h}})\end{aligned} \tag{4.78}$$

definindo uma *f.a.* intrínseca de *incrementos estacionários*.

Finalmente importa referir que uma *f.a.* estacionária de segunda ordem é sempre intrínseca, já o recíproco nem sempre é verdadeiro.

### 4.3.6 Funções aleatórias não intrínsecas

Quando uma *f.a.* apresenta uma deriva ou tendência, isto é, quando o valor esperado $m(\vec{\mathbf{x}})$, definido por (4.34), varia com as coordenadas espaciais, a *f.a.* é não estacionária. Se os seus incrementos de primeira ordem $Z(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}})-Z(\vec{\mathbf{x}})$ também não são estacionários, a *f.a.* diz-se *não intrínseca*. Para este tipo de funções o semivariograma depende do vector separação e dos pontos do domínio. A abordagem das *f.a.*'s não intrínsecas, nomeadamente a análise da sua estrutura probabilística e a estimação do seu comportamento espacial, não é aqui realizada na medida em que ultrapassa o âmbito e objectivo do presente trabalho[22].

### 4.3.7 Algumas considerações sobre inferência estatística, estacionaridade e ergodicidade

Neste ponto da exposição convém rever a abordagem seguida na interpretação probabilística das variáveis regionalizadas e as hipóteses simplificadoras introduzidas.

---

[22] Samper e Carrera (1990) analisam, com algum detalhe e ao longo de vários capítulos, as funções aleatórias não intrínsecas. Marsily (1986) também descreve este tipo de funções.

Convém, igualmente, retomar a questão de saber se é possível a partir de uma amostra de dados extraídos de uma só realização da *f.a.* determinar não só se esta é estacionária, intrínseca ou não intrínseca como ainda obter a respectiva caracterização probabilística.

A primeira simplificação consistiu na suposição de que a caracterização probabilística de uma *f.a.* pode ser realizada por uma *FDP* (ou *fdp*) definida para um número arbitrário e finito de pontos do domínio. Em seguida admitiu-se que os momentos de primeira e segunda ordem contêm informação suficiente para suportar essa caracterização probabilística. Em reforço desta hipótese considerou-se a *f.a.* como multivariada normal, caso em que os dois primeiros momentos, valor esperado e covariância, definem completamente a respectiva *fdp*. Finalmente, ao supor que a *f.a.* é estacionária e isotrópica reduz-se a caracterização probabilística da função ao conhecimento do valor esperado, $m$, constante em todos os pontos do domínio, e da função de covariância, $C(h)$. Como alternativa a esta última pode ser utilizado o semivariograma, $\gamma(h)$.

Fica assim evidente a vantagem de procurar interpretar probabilisticamente uma variável regionalizada por uma função aleatória *estacionária*, *isotrópica* e *multivariada normal*. Agora, perante um problema concreto, por exemplo o de uma propriedade hidrogeológica relativamente à qual se conhece uma amostra de valores medidos em pontos do domínio, as questões que se colocam são as de saber se:

a) a referida propriedade pode ser interpretada por uma *f.a.* multivariada normal?

b) a referida propriedade pode ser interpretada por uma *f.a.* estacionária e isotrópica, ou então por uma *f.a.* intrínseca ou mesmo não intrínseca?

c) é possível estimar os parâmetros estatísticos, $m$ e $C(h)$, ou $\gamma(h)$, cujas definições assentam em esperanças matemáticas a calcular para o conjunto das realizações da *f.a.*, sabendo-se apenas o valor que uma só realização toma num conjunto discreto de pontos do domínio?

A secção 4.3.4 procura responder à primeira questão ao introduzir o conceito de transformação ou mudança de variável com a finalidade de obter uma nova *f.a.* que possa

cumprir a duas condições necessárias para que seja considerada multivariada normal. Tal como já foi então referido, pode acontecer que o número de dados da amostra, eventualmente escasso, não permita retirar uma conclusão válida quanto ao cumprimento ou incumprimento dessas condições. Neste caso, a admissão de que a propriedade em causa, ou a sua transformada, têm um comportamento multivariado normal é aceitável.

A resposta à segunda questão deve ser procurada nos dados da amostra e no respectivo tratamento estatístico. Em particular, deve-se calcular o semivariograma experimental, para o que não é necessário o conhecimento prévio da média, e tentar perceber se este apresenta um comportamento típico de uma *f.a.* estacionária ou de uma *f.a.* intrínseca. Um número escasso de dados da amostra impossibilita uma interpretação segura do semivariograma experimental, nomeadamente a selecção de um modelo teórico que o represente. Uma vez mais a escassez de dados permite a introdução de hipóteses simplificadoras do modelo probabilístico, nomeadamente as da estacionaridade e da isotropia.

Se é evidente a vantagem do modelo estacionário, isotrópico e multivariado normal, isto não significa que seja forçosamente aplicado a todos os problemas, em particular àqueles cujas amostras contêm informação suficiente para sugerir um modelo probabilístico alternativo ou, pelo menos, para rejeitar o estacionário, isotrópico e multivariado normal. A Geoestatística estuda e aplica outros modelos, nomeadamente as funções intrínsecas e não intrínsecas, na estimação da distribuição espacial de variáveis regionalizadas e na quantificação da incerteza associada. Mas esse vasto domínio do conhecimento geoestatístico não é aqui referido porque se procurou orientar o trabalho para a representação das propriedades hidrogeológicas pelo modelo probabilístico mais simples, o modelo estacionário, isotrópico e multivariado normal, enriquecido por informação adicional obtida por modelação inversa.

Esta opção é justificada pelo facto de os dados de campo serem habitualmente escassos, e quanto mais reduzido é o seu número maior é a necessidade de introduzir hipóteses simplificadoras. De facto, quanto mais complexo for um modelo maior é a quantidade de informação necessária para o configurar. No entanto, e apesar desta argumentação, não seria honesto omitir uma outra perspectiva deste problema que pode ser resumida do seguinte modo: quanto mais escasso é o número de dados de campo maior é a liberdade para a introdução de hipóteses simplificadoras...

Finalmente a estimação dos parâmetros estatísticos a partir de uma única realização da *f.a.* $Z(\bar{\mathbf{x}})$. Tal como já se referiu, uma *f.a.* pressupõe a existência de múltiplas realizações. Se $Z(\bar{\mathbf{x}})$ for uma propriedade hidrogeológica de um aquífero, a cada realização de $Z(\bar{\mathbf{x}})$ deveria corresponder a um aquífero distinto. E, por exemplo, a determinação da esperança matemática da função num ponto do aquífero, $E[Z(\bar{\mathbf{x}}_0)]$, deveria corresponder ao cálculo da média dos valores da função nesse ponto em cada um dos distintos aquíferos. Raciocínio idêntico pode ser apresentado para qualquer outro parâmetro estatístico que envolva o cálculo da esperança matemática, visto que esta operação respeita ao conjunto das realizações da *f.a.* Mas como a natureza não se repete só há um aquífero, isto é, uma realização. E o conjunto das realizações não passa de uma abstracção teórica que procura reflectir a incerteza respeitante ao comportamento espacial da propriedade. Assim, a caracterização probabilística da *f.a.* deve ser procurada na informação presente na única realização disponível.

A determinação dos momentos de primeira e segunda ordem tem, então, que ser efectuada por uma ponderação espacial em vez da ponderação relativa ao conjunto das realizações. Este procedimento contém implícita a suposição de que uma única realização da *f.a.* apresenta no espaço a mesma *FDP* (ou *fdp*) que o conjunto das possíveis realizações, isto é, que a *f.a.* é *ergódica.* Uma *f.a.* estacionária com uma distância de correlação substancialmente inferior às dimensões do domínio é uma *f.a.* ergódica. E na terminologia dos processos estocásticos uma função simultaneamente estacionária e ergódica é também designada por *homogénea.* No estudo de uma propriedade hidrogeológica, relativamente à qual são conhecidos dados de campo, é difícil demonstrar a validade da hipótese da ergodicidade ou o oposto. Apesar disso é adoptada, uma vez que é imprescindível à inferência estatística dos modelos probabilísticos utilizados na interpretação das variáveis regionalizadas.

## 4.4 Análise estrutural das funções aleatórias

O processo de definição do modelo probabilístico mais adequado a uma determinada variável regionalizada é designado por *análise estrutural*. Trata-se de escolher um modelo de variabilidade do fenómeno traduzido pela variável regionalizada, isto é, decidir se esta pode ser representada por uma *f.a.* estacionária, intrínseca ou não intrínseca, se apresenta uma tendência, qual a melhor forma de a aproximar, etc. Frequentemente, a designação de análise estrutural é atribuída à estimação do semivariograma pela simples razão de neste estar implícita a definição do tipo de *f.a.* a par de outras informações relativas à estrutura espacial de correlação da variável em causa.

A estimação do semivariograma pode ser efectuada exclusivamente à custa dos dados de campo quantitativos, se estes forem em número suficiente. Quando tal não acontece, a selecção e quantificação do modelo de semivariograma deverá realizada com o apoio de informação qualitativa suplementar ou, então, por técnicas de estimação mais complexas. Entre estas destacam-se as que procuram estabelecer uma correlação com outra ou outras variáveis, seja por uma metodologia exclusivamente geoestatística ou recorrendo à modelação inversa estocástica. É para esta última metodologia que se dirige o essencial do presente trabalho.

O semivariograma das *f.a.*'s estacionárias e a sua relação com a função de covariância são detalhadamente apresentados na secção seguinte. O comportamento do semivariograma para outro tipo de *f.a.*'s também é analisado.

### 4.4.1 O semivariograma e a covariância

Para as *f.a.*'s estacionárias, o semivariograma é definido por

$$\gamma(\vec{\mathbf{h}}) = \gamma(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{x}} + \vec{\mathbf{h}}) = \frac{1}{2} E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}) - Z(\vec{\mathbf{x}} + \vec{\mathbf{h}})\right)^2\right]$$

$$\forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \quad \text{e} \quad \forall \vec{\mathbf{h}} \in \Re^n \tag{4.79}$$

a covariância

$$C(\vec{\mathbf{h}}) = C(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{x}} + \vec{\mathbf{h}}) = E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}) - m\right)\left(Z(\vec{\mathbf{x}} + \vec{\mathbf{h}}) - m\right)\right]$$

$$\forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \quad \text{e} \quad \forall \vec{\mathbf{h}} \in \Re^n \tag{4.80}$$

e a relação entre as duas funções é expressa por

$$\gamma(\vec{\mathbf{h}}) = \sigma^2 - C(\vec{\mathbf{h}}) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{h}} \in \Re^n \tag{4.52}$$

Nas *f.a.*'s estacionárias e isotrópicas o semivariograma e a covariância são função do módulo do vector separação e a relação (4.52) pode ter a expressão gráfica da Figura 4.1.

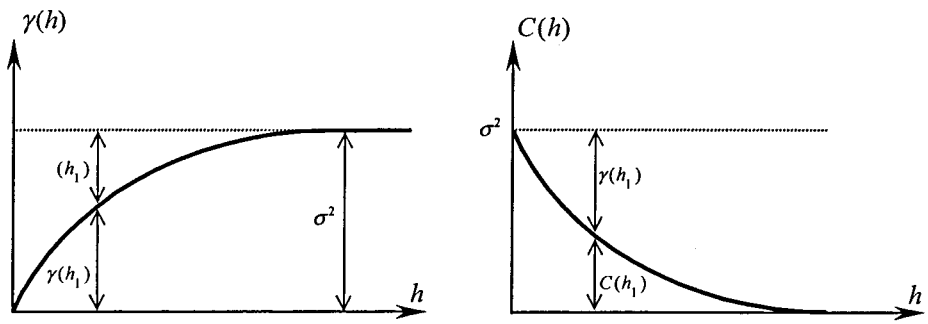



Figura 4.1 – Semivariograma e covariância de uma *f.a.* estacionária isotrópica.

Já foi referida a vantagem do semivariograma, relativamente à covariância, resultante de não ser necessário o conhecimento da média para a sua determinação. Outra vantagem do semivariograma consiste na possibilidade de o definir nas proximidades da origem[23], para as *f.a.*'s não estacionárias, ao contrário do que acontece com a covariância pelo facto de a

[23] Atendendo à definição, o semivariograma é nulo na origem.

variância ser muito grande ou mesmo infinita. Por estes motivos a função $\gamma(h)$ é considerada o instrumento mais poderoso para a análise estrutural de uma variável regionalizada. No entanto, para as *f.a.*'s estacionárias, é indiferente trabalhar com $\gamma(h)$ ou com $C(h)$ na estimação da respectiva distribuição espacial assim como na quantificação da incerteza dessa estimação, atendendo à relação (4.52).

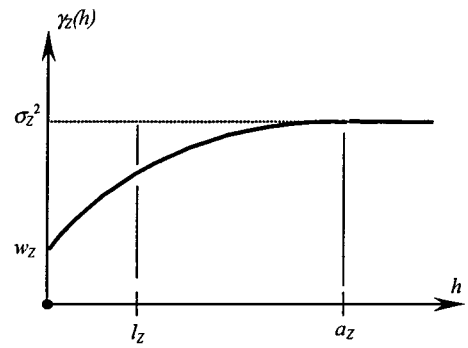



Figura 4.2 – Parâmetros que definem o semivariograma

Normalmente o semivariograma é uma função monótona não decrescente. Se a *f.a.* $Z(\bar{\mathbf{x}})$ for estacionária, $\gamma(h)$ tende para um patamar correspondente à variância, $\sigma_Z^2$, conforme se representa na Figura 4.2. O correspondente valor de $h$ é o *alcance* da *f.a.*, $a_Z$, isto é, o limite da zona de influência em torno de um ponto a partir do qual a correlação é nula. No entanto, a distância de correlação espacial é habitualmente definida por um outro parâmetro, a *distância integral*, $l_Z$

$$l_Z = \frac{1}{\sigma_Z^2}\int_0^\infty C(h)\,dh = \frac{1}{\sigma_Z^2}\int_0^\infty \left[\sigma_Z^2 - \gamma(h)\right]dh \tag{4.81}$$

correspondente ao quociente entre a área delimitada pelo semivariograma e o patamar definido pela variância e o valor desta última. Por outro lado, apesar de o semivariograma ser nulo na origem, é frequente $\gamma(h)$ apresentar uma descontinuidade finita a que é dada a designação de *pepita* ou *efeito pepita*, $w_Z$. Esta descontinuidade representa a parcela da variabilidade da *f.a.* que é totalmente aleatória, isto é, sem qualquer estrutura de correlação espacial. Uma análise mais detalhada do significado dos parâmetros e das propriedades do semivariograma é efectuada adiante, em sub-capítulo dedicado a essas matérias.

### 4.4.2 O semivariograma experimental

O semivariograma de uma determinada variável é estimado com base nos dados de campo, nomeadamente as medições efectuadas em diversos pontos. Estes dados permitem calcular um conjunto discreto de pontos do semivariograma, correspondentes a outras tantas grandezas do vector separação, que constitui o designado *semivariograma experimental*, $\gamma^*(h)$

$$\gamma^*(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} \left[ Z(\vec{\mathbf{x}}_i + \vec{\mathbf{h}}) - Z(\vec{\mathbf{x}}_i) \right]^2 \tag{4.82}$$

sendo $Z(\vec{\mathbf{x}}_i)$ os valores medidos nos pontos $\vec{\mathbf{x}}_i$, $h = |\vec{\mathbf{h}}|$ o módulo do vector separação e $N(h)$ o número de pares de pontos separados pela distância *h*.

A primeira observação sobre (4.82) respeita ao facto de, a partir de uma determinada distância *h*, o número de pares de pontos $N(h)$ tender a diminuir, pelo que para valores de *h* progressivamente maiores o semivariograma experimental é cada vez menos fiável. Como consequência, pode até acontecer que $\gamma^*(h)$ não se apresente como monótono não decrescente. Outro aspecto que importa salientar reside no facto de ser pouco provável que se encontrem dois ou mais pares de pontos rigorosamente à mesma distância. Um dos procedimentos adoptados para ultrapassar esta dificuldade consiste em definir um conjunto de intervalos de valores $]0, h_1]$, $]h_1, h_2]$, ..., $]h_k, h_l]$, etc., com a grandeza relativa dos limites dos intervalos definida por $h_1 < h_2 < ... < h_k < h_l < ...$ e atribuir o valor de $\gamma^*(h_j)$ à média das distâncias dos pares de pontos correspondentes a cada intervalo

$$h_j = \frac{1}{N_{k,l}} \sum_{m=1}^{N_{k,l}} h_m \qquad \text{com} \quad h_m \in ]h_k, h_l] \tag{4.83}$$

A escolha dos intervalos, nomeadamente a sua amplitude, depende do número de dados disponíveis e das distâncias entre pontos. Não há uma regra predefinida, pelo que se deve repetir a determinação do semivariograma experimental para diferentes amplitudes e fazer a opção que produza a melhor definição de $\gamma^*(h)$. Os valores de $h_j$ não devem ser

demasiado separados, ao ponto de não se perceber o andamento semivariograma, nem demasiado próximos, caso em que o número de pares de pontos de cada intervalo pode ser tão pequeno que tire sentido ao conceito de média que está implícito ao semivariograma[24] e deste modo provoque oscilações exageradas nas sucessivas ordenadas de $\gamma^*(h_j)$.

### 4.4.3 Semivariogramas teóricos

Após o cálculo do semivariograma experimental procura-se ajustar um modelo teórico. Os modelos teóricos são funções, com expressões analíticas simples[25], utilizadas para representar semivariogramas experimentais e devem respeitar determinadas condições:

a) de acordo com a definição (4.79), o semivariograma deve ser nulo na origem, isto é, para $h = 0$

$$\gamma(0) = 0 \tag{4.84}$$

Como consequência desta condição e da descontinuidade na origem correspondente ao efeito pepita

$$\lim_{h \to 0} \gamma(h) = w \tag{4.85}$$

as expressões analíticas devem ser definidas para $h > 0$.

b) a simétrica da função $\gamma(h)$ deve ser condicionalmente positiva definida, isto é, para qualquer conjunto de $N$ pontos arbitrários $\{\vec{\mathbf{x}}_1, \vec{\mathbf{x}}_2, ..., \vec{\mathbf{x}}_N\}$ e para qualquer conjunto de outros tantos coeficientes $\{\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_N\}$ que respeitem a condição

---

[24] A definição do semivariograma baseia-se na média dos quadrados das diferenças, pelo que quanto maior for o número de pares de pontos em cada intervalo mais consistente será o valor médio calculado.

[25] Não correspondem a nenhuma hipótese ou processo específico e tomam a designação de semivariogramas teóricos por oposição aos experimentais.

$$\sum_{i=1}^{N} \lambda_i = 0 \tag{4.86}$$

deve cumprir-se a desigualdade[26]

$$-\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \lambda_i \lambda_j \gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) \geq 0 \tag{4.87}$$

Esta desigualdade é consequência da igualdade (4.52) e de uma condição idêntica aplicada à covariância

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \lambda_i \lambda_j C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) \geq 0 \tag{4.88}$$

que resulta da necessidade de a variância ser maior ou igual a zero[27].

c) a condição anterior implica que o semivariograma tenha um ritmo de crescimento inferior a $h^2$, ou seja[28]

$$\lim_{h\to\infty} \frac{\gamma(h)}{h^2} = 0 \tag{4.89}$$

Os modelos teóricos mais utilizados são os seguintes:

- *efeito pepita puro*: é um modelo (Figura 4.3) representativo de um fenómeno sem nenhuma estrutura de correlação espacial

$$\gamma(h) = \begin{cases} 0 & \text{para } h = 0 \\ w & \text{para } h > 0 \end{cases} \tag{4.90}$$

---

[26] Samper e Carrera (1990).
[27] Esta condição é justificada no sub-capítulo respeitante às distribuições condicionadas.
[28] Dagan (1989) e Samper e Carrera (1990) remetem a demonstração para, respectivamente, Matheron (1965) e Journel e Huijbregts (1978).

sendo $w$ a variância do fenómeno. É habitualmente utilizado em combinação com outro modelo de semivariograma, dando origem à já referida descontinuidade na origem.

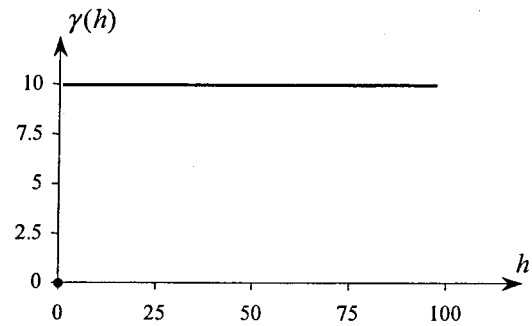



Figura 4.3 – Exemplo de semivariograma correspondente ao efeito pepita puro ($w$ = 10).

- *modelo esférico*: é um modelo (Figura 4.4) representativo de uma *f.a.* estacionária e é definido pelas seguintes expressões analíticas

$$\gamma(h)=\begin{cases}\sigma^2\left[\frac{3}{2}\left(\frac{h}{a}\right)-\frac{1}{2}\left(\frac{h}{a}\right)^3\right] & \text{para } h\le a\\ \sigma^2 & \text{para } h>a\end{cases} \tag{4.91}$$

sendo $\sigma^2$ a variância e $a$ o alcance. A distância integral, $l$, é determinada pela expressão (4.81)

$$l=\frac{1}{\sigma^2}\int_0^a\sigma^2\left[1-\frac{3}{2}\left(\frac{h}{a}\right)+\frac{1}{2}\left(\frac{h}{a}\right)^3\right]dh=\frac{3}{8}a \tag{4.92}$$

Este modelo é um dos mais utilizados e caracteriza-se por atingir o patamar correspondente à variância para um valor finito de $h$, o alcance $a$. É representativo de fenómenos contínuos, ou com um número finito de descontinuidades, ainda que não deriváveis, isto é, um fenómeno cuja representação pode apresentar quebras[29].

[29] Samper e Carrera (1990).

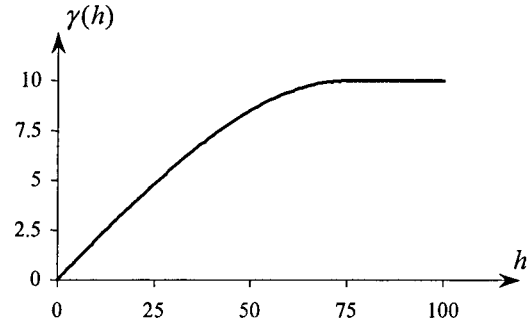



Figura 4.4 – Exemplo de um semivariograma esférico ($\sigma^2 = 10$; $a = 75$).

- *modelo exponencial*: é também um modelo (Figura 4.5) representativo de uma *f.a.* estacionária, sendo definido pela seguinte expressão

$$\gamma(h) = \sigma^2\left(1 - \mathrm{e}^{-h/d}\right) \tag{4.93}$$

que tende assimptoticamente para o patamar correspondente à variância $\sigma^2$

$$\lim_{h\to\infty} \gamma(h) = \lim_{h\to\infty} \sigma^2\left(1 - \mathrm{e}^{-h/d}\right) = \sigma^2 \tag{4.94}$$

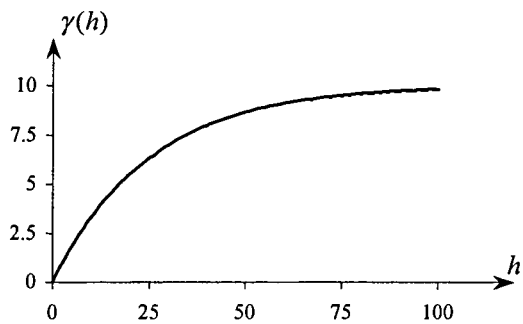



Figura 4.5 – Exemplo de um semivariograma exponencial ($\sigma^2 = 10$; $d = 25$; $a = 75$).

A distância integral, $l$, está presente em (4.93), conforme se demonstra pela aplicação da expressão (4.81)

$$l = \frac{1}{\sigma^2}\int_0^\infty \sigma^2\, \mathrm{e}^{-h/d}\, dh = d \tag{4.95}$$

O alcance deste modelo é definido como o valor de $h$ para o qual o semivariograma atinge o valor de $0.95\sigma^2$, aproximadamente $a = 3l$. Este modelo também é muito utilizado e representa fenómenos semelhantes aos referidos para o modelo esférico.

- *modelo gaussiano*: é um modelo (Figura 4.6) definido pela expressão

$$\gamma(h) = \sigma^2\left[1 - \exp\left(-\frac{h^2}{d^2}\right)\right] \tag{4.96}$$

que tende assimptoticamente para o patamar correspondente à variância $\sigma^2$

$$\lim_{h\to\infty}\gamma(h) = \lim_{h\to\infty}\sigma^2\left[1 - \exp\left(-\frac{h^2}{d^2}\right)\right] = \sigma^2 \tag{4.97}$$

A distância integral, $l$, é determinada, uma vez mais, pela expressão (4.81)

$$l = \frac{1}{\sigma^2}\int_0^\infty \sigma^2 \exp\left(-\frac{h^2}{d^2}\right)dh = \frac{d}{2}\sqrt{\pi} \tag{4.98}$$

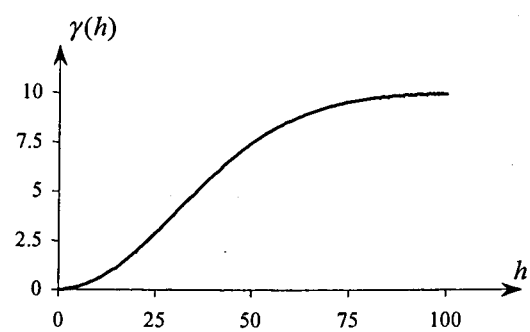



Figura 4.6 – Exemplo de um semivariograma Gaussiano ($\sigma^2 = 10$; $d = 43$; $a = 75$).

e o alcance, tal como no modelo anterior, é definido como o valor de $h$ para o qual o semivariograma atinge o valor de $0.95\sigma^2$, aproximadamente $a = \sqrt{3}\,d$. Este modelo é empregue na representação de fenómenos suaves, isto é, contínuos em

todos os pontos do domínio e deriváveis na maioria. Segundo Samper e Carrera (1990) este modelo pode originar problemas numéricos, exceptuando as situações em que é combinado com o efeito pepita, pelo que a sua utilização prática não é usual.

- *modelo de potência*[30]: é um modelo (Figura 4.7) traduzido pela expressão

$$\gamma(h) = k\, h^b \tag{4.99}$$

com $b \in ]0,2[$. O expoente $b$ deve ser inferior a 2, conforme estipula a condição (4.89), e não deverá ser nulo porque corresponde ao efeito pepita já referido. Como se conclui da observação de (4.99), este modelo tende para infinito com $h$, não existindo um patamar correspondente à variância, logo não se aplicando o conceito de alcance. É um modelo utilizado para representar fenómenos não estacionários, sem variância definida. A maior ou menor suavidade do comportamento a pequenas distâncias está relacionada com a grandeza do expoente. Quando este aumenta, maior é a suavidade. Para o expoente unitário, a variabilidade a pequena distância já é semelhante à dos modelos esférico e exponencial.

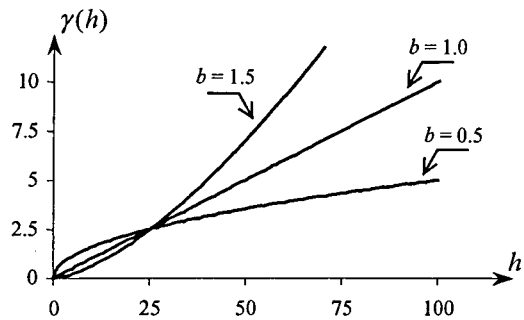



Figura 4.7 – Exemplos de semivariogramas de modelos de potência.

- *modelo logarítmico*: é caracterizado pela expressão

$$\gamma(h) = k \ln h \tag{4.100}$$

[30] "Power model", na literatura de língua inglesa.

não está definido na proximidade da origem[31] e também tende para infinito como o anterior.

Existem outros tipos de modelos que por serem de utilização muito reduzida não são aqui referidos. Uma descrição desses modelos encontra-se em Samper e Carrera (1990).

Aos modelos de semivariogramas respeitantes a *f.a.* estacionárias, aqui apresentados, correspondem modelos de covariância cujas expressões analíticas podem ser facilmente deduzidas com o auxílio da relação (4.52). A Figura 4.8 ilustra o ajuste de um modelo esférico a um semivariograma experimental.

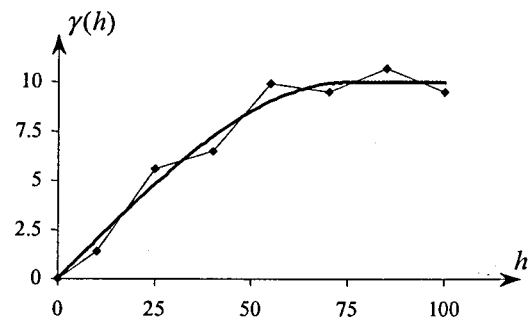



Figura 4.8 – Ajuste de um modelo esférico a um semivariograma experimental.

A representação probabilística de uma determinada variável regionalizada pode ser realizada por um modelo de semivariograma ou por uma combinação de modelos, de acordo com as seguintes regras:

i) a combinação linear de semivariogramas, ou de covariâncias, com coeficientes positivos é ainda um semivariograma, ou uma covariância. De facto, considere-se a *f.a.* $Z(\vec{\mathbf{x}})$, combinação linear de $N$ *f.a.*'s independentes $Y_i(\vec{\mathbf{x}})$

$$Z(\vec{\mathbf{x}}) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i Y_i(\vec{\mathbf{x}}) \qquad (4.101)$$

[31] Toma valores negativos para $h < 1$ e tende para $-\infty$ quando $h$ se aproxima de zero.

Substituindo esta expressão nas definições de semivariograma e covariância, e tendo em conta a independência das diferentes $Y_i(\vec{\mathbf{x}})$, deduz-se

$$\gamma(\vec{\mathbf{h}}) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i^2 \, \gamma_i(\vec{\mathbf{h}}) \tag{4.102}$$

$$C(\vec{\mathbf{h}}) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i^2 \, C_i(\vec{\mathbf{h}}) \tag{4.103}$$

onde $\gamma_i(\vec{\mathbf{h}})$ e $C_i(\vec{\mathbf{h}})$ são, respectivamente, o semivariograma e a covariância das diferentes $Y_i(\vec{\mathbf{x}})$.

ii) o produto de covariâncias também é uma covariância. Considere-se agora $Z(\vec{\mathbf{x}})$ como o produto de *N f.a.*'s independentes $Y_i(\vec{\mathbf{x}})$

$$Z(\vec{\mathbf{x}}) = \prod_{i=1}^{N} Y_i(\vec{\mathbf{x}}) \tag{4.104}$$

Tendo em conta a definição de covariância, e a independência das diferentes $Y_i(\vec{\mathbf{x}})$, é possível deduzir

$$C(\vec{\mathbf{h}}) = \prod_{i=1}^{N} C_i(\vec{\mathbf{h}}) \tag{4.105}$$

e ainda o correspondente semivariograma

$$\gamma(\vec{\mathbf{h}}) = \prod_{i=1}^{N} C_i(\vec{\mathbf{0}}) - \prod_{i=1}^{N} C_i(\vec{\mathbf{h}}) \tag{4.106}$$

## 4.5 Propriedades do semivariograma

O semivariograma é o mais poderoso instrumento de análise da estrutura probabilística de uma variável regionalizada. Por este motivo, e após terem sido apresentados os modelos teóricos, afigura-se adequado referir mais alguns aspectos do semivariograma, nomeadamente as escalas de variabilidade e a combinação de semivariogramas, a anisotropia, e ainda uma análise do significado do traçado de determinadas partes do semivariograma.

### 4.5.1 Escalas de variabilidade e sobreposição de semivariogramas

A variabilidade espacial de uma determinada propriedade do meio natural pode ser considerada como uma consequência da sobreposição de diferentes escalas de variabilidade, em que cada uma integra a variabilidade das escalas inferiores (Figura 4.9), sendo descrita por modelos com *estruturas imbricadas*[32]. Assim, admitindo que a variabilidade a cada escala é independente das restantes[33], o semivariograma da propriedade pode ser considerado como uma soma de semivariogramas

$$\gamma(h) = \gamma_1(h) + \gamma_2(h) + ... + \gamma_n(h) \tag{4.107}$$

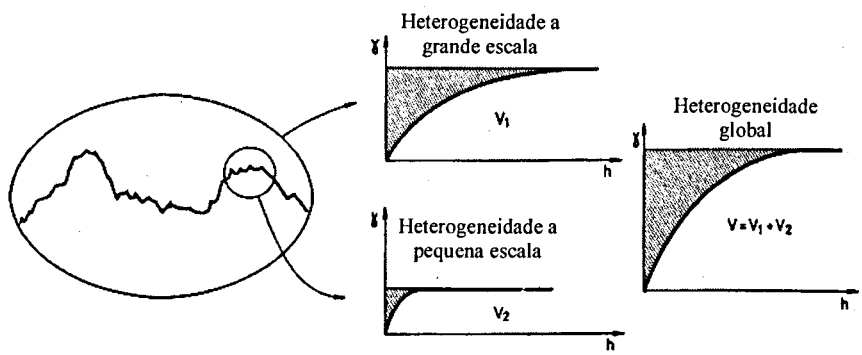



Figura 4.9 – Escalas de heterogeneidade e sobreposição de semivariogramas (extraído e adaptado de Samper e Carrera, 1990).

[32] "Nested structures", na literatura de língua inglesa.
[33] Esta hipótese é exigida pela primeira regra enunciada para a combinação de semivariogramas.

Frequentemente, a variabilidade de uma propriedade a larga escala apresenta uma elevada correlação para valores de $h$ próximos de zero, pelo que o traçado do correspondente semivariograma para valores pequenos de $h$ é condicionado pelo semivariograma das variações a pequena escala . Assim, a sobreposição de semivariogramas permite aumentar o grau de liberdade de ajuste de um modelo teórico a um determinado problema.

### 4.5.2 A anisotropia e o semivariograma

Quando o semivariograma, ou a covariância, depende não só da grandeza mas também da direcção do vector separação está-se na presença de um fenómeno anisotrópico. Para detectar e estudar a presença da anisotropia é necessário calcular o semivariograma experimental em várias direcções, o que exige uma grande quantidade de dados de campo[34]. Nos problemas bidimensionais, como é o caso dos aquíferos regionais, deve-se considerar duas direcções ortogonais entre si e procurar encontrar alguma evidência de que o semivariograma se comporta de forma diferente para cada uma das direcções. Uma outra questão que se coloca é a de perceber qual a orientação correspondente às direcções principais de anisotropia, se esta efectivamente existir. Para a resolver dever-se-á proceder por tentativas.

A anisotropia, se existir, pede ser de dois tipos: geométrica ou zonal. Nas *f.a.*'s estacionárias, a *anisotropia geométrica* caracteriza-se por uma variação do alcance do semivariograma, mantendo-se constante o patamar correspondente à variância (Figura 4.10). Este tipo de anisotropia é definido pela *relação de anisotropia*, que é o quociente entre os alcances mínimo e máximo, e pelas *direcções principais de anisotropia*, correspondentes a estes alcances. A *anisotropia zonal* das *f.a.*'s estacionárias manifesta-se pela variação da grandeza do patamar do semivariograma com a direcção e resulta da existência de uma fonte de variabilidade adicional segundo uma determinada direcção (Figura 4.11). Um caso típico deste tipo de anisotropia é o das formações sedimentares que devido à sua estratificação

[34] Na generalidade dos casos a escassez de dados impede que se retire alguma conclusão sustentável, mesmo para um semivariograma omnidireccional.

horizontal apresentam uma variação da conductividade na direcção horizontal inferior à que se verifica na vertical.

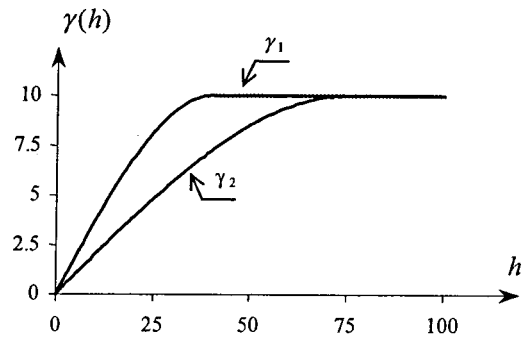



Figura 4.10 – Exemplo de anisotropia geométrica.

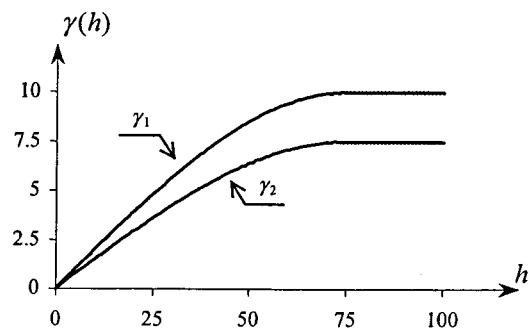



Figura 4.11 – Exemplo de anisotropia zonal.

Finalmente, importa referir que esta matéria deve ser abordada com alguma cautela uma vez que indícios de anisotropia nos semivariogramas experimentais podem, afinal, corresponder à presença de uma variável regionalizada não estacionária ou até mesmo não intrínseca.

### 4.5.3 O semivariograma na proximidade da origem

Outro aspecto importante do semivariograma respeita ao seu traçado nas proximidades da origem pelo que tem de significativo quanto à variabilidade a pequenas distâncias do fenómeno que representa e também pela dificuldade em estimar esse traçado, a partir do semivariograma experimental, para valores de $h$ inferiores à menor distância entre pontos de

medição. Samper e Carrera (1990) apresentam uma descrição detalhada das várias formas que o semivariograma pode ter nas proximidades da origem, e a correspondente interpretação quanto à variabilidade do fenómeno, as quais são aqui relembradas de uma forma sucinta:

a) semivariograma nulo e tangente horizontal, na origem (Figura 4.12): a variável regionalizada tem um comportamento bastante regular, isto é, varia espacialmente com suavidade. A variável é contínua em todos os pontos do domínio e derivável na maioria, pelo que a respectiva representação gráfica não apresenta quebras. Para classificar a suavidade é introduzido o conceito de *ordem* do semivariograma na origem como sendo o número real $\alpha$ tal que

$$\lim_{h\to 0} \frac{\gamma(h)}{h^{\alpha}} = c \tag{4.108}$$

sendo $c$ um número real. Se a tangente na origem for horizontal, $\alpha$ é maior que a unidade. Para o semivariograma gaussiano $\alpha$ é igual a 2 e para os semivariogramas de potência é igual ao expoente $b$. Quanto maior for este expoente mais suave será o comportamento espacial da variável;

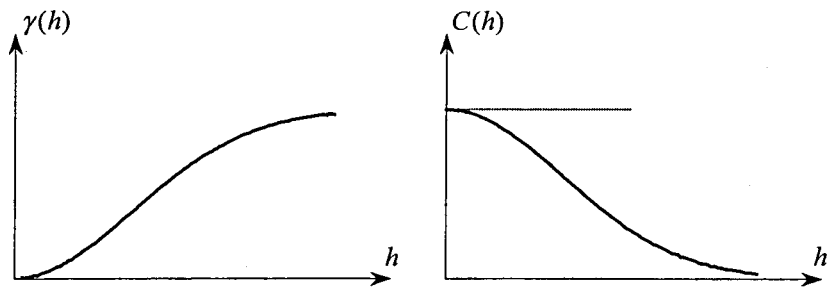



Figura 4.12 – Semivariograma nulo e com tangente horizontal, na origem. Correspondente covariância.

b) semivariograma contínuo e tangente não nula, na origem (Figura 4.13): a ordem do semivariograma na origem é menor ou igual à unidade. O caso mais frequente corresponde a $\alpha$ igual a 1, e diz-se que o semivariograma tem um comportamento linear na origem. É o caso dos modelos esféricos e exponenciais. Também apresentam tangente não nula na origem os semivariogramas de potência com o

expoente menor ou igual à unidade. A tangente não nula indica que a variável regionalizada pode ter descontinuidades e a respectiva representação gráfica apresenta quebras, isto é, a variável não é derivável num número significativo de pontos. As quebras reflectem flutuações a diversas escalas. No caso do comportamento linear na origem, a amplitude das flutuações diminui ao aumentar a frequência, isto é, a amplitude diminui com a redução da distância entre os pontos e, por outro lado, também é proporcional à tangente na origem;

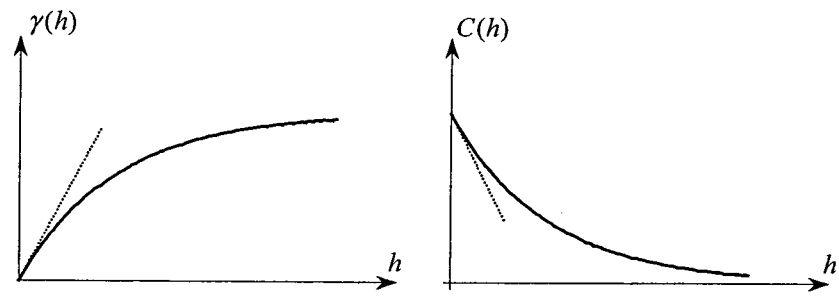



Figura 4.13 – Semivariograma contínuo e tangente não nula, na origem. Correspondente covariância.

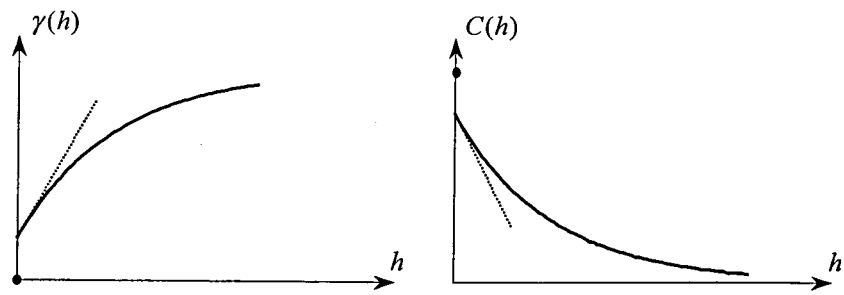



Figura 4.14 – Semivariograma com descontinuidade na origem e tangente não nula. Correspondente covariância

c) descontinuidade na origem, com tangente não nula (Figura 4.14): é uma indicação de um comportamento francamente irregular, ou até mesmo descontínuo, e em que parte da estrutura de correlação espacial se encontra a distâncias inferiores às menores observadas, pelo que não é capturada pelo semivariograma experimental. Outra explicação poderá estar nos erros de medição, sem correlação espacial, e cuja variância corresponde à descontinuidade na origem. O correspondente modelo

teórico pode ser obtido por adição do efeito pepita puro a um outro modelo teórico apresentado;

d) descontinuidade na origem, com tangente nula (efeito pepita puro) (Figura 4.15): é uma indicação de um fenómeno totalmente aleatório, sem nenhuma correlação espacial.

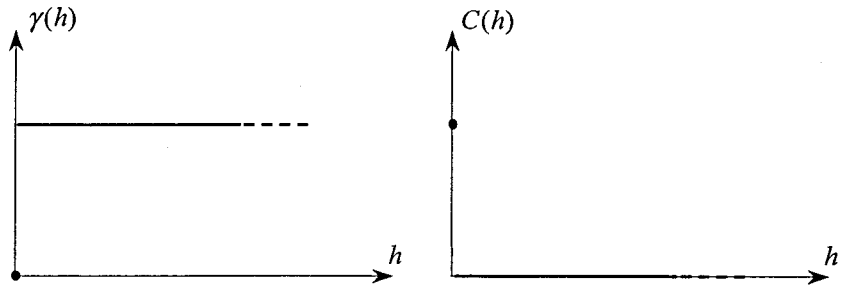



Figura 4.15 – Semivariograma efeito pepita puro. Correspondente covariância.

### 4.5.4 O semivariograma a grandes distâncias

Para além do comportamento em torno da origem, também tem uma importância significativa a análise do traçado do semivariograma para grandes distâncias, o qual permite detectar o tipo de *f.a.* que mais adequadamente pode interpretar o fenómeno em causa. Em particular, permite distinguir as *f.a.*'s estacionárias das intrínsecas. Conforme já se referiu, as primeiras caracterizam-se pela aproximação e estabilização do semivariograma, para grandes distâncias, em torno de um patamar que é a variância da *f.a.* estacionária. A distância a que ocorre essa estabilização é o alcance, o qual define o limite de influência de uma determinada medida de campo uma vez que para distâncias superiores a correlação entre valores da *f.a.* é considerada nula. Novamente segundo Samper e Carrera (1990), nos casos estacionários o referido patamar poderá ser estimado pela média dos quadrados das diferenças das medições de campo em pontos suficientemente afastados. Salientam ainda estes autores que este valor será superior ao da variância da amostra de dados de campo, visto que nesta existem parcelas artificialmente pequenas devido à autocorrelação entre valores da *f.a.* a pequenas distâncias. Por outro lado, o valor do alcance é da ordem de grandeza da frequência das flutuações a

grande escala, o que permite estimá-lo a partir do conhecimento das heterogeneidades a larga escala do fenómeno em causa.

No caso das *f.a.*'s não estacionárias o semivariograma não se estabiliza e tende a crescer indefinidamente com a grandeza do vector separação. O andamento do semivariograma experimental poderá ajudar a seleccionar o modelo teórico mais adequado, tendo presente que este não pode crescer mais depressa que $h^2$, conforme estipula a condição (4.89).

### 4.5.5 Algumas considerações sobre a estimação do semivariograma

Tendo sido apresentado o semivariograma como o mais poderoso instrumento de análise da estrutura probabilística de uma variável regionalizada, definido o semivariograma experimental, referidas as propriedades e os possíveis modelos do semivariograma e analisado o significado do seu traçado, resta colocar a questão fundamental: como estimar o semivariograma de, por exemplo, uma determinada propriedade hidrogeológica, sendo conhecidas algumas medições da mesma num conjunto discreto de pontos do domínio?

A resposta a esta questão é complexa. Tal como já foi referido no início do sub-capítulo 4.4, é possível recorrer a métodos exclusivamente geoestatísticos para estimar o semivariograma mais ajustado ao problema em estudo. Samper e Carrera (1990) dedicam um capítulo completo a esta matéria[35]. Nele são descritas as características e propriedades de alguns dos métodos mais frequentemente utilizados na estimação do semivariograma. Um resumo das linhas de força de alguns desses métodos é aqui apresentado.

O primeiro método, designado por "método dos momentos", baseia-se no cálculo do semivariograma experimental pelo processo já anteriormente descrito. Uma vez que este procedimento apenas estima $\gamma(h)$ para um conjunto discreto de valores de $h$, é necessário encontrar uma função que permita o cálculo do semivariograma para qualquer valor da distância. Para o efeito procura-se ajustar "a sentimento" um dos modelos teóricos

[35] Capítulo 7: "Estimacion del Semivariograma".

conhecidos, o que significa, em primeiro lugar, escolher o tipo de função (esférica, exponencial, potência, etc.), e em segundo lugar, quantificar os parâmetros que a definem. Neste processo é necessário ter em conta algumas considerações qualitativas:

- o modelo ajustado deve reflectir os aspectos principais do semivariograma experimental $\gamma^*(h)$ (anisotropia, variância, etc.);

- o comportamento de $\gamma^*(h)$ a grandes distâncias, conjuntamente com o conhecimento da variância da amostra dos dados de campo, poderá determinar a existência ou não do patamar característico dos fenómenos estacionários. Em caso afirmativo e tendo em conta as considerações aplicáveis produzidas em 4.5.4, o valor da variância da amostra serve de referência, por baixo, para a estimação da ordenada desse patamar;

- o valor do efeito pepita pode ser obtido extrapolando os dois primeiros valores de $\gamma^*(h)$ até se obter a intersecção com o eixo das ordenadas;

- uma melhoria do ajuste da função teórica a $\gamma^*(h)$ pode ser obtida à custa de uma combinação dos modelos conhecidos, por exemplo, a combinação do efeito pepita com um dos outros modelos teóricos;

- o conhecimento físico da propriedade pode também constituir uma contribuição importante para o processo de estimação do semivariograma, em particular nas questões respeitantes ao traçado deste, quer nas proximidades da origem, quer para as grandes distâncias.

Do exposto, resulta evidente tratar-se de um método baseado em algumas considerações de natureza subjectiva e na experiência do hidrogeólogo, o que não permite uma aferição do grau de aproximação da estimação produzida. No entanto, é possível estabelecer um conjunto de critérios estatísticos que classifiquem, em termos relativos, os diversos modelos teóricos no que respeita à bondade dessa estimação. Por outras palavras, é possível determinar se um dado modelo se ajusta melhor ou pior que outro à representação

probabilística de uma determinada propriedade. O modo de efectuar esta análise comparativa é referida adiante.

Outro método de estimação do semivariograma, referido em Samper e Carrera (1990), é o da "máxima verosimilhança"[36]. Neste método, um vector de $N$ variáveis aleatórias $\mathbf{Z}=(Z_1,Z_2,...,Z_N)$ tem uma *fdp* conjunta $f(\mathbf{Z}\,|\,\theta)$ definida por $\theta$, o vector dos $N_p$ parâmetros[37]. A função de verosimilhança de $\theta$ dado o vector $\mathbf{Z}$, $L(\mathbf{Z}\,|\,\theta)$, é proporcional a $f(\mathbf{Z}\,|\,\theta)$. O estimador de máxima verosimilhança, $\hat{\theta}$, do vector $\theta$, é aquele que maximiza a função de verosimilhança, $L(\mathbf{Z}\,|\,\theta)$. Uma vez que o logaritmo desta função é uma função monótona crescente e atinge o máximo quando o mesmo acontece a $L(\mathbf{Z}\,|\,\theta)$, a maximização da função de verosimilhança é equivalente à minimização de

$$MLV=-2\ln L(\mathbf{Z}\,|\,\theta) \tag{4.109}$$

Os parâmetros que definem o modelo de semivariograma são obtidos maximizando a verosimilhança dos valores medidos, ou a verosimilhança dos valores médios das diferenças quadráticas

$$\frac{\sum(Z_i-Z_j)^2}{2N_{ij}} \tag{4.110}$$

sendo $N_{ij}$ o número de pares de dados tais que $|\vec{\mathbf{x}}_i-\vec{\mathbf{x}}_j|<h$, ou ainda a verosimilhança dos erros de validação cruzada. Desta última técnica, igualmente referida por Samper e Carrera (1990) com algum pormenor, é aqui apresentada uma breve resenha.

Tal como estes autores referem, uma das possíveis aplicações do semivariograma é a estimação da distribuição espacial de uma variável regionalizada $Z(\vec{\mathbf{x}})$[38]. Assim sendo, afigura-se lógico desenvolver uma metodologia para a estimação do semivariograma que

---

[36] "Maximum likelihood method", na literatura de língua inglesa. Esta matéria é tratada com bastante detalhe no sexto capítulo, a propósito da estimação por modelação inversa.
[37] Estes parâmetros podem ser, por exemplo, os que definem um determinado modelo de semivariograma.
[38] Esta matéria é apresentada com o devido detalhe nos sub-capítulos seguintes.

assente na ideia de minimizar os erros de estimação de $Z(\vec{\mathbf{x}})$. É neste contexto que surge o método de "validação cruzada", o qual procura avaliar os erros de estimação de $Z(\vec{\mathbf{x}})$. Considere-se, então, uma *f.a.* estacionária de segunda ordem, $Z(\vec{\mathbf{x}})$, com semivariograma $\gamma(\vec{\mathbf{h}})$ e função de covariância $C(\vec{\mathbf{h}})$. Sejam $\{Z_1, Z_2, ..., Z_N\}$ os $N$ valores de $Z(\vec{\mathbf{x}})$ medidos em pontos do domínio. A validação cruzada consiste em suprimir o $i$-ésimo valor medido, $Z_i$, e estimá-lo a partir dos restantes dados. Com o valor assim obtido, $Z_i^*$, calcula-se o *erro de validação* $e_i = Z_i^* - Z_i$. Também é calculada a correspondente variância do erro de estimação, $\sigma_i^2$. Estes procedimentos são repetidos para $M$ pontos, com $M \leq N$.

O método de validação de cruzada é do tipo "tentativa e erro"[39], isto é, ensaiam-se diferentes valores para os parâmetros do modelo teórico seleccionado até que os erros de validação e as respectivas variâncias cumpram os seguintes critérios estatísticos:

- a média dos erros de validação seja próxima de zero;
- minimização do erro reduzido quadrático médio;
- erro quadrático médio adimensional próximo da unidade;
- minimização do valor médio das variâncias de estimação por krigagem;
- valor médio das variâncias de estimação por krigagem igual à variância experimental dos erros de validação;
- ausência de correlação entre os erros de validação e os valores de $Z_i^* - \widetilde{Z}_i$, sendo $\widetilde{Z}_i$ o valor médio de $Z(\vec{\mathbf{x}})$ na vizinhança de $\vec{\mathbf{x}}_i$;
- coeficiente de correlação entre os valores estimados por krigagem e os medidos próximo da unidade;
- os quocientes entre os erros de validação e os respectivos desvios padrão, $e_i/\sigma_i$, devem seguir uma distribuição normal padrão (média nula e variância unitária).

Este método permite testar alguns valores para os parâmetros que definem o semivariograma teórico, mas dificilmente se consegue encontrar o modelo óptimo, não só devido à natureza do método, "tentativa e erro", como também pela dificuldade prática em realizar um grande número de ensaios.

---

[39] "Trial and error", na literatura de língua inglesa.

Uma outra metodologia que supera estas limitações é o método de máxima verosimilhança, desenvolvido por Bastin e Gevers (1985) e por Samper (1986), que estima os parâmetros do modelo teórico de modo a maximizar a verosimilhança dos erros de validação cruzada. É o método de "validação cruzada de máxima verosimilhança". Considere-se, então, o vector dos erros de validação com $M$ componentes, $\mathbf{e} = (e_1, e_2, ..., e_M)$, e a respectiva matriz de covariância, **V**. Supondo que os erros seguem uma distribuição normal, a função de verosimilhança do vector dos parâmetros, $L(\mathbf{e} \mid \theta)$, é expressa por

$$L(\mathbf{e} \mid \theta) = \frac{|\mathbf{V}|^{-1/2}}{(2\pi)^{M/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\mathbf{e}^T \cdot \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{e}\right] \tag{4.111}$$

Tomando o logaritmo de $L(\mathbf{e} \mid \theta)$, dividindo por dois e trocando de sinal obtém-se a função

$$MLV = M \ln(2\pi) + \ln|\mathbf{V}| + \mathbf{e}^T \cdot \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{e} \tag{4.112}$$

Os parâmetros, $\hat{\theta}$, que definem o modelo de semivariograma são obtidos minimizando esta função.

Os métodos acima descritos carecem de um número significativo de dados de campo para produzirem resultados fiáveis. Campanhas de ensaios para a medição, por exemplo, de transmissividades são onerosas, pelo que o número de medições é geralmente muito reduzido. Então, para aumentar a "qualidade" da estimação da distribuição espacial de uma determinada propriedade procura-se correlacionar a propriedade em estudo com outros dados disponíveis, nomeadamente com piezometria, visto que a medição periódica desta é incomparavelmente mais fácil e menos dispendiosa. É precisamente a elaboração desta metodologia o núcleo central do presente trabalho, pelo que este assunto será retomado no sexto capítulo.

## 4.6 Distribuições condicionadas

### 4.6.1 Vectores aleatórios

Voltando à revisão de algumas noções de estatística aplicáveis às matérias em análise, nomeadamente as respeitantes às distribuições condicionadas, retome-se, por simplicidade, o caso do vector aleatório de duas componentes, $\mathbf{Z} = (Z_1, Z_2)$. A respectiva *fdp* condicional $f_{Z_1|Z_2}(z_1|z_2)$, quando multiplicada por $dz_1$, pode ser interpretada como a probabilidade de $Z_1$ tomar um valor no intervalo elementar $]z_1 - dz_1, z_1]$, tendo $z_2$ um determinado valor fixo, e é expressa pelo quociente

$$f_{Z_1|Z_2}(z_1|z_2) = \frac{f_{Z_1Z_2}(z_1, z_2)}{f_{Z_2}(z_2)} \tag{4.113}$$

sendo $f_{Z_2}(z_2)$ a *fdp* marginal de $Z_2$. Generalizando para um vector aleatório de $N$ componentes, tem-se a relação de Bayes

$$f_{Z_1Z_2...Z_M|Z_{M+1}...Z_N}(z_1, z_2, ..., z_M|z_{M+1}, ..., z_N) = \frac{f_{Z_1Z_2...Z_N}(z_1, z_2, ..., z_N)}{f_{Z_{M+1}...Z_N}(z_{M+1}, ..., z_N)} \tag{4.114}$$

onde $f_{Z_1Z_2...Z_M|Z_{M+1}...Z_N}(z_1, z_2, ..., z_M|z_{M+1}, ..., z_N)$ é a *fdp* conjunta das componentes $(Z_1, Z_2, ..., Z_M)$ *condicionada*[40] aos valores fixos das restantes componentes $(Z_{M+1}, ..., Z_N)$ e o denominador é a *fdp* marginal conjunta destas últimas. O momento de primeira ordem (o valor esperado ou média) de uma qualquer das primeiras $M$ componentes, condicionado aos valores das restantes $(Z_{M+1}, ..., Z_N)$ é expresso por

[40] Por este motivo toma a designação abreviada de *fdp* conjunta condicionada.

$$\langle z_i \rangle^{cd} \equiv \langle z_i | z_{M+1}, z_{M+2}, ..., z_N \rangle =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} ... \int_{-\infty}^{+\infty} \tau_i \, f_{Z_1 Z_2 ... Z_M | Z_{M+1} Z_{M+2} ... Z_N}(\tau_1, \tau_2, ..., \tau_M | z_{M+1}, z_{M+2}, ..., z_N) \, d\tau_1 ... d\tau_M = \quad (4.115)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \tau_i \, f_{Z_i | Z_{M+1} Z_{M+2} ... Z_N}(\tau_i | z_{M+1}, z_{M+2}, ..., z_N) \, d\tau_i \quad , \quad \forall i \leq M$$

O momento condicional de segunda ordem entre as componentes $Z_i$ e $Z_j$, isto é, a covariância condicionada entre $Z_i$ e $Z_j$, para $i, j \leq M$, escreve-se

$$C^{cd}_{Z_i Z_j} \equiv C^{cd}(Z_i, Z_j) \equiv \langle z'_i z'_j | z_{M+1}, z_{M+2}, ..., z_N \rangle =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (\tau_i - \langle z_i \rangle^{cd})(\tau_j - \langle z_j \rangle^{cd}) \, f_{Z_i Z_j | Z_{M+1} Z_{M+2} ... Z_M}(\tau_i, \tau_j | \, z_{M+1}, z_{M+2}, ..., z_N) \, d\tau_i \, d\tau_j \quad (4.116)$$

$$\forall i, j \leq M$$

A variância condicionada de uma das componentes, $Z_i$, para $i \leq M$, é um caso particular de (4.116) e toma o aspecto

$$\sigma^{2,cd}_{Z_i} \equiv \langle z'_i z'_i | z_{M+1}, z_{M+2}, ..., z_N \rangle =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} (\tau_i - \langle z_i \rangle^{cd})^2 \, f_{Z_i | Z_{M+1} Z_{M+2} ... Z_N}(\tau_i | z_{M+1}, z_{M+2}, ..., z_N) \, d\tau_i \quad , \quad \forall i \leq M \quad (4.117)$$

### 4.6.2 Vectores aleatórios multivariados normais

No caso dos vectores aleatórios multivariados normais, um qualquer sub-conjunto das respectivas componentes também é multivariado normal[41], pelo que uma qualquer *fdp* conjunta condicionada de um vector aleatório multivariado normal também é multivariada

[41] Alínea d) das propriedades características das *f.a.* multivariadas normais (secção 4.3.4).

normal, podendo ser definida, para as $M \leq N$ componentes, por uma expressão análoga a (4.53), onde os valores esperados e a matriz de covariância são condicionados.

A vantagem de trabalhar com vectores multivariados normais é constatada, uma vez mais, no cálculo dos respectivos momentos de primeira e segunda ordem. De facto, não é necessário recorrer às expressões (4.115), (4.116) e (4.117) acima apresentadas, de difícil utilização em aplicações práticas. Para os vectores aleatórios multivariados normais, estes momentos condicionados são calculados por expressões alternativas de formulação e aplicação substancialmente mais acessíveis[42]. Assim, o momento de primeira ordem de uma qualquer componente $Z_i$, para $i \leq M$, condicionado aos valores de $(Z_{M+1},...,Z_N)$ pode ser calculado pela seguinte expressão

$$\langle z_i \rangle^{cd} \equiv \langle z_i \left| z_{M+1}, z_{M+2}, ..., z_N \right\rangle = \langle z_i \rangle + \sum_{j=M+1}^{N} \lambda_{ij} (z_j - \langle z_j \rangle) \quad , \quad \forall i \leq M \tag{4.118}$$

onde $\langle z_i \rangle$ é o momento de primeira ordem, não condicionado, da componente $Z_i$. Os coeficientes $\lambda_{ij}$ da combinação linear das diferenças entre os valores fixos e os esperados $(z_j - \langle z_j \rangle)$ das componentes $(Z_{+1},...,Z)$ são determinados pelo sistema de equações

$$\sum_{j=M+1}^{N} \lambda_{ij} C(Z_j, Z_k) = C(Z_i, Z_k) \quad , \quad k = M+1,...,N \tag{4.119}$$

onde $C(Z_j, Z_k)$ representa a covariância não condicionada entre duas das componentes fixas, $(Z_{+1},...,Z)$, e $C(Z_i, Z_k)$ a covariância não condicionada entre a componente cujo momento se pretende estimar, $Z_i$, e uma das componentes fixas. O momento de segunda ordem entre $Z_i$ e $Z_j$, para $i, j \leq M$, condicionado aos valores de $(Z_{+1},...,Z)$ é calculado por

---

[42] Dagan (1982a e 1989).

$$C^{cd}_{Z_iZ_j} \equiv C^{cd}(Z_i,Z_j) \equiv \langle z'_i z'_j \big| z_{M+1}, z_{M+2}, ..., z_N \rangle =$$

$$= C(Z_i,Z_j) - \sum_{k=M+1}^{N} \lambda_{ik}\, C(Z_k,Z_j) = \tag{4.120}$$

$$= C(Z_i,Z_j) - \sum_{k=M+1}^{N}\sum_{l=M+1}^{N} \lambda_{ik}\,\lambda_{jl}\, C(Z_l,Z_k) \quad , \quad \forall i,j \le M$$

onde $C(Z_i,Z_j)$ é a covariância não condicionada entre as componentes $Z_i$ e $Z_j$, e $C(Z_l,Z_k)$ representa novamente a covariância não condicionada entre duas das componentes fixas $(Z_{M+1},...,Z_N)$. Os dois conjuntos de coeficientes, $\lambda_{ik}$ e $\lambda_{jl}$, são determinados por dois sistemas de equações análogos a (4.119)[43]

$$\sum_{k=M+1}^{N} \lambda_{ik} C(Z_k,Z_l) = C(Z_i,Z_l) \quad , \quad l = M+1,...,N \tag{4.121}$$

$$\sum_{l=M+1}^{N} \lambda_{jl} C(Z_l,Z_k) = C(Z_j,Z_k) \quad , \quad k = M+1,...,N \tag{4.122}$$

A segunda parcela da expressão final de (4.120) resulta da introdução do primeiro membro de (4.122), atendendo a que $C(Z_k,Z_j) = C(Z_j,Z_k)$. A variância condicional é um caso particular de (4.120) e é dada por

$$\sigma^{2,cd}_{Z_i} \equiv \langle z'_i z'_i \big| z_{M+1}, z_{M+2}, ..., z_N \rangle =$$

$$= \sigma^2_{Z_i} - \sum_{k=M+1}^{N} \lambda_{ik}\, C(Z_k,Z_i) = \tag{4.123}$$

$$= \sigma^2_{Z_i} - \sum_{k=M+1}^{N}\sum_{l=M+1}^{N} \lambda_{ik}\,\lambda_{il}\, C(Z_l,Z_k) \quad , \quad \forall i \le M$$

[43] A matriz do sistema de equações é a mesma. A diferença está no vector dos termos independentes.

sendo $\sigma_{Z_i}^2$ a variância não condicionada de $Z_i$. A variância condicionada é menor ou igual à não condicionada porque a matriz de covariância, não condicionada, tem de ser positiva semidefinida. Esta condição, já anteriormente referida a propósito dos semivariogramas teóricos[44], resulta da obrigatoriedade de que uma variável aleatória, obtida por combinação linear de um qualquer número *n* de componentes de um vector aleatório ou de uma *f.a.*,

$$Y = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i Z_i \qquad \text{ou} \qquad Y = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i Z(\vec{\mathbf{x}}_i) \tag{4.124}$$

tenha uma variância maior ou igual a zero[45]

$$\sigma_Y^2 = \sum_{i}^{n}\sum_{j}^{n} \alpha_i \alpha_j C(Z_i, Z_j) \geq 0 \qquad \text{ou} \qquad \sigma_Y^2 = \sum_{i}^{n}\sum_{j}^{n} \alpha_i \alpha_j C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) \geq 0 \tag{4.125}$$

A variância é, por definição, uma grandeza não negativa, pelo que tem de se verificar a desigualdade (4.125) quaisquer que sejam os *n* coeficientes de combinação $\alpha_i$. Assim, as matrizes de covariância, $C(Z_i, Z_j)$ ou $C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j)$, têm de ser tais que assegurem o cumprimento de (4.125), isto é, têm de ser positivas semidefinidas.

Do exposto resulta claramente que, uma vez determinados os momentos de primeira e segunda ordem condicionados, fica totalmente definida a *fdp* conjunta condicionada das componentes $(Z_1, Z_2, ..., Z_M)$ do vector aleatório, através da expressão (4.53).

### 4.6.3 Funções aleatórias multivariadas normais condicionadas

Retomando novamente o conceito de *f.a.* que a entende como um vector aleatório em que cada uma das componentes corresponde ao valor da função em cada ponto do domínio, os momentos estatísticos condicionados dos vectores aleatórios multivariados normais podem

---

[44] Secção 4.4.3, alínea b) das condições a que devem obedecer os semivariogramas.
[45] Journel (1989).

ser rescritos como função das coordenadas espaciais. Assim, o momento de primeira ordem (o valor esperado ou média) condicionado duma *f.a.* $Z(\vec{\mathbf{x}})$ multivariada normal é expresso por

$$\begin{aligned}\langle z(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle^{cd} &= \langle z(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle + \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\left[z(\vec{\mathbf{x}}_j) - \langle z(\vec{\mathbf{x}}_j)\rangle\right] \\ &= m_Z(\vec{\mathbf{x}}_i) + \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\left[z(\vec{\mathbf{x}}_j) - m_Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega\end{aligned} \tag{4.126}$$

sendo $\vec{\mathbf{x}}_j$ os $n$ pontos onde a *f.a.* tem valores fixos e conhecidos, e $\langle z(\vec{\mathbf{x}})\rangle = m_Z(\vec{\mathbf{x}})$ o valor esperado não condicionado[46] num ponto do domínio. Importa salientar que esta expressão pode ser aplicada a todos os pontos do domínio, inclusive àqueles onde o valor da *f.a.* é fixo. Como se salientará adiante, nestes pontos o valor esperado condicionado coincide com o valor fixo, pelo que (4.126) é considerado um estimador exacto na medida em que respeita os valores conhecidos. Os coeficientes $\lambda_{ij}$ dependem das coordenadas do ponto $\vec{\mathbf{x}}_i$, onde se pretende calcular o valor esperado condicionado, e são determinados pelo sistema de equações

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} C(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j) = C(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_i) \quad , \quad k = 1, \ldots, n \tag{4.127}$$

onde $C(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k)$ representa a covariância não condicionada entre dois pontos onde o valor da *f.a.* é conhecido, $C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_k)$ a covariância não condicionada entre o ponto $\vec{\mathbf{x}}_i$, onde se pretende calcular o valor esperado condicionado, e um dos pontos onde a *f.a.* tem valor conhecido. Este sistema de equações (4.127) também pode ser escrito sob a forma matricial

[46] Se for constante, a *f.a.* é estacionária. Caso contrário, a *f.a.* é não estacionária, isto é, apresenta uma *deriva* ou *tendência* definida pelo momento de primeira ordem não condicionado.

$$\mathbf{C}_{D,D} \cdot \lambda_{(i)} = \mathbf{C}_{i,D}$$

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & . & . & C_{1n} \\ C_{21} & C_{22} & . & . & C_{2n} \\ . & . & & & . \\ . & . & & & . \\ C_{n1} & C_{n2} & . & . & C_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} \lambda_{i1} \\ \lambda_{i2} \\ . \\ . \\ \lambda_{in} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} C_{i1} \\ C_{i2} \\ . \\ . \\ C_{in} \end{Bmatrix} \tag{4.128}$$

assim como a expressão (4.126)

$$\begin{aligned} \langle z(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle^{cd} &= \langle z(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle + \lambda_{(i)}^T \cdot \left[\mathbf{z}(\vec{\mathbf{x}}_D) - \mathbf{m}_Z(\vec{\mathbf{x}}_D)\right] \\ &= \langle z(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle + \mathbf{C}_{i,D}^T \cdot \mathbf{C}_{D,D}^{-1,T} \cdot \left[\mathbf{z}(\vec{\mathbf{x}}_D) - \mathbf{m}_Z(\vec{\mathbf{x}}_D)\right] \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \end{aligned} \tag{4.129}$$

O momento de segunda ordem duma *f.a.* multivariada normal, a covariância entre dois pontos do domínio, $\vec{\mathbf{x}}_i$ e $\vec{\mathbf{x}}_j$, condicionado aos $n$ valores conhecidos escreve-se

$$\begin{aligned} C_{ij}^{cd} \equiv C^{cd}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) &= C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) - \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik} C(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j) = \\ &= C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) - \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} \lambda_{ik} \lambda_{jl} C(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j \in \Omega \end{aligned} \tag{4.130}$$

onde $C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j)$ é a covariância não condicionada entre os dois pontos, $\vec{\mathbf{x}}_i$ e $\vec{\mathbf{x}}_j$, e $C(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k)$ representa a covariância não condicionada entre dois pontos onde os valores da *f.a.* são conhecidos. Os dois conjuntos de coeficientes, $\lambda_{ik}$ e $\lambda_{jl}$, dependem, respectivamente, das coordenadas dos pontos $\vec{\mathbf{x}}_i$ e $\vec{\mathbf{x}}_j$ e são determinados por dois sistemas de equações idênticos a (4.127)

$$\sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik} C(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k) = C(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_i) \quad , \quad l = 1, \ldots, n \tag{4.131}$$

$$\sum_{l=1}^{n} \lambda_{jl} C(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_l) = C(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j) \quad , \quad k = 1, ..., n \tag{4.132}$$

que, escritos sob a forma matricial tomam o aspecto

$$\mathbf{C}_{D,D} \cdot \lambda_{(i)} = \mathbf{C}_{i,D}$$

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & . & . & C_{1n} \\ C_{21} & C_{22} & . & . & C_{2n} \\ . & . & & & . \\ . & . & & & . \\ C_{n1} & C_{n2} & . & . & C_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} \lambda_{i1} \\ \lambda_{i2} \\ . \\ . \\ \lambda_{in} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} C_{i1} \\ C_{i2} \\ . \\ . \\ C_{in} \end{Bmatrix} \tag{4.133}$$

$$\mathbf{C}_{D,D} \cdot \lambda_{(j)} = \mathbf{C}_{j,D}$$

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & . & . & C_{1n} \\ C_{21} & C_{22} & . & . & C_{2n} \\ . & . & & & . \\ . & . & & & . \\ C_{n1} & C_{n2} & . & . & C_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} \lambda_{j1} \\ \lambda_{j2} \\ . \\ . \\ \lambda_{jn} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} C_{j1} \\ C_{j2} \\ . \\ . \\ C_{jn} \end{Bmatrix} \tag{4.134}$$

A expressão que calcula a covariância condicionada, (4.130), também pode ser escrita sob a forma matricial

$$\begin{aligned} C_{ij}^{cd} &= C_{ij} - \lambda_{(i)}^{T} \cdot \mathbf{C}_{D,D} \cdot \lambda_{(j)} \\ &= C_{ij} - \mathbf{C}_{i,D}^{T} \cdot \mathbf{C}_{D,D}^{-1,T} \cdot \mathbf{C}_{j,D} \end{aligned} \tag{4.135}$$

Finalmente, a variância condicional da *f.a.* no ponto de coordenadas $\vec{\mathbf{x}}_i$ é calculada por

$$\sigma^{2,cd}_{(\vec{\mathbf{x}}_i)} = \sigma^2_{(\vec{\mathbf{x}}_i)} - \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik} C(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_i) =$$

$$= \sigma^2_{(\vec{\mathbf{x}}_i)} - \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} \lambda_{ik}\lambda_{il} C(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.136}$$

ou ainda pela expressão matricial

$$\sigma^{2,cd}_{(\vec{\mathbf{x}}_i)} = \sigma^2_{(\vec{\mathbf{x}}_i)} - \lambda^T_{(i)} \cdot \mathbf{C}_{i,D}$$

$$= \sigma^2_{(\vec{\mathbf{x}}_i)} - \mathbf{C}^T_{i,D} \cdot \mathbf{C}^{-1,T}_{D,D} \cdot \mathbf{C}_{i,D} \tag{4.137}$$

Tendo sido apresentadas as expressões que permitem determinar os momentos condicionados de primeira e segunda ordem das *f.a.*'s multivariadas normais, estacionárias ou não, importa sublinhar alguns aspectos relevantes. O primeiro reside no facto de estas expressões só serem válidas para os casos em que o valor esperado e a covariância não condicionais da *f.a.* são conhecidos. O segundo respeita á possibilidade de ser possível caracterizar completamente a *fdp* condicionada, à custa da expressão (4.53), desde que se utilizem nessa expressão os momentos de primeira e segunda ordem condicionados, $\langle z(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$ e $\mathbf{C}^{cd}_{ZZ}$. Assim, enquanto que nas *f.a.*'s multivariadas normais não condicionadas, $\langle z(\vec{\mathbf{x}})\rangle = m(\vec{\mathbf{x}})$ e $\mathbf{C}_{ZZ}$, continham toda a informação estatística, nas condicionadas é necessário acrescentar dados adicionais, os valores que a *f.a.* toma em alguns pontos, para obter a caracterização probabilística completa.

Uma outra reflexão respeita ao facto de os momentos estatísticos das *f.a.*'s que têm vindo a ser referidos respeitarem ao conjunto das infinitas realizações que as *f.a.*'s podem ter. É assim que, por exemplo, o valor esperado de $Z(\vec{\mathbf{x}})$ num determinado ponto do domínio é interpretado como sendo a média dos valores que as infinitas realizações da *f.a.* assumem nesse ponto. Condicionar uma *f.a.*, a um dado conjunto de valores em alguns pontos do domínio, significa seleccionar o sub-conjunto das realizações da *f.a.* que cumprem esses valores nesses pontos. E os momentos estatísticos de uma *f.a.* condicionada respeitam somente a esse sub-conjunto de realizações. Como consequência, e a título exemplificativo, refira-se que uma *f.a.* estacionária multivariada normal, probabilisticamente caracterizada pela

média, $m$, e pela função de covariância[47], $C(h)$, quando condicionada por um dado conjunto de valores deixa de ser estacionária. O valor esperado, ou média, passa a depender do ponto do domínio, $\langle z(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$, e a covariância já não é função do vector separação, $h$, mas do par de pontos envolvidos, $\mathbf{C}_{ZZ}^{cd}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j)$. A variância condicional, também não é constante e passa a ser uma função das coordenadas espaciais.

Finalmente, uma última reflexão sobre momentos condicionados. Observando, por exemplo, a expressão (4.126) que calcula o valor esperado de $Z(\vec{\mathbf{x}})$, constata-se que este momento condicionado depende não só da posição dos pontos onde a *f.a.* tem valores conhecidos como também da grandeza desses valores. O mesmo não acontece com as expressões (4.130) e (4.136) que realizam o cálculo, respectivamente, da covariância e da variância condicionadas, visto que estas só dependem da posição dos referidos pontos. Como consequência, a incerteza duma distribuição condicionada, medida pela variância condicionada, só depende das posições dos pontos de amostragem da *f.a.* e não dos valores que esta toma nesses pontos.

Como se verá adiante, a teoria das probabilidades condicionais desempenha um papel importante na modelação estocástica de escoamentos em meios porosos. Daí que se procure rever esta matéria com algum detalhe, visando particularmente as distribuições multivariadas normais pelas razões já anteriormente referidas. Nos sub-capítulos seguintes são apresentadas, de uma forma sistematizada, as expressões que permitem estimar os momentos condicionados de primeira e de segunda ordem para *f.a.*'s estacionárias e para *f.a.*'s intrínsecas.

### 4.6.4 Estimação de momentos condicionados de funções aleatórias estacionárias multivariadas normais com média conhecida

Como já foi anteriormente referido, um caso com particular interesse é o das *f.a.*'s estacionárias e isotrópicas, caracterizadas pelo valor esperado, $m$, e pela função de covariância, $C(h)$. Por esse motivo, esta secção é dedicada a um resumo das expressões que

[47] Ou em alternativa pelo semivariograma, $\gamma(h)$.

realizam a estimação dos momentos condicionados utilizando a função de covariância, assim como as expressões alternativas resultantes da utilização do semivariograma, $\gamma(h)$.

Valor esperado condicionado

$$\langle z(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle^{cd} = m_Z + \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\left[ z(\vec{\mathbf{x}}_j) - m_Z \right] \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.138}$$

ou, na versão matricial

$$\begin{aligned} \langle z(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle^{cd} &= m_Z + \lambda_{(i)}^{T} \cdot \left[ \mathbf{z}(\vec{\mathbf{x}}_D) - \mathbf{m}_Z \right] \\ &= m_Z + \mathbf{C}_{i,D}^{T} \cdot \mathbf{C}_{D,D}^{-1,T} \cdot \left[ \mathbf{z}(\vec{\mathbf{x}}_D) - \mathbf{m}_Z \right] \end{aligned} \tag{4.139}$$

com os coeficientes $\lambda_{ij}$ definidos pelo sistema de equações

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} C(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k) = C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad k = 1, \ldots, n \tag{4.127}$$

ou, na versão matricial

$$\mathbf{C}_{D,D} \cdot \lambda_{(i)} = \mathbf{C}_{i,D}$$

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & . & . & C_{1n} \\ C_{21} & C_{22} & . & . & C_{2n} \\ . & . & & & . \\ . & . & & & . \\ C_{n1} & C_{n2} & . & . & C_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} \lambda_{i1} \\ \lambda_{i2} \\ . \\ . \\ \lambda_{in} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} C_{i1} \\ C_{i2} \\ . \\ . \\ C_{in} \end{Bmatrix} \tag{4.128}$$

Para utilizar o semivariograma, introduz-se em (4.127) a relação

$$C(h) = \sigma^2 - \gamma(h) \tag{4.140}$$

ficando o sistema de equações

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\left[\sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k)\right] = \sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad k = 1, ..., n \tag{4.141}$$

ou, na versão matricial

$$\mathbf{G}_{D,D} \cdot \lambda_{(i)} = \mathbf{G}_{i,D}$$

$$\begin{bmatrix} \sigma^2 - \gamma_{11} & \sigma^2 - \gamma_{12} & . & . & \sigma^2 - \gamma_{1n} \\ \sigma^2 - \gamma_{21} & \sigma^2 - \gamma_{22} & . & . & \sigma^2 - \gamma_{2n} \\ . & . & & & . \\ . & . & & & . \\ \sigma^2 - \gamma_{n1} & \sigma^2 - \gamma_{n2} & . & . & \sigma^2 - \gamma_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} \lambda_{i1} \\ \lambda_{i2} \\ . \\ . \\ \lambda_{in} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sigma^2 - \gamma_{i1} \\ \sigma^2 - \gamma_{i2} \\ . \\ . \\ \sigma^2 - \gamma_{in} \end{Bmatrix} \tag{4.142}$$

O valor esperado vem

$$\langle z(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle^{cd} = m_Z + \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\left[z(\vec{\mathbf{x}}_j) - m_Z\right] \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.138}$$

ou, na versão matricial

$$\begin{aligned} \langle z(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle^{cd} &= m_Z + \lambda_{(i)}^T \cdot \left[\mathbf{z}(\vec{\mathbf{x}}_D) - \mathbf{m}_Z\right] \\ &= m_Z + \mathbf{G}_{i,D}^T \cdot \mathbf{G}_{D,D}^{-1,T} \cdot \left[\mathbf{z}(\vec{\mathbf{x}}_D) - \mathbf{m}_Z\right] \end{aligned} \tag{4.143}$$

Covariância condicionada

$$\begin{aligned} C_{ij}^{cd} \equiv C^{cd}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) &= C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) - \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik} C(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j) = \\ &= C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) - \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} \lambda_{ik}\lambda_{jl} C(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j \in \Omega \end{aligned} \tag{4.130}$$

ou, na versão matricial

$$\begin{aligned} C_{ij}^{cd} &= C_{ij} - \lambda_{(i)}^{T} \cdot \mathbf{C}_{D,D} \cdot \lambda_{(j)} \\ &= C_{ij} - \mathbf{C}_{i,D}^{T} \cdot \mathbf{C}_{D,D}^{-1,T} \cdot \mathbf{C}_{j,D} \end{aligned} \tag{4.135}$$

com os vectores dos coeficientes, $\lambda_{ik}$ e $\lambda_{jl}$, determinados pelos sistemas de equações

$$\sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik} C(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_l) = C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_l) \quad , \quad l = 1, ..., n \tag{4.131}$$

$$\sum_{l=1}^{n} \lambda_{jl} C(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k) = C(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad k = 1, ..., n \tag{4.132}$$

ou, na versão matricial

$$\mathbf{C}_{D,D} \cdot \lambda_{(i)} = \mathbf{C}_{i,D}$$

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & . & . & C_{1n} \\ C_{21} & C_{22} & . & . & C_{2n} \\ . & . & & & . \\ . & . & & & . \\ C_{n1} & C_{n2} & . & . & C_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} \lambda_{i1} \\ \lambda_{i2} \\ . \\ . \\ \lambda_{in} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} C_{i1} \\ C_{i2} \\ . \\ . \\ C_{in} \end{Bmatrix} \tag{4.133}$$

$$\mathbf{C}_{D,D} \cdot \lambda_{(j)} = \mathbf{C}_{j,D}$$

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & . & . & C_{1n} \\ C_{21} & C_{22} & . & . & C_{2n} \\ . & . & & & . \\ . & . & & & . \\ C_{n1} & C_{n2} & . & . & C_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} \lambda_{j1} \\ \lambda_{j2} \\ . \\ . \\ \lambda_{jn} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} C_{j1} \\ C_{j2} \\ . \\ . \\ C_{jn} \end{Bmatrix} \tag{4.134}$$

Para utilizar o semivariograma, introduz-se em (4.130) a relação (4.140), ficando

$$C_{ij}^{cd} \equiv C^{cd}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j) = \sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j) - \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\lambda_{ik}\lambda_{jl}\left[\sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_l,\vec{\mathbf{x}}_k)\right] \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j \in \Omega \qquad (4.144)$$

ou, na versão matricial

$$\begin{aligned} C_{ij}^{cd} \equiv C^{cd}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j) &= \sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j) - \lambda_{(i)}^{T}\cdot\mathbf{G}_{D,D}\cdot\lambda_{(j)} = \\ &= \sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j) - \mathbf{G}_{i,D}^{T}\cdot\mathbf{G}_{D,D}^{-1,T}\cdot\mathbf{G}_{j,D} \end{aligned} \qquad (4.145)$$

com os sistemas de equações que determinam os vectores dos coeficientes $\lambda_{ik}$ e $\lambda_{jl}$

$$\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}\left[\sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_l)\right] = \sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l) \quad , \quad l = 1,\ldots,n \qquad (4.146)$$

$$\sum_{l=1}^{n}\lambda_{jl}\left[\sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_l,\vec{\mathbf{x}}_k)\right] = \sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad k = 1,\ldots,n \qquad (4.147)$$

ou, na versão matricial

$$\mathbf{G}_{D,D}\cdot\lambda_{(i)} = \mathbf{G}_{i,D}$$

$$\begin{bmatrix} \sigma^2-\gamma_{11} & \sigma^2-\gamma_{12} & . & . & \sigma^2-\gamma_{1n} \\ \sigma^2-\gamma_{21} & \sigma^2-\gamma_{22} & . & . & \sigma^2-\gamma_{2n} \\ . & . & & & . \\ . & . & & & . \\ \sigma^2-\gamma_{n1} & \sigma^2-\gamma_{n2} & . & . & \sigma^2-\gamma_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} \lambda_{i1} \\ \lambda_{i2} \\ . \\ . \\ \lambda_{in} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sigma^2-\gamma_{i1} \\ \sigma^2-\gamma_{i2} \\ . \\ . \\ \sigma^2-\gamma_{in} \end{Bmatrix} \qquad (4.148)$$

$$\mathbf{G}_{D,D}\cdot\lambda_{(\ )} = \mathbf{G}_{\ ,D}$$

$$\begin{bmatrix} \sigma^2-\gamma_{11} & \sigma^2-\gamma_{12} & . & . & \sigma^2-\gamma_{1n} \\ \sigma^2-\gamma_{21} & \sigma^2-\gamma_{22} & . & . & \sigma^2-\gamma_{2n} \\ . & . & & & . \\ . & . & & & . \\ \sigma^2-\gamma_{n1} & \sigma^2-\gamma_{n2} & . & . & \sigma^2-\gamma_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} \lambda_{\ 1} \\ \lambda_{\ 2} \\ . \\ . \\ \lambda_{n} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sigma^2-\gamma_{\ 1} \\ \sigma^2-\gamma_{\ 2} \\ . \\ . \\ \sigma^2-\gamma_{n} \end{Bmatrix} \qquad (4.149)$$

Variância condicionada

$$\sigma^{2,}_{(\vec{\mathbf{x}}_i)} = \sigma^2 - \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik} C(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_i) =$$

$$= \sigma^2 - \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} \lambda_{ik}\lambda_{il} C(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.150}$$

ou, na versão matricial

$$\sigma^{2,cd}_{(\vec{\mathbf{x}}_i)} = \sigma^2 - \lambda^T_{(i)} \cdot \mathbf{C}_{i,D}$$

$$= \sigma^2 - \mathbf{C}^T_{i,D} \cdot \mathbf{C}^{-1,T}_{D,D} \cdot \mathbf{C}_{i,D} \tag{4.151}$$

com o vector dos coeficientes $\lambda_{ik}$ determinado por (4.131) ou (4.133). Para utilizar o semivariograma introduz-se em (4.150) a relação (4.140), ficando

$$\sigma^{2,cd}_i \equiv \sigma^{2,cd}_{(\vec{\mathbf{x}}_i)} = \sigma^2 - \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} \lambda_{ik}\lambda_{il}\left[\sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k)\right] \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.152}$$

ou, na versão matricial

$$\sigma^{2,cd}_i \equiv \sigma^{2,cd}_{(\vec{\mathbf{x}}_i)} = \sigma^2 - \lambda^T_{(i)} \cdot \mathrm{G}_{D,D} \cdot \lambda_{(i)} =$$

$$= \sigma^2 - \mathbf{G}^T_{i,D} \cdot \mathbf{G}^{-1,T}_{D,D} \cdot \mathbf{G}_{i,D} \tag{4.153}$$

O sistema de equações para a determinação dos vectores dos coeficientes é o representado pelas expressões (4.146) ou (4.148).

### 4.6.5 Estimação de momentos condicionados de funções aleatórias intrínsecas multivariadas normais

Nas secções precedentes foram analisadas as *f.a.*'s multivariadas normais, em particular quando condicionadas ao conhecimento de alguns valores em determinados pontos do domínio. Foi referido que a *fdp* conjunta condicionada ainda é multivariada normal e também foram apresentadas as expressões que permitem o cálculo dos momentos condicionados de primeira e segunda ordem quando a *f.a.* é estacionária e tem o valor esperado não condicionado conhecido. Nesta secção são apresentadas as correspondentes expressões para as *f.a.*'s intrínsecas, numa abordagem idêntica à que se encontra em Dagan (1982a e 1989). Este autor rescreve o sistema de equações que permite a determinação dos coeficientes $\lambda_{ij}$ à custa do semivariograma, tal como se fez na secção anterior

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} \left[ \sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k) \right] = \sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad k = 1, ..., n \tag{4.141}$$

o qual, após um pequeno arranjo, toma o aspecto

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} \gamma(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k) = \gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_k) - \sigma^2 \left( 1 - \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} \right) \quad , \quad k = 1, ..., n \tag{4.154}$$

ou ainda

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} \gamma(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k) = \gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_k) - \mu_i \quad , \quad k = 1, ..., n \tag{4.155}$$

se se introduzir mais uma incógnita, $\mu_i$, definida por

$$\mu_i = \sigma^2 \left( 1 - \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} \right) \tag{4.156}$$

O campo de aplicação destas expressões pode ser expandido às *f.a.*'s intrínsecas, admitindo que a variância tende para infinito ($\sigma^2 \to \infty$) em (4.154). Para $\mu_i$ permanecer uma grandeza finita é necessário que

$$1 - \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} = 0 \tag{4.157}$$

Desde modo obtém-se um sistema de $n+1$ equações, para as $n+1$ incógnitas, $\lambda_{ij}$ e $\mu_i$

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} \gamma(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k) + \mu_i = \gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad k = 1, ..., n \\ \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} = 1 \end{cases} \tag{4.158}$$

cuja apresentação matricial é a seguinte

$$\begin{bmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & . & . & \gamma_{1n} & 1 \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & . & . & \gamma_{2n} & 1 \\ . & . & & & . & . \\ . & . & & & . & . \\ \gamma_{n1} & \gamma_{n2} & . & . & \gamma_{nn} & 1 \\ 1 & 1 & . & . & 1 & 0 \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} \lambda_{i1} \\ \lambda_{i2} \\ . \\ . \\ \lambda_{in} \\ \mu_i \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \gamma_{i1} \\ \gamma_{i2} \\ . \\ . \\ \gamma_{in} \\ 1 \end{Bmatrix} \tag{4.159}$$

O valor esperado condicionado é obtido a partir da expressão (4.126)

$$\begin{aligned} \langle z(\vec{\mathbf{x}}_i) \rangle^{cd} &= \langle z(\vec{\mathbf{x}}_i) \rangle + \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} \left[ z(\vec{\mathbf{x}}_j) - \langle z(\vec{\mathbf{x}}_j) \rangle \right] \\ &= m_Z(\vec{\mathbf{x}}_i) + \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} \left[ z(\vec{\mathbf{x}}_j) - m_Z(\vec{\mathbf{x}}_j) \right] \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \end{aligned} \tag{4.126}$$

submetida a um pequeno arranjo

$$\langle z(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle^{cd} = \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\, z(\vec{\mathbf{x}}_j) + m_Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\left(1 - \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\right) \tag{4.160}$$

que permite a simplificação resultante da introdução de (4.157)

$$\langle z(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle^{cd} = \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\, z(\vec{\mathbf{x}}_j) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.161}$$

Esta formulação realiza a estimação do valor esperado condicionado sem o conhecimento do valor esperado não condicionado, seja este constante ou não. Repetindo os procedimentos acima descritos para os sistemas de equações que determinam os coeficientes $\lambda_{ik}$ e $\lambda_{jl}$ obtém-se

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_l) + \mu_i = \gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_l) \quad , \quad l = 1,\ldots,n \\ \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik} = 1 \end{cases} \tag{4.162}$$

e

$$\begin{cases} \sum_{l=1}^{n} \lambda_{jl}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k) + \mu_j = \gamma(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad k = 1,\ldots,n \\ \sum_{l=1}^{n} \lambda_{jl} = 1 \end{cases} \tag{4.163}$$

que permitem calcular a covariância condicionada

$$\begin{aligned} C_{ij}^{cd} \equiv C^{cd}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) &= -\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) + \mu_i + \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j) = \\ &= -\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) + \mu_i + \mu_j + \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} \lambda_{ik}\lambda_{jl}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j \in \Omega \end{aligned} \tag{4.164}$$

e a variância condicionada

$$\sigma_i^{2,cd} = C^{cd}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_i) = \mu_i + \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik}(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_i) =$$

$$= 2\mu_i + \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} \lambda_{ik}\lambda_{il}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.165}$$

A expressão (4.164) é obtida a partir de (4.130), onde é introduzida a relação (4.140)

$$C_{ij}^{cd} \equiv C^{cd}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) = C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) - \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik} C(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j) =$$

$$= \sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) - \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik}\left[\sigma^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j)\right] =$$

$$= -\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) + \sigma^2\left(1 - \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik}\right) + \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j) = \tag{4.166}$$

$$= -\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) + \mu_i + \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j)$$

Na última linha de (4.166) observa-se a presença de $\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j)$ que pode ser substituído pela primeira expressão de (4.163), tendo em conta a simetria do semivariograma $\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j) = \gamma(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k)$

$$C_{ij}^{cd} \equiv C^{cd}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) = -\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) + \mu_i + \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j) =$$

$$= -\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) + \mu_i + \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik}\left[\sum_{l=1}^{n} \lambda_{jl}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k) + \mu_j\right] =$$

$$= -\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) + \mu_i + \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik}\mu_j + \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik}\sum_{l=1}^{n} \lambda_{jl}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k) = \tag{4.167}$$

$$= -\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) + \mu_i + \mu_j + \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} \lambda_{ik}\lambda_{jl}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_k)$$

Constata-se novamente que os momentos de segunda ordem condicionados não dependem dos valores conhecidos da *f.a.*, mas apenas da localização espacial desses valores. Das equações apresentadas nesta secção retira-se que a caracterização probabilística duma *f.a.* intrínseca é realizada à custa do semivariograma e de um determinado conjunto de valores conhecidos e espacialmente localizados. Toda esta formulação pode ser aplicada a uma *f.a.* estacionária, em particular quando não é conhecido o valor esperado não condicionado. Apenas tem como consequência o aumento das covariância e variância condicionadas, resultante de não ser utilizado o valor esperado não condicionado, por desconhecimento da sua grandeza ou por mera opção. Esta questão será retomada com maior detalhe no sub-capítulo seguinte, onde se fará a quantificação deste agravamento.

### 4.6.6 Distribuições condicionadas de funções aleatórias multivariadas normais correlacionadas

Quando, nas secções 4.6.1 e 4.6.2, se introduziram os momentos condicionados dos vectores aleatórios não se colocou nenhuma reserva quanto à natureza ou significado de cada uma das componentes do vector aleatório. Ao transpor as expressões apresentadas em 4.6.2 para as *f.a.*'s multivariadas normais admitiu-se que todas as componentes do vector aleatório correspondiam aos valores de uma só *f.a.* nos diferentes pontos do domínio desta. Mas não há nada que impeça que as componentes do vector aleatório sejam divididas em sub-conjuntos, correspondendo cada um destes aos valores que distintas *f.a.*'s tomam nos diferentes pontos de um domínio comum a todas as *f.a.*'s. Exemplificando para duas *f.a.*'s, $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $H(\vec{\mathbf{y}})$, escreve-se

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} &= (Z_1, Z_2, ..., Z_N) = (Y_1, Y_2, ..., Y_{N_Y}; H_1, H_2, ..., H_{N_H}) \equiv \\ &\equiv \left\{ Y(\vec{\mathbf{x}}_1), Y(\vec{\mathbf{x}}_2), ..., Y(\vec{\mathbf{x}}_{N_Y}); H(\vec{\mathbf{y}}_1), H(\vec{\mathbf{y}}_2), ..., Y(\vec{\mathbf{y}}_{N_H}) \right\} \end{aligned} \tag{4.168}$$

sendo $N = N_Y + N_H$. Os pontos do domínio, $\vec{\mathbf{x}}_i$ e $\vec{\mathbf{y}}_j$, onde são definidas as *f.a.*'s, podem ser total ou parcialmente coincidentes ou completamente distintos. Assumindo que as duas *f.a.*'s são multivariadas normais, assim como a respectiva reunião, as expressões dos momentos

condicionados apresentadas na secção 4.6.3 são rescritas de modo a reflectirem a distinção entre as *f.a.*'s presentes em (4.168). Assim, o momento de primeira ordem de $Y(\vec{\mathbf{x}})$, num ponto qualquer $\vec{\mathbf{x}}_a$, condicionado simultaneamente aos $n_Y$ valores conhecidos de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e aos $n_H$ valores conhecidos de $H(\vec{\mathbf{x}})$ escreve-se

$$\begin{aligned}\langle Y(\vec{\mathbf{x}}_a)\rangle^{ccd} &= \langle Y(\vec{\mathbf{x}}_a)\rangle + \sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}\left[Y(\vec{\mathbf{x}}_i)-\langle Y(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle\right]+\sum_{j=1}^{n_H}\mu_{aj}\left[H(\vec{\mathbf{x}}_j)-\langle H(\vec{\mathbf{x}}_j)\rangle\right]= \\ &= m_Y(\vec{\mathbf{x}}_a)+\sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}\left[Y(\vec{\mathbf{x}}_i)-m_Y(\vec{\mathbf{x}}_i)\right]+\sum_{j=1}^{n_H}\mu_{aj}\left[H(\vec{\mathbf{x}}_j)-m_H(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \\ &\forall\vec{\mathbf{x}}_a\in\Omega\end{aligned} \tag{4.169}$$

sendo $\vec{\mathbf{x}}$ os $n_Y$ pontos onde $Y(\vec{\mathbf{x}})$ é conhecida, $\vec{\mathbf{x}}_j$ os $n_H$ pontos onde $H(\vec{\mathbf{x}})$ é conhecida e $\langle Y(\vec{\mathbf{x}})\rangle = m_Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $\langle H(\vec{\mathbf{x}})\rangle = m\ (\vec{\mathbf{x}})$ os valores esperados não condicionados de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $H(\vec{\mathbf{x}})$. Importa salientar que os pontos onde as duas *f.a.*'s são conhecidas podem ser total ou parcialmente coincidentes ou ainda completamente distintos. Os coeficientes ficam agrupados em dois sub-conjuntos, $\{\lambda_{ai}\}$ e $\{\mu_{aj}\}$, a determinar pelo sistema de equações construído com base nas covariâncias não condicionadas

$$\begin{cases}\displaystyle\sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_i)+\sum_{j=1}^{n_H}\mu_{aj}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_j)=C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_a) \quad , \quad k=1,\ldots,n_Y \\ \\ \displaystyle\sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_l,\vec{\mathbf{x}}_i)+\sum_{j=1}^{n_H}\mu_{aj}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_l,\vec{\mathbf{x}}_j)=C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_l,\vec{\mathbf{x}}_a) \quad , \quad l=1,\ldots,n_H\end{cases} \tag{4.170}$$

cuja representação matricial é

$$\left[\begin{array}{ccc:ccc} C_{Y_1Y_1} & \cdot & C_{Y_1Y_{nY}} & C_{Y_1H_1} & \cdot & C_{Y_1H_{nH}} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ C_{Y_{nY}Y_1} & \cdot & C_{Y_{nY}Y_{nY}} & C_{Y_{nY}H_1} & \cdot & C_{Y_{nY}H_{nH}} \\ \hdashline C_{H_1Y_1} & \cdot & C_{H_1Y_{nY}} & C_{H_1H_1} & \cdot & C_{H_1H_{nH}} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ C_{H_{nH}Y_1} & \cdot & C_{H_{nH}Y_{nY}} & C_{H_{nH}H_1} & \cdot & C_{H_{nH}H_{nH}} \end{array}\right] \times \left\{\begin{array}{c} \lambda_{a1} \\ \cdot \\ \lambda_{anY} \\ \hdashline \mu_{a1} \\ \cdot \\ \mu_{anH} \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{c} C_{Y_1Y_a} \\ \cdot \\ C_{Y_{nY}Y_a} \\ \hdashline C_{H_1Y_a} \\ \cdot \\ C_{H_{nH}Y_a} \end{array}\right\} \quad (4.171)$$

ou ainda de uma forma mais compacta

$$\left[\begin{array}{c:c} \mathbf{C}_{Y_DY_D} & \mathbf{C}_{Y_DH_D} \\ \hdashline \mathbf{C}_{H_DY_D} & \mathbf{C}_{H_DH_D} \end{array}\right] \times \left\{\begin{array}{c} \lambda_{(a)} \\ \hdashline \mu_{(a)} \end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{c} \mathbf{C}_{Y_DY_a} \\ \hdashline \mathbf{C}_{H_DY_a} \end{array}\right\} \quad (4.172)$$

Do ponto de vista prático, a utilização destas expressões não implica um acréscimo de dificuldade significativo relativamente àquelas anteriormente apresentadas para as distribuições condicionadas de uma única *f.a.*, desde que sejam conhecidas as covariâncias cruzadas entre as duas *f.a.*'s[48]

$$C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) \equiv C(Y(\vec{\mathbf{x}}_i), H(\vec{\mathbf{x}}_j)) = E\left[\left(Y(\vec{\mathbf{x}}_i) - m_Y(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)\left(H(\vec{\mathbf{x}}_j) - m_H(\vec{\mathbf{x}}_j)\right)\right] =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} (\tau_i - m_Y(\vec{\mathbf{x}}_i))(\tau_j - m_H(\vec{\mathbf{x}}_j))\, f_{Y(\vec{\mathbf{x}}_i)H(\vec{\mathbf{x}}_j)}(\tau_i, \tau_j)\, d\tau_i\, d\tau_j \quad (4.173)$$

$$\forall \vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j \in \Omega$$

com $m_Y(\vec{\mathbf{x}}_i) \equiv \langle Y(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle$ e $m_H(\vec{\mathbf{x}}_j) \equiv \langle H(\vec{\mathbf{x}}_j)\rangle$. Supondo que as duas *f.a.*'s aqui utilizadas a título exemplificativo, $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $H(\vec{\mathbf{x}})$, representam, respectivamente, a transformada logarítmica da transmissividade e a cota piezométrica, o grande desafio está na quantificação das covariâncias não condicionadas de cada uma das *f.a.*'s e ainda da covariância cruzada não condicionada entre estas. Como se verá adiante, este é precisamente um dos objectivos da metodologia conhecida por *modelação inversa* que constitui o tema central deste trabalho.

[48] Tanto esta observação como as expressões apresentadas nesta secção são generalizáveis para qualquer número de *f.a.*'s correlacionadas.

O momento de segunda ordem de $Y(\vec{\mathbf{x}})$, a covariância entre dois pontos do domínio, $\vec{\mathbf{x}}_a$ e $\vec{\mathbf{x}}_b$, condicionada simultaneamente aos $n_Y$ valores conhecidos de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e aos $n_H$ valores conhecidos de $H(\vec{\mathbf{x}})$ exprime-se

$$\begin{aligned} C_{YY}^{ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b) &= C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b) - \sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_b) - \sum_{j=1}^{n_H}\mu_{aj}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_b) = \\ &= C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b) - \lambda_{(a)}^T\cdot\mathbf{C}_{Y_DY_b} - \mu_{(a)}^T\cdot\mathbf{C}_{H_DY_b} \quad , \quad \forall\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b\in\Omega \end{aligned} \tag{4.174}$$

com os coeficientes $\lambda_{ai}$ e $\mu_{aj}$ determinados pelo sistema de equações (4.170). Escrevendo o sistema de equações para $\vec{\mathbf{x}}$

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{bk}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k) + \sum_{l=1}^{n_H}\mu_{bl}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l) = C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_b) \quad , \quad i=1,...,n_Y \\ \sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{bk}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k) + \sum_{l=1}^{n_H}\mu_{bl}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l) = C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_b) \quad , \quad j=1,...,n_H \end{cases} \tag{4.175}$$

e introduzindo estas igualdades em (4.174) obtém-se, após adequada simplificação

$$\begin{aligned} C_{YY}^{ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b) = C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b) &- \sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{ai}\lambda_{bk}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k) - \sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{l=1}^{n_H}\lambda_{ai}\mu_{bl}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l) - \\ &- \sum_{j=1}^{n_H}\sum_{k=1}^{n_Y}\mu_{aj}\lambda_{bk}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k) - \sum_{j=1}^{n_H}\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{aj}\mu_{bl}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l) \\ &\forall\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b\in\Omega \end{aligned} \tag{4.176}$$

ou ainda, sob a forma matricial

$$\begin{aligned} C_{YY}^{ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b) = C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b) &- \lambda_{(a)}^T\cdot\mathbf{C}_{Y_DY_D}\cdot\lambda_{(b)} - \lambda_{(a)}^T\cdot\mathbf{C}_{Y_DH_D}\cdot\mu_{(b)} - \\ &- \mu_{(a)}^T\cdot\mathbf{C}_{H_DY_D}\cdot\lambda_{(b)} - \mu_{(a)}^T\cdot\mathbf{C}_{H_DH_D}\cdot\mu_{(b)} \end{aligned} \tag{4.177}$$

A variância condicionada de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ no ponto de coordenadas $\vec{\mathbf{x}}_a$ é um caso particular de (4.176) ou (4.177) e é calculada por

$$\sigma_Y^{2,ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a) = \sigma_Y^2(\vec{\mathbf{x}}_a) - \sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{ai}\lambda_{ak}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k) - 2\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{l=1}^{n_H}\lambda_{ai}\mu_{al}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l) - \\ - \sum_{j=1}^{n_H}\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{aj}\mu_{al}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l) \quad , \quad \forall\vec{\mathbf{x}}_a \in \Omega \tag{4.178}$$

ou na forma matricial

$$\sigma_Y^{2,ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a) = \sigma_Y^2(\vec{\mathbf{x}}_a) - \lambda_{(a)}^T \cdot \mathbf{C}_{Y_D Y_D} \cdot \lambda_{(a)} - 2\,\lambda_{(a)}^T \cdot \mathbf{C}_{Y_D H_D} \cdot \mu_{(a)} - \\ - \mu_{(a)}^T \cdot \mathbf{C}_{H_D H_D} \cdot \mu_{(a)} \tag{4.179}$$

Relativamente ao exposto sublinhe-se que também é possível desenvolver idêntica abordagem para a dedução dos momentos condicionados de primeira e segunda ordem de $H(\vec{\mathbf{x}})$ e das covariâncias cruzadas condicionadas. Assim, o momento de primeira ordem de $H(\vec{\mathbf{x}})$, num ponto qualquer $\vec{\mathbf{x}}_a$, condicionado simultaneamente aos $n_Y$ valores conhecidos de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e aos $n_H$ valores conhecidos de $H(\vec{\mathbf{x}})$ escreve-se

$$\langle H(\vec{\mathbf{x}}_a)\rangle^{ccd} = \langle H(\vec{\mathbf{x}}_a)\rangle + \sum_{i=1}^{n_Y}\alpha_{ai}\left[Y(\vec{\mathbf{x}}_i) - \langle Y(\vec{\mathbf{x}}_i)\rangle\right] + \sum_{j=1}^{n_H}\beta_{aj}\left[H(\vec{\mathbf{x}}_j) - \langle H(\vec{\mathbf{x}}_j)\rangle\right] = \\ = m_H(\vec{\mathbf{x}}_a) + \sum_{i=1}^{n_Y}\alpha_{ai}\left[Y(\vec{\mathbf{x}}_i) - m_Y(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] + \sum_{j=1}^{n_H}\beta_{aj}\left[H(\vec{\mathbf{x}}_j) - m_H(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \tag{4.180}$$

$$\forall\vec{\mathbf{x}}_a \in \Omega$$

com os coeficientes $\alpha_{ai}$ e $\beta_{aj}$ determinados pelo sistema de equações

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n_Y} \alpha_{ai} C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_i) + \sum_{j=1}^{n_H} \beta_{aj} C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j) = C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_a) \quad , \quad k = 1, ..., n_Y \\ \\ \sum_{i=1}^{n_Y} \alpha_{ai} C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_i) + \sum_{j=1}^{n_H} \beta_{aj} C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_j) = C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_l, \vec{\mathbf{x}}_a) \quad , \quad l = 1, ..., n_H \end{cases} \tag{4.181}$$

cuja representação matricial compacta é a seguinte

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C}_{Y_D Y_D} & \vdots & \mathbf{C}_{Y_D H_D} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{C}_{H_D Y_D} & \vdots & \mathbf{C}_{H_D H_D} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} \alpha_{(a)} \\ \cdots \\ \beta_{(a)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{C}_{Y_D H_a} \\ \cdots \\ \mathbf{C}_{H_D H_a} \end{Bmatrix} \tag{4.182}$$

O momento de segunda ordem de $H(\vec{\mathbf{x}})$, a covariância entre dois pontos do domínio $\vec{\mathbf{x}}_a$ e $\vec{\mathbf{x}}$, condicionada simultaneamente aos $n_Y$ valores conhecidos de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e aos $n_H$ valores conhecidos de $H(\vec{\mathbf{x}})$ escreve-se

$$\begin{aligned} C_{HH}^{ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a, \vec{\mathbf{x}}_b) &= C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_a, \vec{\mathbf{x}}_b) - \sum_{i=1}^{n_Y} \alpha_{ai} C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_b) - \sum_{j=1}^{n_H} \beta_{aj} C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_b) = \\ &= C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_a, \vec{\mathbf{x}}_b) - \alpha_{(a)}^T \cdot \mathbf{C}_{Y_D H_b} - \beta_{(a)}^T \cdot \mathbf{C}_{H_D H_b} \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_a, \vec{\mathbf{x}}_b \in \Omega \end{aligned} \tag{4.183}$$

Rescrevendo o sistema de equações (4.181) para $\vec{\mathbf{x}}_b$

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^{n_Y} \alpha_{bk} C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_k) + \sum_{l=1}^{n_H} \beta_{bl} C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_l) = C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_b) \quad , \quad i = 1, ..., n_Y \\ \\ \sum_{k=1}^{n_Y} \alpha_{bk} C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k) + \sum_{l=1}^{n_H} \beta_{bl} C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_l) = C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_b) \quad , \quad j = 1, ..., n_H \end{cases} \tag{4.184}$$

e introduzindo estas igualdades em (4.183) obtém-se, após adequada simplificação

$$C_{HH}^{ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)-\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{k=1}^{n_Y}\alpha_{ai}\alpha_{bk}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k)-\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{l=1}^{n_H}\alpha_{ai}\beta_{bl}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l)-$$

$$-\sum_{j=1}^{n_H}\sum_{k=1}^{n_Y}\beta_{aj}\alpha_{bk}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k)-\sum_{j=1}^{n_H}\sum_{l=1}^{n_H}\beta_{aj}\beta_{bl}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l) \qquad (4.185)$$

$$\forall\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b\in\Omega$$

ou ainda, sob a forma matricial

$$C_{HH}^{ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)-\alpha_{(a)}^T\cdot\mathbf{C}_{Y_DY_D}\cdot\alpha_{(b)}-\alpha_{(a)}^T\cdot\mathbf{C}_{Y_DH_D}\cdot\beta_{(b)}-$$

$$-\beta_{(a)}^T\cdot\mathbf{C}_{H_DY_D}\cdot\alpha_{(b)}-\beta_{(a)}^T\cdot\mathbf{C}_{H_DH_D}\cdot\beta_{(b)} \qquad (4.186)$$

A variância condicionada de $H(\vec{\mathbf{x}})$ no ponto de coordenadas $\vec{\mathbf{x}}_a$ é um caso particular de (4.185) ou (4.186) e é calculada por

$$\sigma_H^{2,ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a)=\sigma_H^2(\vec{\mathbf{x}}_a)-\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{k=1}^{n_Y}\alpha_{ai}\alpha_{ak}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k)-2\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{l=1}^{n_H}\alpha_{ai}\beta_{al}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l)-$$

$$-\sum_{j=1}^{n_H}\sum_{l=1}^{n_H}\beta_{aj}\beta_{al}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l)\quad,\quad\forall\vec{\mathbf{x}}_a\in\Omega \qquad (4.187)$$

ou na forma matricial

$$\sigma_H^{2,ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a)=\sigma_H^2(\vec{\mathbf{x}}_a)-\alpha_{(a)}^T\cdot\mathbf{C}_{Y_DY_D}\cdot\alpha_{(a)}-2\alpha_{(a)}^T\cdot\mathbf{C}_{Y_DH_D}\cdot\beta_{(a)}-$$

$$-\beta_{(a)}^T\cdot\mathbf{C}_{H_DH_D}\cdot\beta_{(a)} \qquad (4.188)$$

Finalmente, resta apresentar a covariância cruzada condicionada aos valores conhecidos das duas *f.a.*'s

$$C_{YH}^{ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)-\sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_b)-\sum_{j=1}^{n_H}\mu_{aj}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_b)=$$

$$=C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)-\lambda_{(a)}^{T}\cdot\mathbf{C}_{Y_DH_b}-\mu_{(a)}^{T}\cdot\mathbf{C}_{H_DH_b}\quad,\quad\forall\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b\in\Omega \tag{4.189}$$

que pode ser rescrita após a introdução das igualdades presentes no sistema de equações (4.184)

$$C_{YH}^{ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)-\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{ai}\alpha_{bk}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k)-\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{l=1}^{n_H}\lambda_{ai}\beta_{bl}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l)-$$

$$-\sum_{j=1}^{n_H}\sum_{k=1}^{n_Y}\mu_{aj}\alpha_{bk}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k)-\sum_{j=1}^{n_H}\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{aj}\beta_{bl}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l) \tag{4.190}$$

$$\forall\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b\in\Omega$$

ou ainda, sob a forma matricial

$$C_{YH}^{ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)-\lambda_{(a)}^{T}\cdot\mathbf{C}_{Y_DY_D}\cdot\alpha_{(b)}-\lambda_{(a)}^{T}\cdot\mathbf{C}_{Y_DH_D}\cdot\beta_{(b)}-$$

$$-\mu_{(a)}^{T}\cdot\mathbf{C}_{H_DY_D}\cdot\alpha_{(b)}-\mu_{(a)}^{T}\cdot\mathbf{C}_{H_DH_D}\cdot\beta_{(b)} \tag{4.191}$$

Para se obter a outra covariância cruzada condicionada, $\mathbf{C}_{HY}^{ccd}$, basta proceder à troca de posições entre os vectores dos coeficientes

$$C_{HY}^{ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)-\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{k=1}^{n_Y}\alpha_{ai}\lambda_{bk}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k)-\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{l=1}^{n_H}\alpha_{ai}\mu_{bl}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l)-$$

$$-\sum_{j=1}^{n_H}\sum_{k=1}^{n_Y}\beta_{aj}\lambda_{bk}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k)-\sum_{j=1}^{n_H}\sum_{l=1}^{n_H}\beta_{aj}\mu_{bl}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l) \tag{4.192}$$

$$\forall\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b\in\Omega$$

ou ainda, sob a forma matricial

$$C_{HY}^{ccd}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)-\alpha_a\cdot\mathbf{C}_{YY}\cdot\lambda_b-\alpha_a\cdot\mathbf{C}_{YH}\cdot\mu_b- \\ -\beta_a\cdot\mathbf{C}_{HY}\cdot\lambda_b-\beta_a\cdot\mathbf{C}_{HH}\cdot\mu_b \tag{4.193}$$

Os conceitos e expressões aqui apresentados justificam algumas observações. A primeira para salientar que estas expressões só são válidas para os casos em que os valores esperados, covariâncias e covariâncias cruzadas não condicionados das *f.a.*'s são conhecidos. A segunda observação serve para assinalar que é possível caracterizar completamente a *fdp* condicional conjunta, à custa da expressão (4.53)[49], desde que nesta se utilizem os momentos de primeira e segunda ordem condicionados, $\langle Y(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{ccd}$, $\langle H(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{ccd}$, $\mathbf{C}^{ccd}$, $\mathbf{C}^{ccd}$, $\mathbf{C}^{ccd}$ e $\mathbf{C}^{ccd}$.

Uma outra observação que importa fazer respeita à covariância cruzada entre as duas *f.a.*'s, visto que apresenta propriedades diferentes da covariância entre valores da mesma *f.a.*. Analisando a definição de covariância cruzada entre as *f.a.*'s $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $H(\vec{\mathbf{x}})$

$$C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=E\left[\left(Y(\vec{\mathbf{x}}_a)-\langle Y(\vec{\mathbf{x}}_a)\rangle\right)\left(H(\vec{\mathbf{x}}_b)-\langle H(\vec{\mathbf{x}}_b)\rangle\right)\right] \tag{4.194}$$

verifica-se imediatamente que, ao contrário da covariância de uma única *f.a.*, a covariância cruzada não é necessariamente simétrica pelo que se deve contar com as seguintes desigualdades

$$C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)\neq C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_b,\vec{\mathbf{x}}_a) \tag{4.195}$$

$$C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)\neq C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b) \tag{4.196}$$

Contudo, e porque a ordem dos factores em (4.194) é arbitrária, verifica-se sempre a igualdade

$$C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_b,\vec{\mathbf{x}}_a) \tag{4.197}$$

---

[49] Observação válida porque que se admite que as duas *f.a.*'s são multivariadas normais, assim como a respectiva reunião.

facto que foi explorado na simplificação das expressões (4.178) e (4.187) das variâncias condicionadas de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $H(\vec{\mathbf{x}})$. A não simetria das covariâncias cruzadas é uma característica das correlações cruzadas influenciadas por desfasamentos espaciais e ou temporais, como é precisamente o caso das duas *f.a.*'s que têm estado a servir de exemplo nesta exposição. E, tal como se verá adiante no sub-capítulo referente aos métodos geoestatísticos, problemas desta natureza devem ser caracterizados por covariâncias cruzadas porque os semivariogramas cruzados são simétricos qualquer que seja o significado físico das *f.a.*'s em jogo.

## 4.7 Estimação de distribuições espaciais por métodos geoestatísticos

Os métodos geoestatísticos têm sido largamente utilizados na indústria extractiva para a avaliação dos depósitos minerais. Os estudos realizados por um geólogo sul-africano, D. G. Krige, para a estimação das reservas de ouro das minas de Witwatersrand na África do Sul, e que foram depois desenvolvidos e divulgados nas décadas de sessenta e setenta por Matheron e seus colaboradores na Escola de Minas de Paris[50], conduziram à formulação de um método de estimação da distribuição espacial de um determinado fenómeno ou propriedade cuja designação, a krigagem[51], é inspirada no nome do referido geólogo. Neste sub-capítulo são deduzidas e apresentadas as equações que constituem este método, quando aplicado à estimação pontual de *f.a.*'s estacionárias e intrínsecas. As equações são obtidas por aplicação de três princípios básicos: a estimação ser *linear*, *não enviesada* e com *variância mínima* para o respectivo erro.

A linearidade do método consiste no facto de a estimação do valor de uma *f.a.*, $Z(\vec{\mathbf{x}})$, num qualquer ponto do domínio assentar numa combinação linear dos valores conhecidos de $Z(\vec{\mathbf{x}})$. Para o estimador ser não enviesado é necessário que a respectiva esperança matemática coincida com o valor que se pretende estimar. Após terem sido estabelecidos estes dois

---

[50] Matheron é considerado o fundador e o principal teórico da Geoestatística na sua forma actual. Posteriormente, na década de oitenta, assumiram particular relevo os trabalhos desenvolvidos na Universidade de Stanford pelo grupo de investigação liderado por André Journel.

[51] "Kriging" na literatura de língua inglesa.

princípios, a dedução final das equações resulta da minimização da variância do erro de estimação.

A krigagem é um método que não se esgota na estimação da distribuição espacial de uma *f.a.* uma vez que também possibilita o cálculo da covariância dos erros de estimação. A variância dos erros de estimação – covariância entre "pontos coincidentes" – constitui uma medida da incerteza dessa estimação e é susceptível de representação espacial.

### 4.7.1 Krigagem simples de funções aleatórias estacionárias com média conhecida

A krigagem simples aplica-se à estimação de uma *f.a.* estacionária, $Z(\vec{\mathbf{x}})$, com valor esperado, $E[Z(\vec{\mathbf{x}})]=m_Z$, e função de covariância, $C(h)$, conhecidos. Assim, considere-se $Z(\vec{\mathbf{x}})$ como a soma do valor esperado, a componente estruturada, com uma flutuação aleatória, a componente errática

$$Z(\vec{\mathbf{x}}) = E[Z(\vec{\mathbf{x}})] + F(\vec{\mathbf{x}}) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{4.198}$$

Tratando-se de uma *f.a.* estacionária pode-se rescrever esta soma

$$Z(\vec{\mathbf{x}}) = m_Z + F(\vec{\mathbf{x}}) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{4.199}$$

sendo a flutuação em torno do valor esperado, $F(\vec{\mathbf{x}})$, também uma *f.a.* estacionária com valor esperado nulo

$$\langle f(\vec{\mathbf{x}}) \rangle = E[F(\vec{\mathbf{x}})] = 0 \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{4.200}$$

Sendo $m_Z$ conhecido, estimar $Z(\vec{\mathbf{x}})$ é equivalente a estimar a flutuação, $F(\vec{\mathbf{x}})$. Assim, dando cumprimento ao princípio da linearidade, o valor estimado da flutuação num determinado ponto do domínio, $f^*(\vec{\mathbf{x}}_i)$, é expresso como uma combinação linear das flutuações conhecidas $\{ f(\vec{\mathbf{x}}_j) = z(\vec{\mathbf{x}}_j) - m_Z \, , \, j = 1,...,n \}$

$$f^*(\vec{\mathbf{x}}_i) = \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} f(\vec{\mathbf{x}}_j) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.201}$$

onde $n$ é o número de pontos $\vec{\mathbf{x}}_j$ onde se conhece o valor de $Z(\vec{\mathbf{x}})$, logo da respectiva flutuação. Desenvolvendo (4.201), tendo presente o significado da flutuação, obtém-se

$$z^*(\vec{\mathbf{x}}_i) = m_Z + \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} \left[ z(\vec{\mathbf{x}}_j) - m_Z \right] \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.202}$$

Os $n$ coeficientes da combinação linear das flutuações conhecidas, $\lambda_j$, deveriam ser determinados de modo a minimizar o *erro de estimação*

$$\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i) = f^*(\vec{\mathbf{x}}_i) - f(\vec{\mathbf{x}}_i) = z^*(\vec{\mathbf{x}}_i) - z(\vec{\mathbf{x}}_i) \tag{4.203}$$

Como a *f.a.* só é conhecida num conjunto limitado de pontos não é possível quantificar o erro de estimação nos restantes pontos do domínio. Então, opta-se por minimizar a variância do erro de estimação, cuja quantificação dispensa o conhecimento do valor de $Z(\vec{\mathbf{x}})$ ou da flutuação $F(\vec{\mathbf{x}})$

$$\mathrm{Var}\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] = E\left[ \left( \varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i) - \langle \varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i) \rangle \right)^2 \right] \tag{4.204}$$

Como se pretende que o estimador seja centrado, isto é, com viés nulo

$$\langle z^*(\vec{\mathbf{x}}_i) \rangle = E\left[ Z^*(\vec{\mathbf{x}}_i) \right] = z(\vec{\mathbf{x}}_i) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.205}$$

a esperança matemática do erro de estimação é nulo

$$\langle \varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i) \rangle = \langle z^*(\vec{\mathbf{x}}_i) \rangle - z(\vec{\mathbf{x}}_i) = 0 \tag{4.206}$$

logo a variância do erro de estimação (4.204) resume-se a

$$\mathrm{Var}[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)] = E\left[(\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i))^2\right] \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.207}$$

Introduzindo (4.203) em (4.207) e desenvolvendo esta expressão obtém-se

$$\begin{aligned}
\mathrm{Var}[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)] &= E\left[(\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i))^2\right] = \\
&= E\left[\left(F^*(\vec{\mathbf{x}}_i) - F(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)^2\right] = \\
&= E\left[\left(F^*(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)^2 - 2F^*(\vec{\mathbf{x}}_i)F(\vec{\mathbf{x}}_i) + \left(F(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)^2\right] = \\
&= E\left[\left(\sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} F(\vec{\mathbf{x}}_j)\right)\left(\sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik} F(\vec{\mathbf{x}}_k)\right)\right] - \\
&\quad - 2E\left[\left(\sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} F(\vec{\mathbf{x}}_j)\right) F(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] + E\left[\left(F(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)^2\right]
\end{aligned} \tag{4.208}$$

ao utilizar (4.201) para representar a estimação da flutuação. Prosseguindo os desenvolvimentos em (4.208) obtém-se sucessivamente

$$\begin{aligned}
\mathrm{Var}[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)] &= \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik}\, E\left[F(\vec{\mathbf{x}}_j)F(\vec{\mathbf{x}}_k)\right] - \\
&\quad - 2\sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\, E\left[F(\vec{\mathbf{x}}_j)F(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] + \\
&\quad + E\left[\left(F(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)^2\right]
\end{aligned} \tag{4.209}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)] = &\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}\,E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_j)-m_Z\right)\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_k)-m_Z\right)\right]- \\ &-2\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}\,E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_j)-m_Z\right)\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_i)-m_Z\right)\right]+ \\ &+E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_i)-m_Z\right)\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_i)-m_Z\right)\right]\end{aligned} \tag{4.210}$$

$$\mathrm{Var}[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)] = \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ij}\lambda_{ik}\,C(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k) - 2\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}\,C(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_i) + C(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_i) \quad , \quad \forall\vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.211}$$

Para a minimização da variância do erro de estimação anulam-se as primeiras derivadas desta em ordem aos $n$ coeficientes da combinação linear

$$\frac{\partial\,\mathrm{Var}[\,\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)]}{\partial\lambda_{ij}} = 2\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}C(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_j) - 2C(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_i) = 0 \quad , \quad j=1,\ldots,n \tag{4.212}$$

obtendo-se um sistema de $n$ equações a $n$ incógnitas, os coeficientes $\lambda_{ij}$

$$\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}C(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_j) = C(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_i) \quad , \quad j=1,\ldots,n \tag{4.213}$$

que permitem estimar o valor da *f.a.* $Z(\vec{\mathbf{x}})$ no ponto de coordenadas $\vec{\mathbf{x}}_i$ do domínio, recorrendo à expressão (4.202). A expressão final da variância do erro de estimação por krigagem simples resulta da simplificação de (4.211), após a introdução da igualdade (4.213)

$$\begin{aligned}\sigma^{2,KS}_{(\vec{\mathbf{x}}_i)} = \mathrm{Var}[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)] &= \sigma_Z^2 - \sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}\,C(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_i) \\ &= \sigma_Z^2 - \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ij}\lambda_{ik}C(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad \forall\vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega\end{aligned} \tag{4.214}$$

As expressões da krigagem simples de *f.a.*'s estacionárias com média conhecida, nomeadamente a que define o sistema de equações (4.213), a que calcula o valor estimado

(4.202) e a da variância do erro de estimação (4.214), são idênticas às apresentadas na secção 4.6.4 para o sistema de equações, média e variância condicionadas de *f.a.*'s estacionárias multivariadas normais com média conhecida, respectivamente (4.127), (4.138) e (4.150).

Para a formulação da covariância dos erros de estimação recorre-se a procedimentos idênticos aos utilizados para a variância

$$\begin{aligned} C^{KS}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j) &= C\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i),\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] = E\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)\,\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] = \\ &= E\left[\left(F^*(\vec{\mathbf{x}}_i)-F(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)\left(F^*(\vec{\mathbf{x}}_j)-F(\vec{\mathbf{x}}_j)\right)\right] = \\ &= E\left[F^*(\vec{\mathbf{x}}_i)F^*(\vec{\mathbf{x}}_j)-F^*(\vec{\mathbf{x}}_i)F(\vec{\mathbf{x}}_j)-F(\vec{\mathbf{x}}_i)F^*(\vec{\mathbf{x}}_j)+F(\vec{\mathbf{x}}_i)F(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \end{aligned} \tag{4.215}$$

$$\begin{aligned} C^{KS}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j) = E\left[\left(\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}F(\vec{\mathbf{x}}_k)\right)\left(\sum_{l=1}^{n}\lambda_{jl}F(\vec{\mathbf{x}}_l)\right)\right] - E\left[\left(\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}F(\vec{\mathbf{x}}_k)\right)F(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] - \\ - E\left[\left(\sum_{l=1}^{n}\lambda_{jl}F(\vec{\mathbf{x}}_l)\right)F(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] + E\left[F(\vec{\mathbf{x}}_i)F(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \end{aligned} \tag{4.216}$$

$$\begin{aligned} C^{KS}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j) = \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\lambda_{ik}\lambda_{jl}E\left[F(\vec{\mathbf{x}}_k)F(\vec{\mathbf{x}}_l)\right] - \sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}E\left[F(\vec{\mathbf{x}}_k)F(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] - \\ - \sum_{l=1}^{n}\lambda_{jl}E\left[F(\vec{\mathbf{x}}_l)F(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] + E\left[F(\vec{\mathbf{x}}_i)F(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \end{aligned} \tag{4.217}$$

$$\begin{aligned} C^{KS}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j) = \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\lambda_{ik}\lambda_{jl}C(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_l) - \sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}C(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_j) - \\ - \sum_{l=1}^{n}\lambda_{jl}C(\vec{\mathbf{x}}_l,\vec{\mathbf{x}}_i) + C(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j) \end{aligned} \tag{4.218}$$

Introduzindo nas segunda e terceira parcelas do segundo membro desta última expressão (4.218) os primeiros membros das igualdades que constituem os sistemas de equações que

determinam $\lambda_{ik}$ e $\lambda_{jl}$ obtém-se, após simplificação, a expressão da covariância entre os erros de estimação, por krigagem simples, em dois pontos quaisquer do domínio

$$C^{KS}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=C(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)-\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\lambda_{ik}\lambda_{jl}C(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_l)\quad,\quad\forall\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j\in\Omega \tag{4.219}$$

que tem aspecto idêntico à expressão (4.130) da covariância condicionada de *f.a.* estacionárias multivariadas normais com média conhecida.

### 4.7.2 Krigagem ordinária de funções aleatórias estacionárias com média desconhecida

Quando só é conhecida a função de covariância $C(h)$ da *f.a.* estacionária, não é possível utilizar a krigagem simples, nomeadamente a expressão (4.202) onde figura $m_Z$. A solução está em recorrer à krigagem ordinária. Retomando a expressão (4.202) e procedendo a um arranjo adequado

$$\begin{aligned} z^*(\vec{\mathbf{x}}_i) &= m_Z+\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}\left[z(\vec{\mathbf{x}}_j)-m_Z\right]= \\ &=\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}z(\vec{\mathbf{x}}_j)+m_Z\left(1-\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}\right)\quad,\quad\forall\vec{\mathbf{x}}_i\in\Omega \end{aligned} \tag{4.220}$$

observa-se que $m_Z$ pode ser eliminado desde que se estabeleça a seguinte restrição

$$1-\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}=0 \tag{4.221}$$

que obriga a reformular o problema da minimização da variância do erro de estimação. Para o efeito é definida a função Lagrangeano

$$L(\lambda_{ij},\mu_i)=\mathrm{Var}\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)\right]+2\mu_i\left(1-\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}\right) \tag{4.222}$$

onde $\mu_i$ é o multiplicador de Lagrange correspondente à restrição (4.221)[52]. Para a minimização do Lagrangeano anulam-se as primeiras derivadas deste em ordem aos $n$ coeficientes $\lambda_{ij}$ e ao multiplicador de Lagrange $\mu_i$

$$\begin{cases}\dfrac{\partial L(\lambda_{ij},\mu_i)}{\partial\lambda_{ij}}=2\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}C(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_j)-2C(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_i)-2\mu_i=0 \quad , \quad j=1,\ldots,n \\ \dfrac{\partial L(\lambda_{ij},\mu_i)}{\partial\mu_i}=2\left(1-\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}\right)=0\end{cases} \tag{4.223}$$

Simplificando as expressões representadas em (4.223), obtém-se o sistema de $n+1$ equações a outras tantas incógnitas, os coeficientes $\lambda_{ij}$ e o multiplicador de Lagrange $\mu_i$

$$\begin{cases}\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}C(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_j)-\mu_i=C(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_i) \quad , \quad j=1,\ldots,n \\ \sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}=1\end{cases} \tag{4.224}$$

que permitem estimar o valor da *f.a.* $Z(\vec{\mathbf{x}})$ no ponto de coordenadas $\vec{\mathbf{x}}_i$ do domínio, recorrendo à expressão

$$z^*(\vec{\mathbf{x}}_i)=\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}z(\vec{\mathbf{x}}_j) \quad , \quad \forall\vec{\mathbf{x}}_i\in\Omega \tag{4.225}$$

Introduzindo a primeira das expressões de (4.224) em (4.211) e procedendo às adequadas simplificações, obtém-se a variância do erro de estimação por krigagem ordinária

---

[52] Atendendo à sua natureza, uma restrição igualdade pode ser multiplicada por qualquer valor diferente de zero. Aqui é multiplicada por 2 com a finalidade de se obter uma melhor apresentação final das expressões da krigagem ordinária.

$$\sigma^{2,KO}_{(\vec{\mathbf{x}}_i)} = \mathrm{Var}\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] = \sigma^2_Z - \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\, C(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_i) + \mu_i$$

$$= \sigma^2_Z + 2\mu_i - \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} C(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.226}$$

É uma variância superior à da krigagem simples (4.214) que, recorde-se, estima a distribuição espacial de uma *f.a.* estacionária com média conhecida. Este aumento da variância é uma consequência da incerteza adicional produzida pelo desconhecimento de $m_Z$, o qual obriga à introdução da restrição (4.221). Contudo, o valor de $m_Z$ também pode ser estimado por krigagem, isto é, por combinação linear dos valores conhecidos de $Z(\vec{\mathbf{x}})$

$$m^*_Z = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j z(\vec{\mathbf{x}}_j) \tag{4.227}$$

Recorrendo, uma vez mais, à minimização da variância do erro de estimação

$$E\left[\left(m^*_Z - m_Z\right)^2\right] \tag{4.228}$$

sujeito à restrição de viés nulo

$$E\left[m^*_Z\right] = m_Z$$

$$E\left[\sum_{j=1}^{n} \lambda_j Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j m_Z = m_Z \tag{4.229}$$

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_j = 1$$

obtém-se o sistema de equações que determina os valores dos *n* coeficientes $\lambda_j$

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^{n} \lambda_k C(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j) - \mu_m = 0 \quad , \quad j = 1,...,n \\ \sum_{j=1}^{n} \lambda_j = 1 \end{cases} \tag{4.230}$$

que permitem realizar a combinação linear (4.227). A variância do erro de estimação de $m_Z$ é dada pelo multiplicador de Lagrange

$$\mathrm{Var}\left[m_Z^* - m_Z\right] = \mu_m \tag{4.231}$$

Samper e Carrera (1990) afirmam que é possível demonstrar que a variância correspondente à média desconhecida (4.226) é igual à que se obtém para a média conhecida (4.214) agravada de uma parcela quantificada por

$$\left(1 - \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\right)^2 \mu_m \tag{4.232}$$

onde os coeficientes $\lambda_{ij}$ são os produzidos pelo sistema de equações (4.213) correspondente à estimação com média conhecida.

À semelhança da secção anterior, a expressão da covariância entre os erros de estimação por krigagem ordinária é obtida a partir de (4.218), introduzindo nela as igualdades que constituem os sistemas de equações que determinam $\lambda_{ik}$ e $\lambda_{jl}$

$$C^{KO}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) = C(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) + \mu_i + \mu_j - \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} \lambda_{ik} \lambda_{jl} C(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_l) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j \in \Omega \tag{4.233}$$

### 4.7.3 Krigagem ordinária de funções aleatórias intrínsecas

As *f.a.*'s intrínsecas não têm variância finita, pelo que não é possível definir a função de covariância. Por este motivo, a estimação por krigagem tem de recorrer ao semivariograma, mantendo-se válidos os três princípios básicos: linearidade, viés nulo e variância mínima. Os dois primeiros são traduzidos pelas expressões já utilizadas na secção anterior

$$z^*(\vec{\mathbf{x}}_i) = \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} z(\vec{\mathbf{x}}_j) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.225}$$

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} = 1 \tag{4.234}$$

Esta última, que pode ser obtida directamente de (4.220) e (4.221) com a finalidade de eliminar a presença de $m_Z$ da combinação linear de valores conhecidos, é também uma consequência da imposição de um viés nulo ao estimador. Para o confirmar basta repetir o raciocínio presente em (4.229). Retomando a variância do erro de estimação, agora definido à custa da *f.a.* $Z(\vec{\mathbf{x}})$, tal como autoriza a igualdade (4.203), e introduzindo na expressão a combinação linear (4.225) obtém-se

$$\begin{aligned} \mathrm{Var}\left[z^*(\vec{\mathbf{x}}_i) - z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] &= E\left[\left(Z^*(\vec{\mathbf{x}}_i) - Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)^2\right] = E\left[\left(\sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} Z(\vec{\mathbf{x}}_j) - Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)^2\right] = \\ &= E\left[\left(\sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} Z(\vec{\mathbf{x}}_j) - \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)^2\right] = \\ &= E\left[\left(\sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} \left(Z(\vec{\mathbf{x}}_j) - Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)\right)^2\right] \end{aligned} \tag{4.235}$$

$$\mathrm{Var}\left[z^*(\vec{\mathbf{x}}_i)-z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right]=E\left[\left(\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_j)-Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)\right)\left(\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_k)-Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)\right)\right]= \tag{4.236}$$

$$=\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ij}\lambda_{ik}\,E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_j)-Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_k)-Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)\right]$$

O último membro de (4.236) pode ser escrito à custa o semivariograma. Para o efeito, retome-se e desenvolva-se a definição deste

$$\gamma(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k)=\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_j)-Z(\vec{\mathbf{x}}_k)\right)^2\right]=$$

$$=\frac{1}{2}E\left\{\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_j)-Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)-\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_k)-Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)\right]^2\right\}= \tag{4.237}$$

$$=\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_j)-Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)^2\right]+\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_k)-Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)^2\right]-$$

$$-E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_j)-Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_k)-Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)\right]$$

$$\gamma(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k)=\gamma(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_i)+\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_i)-E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_j)-Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_k)-Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)\right] \tag{4.238}$$

Explicitando a terceira parcela do segundo membro de (4.238) e procedendo à respectiva substituição em (4.236) obtém-se para a variância do erro de estimação

$$\mathrm{Var}\left[z^*(\vec{\mathbf{x}}_i)-z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right]=-\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ij}\lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k)+\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ij}\lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_i)+ \tag{4.239}$$

$$+\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ij}\lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_i)$$

Observando os índices dos somatórios das segunda e terceira parcelas do segundo membro, constata-se que um dos somatórios dos coeficientes pode ser posto em evidência e substituído pela unidade, tendo em conta (4.234)

$$\mathrm{Var}\left[z^*(\vec{\mathbf{x}}_i)-z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right]=-\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ij}\lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k)+\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_i)+$$
$$+\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_i) \tag{4.240}$$

ou ainda

$$\mathrm{Var}\left[z^*(\vec{\mathbf{x}}_i)-z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right]=-\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ij}\lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k)+2\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_i) \tag{4.241}$$

visto que as duas últimas parcelas do segundo membro de (4.240) têm o mesmo significado[53].

A minimização da variância do erro de estimação, tendo em conta a restrição (4.234), segue os mesmos passos da secção anterior. As primeiras derivadas da função Lagrangeano

$$L(\lambda_{ij},\mu_i)=\mathrm{Var}\left[z^*(\vec{\mathbf{x}}_i)-z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right]+2\mu_i\left(1-\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}\right) \tag{4.242}$$

são anuladas

$$\begin{cases}\dfrac{\partial L(\lambda_{ij},\mu_i)}{\partial\lambda_{ij}}=-2\displaystyle\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_j)+2\gamma(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_i)-2\mu_i=0 \quad , \quad j=1,\ldots,n \\ \dfrac{\partial L(\lambda_{ij},\mu_i)}{\partial\mu_i}=2\left(1-\displaystyle\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}\right)=0\end{cases} \tag{4.243}$$

dando lugar ao sistema de equações que determina as $n+1$ incógnitas, os coeficientes $\lambda_{ij}$ e o multiplicador de Lagrange $\mu_i$, que permitem estimar o valor de $Z(\vec{\mathbf{x}})$ no ponto $\vec{\mathbf{x}}_i$ com a expressão (4.225)

---

[53] Produto do vector dos coeficientes de combinação pelo vector do semivariograma entre os pontos onde a *f.a.* é conhecida e o ponto onde se pretende estimar o valor da *f.a.*.

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik} \gamma(\vec{\mathbf{x}}_k, \vec{\mathbf{x}}_j) + \mu_i = \gamma(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_i) \quad , \quad j = 1, ..., n \\ \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} = 1 \end{cases} \tag{4.244}$$

Introduzindo a primeira expressão de (4.244) em (4.241) e procedendo à respectiva simplificação obtém-se a variância do erro de estimação por krigagem ordinária de *f.a.*'s intrínsecas

$$\begin{aligned} \sigma^{2,KO}_{(\vec{\mathbf{x}}_i)} &= \mathrm{Var}\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] = \mathrm{Var}\left[z^*(\vec{\mathbf{x}}_i) - z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] = \\ &= \mu_i + \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij} \gamma(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_i) = \\ &= 2\mu_i + \sum_{j=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} \lambda_{ij} \lambda_{ik} \gamma(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \end{aligned} \tag{4.245}$$

A covariância entre os erros de estimação também é escrita à custa da *f.a.* $Z(\vec{\mathbf{x}})$

$$\begin{aligned} C^{KO}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) &= C\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)\, \varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] = E\left[\left(Z^*(\vec{\mathbf{x}}_i) - Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)\left(Z^*(\vec{\mathbf{x}}_j) - Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right)\right] = \\ &= E\left[Z^*(\vec{\mathbf{x}}_i) Z^*(\vec{\mathbf{x}}_j) - Z^*(\vec{\mathbf{x}}_i) Z(\vec{\mathbf{x}}_j) - Z(\vec{\mathbf{x}}_i) Z^*(\vec{\mathbf{x}}_j) + Z(\vec{\mathbf{x}}_i) Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \end{aligned} \tag{4.246}$$

$$\begin{aligned} C^{KO}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_j) = E\left[\left(\sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik} Z(\vec{\mathbf{x}}_k)\right)\left(\sum_{l=1}^{n} \lambda_{jl} Z(\vec{\mathbf{x}}_l)\right)\right] - E\left[\left(\sum_{k=1}^{n} \lambda_{ik} Z(\vec{\mathbf{x}}_k)\right) Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] - \\ - E\left[\left(\sum_{l=1}^{n} \lambda_{jl} Z(\vec{\mathbf{x}}_l)\right) Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] + E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}_i) Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \end{aligned} \tag{4.247}$$

$$C^{KO}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\lambda_{ik}\lambda_{jl}\,E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}_k)\,Z(\vec{\mathbf{x}}_l)\right]-\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}\,E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}_k)\,Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right]-$$

$$-\sum_{l=1}^{n}\lambda_{jl}\,E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}_l)\,Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right]+E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\,Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \tag{4.248}$$

Neste ponto da dedução, é necessário desenvolver a expressão do semivariograma entre alguns pontos do domínio

$$\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_l)=\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_k)-Z(\vec{\mathbf{x}}_l)\right)^2\right]=$$

$$=\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_k)\right)^2\right]+\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_l)\right)^2\right]-E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}_k)\,Z(\vec{\mathbf{x}}_l)\right] \tag{4.249}$$

$$\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_j)=\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_k)-Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right)^2\right]=$$

$$=\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_k)\right)^2\right]+\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right)^2\right]-E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}_k)\,Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \tag{4.250}$$

$$\gamma(\vec{\mathbf{x}}_l,\vec{\mathbf{x}}_i)=\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_l)-Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)^2\right]=$$

$$=\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_l)\right)^2\right]+\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)^2\right]-E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}_l)\,Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] \tag{4.251}$$

$$\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_i)-Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right)^2\right]=$$

$$=\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\right)^2\right]+\frac{1}{2}E\left[\left(Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right)^2\right]-E\left[Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\,Z(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \tag{4.252}$$

Explicitando estas últimas quatro definições do semivariograma em ordem à última parcela e procedendo à sua substituição em (4.248), esta fica, depois de simplificada

$$C^{KO}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=-\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)-\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\lambda_{ik}\lambda_{jl}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_l)+$$

$$+\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_j)+\sum_{l=1}^{n}\lambda_{jl}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_l,\vec{\mathbf{x}}_i) \tag{4.253}$$

Introduzindo as igualdades que constituem os sistemas de equações que determinam $\lambda_{ik}$ e $\lambda_{jl}$ obtém-se finalmente

$$C^{KO}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)=-\gamma(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)+\mu_i+\mu_j+\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\lambda_{ik}\lambda_{jl}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_l)\quad,\quad\forall\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j\in\Omega \tag{4.254}$$

Embora a dedução das expressões apresentadas neste sub-capítulo tenha sido orientada para as *f.a.*'s intrínsecas, elas também são válidas para as *f.a.*'s estacionárias com média desconhecida. De facto, tomando as equações apresentadas no sub-capítulo anterior e procedendo à substituição da covariância pela diferença entre a variância e o semivariograma (4.140) obtêm-se as equações aqui deduzidas. Começando pelo sistema de equações (4.224)

$$\begin{cases}\displaystyle\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}\left[\sigma_Z^2-\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_j)\right]-\mu_i=\sigma_Z^2-\gamma(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_i)\quad,\quad j=1,\ldots,n\\ \displaystyle\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}=1\end{cases} \tag{4.255}$$

e introduzindo a restrição (4.221) depois de um adequado arranjo das parcelas

$$\begin{cases}\displaystyle\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_j)+\sigma_Z^2\left(1-\sum_{k=1}^{n}\lambda_{ik}\right)+\mu_i=\gamma(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_i)\quad,\quad j=1,\ldots,n\\ \displaystyle\sum_{j=1}^{n}\lambda_{ij}=1\end{cases} \tag{4.256}$$

obtém-se (4.244). Operando a substituição (4.140) em (4.226)

$$\mathrm{Var}\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] = \sigma_Z^2 - \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\left[\sigma_Z^2 - \gamma(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_i)\right] + \mu_i =$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\gamma(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_i) + \sigma_Z^2\left(1 - \sum_{j=1}^{n} \lambda_{ij}\right) + \mu_i \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i \in \Omega \tag{4.257}$$

e introduzindo a restrição (4.221) chega-se a uma expressão igual a (4.245). E o mesmo acontece com a covariância dos erros de estimação.

À semelhança do que se fez na secção 4.7.1, salienta-se que as expressões da krigagem ordinária de *f.a.*'s intrínsecas, nomeadamente a que define o sistema de equações (4.244), a que calcula o valor estimado (4.225), e as da variância (4.245) e covariância dos erros de estimação (4.254), são idênticas às apresentadas na secção 4.6.5 para o sistema de equações, média, variância e covariância condicionadas de *f.a.*'s intrínsecas multivariadas normais, respectivamente, (4.158), (4.161), (4.165) e (4.164).

### 4.7.4 Algumas considerações sobre a krigagem

O primeiro aspecto a salientar relativamente à krigagem reside no facto de produzir um estimador exacto, isto é, nos pontos do domínio onde são conhecidos os valores da *f.a.* os valores estimados coincidem com os medidos e a variância de estimação é nula

$$z^*(\vec{\mathbf{x}}_k) = z(\vec{\mathbf{x}}_k) \quad , \quad k = 1, \ldots, n \tag{4.258}$$

$$\mathrm{Var}\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_k)\right] = 0 \quad , \quad k = 1, \ldots, n \tag{4.259}$$

Esta propriedade da krigagem, simples ou ordinária, é uma vantagem assinalável relativamente a outros métodos de estimação como, por exemplo, os mínimos quadrados.

Outro aspecto importante da krigagem está em constituir o melhor estimador linear não enviesado, atendendo a que, por definição, a variância do erro de estimação é mínima.

Esta afirmação baseia-se no pressuposto de que a função de covariância ou o semivariograma são exactos. Mas, sendo a krigagem o melhor estimador linear, tal não significa que seja o melhor em termos absolutos, uma vez que poderão existir outros estimadores, não lineares, que produzam erros de estimação inferiores. Há, contudo, um caso em que constitui o melhor estimador absoluto. É aquele em que se pretende estimar o comportamento de uma *f.a.* multivariada normal. Esta conclusão é uma consequência directa da análise comparativa, entre a expressão do valor da *f.a.* estimado por krigagem e a correspondente ao momento de primeira ordem condicionado, realizada nas secções anteriores para os diferentes tipos de *f.a.*'s estudados. Esta análise também permite concluir que a covariância dos erros de estimação coincide com a covariância condicionada[54] da *f.a.* multivariada normal. Assim, ao admitir que uma determinada propriedade do meio natural tem um comportamento multivariado normal é indiferente procurar prever o seu comportamento espacial recorrendo à teoria das distribuições condicionadas ou à ferramenta geoestatística conhecida por krigagem.

Na krigagem, os coeficientes da combinação linear, $\lambda_{ij}$, representam o peso com que cada valor conhecido, $z(\vec{\mathbf{x}}_j)$, contribui para a formação do valor estimado, $z^*(\vec{\mathbf{x}}_i)$. Os pesos são maiores para os valores mais próximos do ponto onde se pretende estimar a *f.a.* e vice-versa. Por outro lado, quando dois pontos com valor conhecido estão muito próximos um do outro, os respectivos pesos tomam valores inferiores aos que teriam se estivessem mais afastados. Estas duas características da krigagem são um reflexo da estrutura de correlação espacial contida na função de covariância ou no semivariograma[55]. Quando a correlação diminui – por exemplo, por introdução ou aumento do efeito pepita – estas duas características da krigagem são atenuadas. No limite, se só existisse efeito pepita, o peso de cada valor conhecido seria igual a $1/n$. Por outras palavras, se não existir estrutura de correlação espacial, o valor estimado, em qualquer ponto do domínio, não é mais do que a média aritmética dos dados. Constituem excepção os pontos de medição atendendo à já sublinhada natureza exacta do estimador.

Quando a função de covariância ou o semivariograma não são exactos, os resultados do método são afectados, embora de forma distinta: a variância do erro de estimação

---

[54] Retira-se idêntica conclusão para a variância, que não é mais do que um caso particular da covariância.

[55] Uma análise interessante deste comportamento da krigagem é apresentada por Samper e Carrera (1990): para diferentes semivariogramas, com e sem efeito pepita, são determinados os pesos para diferentes posições relativas dos dados e do ponto onde se pretende obter o valor estimado.

apresenta maior sensibilidade aos erros do semivariograma do que a própria estimação. De facto, mesmo quando o semivariograma é incorrecto, a estimação tende para o valor verdadeiro quando o número de dados aumenta. O mesmo não acontece com a variância do erro de estimação, em particular quando a incorrecção reside na definição do patamar, isto é, na variância da *f.a.*. Do exposto resulta a necessidade de encarar com alguma cautela os resultados respeitantes à covariância dos erros de estimação, em particular quando se pretende usá-los para quantificar a matriz de covariância condicionada da *f.a.* a utilizar numa eventual modelação estocástica.

Em termos gerais, o conhecimento da variância, por si só, não permite definir um intervalo de confiança da estimação de uma *f.a.*. É também preciso conhecer o tipo de distribuição. Se esta for normal, hipótese frequentemente admitida, é habitual considerar o intervalo de confiança de 95%, o qual tem uma amplitude aproximada do dobro do desvio padrão

$$\left[z^*(\vec{\mathbf{x}}_i)-2\sigma(\vec{\mathbf{x}}_i), z^*(\vec{\mathbf{x}}_i)+2\sigma(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] \tag{4.260}$$

Pelas razões expostas no parágrafo anterior, este intervalo de confiança é, igualmente, muito sensível a eventuais erros do semivariograma utilizado[56].

### 4.7.5 Cokrigagem de funções aleatórias com média conhecida

Até aqui, a krigagem foi apresentada como um método para a estimação da distribuição espacial de uma determinada propriedade com base nos valores conhecidos dessa mesma propriedade. Se também forem conhecidos valores de outras propriedades, correlacionadas com a primeira, é possível melhorar a estimação desta aplicando uma técnica habitualmente designada por cokrigagem e que é baseada nos mesmos princípios da krigagem. Assim, este novo estimador deve resultar de uma combinação linear dos valores

[56] Estas questões, relativas à sensibilidade da estimação e da respectiva variância, são tratadas com detalhe em Samper e Carrera (1990). Nesta publicação são apresentadas, relativamente a uma *f.a.* unidimensional, diversas estimações e respectivos intervalos de confiança respeitantes a outras tantas hipóteses relativas a alguns dos parâmetros do semivariograma.

BIBLIOTECA F.E.

conhecidos das diversas propriedades correlacionadas, ser não enviesado e apresentar uma variância mínima para o respectivo erro.

Embora o que se segue seja generalizável para um número qualquer, considerem-se apenas, em benefício da simplicidade da exposição, duas propriedades correlacionadas, representadas pelas *f.a.*'s $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $H(\vec{\mathbf{x}})$ e com os respectivos valores esperados conhecidos. Cada uma destas *f.a.*'s é o resultado da soma da componente estruturada, o valor esperado, com a componente aleatória, a flutuação

$$\begin{aligned} Y(\vec{\mathbf{x}}) &= \langle Y(\vec{\mathbf{x}}) \rangle + f(\vec{\mathbf{x}}) = \\ &= m_Y(\vec{\mathbf{x}}) + f(\vec{\mathbf{x}}) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \end{aligned} \tag{4.261}$$

$$\begin{aligned} H(\vec{\mathbf{x}}) &= \langle H(\vec{\mathbf{x}}) \rangle + h(\vec{\mathbf{x}}) = \\ &= m_H(\vec{\mathbf{x}}) + h(\vec{\mathbf{x}}) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \end{aligned} \tag{4.262}$$

sendo que as flutuações são *f.a.*'s estacionárias com valor esperado nulo

$$\langle f(\vec{\mathbf{x}}) \rangle = E[f(\vec{\mathbf{x}})] = 0 \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{4.263}$$

$$\langle h(\vec{\mathbf{x}}) \rangle = E[h(\vec{\mathbf{x}})] = 0 \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{4.264}$$

Visto que se admite que os valores esperados de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $H(\vec{\mathbf{x}})$ são conhecidos, estimar a distribuição espacial de uma destas *f.a.*'s é o mesmo que estimar a distribuição das respectivas flutuações. Assim, e de acordo com um dos princípios básicos enunciados, o valor estimado da flutuação de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ em $\vec{\mathbf{x}}_a$ é gerado por uma combinação linear das flutuações conhecidas das duas *f.a.*'s

$$f^*(\vec{\mathbf{x}}_a) = \sum_{i=1}^{n_Y} \lambda_{ai} f(\vec{\mathbf{x}}_i) + \sum_{j=1}^{n_H} \mu_{aj} h(\vec{\mathbf{x}}_j) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_a \in \Omega \tag{4.265}$$

ou

$$Y^*(\vec{\mathbf{x}}_a) - m_Y(\vec{\mathbf{x}}_a) = \sum_{i=1}^{n_Y} \lambda_{ai}\left[Y(\vec{\mathbf{x}}_i) - m_Y(\vec{\mathbf{x}}_i)\right] + \sum_{j=1}^{n_H} \mu_{aj}\left[H(\vec{\mathbf{x}}_j) - m_H(\vec{\mathbf{x}}_j)\right]$$
$$\forall \vec{\mathbf{x}}_a \in \Omega \tag{4.266}$$

sendo $n_Y$ e $n_H$ os números de pontos do domínio onde são conhecidos os valores de, respectivamente, $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $H(\vec{\mathbf{x}})$.

Os coeficientes da combinação linear, $\lambda_{ai}$ e $\mu_{aj}$, são determinados de modo a minimizar a variância do erro de estimação, $\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)$

$$\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a) = Y^*(\vec{\mathbf{x}}_a) - Y(\vec{\mathbf{x}}_a) = f^*(\vec{\mathbf{x}}_a) - f(\vec{\mathbf{x}}_a) \tag{4.267}$$

tal como na krigagem. A expressão desta variância

$$\mathrm{Var}\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)\right] = E\left[\left(\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a) - \langle\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)\rangle\right)^2\right] \tag{4.268}$$

é simplificada pela introdução da condição de viés nulo

$$\langle Y^*(\vec{\mathbf{x}}_a)\rangle = E\left[Y^*(\vec{\mathbf{x}}_a)\right] = Y(\vec{\mathbf{x}}_a) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_a \in \Omega \tag{4.269}$$

que implica que a esperança matemática do erro de estimação seja nulo

$$\langle\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)\rangle = \langle Y^*(\vec{\mathbf{x}}_a)\rangle - Y(\vec{\mathbf{x}}_a) = 0 \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_a \in \Omega \tag{4.270}$$

ficando a variância do erro de estimação reduzida a

$$\mathrm{Var}\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)\right] = E\left[\left(\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)\right)^2\right] \tag{4.271}$$

Introduzindo (4.267) em (4.271) e recorrendo a (4.265) para representar a estimação da flutuação obtém-se sucessivamente

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)] &= E\left[(\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a))^2\right] = E\left[\left(f^*(\vec{\mathbf{x}}_a) - f(\vec{\mathbf{x}}_a)\right)^2\right] = \\ &= E\left[\left(f^*(\vec{\mathbf{x}}_a)\right)^2 - 2f^*(\vec{\mathbf{x}}_a) f(\vec{\mathbf{x}}_a) + \left(f(\vec{\mathbf{x}}_a)\right)^2\right]\end{aligned} \tag{4.272}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)] = E\left[\left(\sum_{i=1}^{n_\gamma} \lambda_{ai} f(\vec{\mathbf{x}}_i) + \sum_{j=1}^{n_H} \mu_{aj} h(\vec{\mathbf{x}}_j)\right)\left(\sum_{k=1}^{n_\gamma} \lambda_{ak} f(\vec{\mathbf{x}}_k) + \sum_{l=1}^{n_H} \mu_{al} h(\vec{\mathbf{x}}_l)\right)\right] - \\ - 2E\left[\left(\sum_{i=1}^{n_\gamma} \lambda_{ai} f(\vec{\mathbf{x}}_i) + \sum_{j=1}^{n_H} \mu_{aj} h(\vec{\mathbf{x}}_j)\right) f(\vec{\mathbf{x}}_a)\right] + E\left[\left(f(\vec{\mathbf{x}}_a)\right)^2\right]\end{aligned} \tag{4.273}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)] = &\sum_{i=1}^{n_\gamma}\sum_{k=1}^{n_\gamma} \lambda_{ai}\lambda_{ak}\, E[f(\vec{\mathbf{x}}_i) f(\vec{\mathbf{x}}_k)] + \sum_{i=1}^{n_\gamma}\sum_{l=1}^{n_H} \lambda_{ai}\mu_{al}\, E[f(\vec{\mathbf{x}}_i) h(\vec{\mathbf{x}}_l)] + \\ &+ \sum_{j=1}^{n_H}\sum_{k=1}^{n_\gamma} \mu_{aj}\lambda_{ak}\, E[h(\vec{\mathbf{x}}_j) f(\vec{\mathbf{x}}_k)] + \sum_{j=1}^{n_H}\sum_{l=1}^{n_H} \mu_{aj}\mu_{al}\, E[h(\vec{\mathbf{x}}_j) h(\vec{\mathbf{x}}_l)] - \\ &- 2\sum_{i=1}^{n_\gamma} \lambda_{ai}\, E[f(\vec{\mathbf{x}}_i) f(\vec{\mathbf{x}}_a)] - 2\sum_{j=1}^{n_H} \mu_{aj}\, E[h(\vec{\mathbf{x}}_j) f(\vec{\mathbf{x}}_a)] + \\ &+ E[f(\vec{\mathbf{x}}_a) f(\vec{\mathbf{x}}_a)]\end{aligned} \tag{4.274}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)] = &\sum_{i=1}^{n_\gamma}\sum_{k=1}^{n_\gamma} \lambda_{ai}\lambda_{ak} C_{\gamma\gamma}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_k) + \sum_{i=1}^{n_\gamma}\sum_{l=1}^{n_H} \lambda_{ai}\mu_{al} C_{\gamma H}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_l) + \\ &+ \sum_{j=1}^{n_H}\sum_{k=1}^{n_\gamma} \mu_{aj}\lambda_{ak} C_{H\gamma}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k) + \sum_{j=1}^{n_H}\sum_{l=1}^{n_H} \mu_{aj}\mu_{al} C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_l) - \\ &- 2\sum_{i=1}^{n_\gamma} \lambda_{ai} C_{\gamma\gamma}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_a) - 2\sum_{j=1}^{n_H} \mu_{aj} C_{H\gamma}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_a) + C_{\gamma\gamma}(\vec{\mathbf{x}}_a, \vec{\mathbf{x}}_a)\end{aligned} \tag{4.275}$$

$$\forall \vec{\mathbf{x}}_a \in \Omega$$

Para minimizar a variância do erro de estimação anulam-se as primeiras derivadas desta em ordem aos $n_Y$ coeficientes $\lambda_{ai}$

$$\frac{\partial \mathrm{Var}[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)]}{\partial \lambda_{ai}} = 2\sum_{k=1}^{n_Y} \lambda_{ak} C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_k) + 2\sum_{l=1}^{n_H} \mu_{al} C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_l) - 2C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_a) = 0 \qquad (4.276)$$

$$i = 1, ..., n_Y$$

e aos coeficientes $\mu_{aj}$

$$\frac{\partial \mathrm{Var}[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)]}{\partial \mu_{aj}} = 2\sum_{k=1}^{n_Y} \lambda_{ak} C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k) + 2\sum_{l=1}^{n_H} \mu_{al} C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_l) - 2C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_a) = 0 \qquad (4.277)$$

$$j = 1, ..., n_H$$

Procedendo às adequadas simplificações, obtém-se o sistema de equações

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^{n_Y} \lambda_{ak} C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_k) + \sum_{l=1}^{n_H} \mu_{al} C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_l) = C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_a) \quad , \quad i = 1, ..., n_Y \\ \sum_{k=1}^{n_Y} \lambda_{ak} C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_k) + \sum_{l=1}^{n_H} \mu_{al} C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_l) = C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_a) \quad , \quad j = 1, ..., n_H \end{cases} \qquad (4.278)$$

que determina os valores dos coeficientes $\lambda_{ai}$ e $\mu_{aj}$. Introduzindo as igualdades deste sistema de equações na expressão (4.275) e procedendo às adequadas simplificações obtém-se a variância do erro de estimação no ponto de coordenadas $\vec{\mathbf{x}}_a$

$$\sigma_Y^{2,CKS}(\vec{\mathbf{x}}_a) = \sigma_Y^2(\vec{\mathbf{x}}_a) - \sum_{i=1}^{n_Y} \lambda_{ai} C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i, \vec{\mathbf{x}}_a) - \sum_{j=1}^{n_H} \mu_{aj} C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j, \vec{\mathbf{x}}_a) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_a \in \Omega \qquad (4.279)$$

ou

$$\sigma_Y^{2,CKS}(\vec{\mathbf{x}}_a) = \sigma_Y^2(\vec{\mathbf{x}}_a) - \sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{ai}\lambda_{ak}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k) - 2\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{l=1}^{n_H}\lambda_{ai}\mu_{al}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l) - \\ - \sum_{j=1}^{n_H}\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{aj}\mu_{al}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l) \quad , \quad \forall\vec{\mathbf{x}}_a \in \Omega \tag{4.280}$$

conforme a substituição efectuada com as igualdades do sistema de equações (4.278).

Estas expressões, que materializam a estimação por cokrigagem de uma *f.a.* correlacionada com uma outra *f.a.*, requerem o conhecimento prévio dos valores médios e das covariâncias das duas *f.a.*'s e ainda das covariâncias cruzadas entre estas.

Uma simples comparação permite concluir que estas expressões, nomeadamente as que definem o sistema de equações (4.278), o valor estimado (4.266) e a variância do erro de estimação (4.280), são idênticas às apresentadas na secção 4.6.6 para o sistema de equações, média e variância condicionadas de uma *f.a.* multivariada normal correlacionada com outra do mesmo tipo, respectivamente (4.170), (4.169) e (4.178). É possível detectar idêntica analogia entre a covariância condicionada (4.176) e a covariância dos erros de estimação por cokrigagem, cuja dedução recorre a procedimentos similares aos utilizados para a variância do erro de estimação

$$C_{YY}^{CKS}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b) \equiv C\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a),\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_b)\right] = E\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)\,\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_b)\right] = \\ = E\left[\left(f^*(\vec{\mathbf{x}}_a) - f(\vec{\mathbf{x}}_a)\right)\left(f^*(\vec{\mathbf{x}}_b) - f(\vec{\mathbf{x}}_b)\right)\right] = \\ = E\left[f^*(\vec{\mathbf{x}}_a)f^*(\vec{\mathbf{x}}_b) - f^*(\vec{\mathbf{x}}_a)f(\vec{\mathbf{x}}_b) - f^*(\vec{\mathbf{x}}_b)f(\vec{\mathbf{x}}_a) + f(\vec{\mathbf{x}}_a)f(\vec{\mathbf{x}}_b)\right] \tag{4.281}$$

$$C_{YY}^{CKS}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=E\left[\left(\sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}f(\vec{\mathbf{x}}_i)+\sum_{j=1}^{n_H}\mu_{aj}h(\vec{\mathbf{x}}_j)\right)\left(\sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{bk}f(\vec{\mathbf{x}}_k)+\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{bl}h(\vec{\mathbf{x}}_l)\right)\right]-$$

$$-E\left[\left(\sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}f(\vec{\mathbf{x}}_i)+\sum_{j=1}^{n_H}\mu_{aj}h(\vec{\mathbf{x}}_j)\right)f(\vec{\mathbf{x}}_b)\right]- \tag{4.282}$$

$$-E\left[\left(\sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{bk}f(\vec{\mathbf{x}}_k)+\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{bl}h(\vec{\mathbf{x}}_l)\right)f(\vec{\mathbf{x}}_a)\right]+E\left[f(\vec{\mathbf{x}}_a)f(\vec{\mathbf{x}}_b)\right]$$

$$C_{YY}^{CKS}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{ai}\lambda_{bk}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k)+\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{l=1}^{n_H}\lambda_{ai}\mu_{bl}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l)+$$

$$+\sum_{j=1}^{n_H}\sum_{k=1}^{n_Y}\mu_{aj}\lambda_{bk}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k)+\sum_{j=1}^{n_H}\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{aj}\mu_{bl}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l)-$$

$$-\sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_b)-\sum_{j=1}^{n_H}\mu_{aj}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_b)- \tag{4.283}$$

$$-\sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{bk}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_k,\vec{\mathbf{x}}_a)-\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{bl}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_l,\vec{\mathbf{x}}_a)+C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)$$

Introduzindo em (4.283) as igualdades dos sistemas de equações escritos para os pontos $\vec{\mathbf{x}}_a$ e $\vec{\mathbf{x}}_b$ obtém-se, finalmente, a covariância entre os erros de estimação por cokrigagem

$$C_{YY}^{CKS}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)-\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{ai}\lambda_{bk}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k)-\sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{l=1}^{n_H}\lambda_{ai}\mu_{bl}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l)-$$

$$-\sum_{j=1}^{n_H}\sum_{k=1}^{n_Y}\mu_{aj}\lambda_{bk}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k)-\sum_{j=1}^{n_H}\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{aj}\mu_{bl}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l) \tag{4.284}$$

$$\forall\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b\in\Omega$$

que tem, conforme já foi referido, um aspecto idêntico à expressão (4.176) da covariância condicionada simultaneamente a valores conhecidos de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $H(\vec{\mathbf{x}})$.

### 4.7.6 Cokrigagem de uma função aleatória estacionária, com média conhecida ou não

Na secção anterior, a cokrigagem foi introduzida sem nenhuma simplificação ou restrição relativamente às *f.a.*'s envolvidas para além do conhecimento prévio dos valores esperados (médias), covariâncias e covariâncias cruzadas. Na literatura sobre este método de estimação é habitual apresentá-lo, e às respectivas equações, de uma forma compartimentada, isto é, para *f.a.*'s estacionárias, *f.a.*'s intrínsecas e *f.a.*'s não intrínsecas[57]. Contudo, e porque essa abordagem não se ajusta aos objectivos do presente trabalho, optou-se por tratar dois casos particulares, tomando como ponto de partida os conceitos e as equações da secção anterior. Esta opção é justificada pela natureza e pelas características das *f.a.*'s tratadas no presente trabalho. De facto, quando no respectivo capítulo for estudado o problema da estimação de uma propriedade hidrogeológica, tirando partido da correlação desta com a piezometria, estar-se-á perante duas *f.a.*'s com classificações probabilísticas diferentes. Enquanto que, por exemplo, a transformada logarítmica da transmissividade, $Y(\vec{\mathbf{x}})$, pode ser representada por uma *f.a.* estacionária, já o mesmo não se considera apropriado para a cota piezométrica, $H(\vec{\mathbf{x}},t)$. Por este motivo, entendeu-se como mais adequado desenvolver e apresentar as expressões da cokrigagem à medida das necessidades do presente trabalho, ou seja, expressões que realizem a estimação de uma *f.a.* estacionária com média conhecida ou não, correlacionada com uma outra *f.a.* não estacionária mas com média conhecida.

Para o primeiro caso, a estimação de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ admitindo que é uma *f.a.* estacionária com média conhecida, $m_Y$, introduz-se a simplificação

$$m_Y(\vec{\mathbf{x}}) = m_Y \ , \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{4.285}$$

na expressão (4.266), ficando

$$Y^*(\vec{\mathbf{x}}_a) = m_Y + \sum_{i=1}^{n_Y} \lambda_{ai}\left[Y(\vec{\mathbf{x}}_i) - m_Y\right] + \sum_{j=1}^{n_H} \mu_{aj}\left[H(\vec{\mathbf{x}}_j) - m_H(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_a \in \Omega \tag{4.286}$$

[57] É o caso, por exemplo, de Samper e Carrera (1990).

com os coeficientes da combinação linear, $\lambda_{ai}$ e $\mu_{aj}$, determinados pelo sistema de equações (4.278). A variância e a covariância dos erros de estimação são também calculadas com as expressões da secção anterior, respectivamente (4.279), ou (4.280), e (4.284).

Para o segundo caso, correspondente à situação em que a média, $m_Y$, não é conhecida, recorre-se a um procedimento idêntico ao utilizado na dedução das expressões da krigagem ordinária, isto é, elimina-se $m_Y$ de (4.286) através de um arranjo desta expressão

$$Y^*(\vec{\mathbf{x}}_a) = m_Y\left(1-\sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}\right)+\sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}Y(\vec{\mathbf{x}}_i)+\sum_{j=1}^{n_H}\mu_{aj}\left[H(\vec{\mathbf{x}}_j)-m_H(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \tag{4.287}$$

e da introdução da restrição

$$1-\sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}=0 \tag{4.288}$$

Tal como então, é preciso reformular o problema da minimização da variância do erro de estimação tendo presente esta restrição. Para o efeito é definida a função Lagrangeano

$$L(\lambda_{ai},\mu_{aj},\eta_a)=\mathrm{Var}\left[\varepsilon(\vec{\mathbf{x}}_a)\right]+2\eta_a\left(1-\sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}\right) \tag{4.289}$$

onde a variância do erro de estimação é traduzida pela expressão (4.275) deduzida na secção anterior e $\eta_a$ é o multiplicador de Lagrange correspondente à restrição (4.288)[58]. Para a minimização do Lagrangeano anulam-se as primeiras derivadas deste em ordem aos $n_Y$ coeficientes $\lambda_{ai}$, aos $n_H$ coeficientes $\mu_{aj}$ e ao multiplicador de Lagrange $\eta_a$

[58] Tal como se fez na secção 4.7.2, a restrição igualdade é multiplicada por 2 para se obter uma melhor apresentação final das expressões.

$$\frac{\partial L(\lambda_{ai},\mu_{aj},\eta_a)}{\partial \lambda_{ai}} = 2\sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{ak}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k)+2\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{al}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l)- \\ -2C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_a)-2\eta_a=0 \quad , \quad i=1,...,n_Y \tag{4.290}$$

$$\frac{\partial L(\lambda_{ai},\mu_{aj},\eta_a)}{\partial \mu_{aj}} = 2\sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{ak}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k)+2\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{al}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l)- \\ -2C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_a)=0 \quad , \quad j=1,...,n_H \tag{4.291}$$

$$\frac{\partial L(\lambda_{ai},\mu_{aj},\eta_a)}{\partial \eta_a} = 2\left(1-\sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}\right)=0 \tag{4.292}$$

Procedendo às adequadas simplificações chega-se ao sistema de $n_Y+n_H+1$ equações a outras tantas incógnitas, os coeficientes $\lambda_{ai}$, $\mu_{aj}$ e o multiplicador de Lagrange $\eta_a$

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{ak}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k)+\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{al}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l)-\eta_a=C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_a) & , \quad i=1,...,n_Y \\ \sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{ak}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k)+\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{al}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l)=C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_a) & , \quad j=1,...,n_H \\ \sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}=1 \end{cases} \tag{4.293}$$

que permitem estimar o valor da *f.a.* estacionária com média desconhecida, $Y(\vec{\mathbf{x}})$, no ponto $\vec{\mathbf{x}}_a$ recorrendo à expressão

$$Y^*(\vec{\mathbf{x}}_a)=\sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}Y(\vec{\mathbf{x}}_i)+\sum_{j=1}^{n_H}\mu_{aj}\left[H(\vec{\mathbf{x}}_j)-m_H(\vec{\mathbf{x}}_j)\right] \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_a \in \Omega \tag{4.294}$$

Introduzindo as igualdades do sistema de equações (4.293) em (4.275) obtêm-se as expressões da variância do erro de estimação por cokrigagem da *f.a.* $Y(\vec{\mathbf{x}})$ estacionária e com média desconhecida

$$\sigma_Y^{2,CKO}(\vec{\mathbf{x}}_a) = C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_a) + \eta_a - \sum_{i=1}^{n_Y}\lambda_{ai}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_a) - \sum_{j=1}^{n_H}\mu_{aj}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_a)$$
$$\forall\vec{\mathbf{x}}_a \in \Omega \tag{4.295}$$

ou

$$\sigma_Y^{2,CKO}(\vec{\mathbf{x}}_a) = C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_a) - \sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{ai}\lambda_{ak}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k) - \sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{l=1}^{n_H}\lambda_{ai}\mu_{al}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l) -$$
$$- \sum_{j=1}^{n_H}\sum_{k=1}^{n_Y}\mu_{aj}\lambda_{ak}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k) - \sum_{j=1}^{n_H}\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{aj}\mu_{al}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l) + \tag{4.296}$$
$$+ 2\eta_a \quad , \quad \forall\vec{\mathbf{x}}_a \in \Omega$$

correspondentes a diferentes estratégias seguidas na simplificação. Finalmente, utilizando procedimentos similares aos da secção anterior, nomeadamente a substituição em (4.283) das igualdades dos sistemas de equações escritos para os pontos $\vec{\mathbf{x}}_a$ e $\vec{\mathbf{x}}_b$, chega-se à covariância entre os erros de estimação por cokrigagem de $Y(\vec{\mathbf{x}})$, para o caso em que esta é uma *f.a.* estacionária com média desconhecida

$$C_{YY}^{CKO}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b) = C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b) - \sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{k=1}^{n_Y}\lambda_{ai}\lambda_{bk}C_{YY}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_k) - \sum_{i=1}^{n_Y}\sum_{l=1}^{n_H}\lambda_{ai}\mu_{bl}C_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_l) -$$
$$- \sum_{j=1}^{n_H}\sum_{k=1}^{n_Y}\mu_{aj}\lambda_{bk}C_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_k) - \sum_{j=1}^{n_H}\sum_{l=1}^{n_H}\mu_{aj}\mu_{bl}C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_j,\vec{\mathbf{x}}_l) + \tag{4.297}$$
$$+ \eta_a + \eta_b \quad , \quad \forall\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b \in \Omega$$

Analogamente à krigagem, o conhecimento ou desconhecimento da média da *f.a.* que se pretende estimar reflecte-se principalmente na incerteza da estimação, traduzida pela variância do respectivo erro. A não introdução do valor da média no problema da estimação, por este ser eventualmente desconhecido, implica um agravamento da incerteza quanto à caracterização probabilística da *f.a.* pelo que a variância do erro de estimação vem

naturalmente aumentada. Constituem excepção os pontos onde o valor da *f.a.* a estimar é conhecido, relativamente aos quais a variância é nula.

A notação utilizada para estes dois casos de cokrigagem, respectivamente *CKS* e *CKO*, é inspirada na semelhança de metodologias com a krigagem simples, *KS*, e com a krigagem ordinária, *KO*. Mas a sua utilização não significa que se devam utilizar as designações de "cokrigagem simples" e "cokrigagem ordinária" para estes dois casos[59].

### 4.7.7 Algumas considerações sobre a cokrigagem

A cokrigagem também é um método exacto de estimação na medida em que os valores gerados para a *f.a.* a estimar coincidem com os medidos e a variância do erro de estimação é nula nos pontos do domínio onde a *f.a.* tem valores conhecidos. Neste aspecto não se distingue da krigagem. A diferença substancial está na possibilidade de enriquecer a estimação de uma determinada propriedade pela incorporação de dados respeitantes a outra ou outras propriedades correlacionadas com a primeira. Este enriquecimento deverá reflectir-se, simultaneamente, numa melhor estimação da propriedade em causa e numa redução da variância, logo da incerteza, dessa estimação.

Do ponto de vista operacional, isto é, da elaboração e aplicação dos algoritmos de cálculo, a cokrigagem é mais complexa do que a krigagem devido ao facto de trabalhar com mais do que uma variável. Contudo, esta maior complexidade conceptual, que exige uma mais cuidada elaboração dos algoritmos de cálculo, não constitui a principal dificuldade a ultrapassar. De facto, esta encontra-se na quantificação das médias e das covariâncias das *f.a.*'s envolvidas e das respectivas covariâncias cruzadas. Esta quantificação assenta nos dados recolhidos, sobre os quais são calculadas as covariâncias experimentais de cada *f.a.* e, ainda, as covariâncias cruzadas experimentais. A seguir, estas funções experimentais são aproximadas por modelos teóricos, à semelhança do já referido a propósito da covariância ou do semivariograma no sub-capítulo 4.4. Mas, a selecção e configuração dos modelos teóricos

---

[59] Trata-se somente de uma comodidade ao nível da notação, da exclusiva responsabilidade do autor deste trabalho. De resto, as designações de "cokrigagem simples" ou "cokrigagem ordinária" não se encontram na literatura respeitante a estas matérias.

para as covariâncias cruzadas constitui uma tarefa mais complicada do que para as covariâncias simples porque aqueles devem respeitar um conjunto de restrições, imposto pela exigência de que a variância de estimação seja sempre positiva, de cumprimento mais difícil[60]. Assim, este processo de análise das estruturas de correlação espacial de cada uma das *f.a.*'s e das estruturas de correlação entre as diferentes *f.a.*'s é mais complexo do que a análise estrutural de uma só *f.a.* e, por isso, ainda mais prejudicado pela habitual escassez de dados de campo. Em particular, os momentos cruzados são difíceis de estimar quando os dados comuns às várias *f.a.*'s são escassos ou quando essas *f.a.*'s estão debilmente correlacionadas[61].

Tendo em conta estas considerações, importa observar que, tal como para a krigagem, as imprecisões ou incorrecções na definição dos modelos teóricos dos diversos momentos presentes nas expressões do método afectam a qualidade da estimação produzida. E que a incerteza da estimação, geralmente quantificada pela respectiva variância, é agravada pela incerteza da avaliação dos parâmetros estatísticos que configuram os modelos teóricos utilizados. Postas as coisas nestes termos, coloca-se a questão de saber se vale a pena investir na cokrigagem para estimar a distribuição de uma determinada propriedade ou fenómeno se, para tal, é preciso escolher e quantificar modelos teóricos de mais funções a partir de dados de campo eventualmente escassos, sabendo-se que os erros cometidos na selecção e quantificação desses modelos se reflectirão na bondade dos resultados finais produzidos. A resposta a esta questão terá que ser encontrada para cada caso tendo em conta a natureza das propriedades ou fenómenos a tratar e o número de dados de campo disponíveis.

No caso particular da estimação de uma propriedade hidrogeológica de um aquífero – por exemplo, a transmissividade – tirando partido da correlação com a piezometria, os obstáculos referidos no parágrafo anterior podem ser contornados com o auxílio da modelação inversa. Como se verá adiante, esta metodologia permite deduzir a covariância da piezometria e a covariância cruzada desta com a propriedade hidrogeológica, unicamente a partir do modelo teórico proposto para esta propriedade. Em termos práticos, a contribuição da piezometria para a cokrigagem confina-se, apenas, aos níveis medidos, dispensando-se qualquer análise de âmbito exclusivamente geoestatístico sobre os campos piezométricos e sobre a correlação destes com a propriedade em causa.

---

[60] Esta matéria é tratada nos sub-capítulos 11.6 e 11.7 de Samper e Carrera (1990) a propósito da estimação da covariância e do semivariograma cruzados. Este assunto é também abordado em Ahmed e Marsily (1987).

[61] Samper e Carrera (1990), secção 11.8.5.

Sendo esta matéria um dos temas centrais do presente trabalho, importa explicar o outro motivo, para além dos referidos no primeiro parágrafo de 4.7.6, que justifica a não consideração da formulação da cokrigagem válida para *f.a.*'s intrínsecas. Trata-se de formulação que assenta na definição de semivariograma, em particular na do semivariograma cruzado entre duas *f.a.*'s

$$\gamma_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=\frac{1}{2}E\left[\left(Y(\vec{\mathbf{x}}_a)-Y(\vec{\mathbf{x}}_b)\right)\left(H(\vec{\mathbf{x}}_a)-H(\vec{\mathbf{x}}_b)\right)\right] \tag{4.298}$$

o qual até pode, sublinhe-se, tomar valores negativos, ao contrário do semivariograma simples. Ainda de acordo com esta definição, verifica-se que o semivariograma cruzado é simétrico tanto para as *f.a.*'s como para os pontos do domínio em causa

$$\gamma_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=\gamma_{HY}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b) \tag{4.299}$$

$$\gamma_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_a,\vec{\mathbf{x}}_b)=\gamma_{YH}(\vec{\mathbf{x}}_b,\vec{\mathbf{x}}_a) \tag{4.300}$$

Atendendo a que a covariância cruzada não é necessariamente simétrica [(4.195) e (4.196)], trabalhar com covariâncias ou semivariogramas cruzados pode não ser equivalente, ao contrário do que sucede na krigagem de uma única *f.a.*. De facto, essa equivalência só existe para os casos em que a covariância cruzada é simétrica, o que não acontece entre as propriedades hidrogeológicas e a piezometria, cujas correlações cruzadas são influenciadas por desfasamentos espaciais e temporais.

A cokrigagem não é mais do que uma extensão dos princípios básicos da krigagem à estimação de uma *f.a.* quando esta está correlacionada com outra ou outras *f.a.*'s. E, conforme se evidenciou na secção 4.7.5, as expressões da cokrigagem para o caso das *f.a.*'s com valores esperados (ou médias) conhecidos são idênticas às que definem os momentos condicionados de uma *f.a.* correlacionada com outra ou outras *f.a.*'s (secção 4.6.6). Estes factos convidam a estender à cokrigagem algumas das observações feitas para a krigagem na secção 4.7.4, nomeadamente a de que constitui o melhor estimador absoluto quando as *f.a.*'s são consideradas conjuntamente multivariadas normais. Quanto à possibilidade de a cokrigagem

constituir o melhor estimador linear não enviesado, a bibliografia consultada não apresenta uma declaração taxativa nesse sentido, embora a dedução das expressões continue a assentar no princípio da variância mínima para o erro de estimação. Em Samper e Carrera (1990)[62] afirma-se que o método da cokrigagem é "o mais rigoroso e o que se baseia no menor número de hipóteses". Mas também se escreve que este método requer "um número relativamente alto de pontos nos quais se tenham medido todas as variáveis para poder estimar com certa fiabilidade os semivariogramas cruzados". E que quando tal não acontece o método "perde quase toda a sua superioridade".

No mesmo sub-capítulo de Samper e Carrera (1990), é feita uma análise comparativa da cokrigagem relativamente a outras técnicas alternativas de estimação de *f.a.*'s espacialmente correlacionadas que, eventualmente, poderão superar em qualidade de resultados e tempo de cálculo a cokrigagem, em particular quando a escassez de dados prejudica ou impossibilita a utilização deste estimador. Uma dessas técnicas é a da "krigagem com deriva externa" que dispensa o semivariograma cruzado e apenas exige a definição do semivariograma teórico da *f.a.* a estimar. Em contrapartida, carece do conhecimento dos valores das *f.a.*'s nos pontos onde se pretende estimar uma outra *f.a.*, pelo que é necessário proceder à prévia estimação das distribuições espaciais das *f.a.*'s de apoio com uma técnica de interpolação que poderá ser, por exemplo, a krigagem[63] simples ou a ordinária. Mas, tal como referem Ahmed e Marsily (1987), o erro de estimação introduzido por este procedimento não é avaliado.

---

[62] Sub-capítulo 11.8.

[63] Se for utilizada a krigagem, acaba por ser necessário definir as covariâncias ou os semivariogramas teóricos das *f.a.*'s de apoio.

*CAPÍTULO 5*

# HIDROGEOLOGIA ESTOCÁSTICA. SIMULAÇÃO DIRECTA


5.1 Introdução 5.1

5.2 Algumas considerações sobre a diferenciação e integração de funções aleatórias 5.3

5.3 Métodos de simulação directa estocástica 5.6
5.3.1 Método espectral 5.9
5.3.2 Método numérico de desenvolvimentos em série 5.18

5.4 Método das simulações de Monte-Carlo 5.23
5.4.1 Realizações de uma função aleatória 5.25
5.4.2 Método de simulação sequencial gaussiana 5.27
5.4.3 Método de recozimento simulado 5.31
5.4.4 Simulações de Monte-Carlo não condicionadas 5.34
5.4.5 Simulações de Monte-Carlo condicionadas 5.48

5.5 Método das perturbações 5.62
5.5.1 Considerações iniciais 5.62
5.5.2 Aquíferos confinados. Equações diferenciais 5.79
5.5.3 Aquíferos não confinados. Equações diferenciais 5.88
5.5.4 Valor esperado e covariância do nível piezométrico 5.98
5.5.5 Integração numérica da equação diferencial dos valores esperados 5.103
5.5.6 Integração numérica da equação diferencial das perturbações de $H$ e $Y$ 5.133
5.5.7 Integração numérica da equação diferencial das perturbações de $H$ e $G$ 5.150
5.5.8 Exemplos de aplicação do método das perturbações. Comparação com simulações de Monte-Carlo não condicionadas. 5.160
5.5.9 Exemplos de aplicação do método das perturbações. Comparação com simulações de Monte-Carlo condicionadas. 5.168

5.6 Simulação directa estocástica. Exercícios 5.183
5.6.1 Aquífero confinado 5.183
5.6.2 Aquífero não confinado 5.251


## 5.1 Introdução

No capítulo anterior já foi introduzida a problemática da *hidrogeologia estocástica*, nomeadamente a interpretação dos parâmetros hidrogeológicos como *funções aleatórias* e, por consequência, a conversão das equações diferenciais que regem o escoamento em meios porosos em *equações diferenciais estocásticas* onde a variável dependente (ou de estado) é um *processo estocástico*, a caracterizar estatisticamente. Em termos práticos, esta caracterização é geralmente efectuada pelo valor esperado (ou média) da variável de estado e pela respectiva variância.

Com a finalidade de reintroduzir o problema retomem-se as equações diferenciais em causa

$$-\vec{\nabla}\,|\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H\right)+S\frac{\partial H}{\partial t}+Q+\sum_{i=1}^{N_w}Q_{w,i}\delta(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i)=0 \tag{5.1}$$

Aquíferos confinados

$$-\vec{\nabla}\,|\left[(H-Z_{\text{fundo}})\mathbf{K}\cdot\vec{\nabla}H\right]+\omega_d\frac{\partial H}{\partial t}+Q+\sum_{i=1}^{N_w}Q_{w,i}\delta(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_i)=0 \tag{5.2}$$

Aquíferos não confinados

e as respectivas condições iniciais

$$H(\vec{\mathbf{x}},t)=H_0(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{para} \quad t=0\,,\ \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega \tag{5.3}$$

e de fronteira

$$H(\vec{\mathbf{x}},t)=H_{\text{definido}}(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Dirichlet}}\,,\ \forall t \tag{5.4}$$

$$-\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H\right)|\,\vec{\mathbf{n}}=q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Neumann}}\,,\ \forall t \tag{5.5}$$

$$H+a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathbf{T}\cdot\vec{\nabla}H\right)|\,\vec{\mathbf{n}}+b(\vec{\mathbf{x}},t)=0 \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Cauchy}}\,,\ \forall t \tag{5.6}$$

para aquíferos confinados. Estas duas últimas condições escrevem-se

$$-\left[(H-Z_{\text{fundo}})\mathbf{K}\cdot\vec{\nabla}H\right]|\,\vec{\mathbf{n}}=q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Neumann}}\,,\ \forall t \tag{5.7}$$

$$H+a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[(H-Z_{\text{fundo}})\mathbf{K}\cdot\vec{\nabla}H\right]|\,\vec{\mathbf{n}}+b(\vec{\mathbf{x}},t)=0 \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Cauchy}}\,,\ \forall t \tag{5.8}$$

para aquíferos não confinados. Em ambos os casos $q_n$, $a$ e $b$ são previamente definidos. Conforme oportunamente se explicitou, é um dos objectivos deste trabalho o estudo das equações diferenciais estocásticas que resultam da representação dos parâmetros hidrogeológicos, ou parâmetros do sistema ($T$ ou $K$, $S$ ou $\omega_d$), por *funções aleatórias* (*f.a.*'s).

Ficam de fora os casos em que a condição inicial, as condições fronteira ou as parcelas extracção/recarga são processos estocásticos.

## 5.2 Algumas considerações sobre a diferenciação e integração de funções aleatórias

Uma vez estabelecido o problema a estudar, e antes de abordar com mais detalhe os métodos aplicáveis, importa efectuar uma revisão de algumas das definições e conceitos envolvidos. Assim, e a propósito da convergência e continuidade das *f.a.*'s, Dagan (1989) começa por introduzir a definição de *convergência em média quadrática*. Diz-se, então, que uma sucessão de variáveis aleatórias $Z_1, Z_2, ..., Z_n$ converge para a variável aleatória $Z$ em média quadrática se

$$\lim_{n\to\infty} E\left[(Z_n - Z)^2\right] \equiv \lim_{n\to\infty} \langle (Z_n - Z)^2 \rangle = 0 \tag{5.9}$$

Ainda segundo Dagan (1989), se esta condição for satisfeita tem-se que

$$\langle \lim_{n\to\infty} Z_n \rangle = \lim_{n\to\infty} \langle Z_n \rangle = \langle Z \rangle \tag{5.10}$$

ou seja, os operadores limite e esperança matemática comutam.

Continuando a acompanhar este autor, uma *f.a.* $Z(\vec{\mathbf{x}})$ diz-se *contínua em média quadrática* no ponto $\vec{\mathbf{x}}$ se

$$\lim_{|\vec{\mathbf{h}}|\to 0} \langle \left[Z(\vec{\mathbf{x}} + \vec{\mathbf{h}}) - Z(\vec{\mathbf{x}})\right]^2 \rangle = 0 \tag{5.11}$$

condição que pode ser rescrita do seguinte modo

$$\lim_{|\vec{\mathbf{h}}|\to 0} C_{ZZ}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{x}} + \vec{\mathbf{h}}) = C_{ZZ}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{x}}) = \sigma_Z^2(\vec{\mathbf{x}}) \tag{5.12}$$

No caso particular das *f.a.*'s estacionárias de segunda ordem, se $Z(\vec{\mathbf{x}})$ for continua em média quadrática no ponto $\vec{\mathbf{x}}$, então também é contínua em qualquer outro ponto $\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{h}}$. A correspondente condição necessária e suficiente de continuidade é, de acordo com (5.12),

$$\lim_{|\vec{\mathbf{h}}|\to 0} C_{ZZ}(\vec{\mathbf{h}}) = C_{ZZ}(\vec{\mathbf{0}}) = \sigma_Z^2 \tag{5.13}$$

com a covariância de $Z(\vec{\mathbf{x}})$ contínua para qualquer vector separação.

Para a definição de derivada de uma *f.a.* considere-se agora, em benefício da simplicidade de notação, uma *f.a.* unidimensional, $Z(x)$. Esta *f.a.* é *diferenciável em média quadrática* no ponto $x$ e tem a *f.a.* $dZ(x)/dx$ como sua derivada nesse ponto se

$$\lim_{\varepsilon\to 0} E\left[\left(\frac{Z(x+\varepsilon)-Z(x)}{\varepsilon} - \frac{dZ(x)}{dx}\right)^2\right] = 0 \tag{5.14}$$

Esta definição, extensível a domínios de dimensão superior, é válida para as derivadas parciais das *f.a.*'s. Segundo Dagan (1989), a condição necessária e suficiente para que em $x$ exista $dZ(x)/dx$ definida por (5.14) é a de que a covariância $C_{ZZ}(x,x+h)$ possua as derivadas parciais $\partial C_{ZZ}/\partial x$, $\partial C_{ZZ}/\partial h$ e $\partial^2 C_{ZZ}/\partial x\,\partial h$ quando $h$ tender para zero. Se $dZ(x)/dx$ existir para todo o domínio, então esta condição é extensível para qualquer ponto e qualquer grandeza do vector separação.

O *integral* de uma *f.a. em média quadrática* pode ser definido de um modo análogo, envolvendo o limite do somatório em média quadrática. Continuando com Dagan (1989), o integral estendido a um determinado domínio $n$-dimensional, $V$, do produto de uma função determinística contínua, $A(\vec{\mathbf{x}})$, por uma aleatória, $Z(\vec{\mathbf{x}})$, é expresso por

$$U = \int_V A(\vec{\mathbf{x}})\, Z(\vec{\mathbf{x}})\, dV \tag{5.15}$$

com $dV = dx_1 dx_2 \ldots dx_n$. Este integral pode ser aproximado pelo somatório

$$U_N = \sum_{i=1}^{N} A(\vec{\mathbf{x}}_i)\, Z(\vec{\mathbf{x}}_i)\, \Delta V_i \tag{5.16}$$

onde $\Delta V_i$ representa o elemento de domínio em torno de $\vec{\mathbf{x}}_i$. Se $N \to \infty$, com a dimensão do maior $\Delta V_i$ a tender para zero, a variável $U_N$ converge em média quadrática para $U$, isto é,

$$\lim_{N\to\infty} \langle (U_N - U)^2 \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \text{máximo}\, \Delta V_i \to 0 \tag{5.17}$$

então $U$ é o integral estocástico do produto $A(\vec{\mathbf{x}})\, Z(\vec{\mathbf{x}})$ relativamente ao domínio $V$. A condição necessária e suficiente para que se verifique (5.17) é que exista a igualdade

$$\langle (U')^2 \rangle = \langle (U - \langle U \rangle)^2 \rangle = \int_V \int_V A(\vec{\mathbf{x}})\, A(\vec{\mathbf{y}})\, C_{ZZ}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{y}})\, dV\, dW \tag{5.18}$$

que representa a variância de $U$, com $dW = dy_1 dy_2 \ldots dy_n$ e o valor esperado expresso por

$$\langle U \rangle = \int_V A(\vec{\mathbf{x}}) \langle Z(\vec{\mathbf{x}}) \rangle\, dV \tag{5.19}$$

No caso particular de $Z(\vec{\mathbf{x}})$ ser uma *f.a.* estacionária de segunda ordem, a expressão (5.18) pode ser rescrita com a covariância dependendo do vector separação $\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{y}}$

$$\sigma_U^2 = \int_V A(\vec{\mathbf{x}})\, dV \int_V A(\vec{\mathbf{y}})\, C_{ZZ}(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{y}})\, dW \tag{5.20}$$

Como salienta Gelhar (1993), a definição de derivada de uma *f.a.* em média quadrática é particularmente útil na medida em que as suas propriedades podem ser expressas em função dos momentos de primeira e segunda ordem da *f.a.*. Também este autor refere que quando a derivada e o integral em média quadrática existem, as habituais regras do cálculo diferencial e integral, válidas para funções determinísticas, são aplicáveis à diferenciação e integração em média quadrática[1].

---

[1] Gelhar (1993) remete para Soong (1973) a demonstração desta afirmação.

Uma das propriedades mais simples e de grande utilidade é a de que o valor esperado da derivada de uma *f.a.* é igual à derivada do valor esperado da *f.a.*

$$\langle \frac{dZ(x)}{dx} \rangle = \frac{d\langle Z(x) \rangle}{dx} \tag{5.21}$$

e pode ser escrita, em derivadas parciais, para domínios de ordem superior

$$\langle \frac{\partial Z(\vec{\mathbf{x}})}{\partial x_i} \rangle = \frac{\partial \langle Z(\vec{\mathbf{x}}) \rangle}{\partial x_i} \quad , \quad \forall i = 1,2,3 \tag{5.22}$$

No caso particular das *f.a.*'s estacionárias de segunda ordem, os valores esperados das derivadas são nulos

$$\langle \frac{\partial Z(\vec{\mathbf{x}})}{\partial x_i} \rangle = 0 \quad , \quad \forall i = 1,2,3 \tag{5.23}$$

atendendo que $\langle Z(\vec{\mathbf{x}}) \rangle = m_Z$ é constante.

## 5.3 Métodos de simulação directa estocástica

Realizar a *simulação directa* do escoamento num dado aquífero significa resolver a equação diferencial que rege o escoamento em ordem à variável dependente ou de estado, o nível piezométrico ou carga hidráulica, *H*. Para o efeito é necessário conhecer previamente os parâmetros do sistema (*T* ou *K*, *S* ou $\omega_q$) e as variáveis de controlo ($Q$, $Q_{w,i}$, $q_n$ ou *a* e *b*). Os parâmetros do sistema representam as propriedades hidrogeológicas que realizam a caracterização física do aquífero e as variáveis de controlo quantificam as recargas e as extracções, pontuais ($Q_{w,i}$) ou difusas ($Q$), e ainda as condições fronteira de Neumann ($q_n$) e de Cauchy (*a* e *b*).

Quando estes parâmetros e variáveis de controlo têm uma definição determinística, tal como as condições iniciais e as condições fronteira de Dirichlet, a solução da equação

diferencial, $H \equiv H(\vec{\mathbf{x}},t)$, também é uma função determinística das coordenadas espaciais e temporal. A quantificação determinística da variável de estado do problema em cada ponto do domínio e em cada instante designa-se, então, por simulação directa determinística.

Quando, por exemplo, os parâmetros do sistema têm uma caracterização probabilística traduzida pelas correspondentes *f.a.*'s, a solução da equação diferencial, $H \equiv H(\vec{\mathbf{x}},t)$, é também uma *f.a.*[2]. Neste contexto, resolver a equação diferencial significa caracterizar probabilisticamente $H$, o que, em bom rigor, corresponde a determinar a respectiva função de distribuição de probabilidade conjunta (*FDP*) ou, em alternativa, a função de densidade de probabilidade conjunta (*fdp*). A caracterização probabilística da variável de estado do problema, a partir do conhecimento prévio da descrição probabilística dos parâmetros do sistema e ou de algumas variáveis de controlo, é designada por *simulação directa estocástica.*

A questão que agora se coloca é a de saber quais os métodos disponíveis para realizar a simulação directa estocástica e, de entre estes, qual o mais apropriado à modelação de um determinado aquífero. Os vários métodos podem ser divididos em dois grandes grupos consoante procurem uma caracterização probabilística completa ou incompleta. Neste último grupo estão os métodos que admitem que os momentos de primeira e segunda ordem são suficientes para a descrição probabilística das *f.a.*'s. No primeiro grupo estão métodos analíticos que procuram deduzir a *FDP* de uma *f.a.* dadas as *FDP* das suas variáveis independentes. São métodos de grande complexidade, somente aplicáveis a sistemas simples com propriedades probabilísticas relativamente simples[3]. Outro método que se pode também incluir neste grupo é o das simulações de Monte-Carlo, que se baseia na resolução "determinística" da equação diferencial para um grande número de realizações dos parâmetros do sistema, das variáveis de controlo e das condições iniciais e de fronteira. Estas realizações são produzidas com base nas respectivas *FDP*. Os resultados são armazenados e permitem um posterior tratamento estatístico da variável de estado. Contudo, a arrumação do método das simulações de Monte-Carlo neste grupo é discutível uma vez que, na prática, as referidas realizações são obtidas por algoritmos que utilizam somente a informação probabilística contida nos momentos de primeira e segunda ordem. Provavelmente, a justificação para

---

[2] Ou processo estocástico, uma vez que também depende do tempo.

[3] Dettinger e Wilson (1981). Estes autores remetem para Benjamin e Cornell (1970) uma descrição mais detalhada destes métodos.

Dettinger e Wilson (1981) defenderem esta arrumação reside no facto de o volume de dados armazenado permitir uma análise probabilística mais complexa do que a resultante dos momentos de primeira e segunda ordem. Este método tem como principal vantagem o facto de poder ser aplicado a problemas complexos, tanto no que respeita à geometria do domínio como na definição e quantificação dos parâmetros do sistema e das variáveis de controlo. A desvantagem geralmente apontada reside na impossibilidade de relacionar, de alguma forma, os resultados obtidos com, por exemplo, a caracterização probabilística dos parâmetros ou variáveis referidos. Trata-se de um método exclusivamente numérico que não permite estabelecer uma relação analítica entre dados e resultados transportável para outros problemas. Uma análise mais detalhada deste método é realizada adiante, em sub-capítulo próprio.

Conforme se conclui facilmente do capítulo anterior, a caracterização probabilística de uma *f.a.* é uma tarefa difícil, mesmo que unicamente à custa dos momentos de primeira e segunda ordem. Avaliar e decidir, para uma determinada propriedade de um aquífero, qual a *f.a.* mais apropriada para a representar, nomeadamente, se é multivariada normal ou não, se é estacionária ou intrínseca, se é isotrópica ou anisotrópica, qual o modelo teórico para a função de covariância, quantificar os respectivos parâmetros, etc., não é tarefa simples mesmo quando os dados de campo são numerosos. Na prática, é quase inevitável a introdução de hipóteses simplificadoras. Neste contexto afigura-se como perfeitamente suficiente caracterizar as *f.a.*'s pelos valores esperados e pelas covariâncias.

Os métodos de simulação directa estocástica que trabalham com os dois primeiros momentos estatísticos procuram, por diversas vias, estabelecer uma relação entre os momentos dos parâmetros do sistema e ou das variáveis de controlo e os momentos da variável de estado. Mas este grupo de métodos é ainda divisível em dois subgrupos: o das *perturbações* e o dos *desenvolvimentos em série*. No primeiro subgrupo, as *f.a.*'s são definidas pela soma do *valor esperado* com a *perturbação* ou flutuação. Uma vez introduzida essa soma na equação diferencial, esta dá origem a outras duas novas equações diferenciais: uma, idêntica à original, relaciona os valores esperados e a outra as perturbações ou flutuações das variáveis. É esta última que permite estabelecer, por exemplo, as relações entre as covariâncias dos parâmetros do sistema, a covariância da variável de estado e as covariâncias cruzadas entre esta última e os parâmetros do sistema. Mas aqui, no tratamento da equação diferencial que relaciona as perturbações abrem-se duas vias alternativas que dão lugar a dois

métodos distintos de simulação directa: o *método das perturbações*, propriamente dito, e o *método espectral*. Enquanto que no primeiro, a referida equação diferencial é integrada no domínio espacio-temporal, já no segundo é utilizada para transportar o problema para o domínio dos números de onda, no qual se procura relacionar as funções de densidade espectral das *f.a.*'s em causa. Conhecendo-se a relação entre a função de densidade espectral e a função de covariância de cada *f.a.* e a relação entre as funções de densidade espectral das *f.a.*'s é possível, finalmente, relacionar as covariâncias dos parâmetros do sistema e ou das variáveis de controlo com a covariância da variável de estado. O segundo subgrupo, dos desenvolvimentos em série, é baseado na expansão em série de Taylor de soluções, analíticas ou numéricas, da equação diferencial aplicada aos valores esperados das *f.a.*'s.

Nas secções seguintes são apresentados, de um modo sucinto e a título meramente exemplificativo, o método espectral e o método numérico dos desenvolvimentos em série. O método das perturbações, trave mestra do presente trabalho, é tratado em sub-capítulo próprio, à semelhança do método das simulações de Monte-Carlo.

### 5.3.1 Método espectral[4]

Para exemplificar a aplicação do método espectral considere-se a equação diferencial que rege o escoamento permanente num meio poroso isotrópico tridimensional

$$\vec{\nabla} \mid (K \vec{\nabla} H) = 0 \tag{5.24}$$

sendo $K$ a conductividade hidráulica (isotrópica) e $H$ a carga hidráulica. Uma vez que se admite que a transformada logarítmica da conductividade hidráulica tem uma distribuição normal considere-se a mudança de variável

$$Y = \ln K \tag{5.25}$$

---

[4] Esta apresentação do método espectral segue de perto parte da secção 17.2.1 de Samper e Carrera (1990). Serviram também de apoio à elaboração desta pequena apresentação Dagan (1989) e, em especial, Gelhar (1993). Algumas das definições presentes nestes textos, e reproduzidas no presente trabalho, resultam das importantes contribuições de Lumley e Panofsky (1964) e de Brieman (1969).

na igualdade (5.24)

$$\vec{\nabla} \mid (e^{Y} \vec{\nabla} H) = 0 \tag{5.26}$$

Desenvolvendo esta equação

$$e^{Y} \vec{\nabla} Y \mid \vec{\nabla} H + e^{Y} \vec{\nabla} \mid \vec{\nabla} H = 0 \tag{5.27}$$

e dividindo-a por $e^{Y}$ obtém-se

$$\vec{\nabla} Y \mid \vec{\nabla} H + \vec{\nabla} \mid \vec{\nabla} H = 0 \tag{5.28}$$

a equação diferencial que rege o escoamento, tendo em conta a variabilidade espacial da conductividade hidráulica e a representação desta através da transformada logarítmica.

Considere-se agora que $Y$ e $H$ são *f.a.*'s, ou processos estocásticos, expressos pela soma da componente "determinística", o valor esperado ou média, com a componente errática, a perturbação estacionária (de segunda ordem) de média nula

$$Y(\vec{\mathbf{x}}) = \langle Y(\vec{\mathbf{x}}) \rangle + f(\vec{\mathbf{x}}) \quad , \quad E[f(\vec{\mathbf{x}})] = 0 \tag{5.29}$$

$$H(\vec{\mathbf{x}}) = \langle H(\vec{\mathbf{x}}) \rangle + h(\vec{\mathbf{x}}) \quad , \quad E[h(\vec{\mathbf{x}})] = 0 \tag{5.30}$$

Substituindo em (5.28) $Y$ e $H$ pelas somas acima definidas, a equação diferencial fica sucessivamente

$$\vec{\nabla}(\langle Y \rangle + f) \mid \vec{\nabla}(\langle H \rangle + h) + \vec{\nabla} \mid \vec{\nabla}(\langle H \rangle + h) = 0 \tag{5.31}$$

$$\vec{\nabla}\langle Y \rangle \mid \vec{\nabla}\langle H \rangle + \vec{\nabla}\langle Y \rangle \mid \vec{\nabla} h + \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla}\langle H \rangle + \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla} h + \vec{\nabla} \mid \vec{\nabla}\langle H \rangle + \vec{\nabla} \mid \vec{\nabla} h = 0 \tag{5.32}$$

Admitindo que $Y$ é estacionária, isto é, $\langle Y \rangle = m_Y$, logo $\vec{\nabla}\langle Y \rangle = 0$, e calculando o valor esperado de (5.32), esta fica

$$\vec{\nabla} \mid \vec{\nabla}\langle H \rangle + \langle \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla} h \rangle = 0 \tag{5.33}$$

Subtraindo esta igualdade de (5.32) e tendo novamente em conta que $\vec{\nabla}\langle Y \rangle = 0$, obtém-se

$$\vec{\nabla} \mid \vec{\nabla} h + \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla}\langle H \rangle = \langle \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla} h \rangle - \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla} h \tag{5.34}$$

Nestas duas últimas equações estão presentes parcelas que envolvem produtos de derivadas de perturbações. Supondo que as perturbações ou flutuações de $Y$ são pequenas e que o mesmo sucede com as perturbações[5] de $H$, admite-se que produtos de perturbações ou de derivadas de perturbações são parcelas de segunda ordem, desprezáveis, pelo que as equações (5.33) e (5.34) podem ser simplificadas

$$\vec{\nabla} \mid \vec{\nabla}\langle H \rangle = 0 \tag{5.35}$$

$$\vec{\nabla} \mid \vec{\nabla} h + \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla}\langle H \rangle = 0 \tag{5.36}$$

A primeira destas igualdades, (5.35), é a equação diferencial que relaciona os valores esperados, ou médias, das variáveis em jogo. Trata-se de uma equação idêntica à determinística, para a hipótese de $K$ ser constante. A segunda, (5.36), relaciona as perturbações de $Y$ e $H$. E é precisamente no modo de utilizar esta equação, para obter a covariância de $H$ em função da covariância de $Y$, que reside a diferença entre o método espectral e o método das perturbações.

O método espectral baseia-se na representação espectral das componentes erráticas das *f.a.*'s, definidas como estacionárias de segunda ordem. Assim, qualquer processo estocástico real e estacionário, $f(\vec{\mathbf{x}})$, pode ser definido à custa de um processo estocástico complexo, $Z_f(\vec{\mathbf{k}})$, através do integral de Fourier-Stieltjes

---

[5] As perturbações de $H$ são uma consequência das perturbações de $Y$.

$$f(\vec{\mathbf{x}}) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\vec{\mathbf{k}}|\vec{\mathbf{x}}} \, dZ_f(\vec{\mathbf{k}}) \tag{5.37}$$

onde $i$ representa a unidade imaginária ($i = \sqrt{-1}$), $\vec{\mathbf{k}}$ o vector dos números de onda e $\vec{\mathbf{x}}$ o vector de posição no domínio espacial. Para processos estacionários verifica-se a condição de ortogonalidade dos incrementos do processo estocástico complexo

$$\langle dZ_f(\vec{\mathbf{k}}) \, d\overline{Z}_f(\vec{\mathbf{k}}')\rangle = \begin{cases} 0 & \text{para } \vec{\mathbf{k}} \neq \vec{\mathbf{k}}' \\ S_{ff}(\vec{\mathbf{k}}) \, d\mathbf{k} & \text{para } \vec{\mathbf{k}} = \vec{\mathbf{k}}' \end{cases} \tag{5.38}$$

onde $d\overline{Z}_f(\vec{\mathbf{k}}')$ representa o conjugado do incremento $dZ_f(\vec{\mathbf{k}}')$ e $S_{ff}(\vec{\mathbf{k}})$ é a *função de densidade espectral* de $f(\vec{\mathbf{x}})$. Esta *f.a.* tem, por definição, média nula. A respectiva função de covariância[6], $C_{ff}(\vec{\mathbf{s}})$, é uma função real que também tem uma representação espectral. Para a obter introduz-se na definição de covariância[7] da *f.a.*

$$C_{ff}(\vec{\mathbf{s}}) = E\left[f(\vec{\mathbf{x}} + \vec{\mathbf{s}}) \, \bar{f}(\vec{\mathbf{x}})\right] \tag{5.39}$$

a representação espectral de $f(\vec{\mathbf{x}})$ expressa por (5.37)

$$\begin{aligned} C_{ff}(\vec{\mathbf{s}}) &= E\left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\vec{\mathbf{k}}|(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{s}})} \, dZ_f(\vec{\mathbf{k}}) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\vec{\mathbf{k}}'|\vec{\mathbf{x}}} \, d\overline{Z}_f(\vec{\mathbf{k}}')\right] = \\ &= E\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\left[\vec{\mathbf{k}}|(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{s}}) - \vec{\mathbf{k}}'|\vec{\mathbf{x}}\right]} dZ_f(\vec{\mathbf{k}}) \, d\overline{Z}_f(\vec{\mathbf{k}}')\right] \end{aligned} \tag{5.40}$$

---

[6] Na literatura sobre Geoestatística é habitual designar o vector separação pela letra **h**. Aqui utiliza-se **s** para evitar a confusão com a perturbação *h*.

[7] Na definição de covariância está presente o conjugado da *f.a.* que é igual à própria *f.a.* visto que se trata de uma função real. Esta troca visa introduzir o conjugado do incremento do processo estocástico complexo na dedução da relação entre a covariância e a função de densidade espectral.

$$C_{ff}(\vec{\mathbf{s}}) = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\left[\vec{\mathbf{k}}|(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{s}})-\vec{\mathbf{k}}'|\vec{\mathbf{x}}\right]} E\left[dZ_f(\vec{\mathbf{k}})\, d\overline{Z}_f(\vec{\mathbf{k}}')\right] =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\vec{\mathbf{k}}|\vec{\mathbf{s}}}\, S_{ff}(\vec{\mathbf{k}})\, d\mathbf{k} \tag{5.41}$$

A última passagem desta dedução resulta da aplicação condição de ortogonalidade (5.38). Esta relação (5.41) entre a função de covariância e a função de densidade espectral é a operação inversa da transformada de Fourier da função de covariância

$$S_{ff}(\vec{\mathbf{k}}) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\vec{\mathbf{k}}|\vec{\mathbf{s}}}\, C_{ff}(\vec{\mathbf{s}})\, d\mathbf{s} \tag{5.42}$$

onde $n$ representa a ordem do domínio de aplicação de $f(\vec{\mathbf{x}})$. A variância de $f(\vec{\mathbf{x}})$, caso particular de (5.41) para o vector separação nulo ($\vec{\mathbf{s}} = 0$), é dada pelo integral da função de densidade espectral estendido ao domínio dos números de onda

$$\sigma_f^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} S_{ff}(\vec{\mathbf{k}})\, d\mathbf{k} \tag{5.43}$$

Considere-se a função de covariância exponencial, escrita para um problema tridimensional e anisotrópico

$$C_{ff}(\vec{\mathbf{s}}) = \sigma_f^2 \exp\left(-\sqrt{(s_1/l_1)^2 + (s_2/l_2)^2 + (s_3/l_3)^2}\right) \tag{5.44}$$

onde $l_1$, $l_2$ e $l_3$ são as distâncias integrais segundo os eixos de anisotropia e $s_1$, $s_2$ e $s_3$ são as componentes do vector separação segundo as mesmas direcções. A introdução de (5.44) na relação (5.42) conduz à seguinte expressão para a função de densidade espectral

$$S_{ff}(\vec{\mathbf{k}}) = \frac{\sigma_f^2\, l_1\, l_2\, l_3}{\pi^2 (1 + k_1^2\, l_1^2 + k_2^2\, l_2^2 + k_3^2\, l_3^2)^2} \tag{5.45}$$

Para um problema tridimensional isotrópico esta expressão fica

$$S_{ff}(\vec{\mathbf{k}}) = \frac{\sigma_f^2 l^3}{\pi^2 (1 + k^2 l^2)^2} \tag{5.46}$$

atendendo a que $k^2 = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2$ e $l = l_1 = l_2 = l_3$.

Como também se admite que a perturbação da carga hidráulica é estacionária, a função $h(\vec{\mathbf{x}})$ pode ser igualmente definida à custa do integral de Fourier-Stieltjes

$$h(\vec{\mathbf{x}}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{i\vec{\mathbf{k}}|\vec{\mathbf{x}}} \, dZ_h(\vec{\mathbf{k}}) \tag{5.47}$$

com o processo estocástico complexo $Z_h(\vec{\mathbf{k}})$ sujeito à mesma condição de ortogonalidade

$$\langle dZ_h(\vec{\mathbf{k}}) \, d\overline{Z}_h(\vec{\mathbf{k}}') \rangle = \begin{cases} 0 & \text{para } \vec{\mathbf{k}} \neq \vec{\mathbf{k}}' \\ S_{hh}(\vec{\mathbf{k}}) \, d\mathbf{k} & \text{para } \vec{\mathbf{k}} = \vec{\mathbf{k}}' \end{cases} \tag{5.48}$$

Retome-se agora a equação diferencial das perturbações (5.36) e admita-se que o gradiente hidráulico médio é aproximadamente constante ($\vec{\nabla}\langle H \rangle = -\vec{\mathbf{J}}$), o que corresponde a considerar um escoamento médio uniforme num meio infinito. Substituindo (5.37) e (5.47) na equação diferencial (5.36) esta fica

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left[ i^2 \, \vec{\mathbf{k}} \,|\, \vec{\mathbf{k}} \, dZ_h(\vec{\mathbf{k}}) - i \vec{\mathbf{k}} \,|\, \vec{\mathbf{J}} \, dZ_f(\vec{\mathbf{k}}) \right] \mathrm{e}^{i\vec{\mathbf{k}}|\vec{\mathbf{x}}} = 0 \tag{5.49}$$

Uma vez que a representação espectral de uma função é única, (5.49) impõe que o argumento do integral seja nulo pelo que

$$i^2 \, \vec{\mathbf{k}} \,|\, \vec{\mathbf{k}} \, dZ_h(\vec{\mathbf{k}}) - i \vec{\mathbf{k}} \,|\, \vec{\mathbf{J}} \, dZ_f(\vec{\mathbf{k}}) = 0 \tag{5.50}$$

atendendo a que a função exponencial é não nula. Esta equação define uma relação entre os incrementos dos processos estocásticos complexos

$$dZ_h(\vec{\mathbf{k}}) = -i\frac{\vec{\mathbf{k}} \mid \vec{\mathbf{J}}}{\vec{\mathbf{k}} \mid \vec{\mathbf{k}}}\, dZ_f(\vec{\mathbf{k}}) \tag{5.51}$$

que substituída em (5.48) e com a contribuição de (5.38) dá lugar a uma relação entre funções de densidade espectral

$$S_{hh}(\vec{\mathbf{k}}) = \left(\frac{\vec{\mathbf{k}} \mid \vec{\mathbf{J}}}{\vec{\mathbf{k}} \mid \vec{\mathbf{k}}}\right)^2 S_{ff}(\vec{\mathbf{k}}) \tag{5.52}$$

Escrevendo, à semelhança de $f(\vec{\mathbf{x}})$, a inversa da transformada de Fourier da função de covariância de $h(\vec{\mathbf{x}})$

$$C_{hh}(\vec{\mathbf{s}}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{i\vec{\mathbf{k}}\mid\vec{\mathbf{s}}}\, S_{hh}(\vec{\mathbf{k}})\, d\mathbf{k} \tag{5.53}$$

introduzindo nela a relação (5.52) e substituindo $S_{ff}(\vec{\mathbf{k}})$ pela expressão apropriada ((5.45) ou (5.46)) obtém-se finalmente a covariância da variável de estado, *H*, em função dos parâmetros que caracterizam a covariância de *Y*, nomeadamente a variância e a distância ou distâncias integrais. Para o problema isotrópico, a variância de *H*

$$\sigma_h^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} S_{hh}(\vec{\mathbf{k}})\, d\mathbf{k} \tag{5.54}$$

é expressa por

$$\sigma_h^2 = \frac{\sigma_f^2\, l^2 J^2}{3} \tag{5.55}$$

Este resultado, obtido para um escoamento médio uniforme e permanente num domínio isotrópico e infinito, evidencia a dependência da variância de *H* relativamente à grandeza do gradiente hidráulico e dos parâmetros estatísticos da *f.a.* estacionária *Y*.

Gelhar (1993) demostra que esta variância, para um problema tridimensional, é menor, cerca de duas ordens de grandeza, que a equivalente para um problema unidimensional. Deste

facto retira-se que o número de dimensões do problema (1D, 2D ou 3D) influencia o impacto que a heterogeneidade do meio tem na incerteza dos resultados. Porque o presente trabalho é dirigido ao estudo de aquíferos regionais, com representação bidimensional, tem particular interesse referir os valores obtidos por este autor para as variâncias de *H*. Assim, Gelhar (1993), utilizando a função de densidade espectral

$$S_{ff}(k) = \frac{2\sigma_f^2 \alpha^2 k^2}{\pi(\alpha^2 + k^2)^3} \tag{5.56}$$

que corresponde à função de covariância

$$C_{ff}(s) = \sigma_f^2 \left[ \alpha s K_1(\alpha s) - (\alpha s)^2 K_0(\alpha s) \right] \quad \text{com} \quad \alpha = \frac{1.045}{l} \tag{5.57}$$

onde $K_n(x)$ é a função modificada de Bessel de ordem $n$, chega à seguinte expressão para a variância de $H$ num aquífero confinado, isotrópico, de dimensão infinita e com um escoamento médio uniforme e permanente

$$\sigma_H^2 = 0.46 \sigma_f^2 l^2 J^2 \tag{5.58}$$

Utilizando outra função de densidade espectral

$$S_{ff}(k) = \frac{3\sigma_f^2 \alpha^2 k^4}{\pi(\alpha^2 + k^2)^4} \quad \text{com} \quad \alpha = \frac{0.825}{l} \tag{5.59}$$

obtém uma variância ligeiramente inferior

$$\sigma_H^2 = 0.37 \sigma_f^2 l^2 J^2 \tag{5.60}$$

Estas diferenças, tal como refere Gelhar (1993), resultam do facto de a variância de $H$ depender da forma da função de densidade espectral utilizada, o que é o mesmo que dizer que

depende da função de covariância de $Y$ implicitamente considerada[8].

Para um aquífero regional (2D) não confinado, isotrópico, de dimensão infinita, com escoamento médio uniforme e permanente e com as transmissividade e espessura (do aquífero) médias constantes, este autor apresenta a seguinte expressão para a variância de $H$

$$\sigma_H^2 = 0.37\,\sigma_f^2\, l^2 J^2 \ln\left(\frac{1.21B}{Jl}\right) \tag{5.61}$$

obtida para a função de densidade espectral

$$S_{ff}(k) = \frac{\sigma_f^2\,\alpha^2}{\pi(\alpha^2 + k^2)^2} \quad \text{com} \quad k^2 = k_1^2 + k_2^2 \tag{5.62}$$

correspondente à função de covariância

$$C_{ff}(s) = \sigma_f^2\,\alpha\, s\, K_1(\alpha s) \quad \text{com} \quad s^2 = s_1^2 + s_2^2 \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{1.045}{l} \tag{5.63}$$

Esta expressão da variância (5.61) conduz a valores substancialmente superiores aos das expressões (5.58) e (5.61) correspondentes aos aquíferos confinados. Segundo Gelhar (1993) esta diferença reflecte o facto de a transmissividade ter uma maior variabilidade nos aquíferos não confinados devido ao efeito combinado das variações da conductividade hidráulica e da espessura saturada. Contudo, alguns exemplos com simulações de Monte-Carlo não condicionadas produziram resultados idênticos para a variância de $H$ em aquíferos confinados e não confinados para idênticas condições do escoamento médio e da função de covariância do parâmetro hidrogeológico. Esta discrepância poderá resultar, em parte, de o referido autor ter utilizado diferentes funções de densidade espectral. Outra justificação poderá estar no facto de, para os aquíferos confinados, Gelhar (1993) ter estudado o efeito da variabilidade de $K$ em vez de $T$, tal como se fez nas simulações de Monte-Carlo. Esta análise será retomada quando da apresentação de alguns exemplos de aplicação dos métodos das simulações de Monte-Carlo e das perturbações.

---

[8] Conforme evidencia (5.42), as funções de covariância e de densidade espectral estão relacionadas.

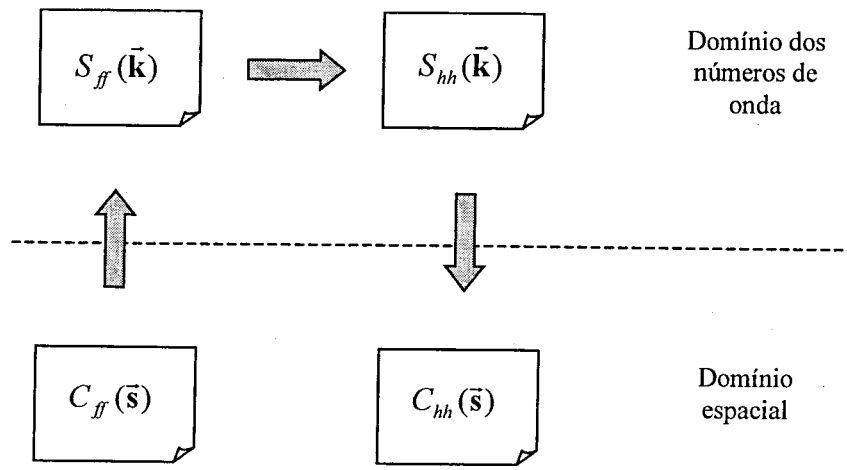



Figura 5.1 – Esquema do Método Espectral

Em conclusão, pode-se afirmar que o método espectral, em vez de integrar no domínio espacial a equação diferencial que rege a relação entre perturbações, utiliza essa equação para construir no domínio dos números de onda uma relação entre as funções de densidade espectral que, geralmente, tem uma forma algébrica relativamente simples. Na Figura 5.1 apresenta-se um esquema sintético do fluxo da informação probabilística que começa e termina no domínio espacial, com passagem pelo domínio dos números de onda.

### 5.3.2 Método numérico de desenvolvimentos em série[9]

Habitualmente, a resolução directa da equação diferencial do escoamento é efectuada numericamente. Para o efeito recorre-se a um dos vários métodos conhecidos, tal como o dos elementos finitos. Independentemente do método numérico utilizado, chega-se a uma expressão matricial que, para os problemas permanentes, é do tipo

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{H} = \mathbf{b} \tag{5.64}$$

[9] À semelhança da anterior, esta secção segue de perto Samper e Carrera (1990). Foram também consultados dois dos trabalhos mais citados, Dettinger e Wilson (1981) e Townley e Wilson (1983).

onde **H** é o vector dos valores da carga hidráulica, $H$, num conjunto discreto de $N$ pontos do domínio[10]. O vector **b** contém as contribuições das extracções, ou recargas, e das condições fronteira. A matriz **A** ( $N \times N$ ) é função da conductividade hidráulica do meio poroso.

Se a conductividade hidráulica for caracterizada por uma *f.a.*, o sistema de equações (5.64) converte-se num sistema de equações estocásticas e as componentes do vector **H** passam a ser variáveis aleatórias. Uma forma de resolver este sistema de equações estocástico consiste em desenvolver **H** em séries de perturbações das conductividades relativamente aos valores esperados. Este desenvolvimento em série é posteriormente utilizado na obtenção dos momentos de primeira e segunda ordem de **H**. Tal como referem Samper e Carrera (1990), o método dos desenvolvimentos em séries de Taylor foi utilizado por vários autores, nomeadamente Dettinger e Wilson (1981), Townley e Wilson (1983) e Townley (1984), na resolução numérica do escoamento em meios porosos. A título exemplificativo, rescreva-se (5.64) em função dos $M$ valores de $Y$, o logaritmo da conductividade ou da transmissividade

$$\mathbf{A}(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{H}(\mathbf{y}) = \mathbf{b} \tag{5.65}$$

onde **y** representa o vector dos $M$ valores de $Y$. Este vector pode ser expresso como uma soma dos valores esperados com as flutuações estacionárias de média nula

$$\mathbf{y} = \langle \mathbf{y} \rangle + \mathbf{y}' \quad , \quad E[\mathbf{y}'] = \mathbf{0} \tag{5.66}$$

Desenvolvendo $\mathbf{H}(\mathbf{y})$ em série de Taylor em torno de $\langle \mathbf{y} \rangle$ e considerando apenas os termos de primeira ordem

$$\mathbf{H}(\mathbf{y}) \cong \mathbf{H}(\langle \mathbf{y} \rangle) + \mathbf{J} \cdot \mathbf{y}' \tag{5.67}$$

onde **J** representa a matriz Jacobiana da carga hidráulica nos nós relativamente às $M$ componentes de **y**

[10] Nós, no caso do método dos elementos finitos.

$$J_{ij} = \left.\frac{\partial H_i}{\partial y_j}\right|_{\mathbf{y}=\langle \mathbf{y} \rangle} \tag{5.68}$$

Calculando os valores esperados de (5.67) obtém-se

$$E[\mathbf{H}(\mathbf{y})] \equiv \langle \mathbf{H}(\mathbf{y}) \rangle = \mathbf{H}(\langle \mathbf{y} \rangle) \tag{5.69}$$

que permite concluir que a média da aproximação de primeira ordem de **H** coincide com o vector **H** correspondente aos valores médios de **y**, ou seja, o valor esperado de **H** coincide com a solução de (5.64) escrita para as médias dos $M$ valores de $Y$

$$\langle \mathbf{H} \rangle = \mathbf{H}(\langle \mathbf{y} \rangle) = \mathbf{A}^{-1}(\langle \mathbf{y} \rangle) \cdot \mathbf{b} \tag{5.70}$$

A matriz de covariância de $H$ entre os nós obtém-se a partir da definição, uma vez introduzidas as expressões (5.69)

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{HH} &= E\left[ (\mathbf{H} - \langle \mathbf{H}(\mathbf{y}) \rangle) \cdot (\mathbf{H} - \langle \mathbf{H}(\mathbf{y}) \rangle)^T \right] = \\ &= E\left[ (\mathbf{H} - \mathbf{H}(\langle \mathbf{y} \rangle)) \cdot (\mathbf{H} - \mathbf{H}(\langle \mathbf{y} \rangle))^T \right] \end{aligned} \tag{5.71}$$

e (5.67)

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{HH} &= E\left[ (\mathbf{J} \cdot \mathbf{y}') \cdot (\mathbf{J} \cdot \mathbf{y}')^T \right] = E\left[ \mathbf{J} \cdot \mathbf{y}' \cdot \mathbf{y}'^T \cdot \mathbf{J}^T \right] = \mathbf{J} \cdot E\left[ \mathbf{y}' \cdot \mathbf{y}'^T \right] \cdot \mathbf{J}^T = \\ &= \mathbf{J} \cdot \mathbf{C}_{YY} \cdot \mathbf{J}^T \end{aligned} \tag{5.72}$$

onde $\mathbf{C}_{YY}$ representa a matriz de covariância entre os valores de $Y$.

Da observação de (5.72) conclui-se que a covariância de $H$ depende não só da covariância de $Y$ mas também da sensibilidade da carga hidráulica às flutuações de $Y$ em torno dos valores médios traduzida pela matriz Jacobiana. Por outras palavras, a incerteza de $H$ é tanto maior quanto maior for a incerteza de $Y$ e a sensibilidade de $H$ às variações de $Y$.

Dettinger e Wilson (1981) e Townley (1984) estudaram uma aproximação de segunda ordem do desenvolvimento de $\mathbf{H}(\mathbf{y})$ em série de Taylor em torno de $\langle \mathbf{y} \rangle$. Esta aproximação requer a introdução de hipóteses adicionais relativamente à distribuição de $Y$ e implica um incremento substancial do esforço de cálculo. A aproximação de segunda ordem implica também uma complicação da notação, pelo que a expressão seguinte se refere somente à aproximação ao valor de $H$ no nó $i$ do domínio

$$H_i(\mathbf{y}) \cong H_i(\langle \mathbf{y} \rangle) + \mathbf{J}^i \cdot \mathbf{y}' + \mathbf{y}'^T \cdot \mathbf{G}^i \cdot \mathbf{y}' \tag{5.73}$$

onde $\mathbf{J}^i$ é a $i$-ésima linha da matriz Jacobiana e $\mathbf{G}^i$ é a matriz Hessiana da carga hidráulica no nó $i$ relativamente às $M$ componentes de $\mathbf{y}$

$$G^i_{kl} = \left. \frac{\partial^2 H_i}{\partial y_k \partial y_l} \right|_{\mathbf{y}=\langle \mathbf{y} \rangle} \tag{5.74}$$

Calculando os valores esperados de (5.73) obtém-se

$$E[H_i(\mathbf{y})] \equiv \langle H_i(\mathbf{y}) \rangle = H_i(\langle \mathbf{y} \rangle) + \langle \mathbf{y}'^T \cdot \mathbf{G}^i \cdot \mathbf{y}' \rangle \tag{5.75}$$

que permite concluir que a média de segunda ordem difere da de primeira ordem na parcela $\langle \mathbf{y}'^T \cdot \mathbf{G}^i \cdot \mathbf{y}' \rangle$ que pode ser calculada pela expressão

$$\langle \mathbf{y}'^T \cdot \mathbf{G}^i \cdot \mathbf{y}' \rangle \equiv E\left[\mathbf{y}'^T \cdot \mathbf{G}^i \cdot \mathbf{y}'\right] = \sum_{k=1}^{M} \sum_{l=1}^{M} E\left[y'_k G^i_{kl} y'_l\right] = \sum_{k=1}^{M} \sum_{l=1}^{M} G^i_{kl} C_{YY,kl} \tag{5.76}$$

onde $C_{YY,kl}$ é o elemento $k,l$ da matriz de covariância dos valores de $Y$. A grandeza desta parcela depende da maior ou menor não linearidade da sensibilidade de $H$ às variações de $Y$. A aproximação de segunda ordem representa uma melhoria relativamente à de primeira ordem porque também reflecte a incerteza de $Y$ através da respectiva matriz de covariância. Contudo, esta formulação exige o cálculo da matriz Hessiana para cada nó, logo um grande esforço computacional para os problemas com grande número de nós. O cálculo da

covariância de $H$ à custa das expressões da aproximação de segunda ordem, (5.73) e (5.75), exige a consideração de momentos de quarta ordem, pelo que não é viável. Segundo Samper e Carrera (1990), Townley (1984) realizou uma análise comparativa entre os valores esperados de $H$ produzidos pelas aproximações de primeira e segunda ordem, verificando que as diferenças crescem com o aumento da variância de $Y$ e que, por outro lado, decrescem quando a distância de correlação de $Y$ tende para zero (ausência de correlação) ou tende para infinito (correlação total).

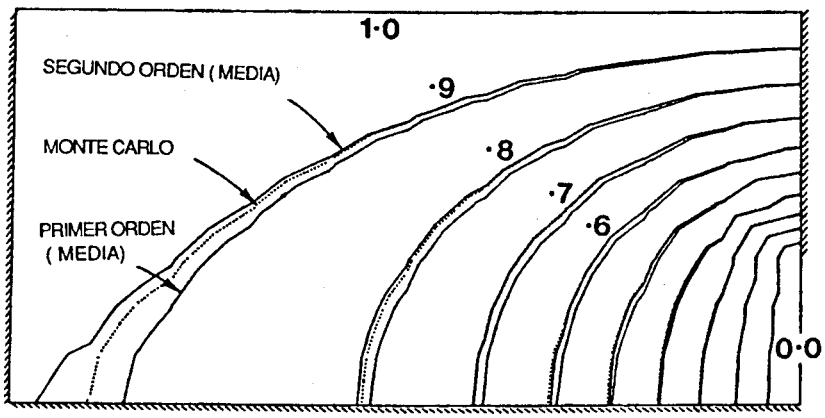



Figura 5.2 – Comparação entre os valores esperados de $H$ calculados pelo método das simulações de Monte-Carlo e por aproximações de primeira e segunda ordem. Reproduzido de Samper e Carrera (1990).

A Figura 5.2 compara os valores médios de $H$ obtidos por aproximações de primeira e segunda ordem com os valores médios obtidos pelo método das simulações de Monte-Carlo. Este exemplo apresentado por Samper e Carrera (1990) corresponde a um aquífero com níveis fixos na fronteira superior e no trecho inferior da fronteira do lado direito, sendo os restantes trechos de fronteira impermeáveis. Saliente-se que as diferenças entre as aproximações de primeira e segunda ordem são menores nas proximidades das fronteiras com o nível imposto (condição fronteira de Dirichlet) uma vez que aí a sensibilidade de $H$ às variações de $Y$ é menor.

## 5.4 Método das simulações de Monte-Carlo

O método das simulações de Monte-Carlo consiste na resolução numérica da equação diferencial do escoamento para um grande número de realizações dos parâmetros do sistema, das variáveis de controlo e das condições iniciais e de fronteira. No contexto do estudo dos escoamentos em aquíferos porosos regionais, tendo em conta a variabilidade natural dos parâmetros hidrogeológicos, a utilização do método das simulações de Monte-Carlo implica a resolução da equação diferencial para um grande número de realizações da transmissividade e do coeficiente de armazenamento, no caso dos aquíferos confinados, ou da conductividade hidráulica e da porosidade, no caso dos aquíferos não confinados. A equação diferencial é integrada numericamente pelo método dos elementos finitos ou outro para cada uma das realizações dos parâmetros hidrogeológicos e os valores de $H$ obtidos em cada simulação[11], para o conjunto discreto de nós do domínio e de instantes temporais, são armazenados. Deste modo é gerado e guardado um conjunto de realizações da variável de estado, $H$, que permite obter para cada ponto do domínio e em cada instante temporal diversos dados estatísticos: média, variância, histograma, função de distribuição de probabilidade, etc. Com os dados armazenados também é possível caracterizar a estrutura probabilística de $H$ através dos momentos de segunda ordem experimentais, como o semivariograma ou a covariância. Exemplificando, considere-se um aquífero não confinado relativamente ao qual se conhecem as realizações de ordem $l$ da conductividade hidráulica e da porosidade, isto é, os respectivos valores nos $N$ nós da malha de elementos finitos, $K^{(l)}(\vec{\mathbf{x}}_j)$ e $\omega_d^{(l)}(\vec{\mathbf{x}}_j)$, com $j = 1,...,N$. A simulação de ordem $l$, isto é, a integração numérica da equação diferencial para estas duas realizações de ordem $l$ dos parâmetros do sistema dá lugar à realização de ordem $l$ da variável de estado

$$\mathbf{H}_t^{(l)} = \left\{ H^{(l)}(\vec{\mathbf{x}}_j, t) \; ; \; j = 1,...,N \right\} \quad , \quad t = 1,2,... \tag{5.77}$$

Procedendo de modo análogo para as $M$ realizações dos parâmetros do sistema e guardando os resultados obtidos é possível calcular posteriormente os momentos de primeira e segunda ordem de $H$ para cada um dos nós e instantes

---

[11] Às realizações de ordem $l$ dos dois parâmetros hidrogeológicos corresponde a simulação de ordem $l$.

$$\langle H(\vec{\mathbf{x}}_j,t)\rangle = \frac{1}{M}\sum_{l=1}^{M} H^{(l)}(\vec{\mathbf{x}}_j,t) \quad , \quad j=1,...,N \quad , \quad t=1,2,... \tag{5.78}$$

$$\sigma_H^2(\vec{\mathbf{x}}_j,t) = \frac{1}{M}\sum_{l=1}^{M}\left[H^{(l)}(\vec{\mathbf{x}}_j,t) - \langle H(\vec{\mathbf{x}}_j,t)\rangle\right]^2 \quad , \quad j=1,...,N \quad , \quad t=1,2,... \tag{5.79}$$

Este método é versátil e conceptualmente simples. A versatilidade resulta do facto de ser aplicável a todo o tipo de problemas e reconhecer naturalmente a geometria do domínio e as condições iniciais e de fronteira, independentemente da respectiva complexidade. Tal como se explicitará adiante, também permite incorporar dados de campo caso se utilizem realizações condicionadas dos parâmetros hidrogeológicos.

Neste método, conforme salienta Dagan (1989), estão implícitos dois tipos de aproximações. O primeiro respeita à discretização do domínio, dos parâmetros do sistema e da variável de estado. Apesar de se tratar de uma realidade inerente à utilização de um método numérico para a integração da equação diferencial, coloca-se a questão particular de avaliar o grau de refinamento da malha de elementos finitos apropriado à variabilidade espacial dos parâmetros hidrogeológicos. De facto, uma malha demasiado "aberta" pode não captar a variabilidade a pequena escala e, por este motivo, não representar adequadamente a correspondente estrutura de correlação espacial. A outra aproximação reside no facto da simulação assentar num número finito de realizações. Este número é difícil de estabelecer previamente. O procedimento mais adequado consistirá em avaliar o comportamento da média a da variância de $H$ em alguns pontos do domínio e considerar o número de realizações que estabilize estes momentos estatísticos a menos de um erro predeterminado.

Apesar da simplicidade e versatilidade já evidenciadas, o método das simulações de Monte-Carlo apresenta algumas limitações. A primeira reside no grande esforço de cálculo computacional necessário à obtenção de bons resultados. Mas a crescente capacidade e rapidez de processamento dos computadores vai progressivamente atenuando este problema, convidando à utilização do método para a modelação estocástica do escoamento e transporte em aquíferos. Outra limitação, já anteriormente referida, está na impossibilidade de relacionar os resultados obtidos com, por exemplo, a caracterização probabilística dos parâmetros hidrogeológicos e retirar daí qualquer regra ou conclusão de ordem geral. Finalmente, alguns

autores referem que, para valores elevados das variâncias das *f.a.*'s que representam as propriedades hidrogeológicas, poderá não ser possível atingir a convergência e a estabilidade dos momentos estatísticos referidos no parágrafo anterior para um número de realizações compatível com os meios de cálculo disponíveis.

### 5.4.1 Realizações de uma função aleatória

Tal como já se referiu no capítulo anterior, o conceito de *f.a.* pressupõe a existência de múltiplas realizações alternativas e igualmente prováveis da distribuição espacial de, por exemplo, $Z(\vec{\mathbf{x}})$

$$\left\{ z^{(l)}(\vec{\mathbf{x}}), \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \right\} \quad , \quad \forall l \tag{5.80}$$

As realizações de uma *f.a.* tomam a designação de *condicionadas* quando respeitam os dados de campo conhecidos $\left\{ Z(\vec{\mathbf{x}}_i), i = 1, ..., N_{\text{dados}} \right\}$

$$z^{(l)}(\vec{\mathbf{x}}_i) = Z(\vec{\mathbf{x}}_i) \, , \quad i = 1, ..., N_{\text{dados}} \quad , \quad \forall l \tag{5.81}$$

e dizem-se *não condicionadas* quando tal não sucede.

As realizações de uma *f.a.* devem reflectir a representação probabilística definida pela respectiva *FDP* conjunta, ou pelo menos, os momentos estatísticos de primeira e segunda ordem da *f.a.*[12]. Embora, aparentemente, o método de estimação da distribuição espacial apresentado no capítulo anterior, a krigagem, preencha estes requisitos, os procedimentos utilizados na *geração* das realizações de uma *f.a.* diferem da *estimação* em dois aspectos principais:

[12] Na prática, tal como se salientou no capítulo anterior, as *f.a.*'s são apenas caracterizadas pelos dois primeiros momentos estatísticos.

a) os métodos de estimação têm como finalidade a obtenção da melhor estimativa local da *f.a.*, $z^*(\vec{\mathbf{x}})$, considerada isoladamente, sem cuidar da estrutura probabilística da distribuição espacial produzida, $\left\{z^*(\vec{\mathbf{x}}), \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega\right\}$. Tal como referem Deutsch e Journel (1992) sobre a geração de realizações de *f.a.*'s, as características globais (textura) e estatísticas de cada realização, $\left\{z^{(l)}(\vec{\mathbf{x}}), \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega\right\}$, têm prioridade relativamente à precisão local;

b) ainda segundo estes autores, para um determinado conjunto de valores conhecidos da *f.a.* e para uma determinada definição probabilística[13], a krigagem consiste num algoritmo de interpolação que produz uma única distribuição, $\left\{z_K^*(\vec{\mathbf{x}}), \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega\right\}$, que é a melhor em termos de precisão local. Em contrapartida, as realizações de uma *f.a.* constituem distribuições espaciais alternativas, cada uma das quais é considerada como uma boa representação do fenómeno ou propriedade em causa sob um ponto de vista global. As diferenças entre as diversas realizações alternativas fornecem uma medida da incerteza espacial conjunta.

Diferentes algoritmos de geração de realizações dão lugar a diferentes características globais e a diferentes modelos estatísticos dessas realizações. Segundo Deutsch e Journel (1992), nenhum algoritmo é suficientemente flexível para produzir a grande variedade de características e de modelos estatísticos existentes na prática. Será, então, da responsabilidade do hidrogeólogo a selecção do algoritmo mais apropriado a cada caso concreto.

O presente trabalho não tem como objectivo principal o estudo e aplicação do método das simulações de Monte-Carlo. Contudo, entendeu-se que no contexto deste sub-capítulo seria adequado referir, de um modo sintético, alguns métodos ou algoritmos de geração de realizações de uma *f.a.*. Assim, as duas secções seguintes, que acompanham de perto Deutsch e Journel (1992), destinam-se a uma breve apresentação de dois algoritmos que foram utilizados na preparação de alguns exemplos de aplicação.

---

[13] Através, por exemplo, do semivariograma e do valor esperado.

### 5.4.2 Método de simulação sequencial gaussiana[14]

Este método baseia-se na ideia de, em cada ponto do domínio, se *extrair*[15] um valor para a *f.a.* a partir da respectiva *FDP* (ou *fdp*) condicionada a valores da *f.a.* na vizinhança do ponto. Estes valores incluem não só os "dados de campo" conhecidos como também valores previamente extraídos.

Considerem-se $N$ variáveis aleatórias, $\{Z_1, Z_2, ..., Z_N\}$, correspondentes aos valores que a *f.a.* $Z(\vec{\mathbf{x}})$ pode tomar em $N$ pontos do domínio, por exemplo os nós da malha de elementos finitos. A seguir considerem-se estas variáveis aleatórias condicionadas a outras $M$ variáveis, eventualmente com o mesmo significado físico da *f.a.*, $\{Z_{N+1}, Z_{N+2}, ..., Z_{N+M}\}$. A respectiva *FDP* conjunta condicionada define-se

$$\begin{aligned} &F_{Z_1 Z_2 ... Z_N | Z_{N+1} Z_{N+M}}(z_1, z_2, ..., z_N \mid z_{N+1}, ..., z_{N+M}) = \\ &= \text{Prob}\{Z_i \le z_i, i = 1, ..., N \mid z_{N+1}, ..., z_{N+M}\} \end{aligned} \tag{5.82}$$

ou ainda, com uma notação mais condensada

$$F_{Z_1 Z_2 ... Z_N | (M)} = \text{Prob}\{Z_i \le z_i, i = 1, ..., N \mid (M)\} \tag{5.83}$$

A extracção de uma realização de $Z(\vec{\mathbf{x}})$, isto é, das $N$ variáveis $\{Z_1, Z_2, ..., Z_N\}$, a partir da *FDP* conjunta condicionada, (5.82) ou (5.83), pode ser efectuada em $N$ sucessivos passos, cada um dos quais com base numa *FDP* univariada, com um grau crescente de condicionamento. Assim, a geração ou extracção de uma qualquer realização de ordem $l$ realiza-se do seguinte modo:

---

[14] Na literatura sobre estas matérias é habitual designar o processo de geração de realizações de uma *f.a.* por "simulação estocástica" de uma *f.a.*. Neste trabalho optou-se por reservar a aplicação desta expressão à modelação do escoamento nos aquíferos, num contexto estocástico, de modo a evitar o risco de uma confusão de conceitos. Contudo, no título desta secção é assumida a designação corrente do método apresentado.

[15] *Extrair* tem aqui um significado semelhante ao subjacente às expressões "tirar à sorte" ou "extracção da lotaria". A diferença reside no facto de, ao contrário destes dois exemplos, os resultados possíveis não serem todos igualmente prováveis.

a) extracção do valor $z_1^{(l)}$ a partir da correspondente *FDP* univariada, condicionada aos $M$ dados iniciais $\{z_{N+1}, z_{N+2}, ..., z_{N+M}\}$

$$F_{Z_1|(M)} = \text{Prob}\{Z_1 \leq z_1 \mid (M)\} \tag{5.84}$$

O valor extraído, $z_1$ , passa a ser mais um valor que vai condicionar a extracção da variável seguinte, $Z_2$;

b) extracção do valor $z_2$ a partir da *FDP* univariada de $Z_2$, condicionada ao ampliado conjunto de dados $\{z_{N+1}, z_{N+2}, ..., z_{N+M}\} \cup \{z_1^{(l)}\}$

$$F_{Z_2|(M+1)} = \text{Prob}\{Z_2 \leq z_2 \mid (M+1)\} \tag{5.85}$$

O valor extraído, $z_2$ , é acrescentado ao conjunto dos dados que vai condicionar a extracção seguinte $\{z_{N+1}, z_{N+2}, ..., z_{N+M}\} \cup \{z_1^{(l)}, z_2^{(l)}\}$

$$F_{Z_3|(M+2)} = \text{Prob}\{Z_3 \leq z_3 \mid (M+2)\} \tag{5.86}$$

c) estes procedimentos são repetidos até se extrair o valor $z_N^{(l)}$, condicionado ao conjunto de dados $\{z_{N+1}, z_{N+2}, ..., z_{N+M}\} \cup \{z_1^{(l)}, z_2^{(l)}, ..., z_{N-1}^{(l)}\}$

$$F_{Z_N|(M+N-1)} = \text{Prob}\{Z_N \leq z_N \mid (M+N-1)\} \tag{5.87}$$

Os $N$ valores extraídos deste modo, $\{z_1^{(l)}, z_2^{(l)}, ..., z_N^{(l)}\}$, constituem uma realização da *f.a.* $Z(\vec{\mathbf{x}})$ num conjunto discreto de pontos do domínio. Para produzir uma nova realização, os procedimentos sequenciais acima descritos são repetidos desde o início. Esta geração sequencial das $N$ componentes[16] da *f.a.* requer a determinação de $N$ sucessivas *FDP*'s

[16] No capítulo anterior a *f.a.* foi apresentada como um vector aleatório com um número infinito de componentes. Aqui, a *f.a.* é representada por um vector com um número finito de componentes, as quais correspondem aos valores da *f.a.* num conjunto discreto de pontos do domínio. Estes pontos deverão ser em elevado número, para uma boa representação do comportamento espacial da *f.a.*.

univariadas, condicionadas a um número crescente de dados. Por outro lado, a ordem seguida nas sucessivas extracções é independente dos procedimentos utilizados na dedução das sucessivas *FDP*. Estes duas últimas observações justificam algumas considerações adicionais:

d) a aplicação da geração sequencial, exactamente nos termos acima formulados, obriga à determinação de cada vez mais complexas *FDP*'s, uma vez que os dados que as condicionam vão sucessivamente aumentando de *M* até *M*+*N*-1. Na prática, utiliza-se um procedimento simplificativo que se fundamenta no facto de a habitual estrutura de correlação espacial das *f.a.*'s implicar que os dados mais próximos do valor a extrair condicionem mais fortemente a respectiva *FDP* univariada. Assim, só um determinado número de dados situados na vizinhança do valor a extrair, $z_i^{(l)}$, é considerado para a determinação da *FDP* univariada. Este procedimento é aplicado não só aos dados iniciais, $\{z_{N+1}, z_{N+2}, ..., z_{N+M}\}$, como aos valores obtidos nas extracções precedentes, $\{z_1^{(l)}, z_2^{(l)}, ..., z_{i-1}^{(l)}\}$;

e) este procedimento, de limitar os dados que condicionam a determinação da *FDP* univariada, respeitante a um determinado ponto, aos que se encontram na sua vizinhança, implica que as propriedades estatísticas a reproduzir pelas sucessivas *FDP*'s não ultrapassem a distância máxima considerada nessa vizinhança. Atendendo a que, pelo menos, se deverá ter em conta a distância máxima representada no semivariograma (ou na função de covariância), facilmente se conclui que o número de dados que condicionam as *FDP*'s pode ser ainda muito elevado. Para contornar esta dificuldade é utilizado o "multiple grid concept"[17] que consiste na extracção dos *N* valores em dois ou mais passos:

- primeiro, é efectuada a extracção dos valores nos pontos ou nós de uma grelha ou malha muito aberta, condicionada por uma vizinhança muito ampla. Deste modo são considerados os dados iniciais e alguns dos primeiros valores que vão sendo extraídos, o que permite reproduzir a estrutura de correlação espacial a larga escala sem utilizar um grande número de dados na determinação das *FDP*'s univariadas condicionadas;

[17] Deutsch e Journel (1992).

- no passo seguinte são extraídos os valores dos restantes pontos ou nós da grelha ou malha a gerar, condicionados agora por uma vizinhança mais próxima. Este passo pode ser desdobrado em passos intermédios para grelhas ou malhas progressivamente mais apertadas e vizinhanças cada vez mais pequenas.

f) finalmente, não há uma regra definida para a ordem a seguir na extracção dos valores nos pontos ou nós da grelha ou malha considerada. Na prática, é habitual a utilização de uma sequência aleatória, de modo a evitar a introdução de algum efeito de natureza artificial resultante de uma qualquer sequência rígida como seria, por exemplo, a de percorrer por linhas ou por colunas os pontos a extrair.

Quando se pretende, com este método, gerar realizações de *f.a.*'s multivariadas normais, o valor em cada ponto é extraído de uma *FDP* univariada normal, para cuja definição basta o conhecimento da média e da variância condicionadas. Estas são determinadas por krigagem simples ou ordinária, tendo em conta os dados iniciais e os previamente extraídos que se encontram na vizinhança do ponto em causa. Este método toma, então, a designação de *simulação sequencial gaussiana*[18] e, como se deduz facilmente do exposto, gera exclusivamente realizações condicionadas.

Concluída a apresentação deste método torna-se mais fácil evidenciar a diferença entre os conceitos de *estimação* e *geração*. Estimar o valor de uma *f.a.* num ponto corresponde a adoptar o valor esperado condicionado, nesse ponto. A krigagem quantifica esse valor e ainda a variância do erro de estimação que, para as *f.a.*'s multivariadas normais, correspondem, respectivamente, às média e variância condicionadas[19]. Em contrapartida, gerar uma *f.a.* num determinado ponto significa "tirar à sorte" um valor de acordo com uma determinada lei de probabilidade, a *FDP* univariada condicional que, para as *f.a.*'s multivariadas normais, é definida pelas média e variância condicionadas nesse ponto.

---

[18] "Sequential gaussian simulation", segundo Deutsch e Journel (1992).

[19] A fundamentação desta afirmação constituiu uma das preocupações tidas em consideração na redacção do capítulo anterior.

### 5.4.3 Método de recozimento simulado[20]

Este método baseia-se na analogia entre a optimização e a técnica metalúrgica de recozimento de um sólido utilizada no seu endurecimento. Esta técnica caracteriza-se pelo aquecimento do sólido, que provoca um aumento da vibração das suas moléculas, até se atingir o estado de máxima energia, na qual o sólido perde a sua estrutura (fusão). Em seguida procede-se a um lento arrefecimento de modo a que as moléculas encontrem um arranjo correspondente ao estado de energia mínima. O recozimento simulado procura reproduzir estes procedimentos. A função objectivo, a minimizar, representa a energia, as variáveis da função objectivo definem um determinado arranjo molecular e as oscilações das variáveis são interpretadas como vibrações moleculares. No recozimento simulado, o parâmetro que representa a temperatura ajuda a controlar a probabilidade de aceitação de valores da função objectivo correspondentes a diferentes conjuntos ou configurações de valores das variáveis da função objectivo, o que é equivalente a controlar, no processo metalúrgico, a probabilidade de aceitação de estados de energia correspondentes a diferentes arranjos moleculares. Como se verá adiante, esta "temperatura" tem particular interesse na quantificação da probabilidade de aceitação de configurações de variáveis que aumentem o valor da função objectivo.

Na geração de uma realização de $Z(\vec{\mathbf{x}})$ com este método, começa-se por criar uma "imagem" da *f.a.*, atribuindo um valor a cada ponto ou nó do domínio. Nos pontos onde a *f.a.* é conhecida, coloca-se o respectivo valor. Para os restantes pontos extrai-se um valor a partir da *FDP* conjunta univariada ou de outra função probabilística equivalente. Uma determinada "imagem" pode ser modificada por uma permuta de posição dos valores de um qualquer par de pontos ou nós do domínio, excluindo-se aqueles com valores previamente conhecidos[21]. Uma permuta é sempre aceite se produzir uma redução da função objectivo. Contudo, se esta aumentar, a permuta poderá não ser rejeitada. A probabilidade de ser aceite depende do parâmetro de controlo equivalente à temperatura: quanto maior for o valor deste, maior é a probabilidade de uma permuta desfavorável ser aceite. Este procedimento destina-se a evitar que o processo de optimização fique encurralado num mínimo local. Para tal é conveniente que o valor inicial da "temperatura" seja suficientemente alto e que seu "arrefecimento" seja

---

[20] "Simulated annealing", na literatura de língua inglesa.

[21] Deste modo assegura-se que a geração seja exacta, isto é, que reproduza os valores da *f.a.* onde estes são conhecidos.

suficientemente lento. A geração de uma realização é dada por terminada quando a "imagem" fica "arrefecida", isto é, quando não há permutas que reduzam mais ao valor da função objectivo, ou quando esta atinge um valor predefinido. Introduzidas as ideias gerais, são agora apresentados com maior detalhe os procedimentos inerentes ao método e que permitem construir uma qualquer realização da função aleatória, tendo em conta a *FDP* conjunta univariada, $F(z)$, o semivariograma teórico, $\gamma(s)$, e os valores conhecidos:

a) para cada ponto ou nó do domínio que não tenha um valor previamente conhecido, é extraído aleatoriamente um valor, a partir de $F(z)$. Este procedimento gera uma configuração inicial da realização da *f.a.* que respeita os dados conhecidos e a *FDP* conjunta univariada, $F(z)$, mas não corresponde ao semivariograma teórico, $\gamma(s)$. De facto, se se calcular o semivariograma experimental desta configuração inicial certamente que se obterá algo próximo do efeito pepita puro, o que significa a ausência de qualquer estrutura espacial de correlação;

b) o objectivo do método consiste, então, em proceder ao rearranjo das posições dos valores obtidos no procedimento anterior de modo a obter uma nova configuração que contenha a estrutura espacial de correlação pretendida, isto é, com o respectivo semivariograma experimental, $\gamma^*(s)$, o mais semelhante possível ao teórico, $\gamma(s)$. Para o efeito é definida a seguinte função objectivo

$$F_{\text{obj}} = \sum_{s} \frac{\left[\gamma^*(s) - \gamma(s)\right]^2}{\gamma(s)^2} \tag{5.88}$$

A presença do quadrado de $\gamma(s)$ no denominador destina-se a tornar a $F_{\text{obj}}$ adimensional e a assegurar uma sensibilidade maior da função objectivo aos valores localizados em pontos ou nós mais próximos, isto é, com distâncias de separação mais pequenas, logo valores do semivariograma mais reduzidos. Contudo, um problema subsiste para as realizações condicionadas: os valores previamente conhecidos, geralmente em número reduzido, têm um peso quase insignificante na formação da função objectivo face ao elevado número de valores gerados. Por este motivo, a função objectivo é pouco sensível a eventuais descontinuidades em redor dos dados conhecidos. Para evitar estas descontinuidades, Deutsch e Journel (1992)

sugerem a divisão da função objectivo em duas partes: uma, com os pares de pontos que contêm, pelo menos, um dos valores previamente conhecidos e, outra, com os pares de pontos somente com valores gerados;

c) a configuração inicial é modificada através de sucessivas permutas de pares de valores, pares esses escolhidos aleatoriamente. Após cada permuta, o valor da função objectivo (5.88) é actualizado. Face ao novo valor de $F_{obj}$ decide-se a aceitação, ou não, da permuta. Se o valor de $F_{obj}$ decresce, aceita-se a permuta. Pelo contrário, se $F_{obj}$ aumentar, coloca-se o problema de rejeitar, ou não, a permuta. Aparentemente, dever-se-ia rejeitá-la. Contudo, e tal como já se referiu, desta opção pode resultar um "arrefecimento" prematuro da configuração da realização, isto é, uma interrupção das permutas para um valor da função objectivo ainda distante de zero e correspondente a um mínimo local. Se a redução da função objectivo for realizada mais lentamente, ou seja, se algumas permutas que aumentem ao valor de $F_{obj}$ forem aceites, a função objectivo terá melhores condições para atingir o mínimo global porque poderá "escapar" a um mínimo local. Admitindo como válido este princípio, é necessário estabelecer o critério a seguir no que respeita à aceitação, ou rejeição, de uma permuta que aumente o valor de $F_{obj}$. Para o efeito utiliza-se a *FDP* de Boltzman

$$P_{aceitar} = \begin{cases} 1 & \text{para } \Delta F_{obj} \leq 0 \\ \exp\left(-\dfrac{\Delta F_{obj}}{t}\right) & \text{para } \Delta F_{obj} > 0 \end{cases} \tag{5.89}$$

onde $\Delta F_{obj}$ representa a variação da função objectivo e $t$ a "temperatura". Deste modo, as permutas não favoráveis são aceites de acordo com uma *FDP* exponencial: quanto maior for o valor de $t$, maior a probabilidade de ser aceite uma permuta desfavorável. Este parâmetro, $t$, não deve ser reduzido muito rapidamente, para evitar que o processo de optimização convirja para um mínimo local, nem tão lentamente que agrave desnecessariamente o esforço de cálculo. O critério para a definição do ritmo de redução de $t$ é designado por "plano de recozimento"[22].

[22] "Annealing schedule", na literatura de língua inglesa.

Deutsch e Journel (1992) sugerem um esquema relativamente simples: começar com um valor elevado, $t_0$, que é reduzido por multiplicação com um factor de redução, $\lambda \in ]0,1[$, sempre que um número considerado suficiente de permutas, para uma determinada temperatura, tenha sido aceite ($N_{\text{aceite}}$) ou tentado ($N_{\text{máximo}}$). O processo de recozimento simulado termina quando o número máximo de permutas, $N_{\text{máximo}}$, for atingido um número predeterminado de vezes (2 ou 3) ou quando $F_{\text{obj}}$ alcançar um valor mínimo predefinido. Os valores de $N_{\text{máximo}}$ e $N_{\text{aceite}}$ devem ter uma ordem de grandeza de, respectivamente, 100 e 10 vezes o número de pontos ou nós do domínio.

Este método tem uma vantagem relativamente ao exposto na secção anterior que é a de também gerar realizações não condicionadas. Contudo, é um método muito mais exigente do ponto de vista do esforço computacional. Por este motivo será preferível a simulação sequencial gaussiana para a geração de realizações condicionadas.

### 5.4.4 Simulações de Monte-Carlo não condicionadas

Nesta secção apresenta-se, a título exemplificativo, uma aplicação do método das simulações de Monte-Carlo não condicionadas a um problema simples, cuja solução é conhecida para um meio poroso homogéneo. Considere-se, então, um aquífero regional não confinado com a geometria e as condições fronteira definidas na Figura 5.3. Admita-se que o fundo impermeável do aquífero tem uma inclinação constante entre as duas fronteiras com o valor do nível piezométrico definido, variando a respectiva cota entre $Z_{\text{fundo}} = 50\,\text{m}$, para $x = 0\,\text{m}$, e $Z_{\text{fundo}} = 44\,\text{m}$, para $x = 6000\,\text{m}$. O objectivo dos dois exercícios de aplicação do método das simulações de Monte-Carlo (*msM-C*) que aqui se apresentam consiste no estabelecimento de um escoamento estabilizado, logo permanente, entre as duas fronteiras com $H$ definido, pelo que os resultados são indiferentes ao valor da porosidade drenável adoptada. Contudo, e porque a equação diferencial e o respectivo modelo numérico exigem a quantificação desta porosidade, adoptou-se $\omega_d = 0.25$. Este parâmetro só influencia os

resultados durante a fase transitória do problema, até à estabilização dos mesmos[23]. Para condição inicial admitiu-se um nível piezométrico constante e igual a $H = 100\,\text{m}$.

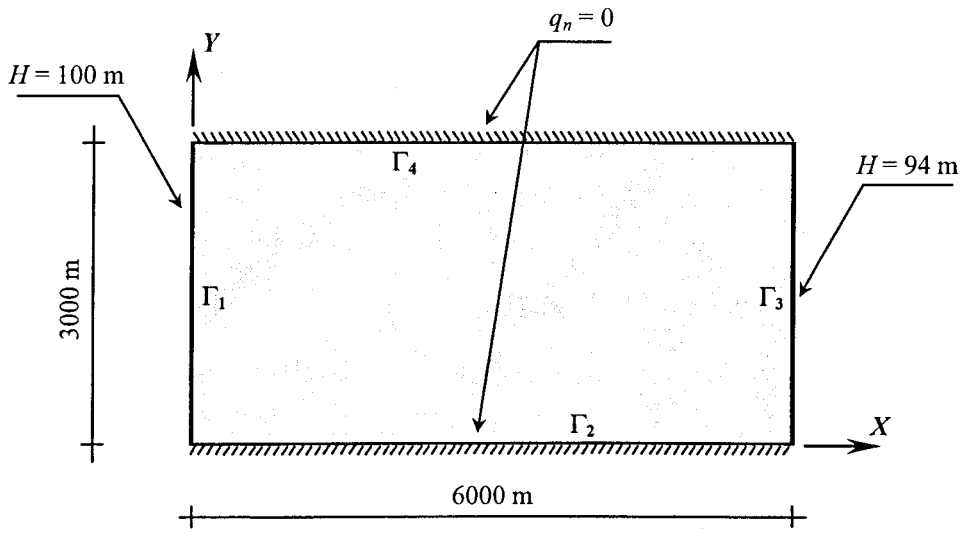



Figura 5.3 – ES21_K e ES22_K: Planta do aquífero. Condições fronteira de Dirichlet e Neumann.

| Conjunto de realizações | $m_Y$ | $w_Y$ | $\sigma_Y^2$ | $l_Y$ (m) |
|---|---|---|---|---|
| **ES21_K** | 2.99573 | 0.0 | 0.23 | 500 |
| **ES22_K** | 2.99573 | 0.0 | 0.98 | 500 |

Tabela 5.1 – Parâmetros estatísticos dos dois conjuntos de realizações de $Y$=ln$K$ (semivariograma exponencial).

Os dois exercícios que aqui se apresentam, ES21_K e ES22_K, correspondem a dois conjuntos diferentes de realizações *não condicionadas* da conductividade hidráulica, definidos para distintos valores da variância das respectivas transformadas logarítmicas, $\sigma_Y^2$, mas com a mesma média, $m_Y$, distância integral, $l_Y$, e efeito pepita, $w_Y$ (Tabela 5.1; semivariograma exponencial). Com estes exemplos pode-se observar o impacto da variância de $Y = \ln K$ na variância do nível piezométrico, $\sigma_H^2$. O valor de $m_Y$ é o logaritmo da média geométrica $K_G = 20\,\text{m/d}$.

[23] Quanto menor for o valor de $\omega_t$, mais rapidamente se atinge a estabilização do escoamento. De facto, para a mesma conductividade hidráulica, quanto menor for o valor de $\omega_t$, menor é a quantidade de água contida pelo solo. Como consequência, há menos água a drenar para se atingir a nova configuração de equilíbrio, logo esta estabelece-se mais rapidamente.

O aquífero foi discretizado com uma malha de 800 elementos finitos isoparamétricos de oito nós de 150×150 $m^2$. Com esta dimensão dos elementos procurou-se que a distância entre os nós mais próximos fosse substancialmente inferior ao valor da distância integral de $Y = \ln K$. As 300 realizações desta *f.a.* foram inicialmente geradas numa "grelha geoestatística" rectangular de 81×41 pontos. A distância entre pontos consecutivos, segundo $x$ e $y$, foi fixada em 75 metros de modo a obter-se uma sobreposição entre os pontos da "grelha" e os nós da malha de elementos finitos. Com esta distância entre os nós mais próximos assegura-se a representação nas realizações geradas, e por conseguinte no modelo numérico, de uma parte significativa da estrutura de correlação espacial da conductividade hidráulica, nomeadamente o trecho do semivariograma (ou da função de covariância) mais próximo da origem[24]. O programa de cálculo utilizado, **SASIM**[25], baseia-se num algoritmo que gera realizações normais padrão ($m_X = 1, w_X + \sigma_X^2 = 1$) da *f.a.*, pelo que é necessário proceder a uma posterior mudança de variável ($X \rightarrow Y$) de modo a produzir as realizações correspondentes aos parâmetros estatísticos pretendidos[26]. As realizações da *f.a.* $Y = \ln K$ assim obtidas são posteriormente convertidas em realizações da conductividade hidráulica, $K = \exp Y$, e transportadas dos pontos da "grelha geoestatística" para os nós da malha de elementos finitos. Este transporte implica uma perda de informação resultante de os pontos da "grelha geoestatística" localizados no centro dos elementos não corresponderem a nós da malha de elementos finitos. Contudo, esta perda de informação não tem impacto significativo nos parâmetros estatísticos das realizações produzidas, tal como se pode observar nos histogramas e semivariogramas experimentais de algumas destas realizações.

Nas páginas seguintes são apresentadas, para os exemplos de aplicação ES21_K e ES22_K, as imagens de três realizações de $Y = \ln K$ e respectivos histogramas e semivariogramas experimentais, os níveis piezométricos esperados e as correspondentes variâncias. Nas imagens das realizações, optou-se por representar a transformada logarítmica, uma vez que é esta *f.a.* que é gerada. Assim, as isolinhas representadas correspondem ao logaritmo dos valores de $K$ indicados nas respectivas legendas.

---

[24] Naturalmente que fica por representar a variabilidade de $K$ para distâncias inferiores a 75 metros. Esta questão já foi referida na introdução do presente sub-capítulo, a propósito das aproximações resultantes da utilização deste método numérico.

[25] Deutsch e Journel (1992).

[26] Para este efeito, foi utilizado o programa **SIMTOSIM**.

## a) Exemplo ES21_K

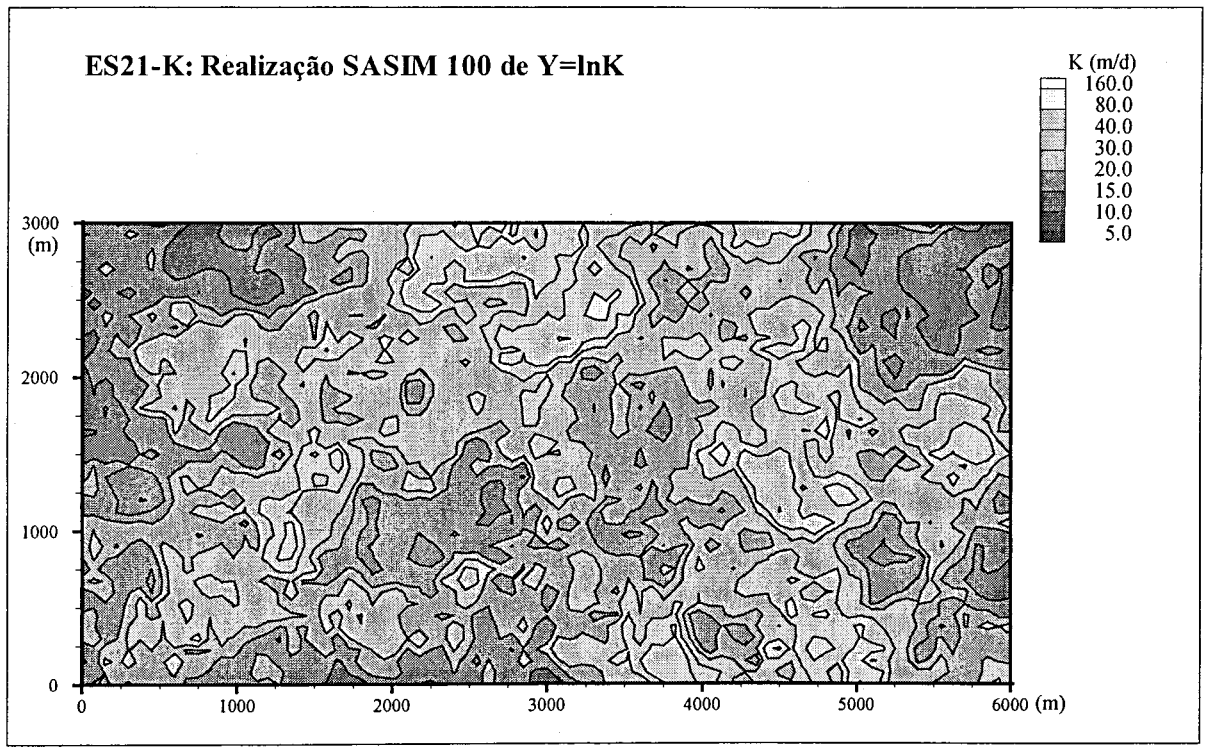



Figura 5.4 – ES21_K: Realização não condicionada nº 100 de $Y=\ln K$.

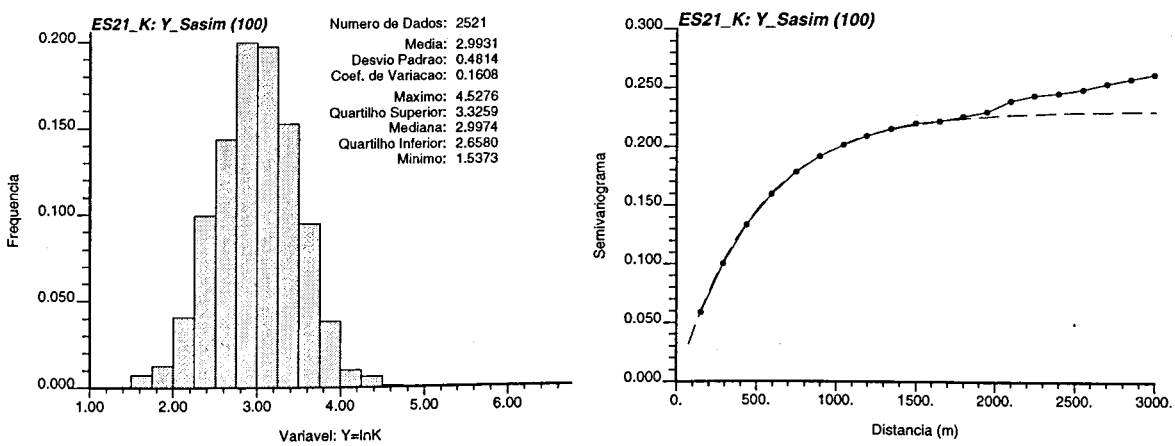



Figura 5.5 – ES21_K: Histograma e semivariograma experimentais da realização não condicionada nº 100 de $Y=\ln K$. A tracejado, o semivariograma exponencial teórico adoptado.

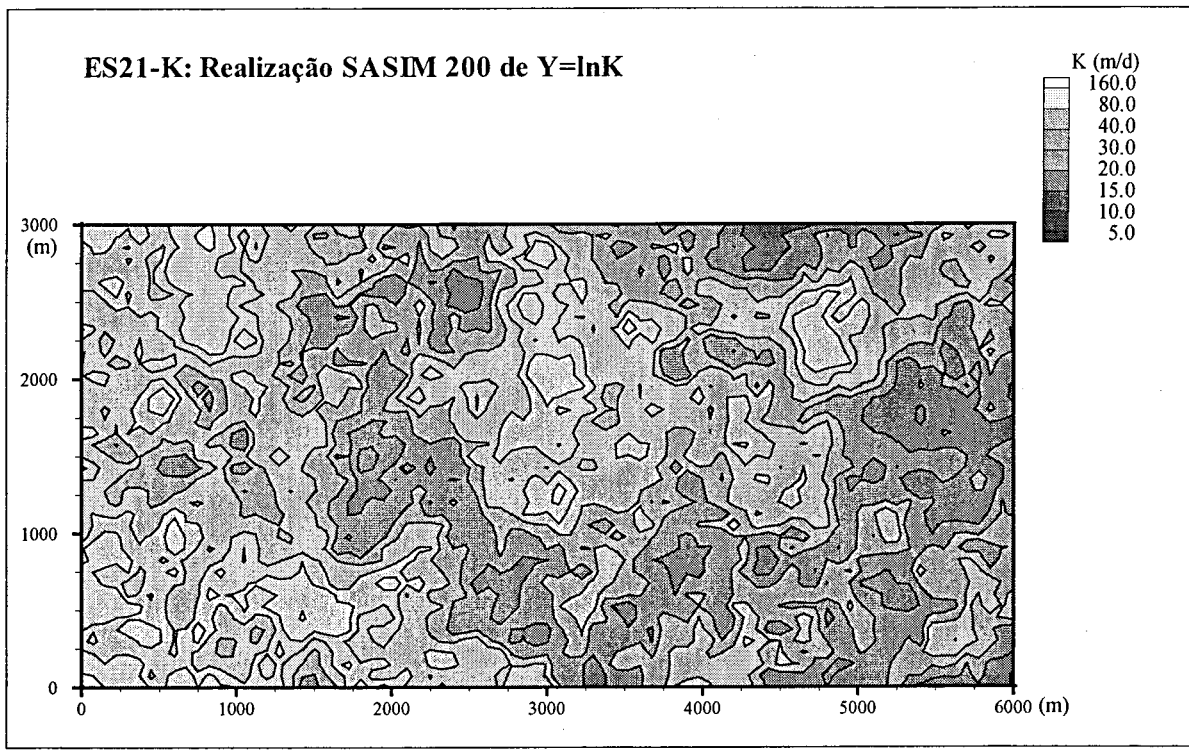



Figura 5.6 - ES21_K: Realização não condicionada nº 200 de $Y$=ln$K$.

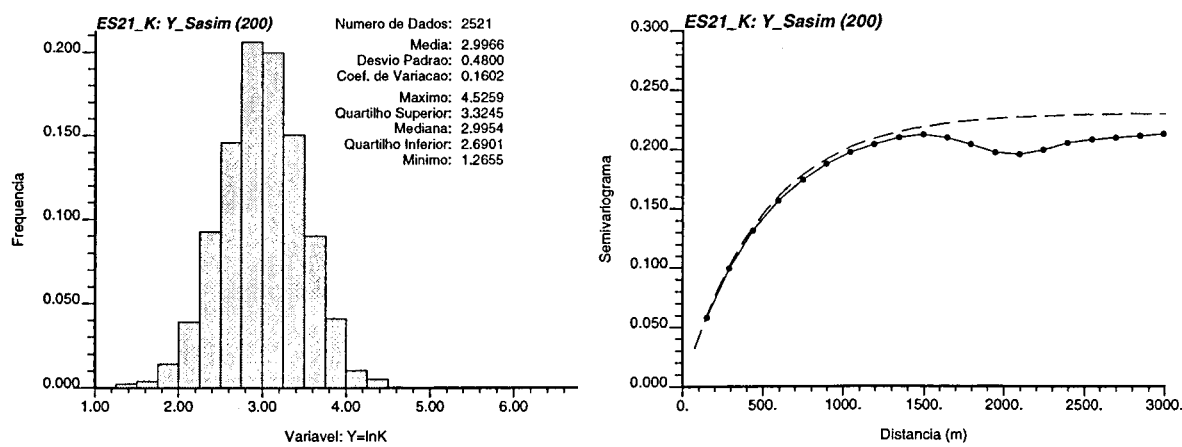



Figura 5.7 – ES21_K: Histograma e semivariograma experimentais da realização não condicionada nº 200 de $Y$=ln$K$. A tracejado, o semivariograma exponencial teórico adoptado.

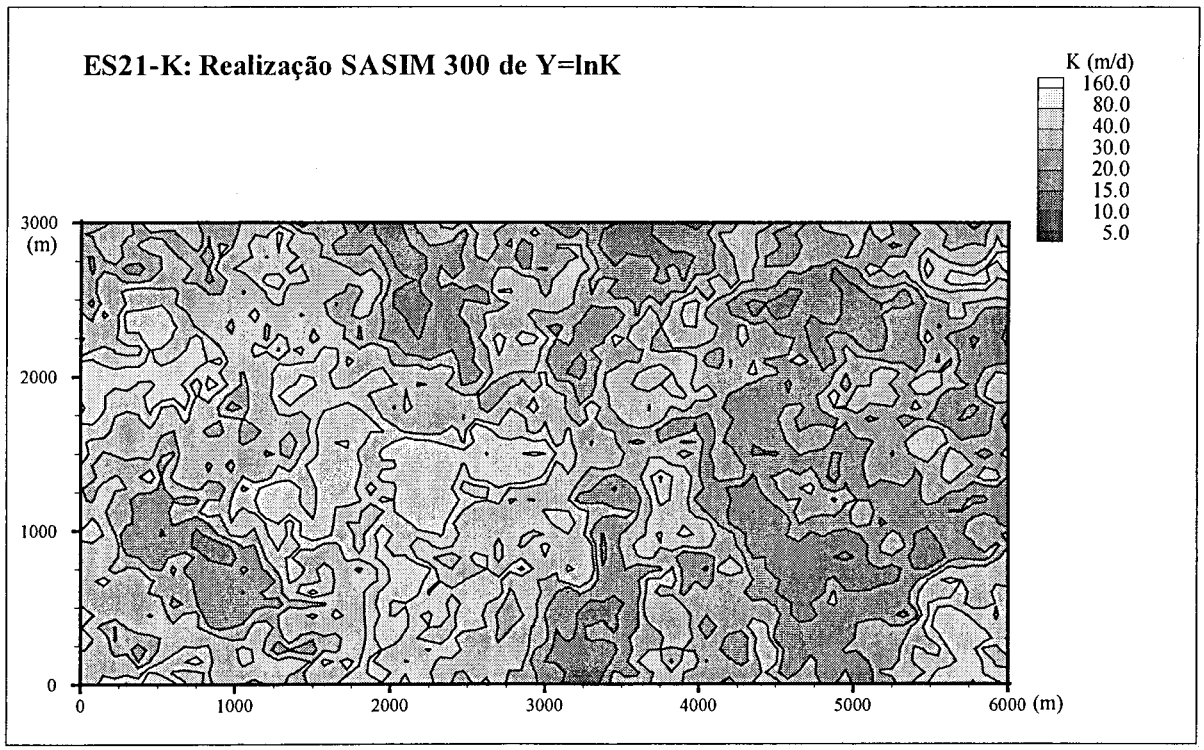



Figura 5.8 – ES21_K: Realização não condicionada nº 300 de $Y$=ln$K$.

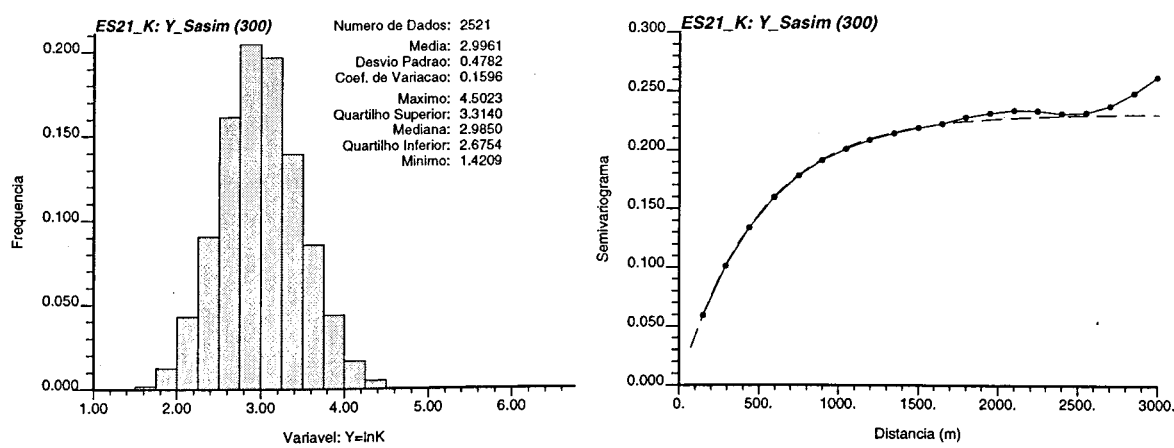



Figura 5.9 – ES21_K: Histograma e semivariograma experimentais da realização não condicionada nº 300 de $Y$=ln$K$. A tracejado, o semivariograma exponencial teórico adoptado.

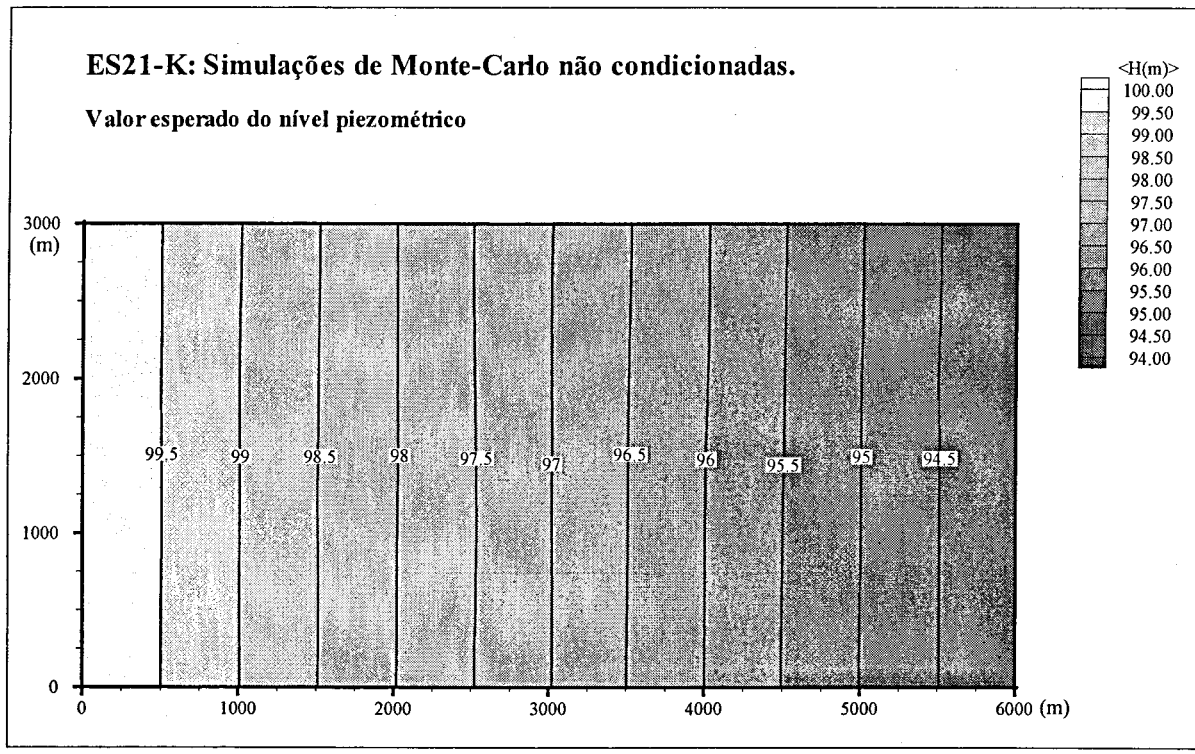



Figura 5.10 – ES21_K: Valor esperado do nível piezométrico.

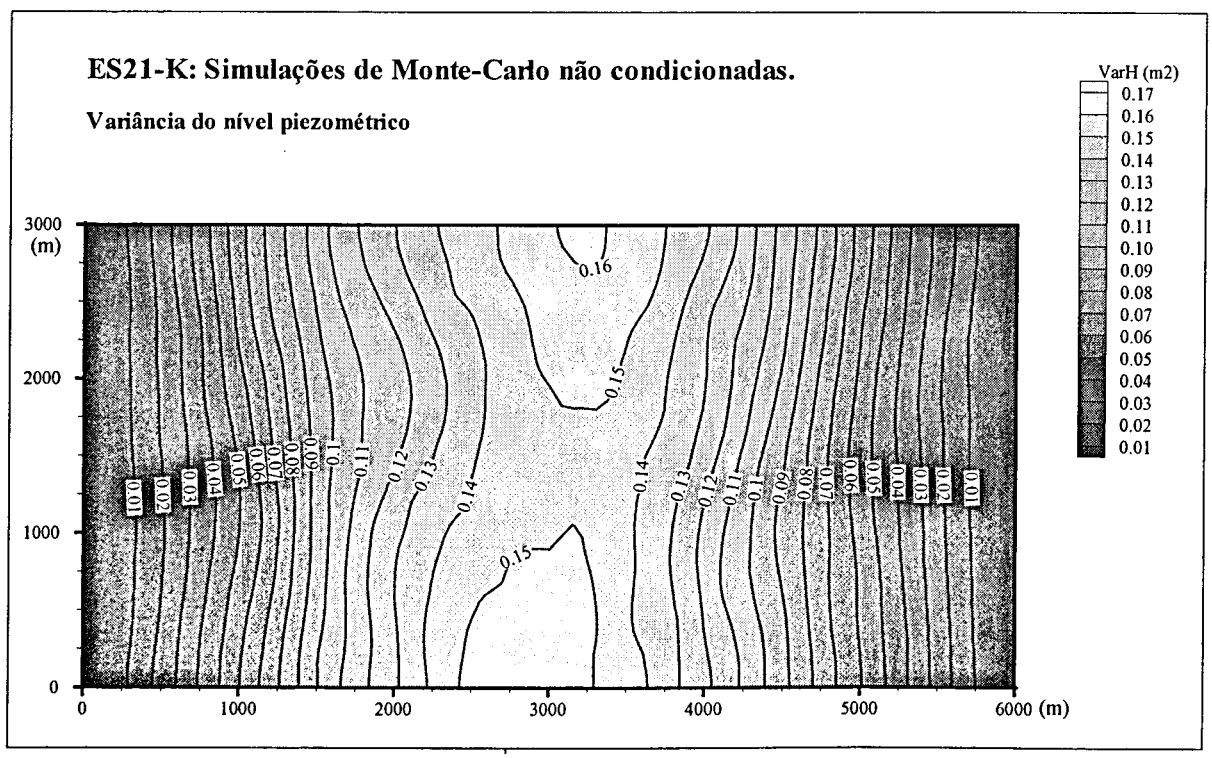



Figura 5.11 – ES21_K: Variância do nível piezométrico.

## b) Exemplo ES22_K

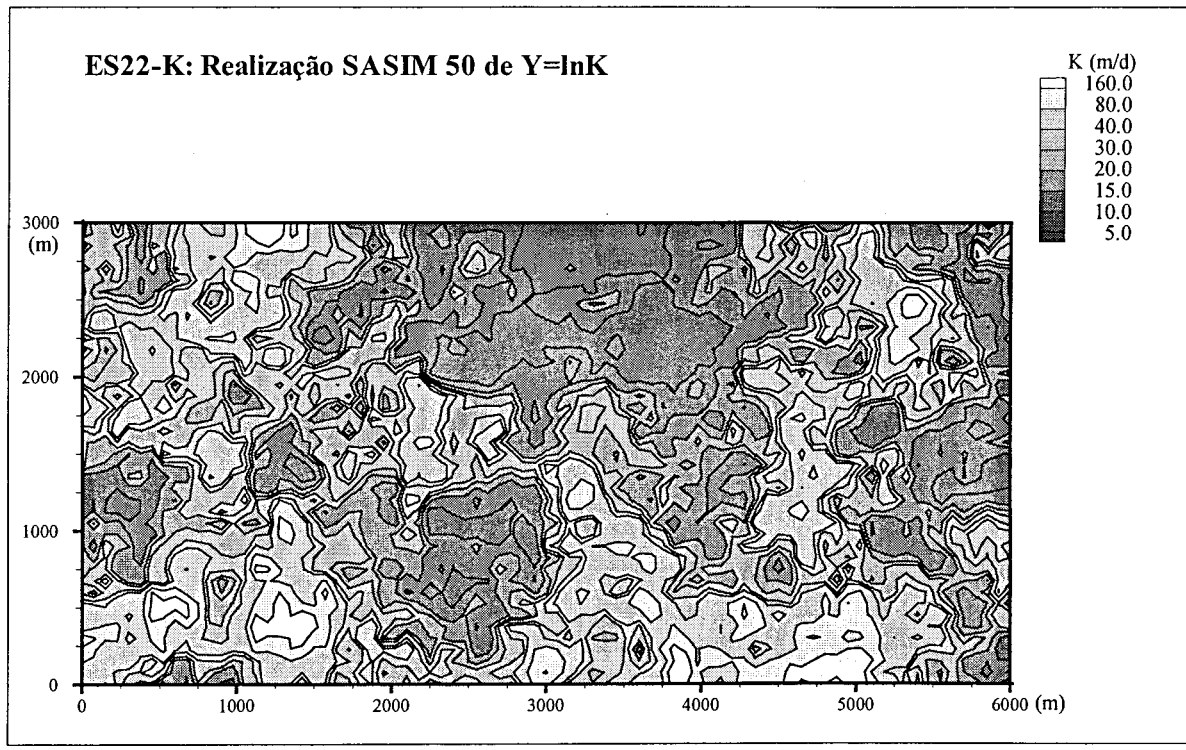



Figura 5.12 – ES22_K: Realização não condicionada nº 50 de $Y$=ln$K$.

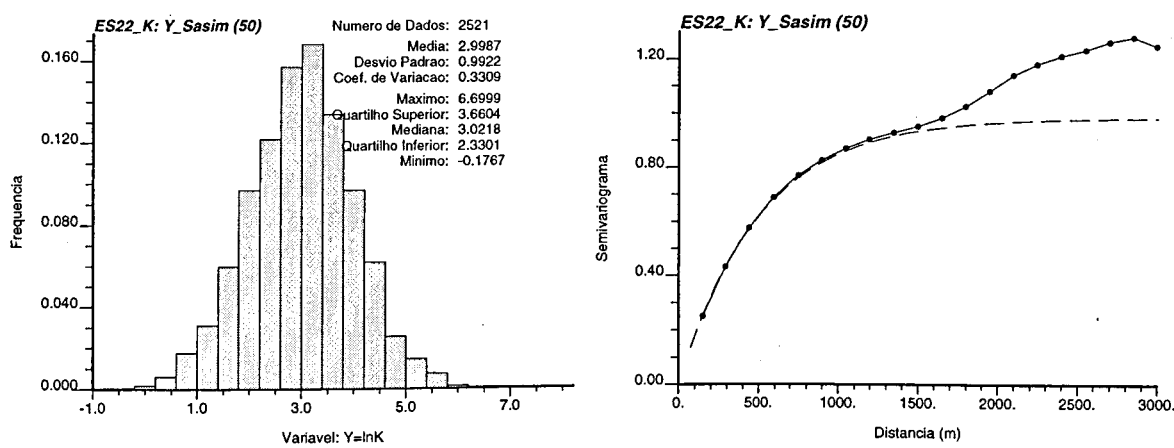



Figura 5.13 – ES22_K: Histograma e semivariograma experimentais da realização não condicionada nº 50 de $Y$=ln$K$. A tracejado, o semivariograma exponencial teórico adoptado.

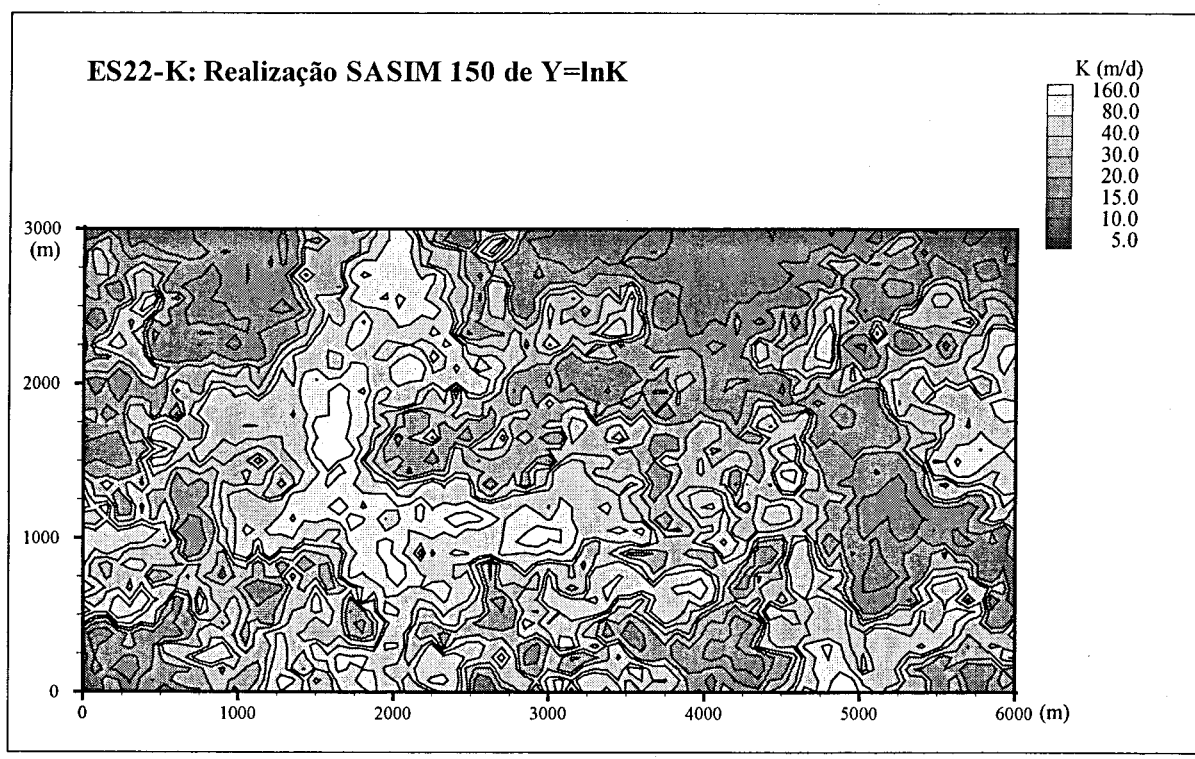



Figura 5.14 – ES22_K: Realização não condicionada nº 150 de $Y$=ln$K$.

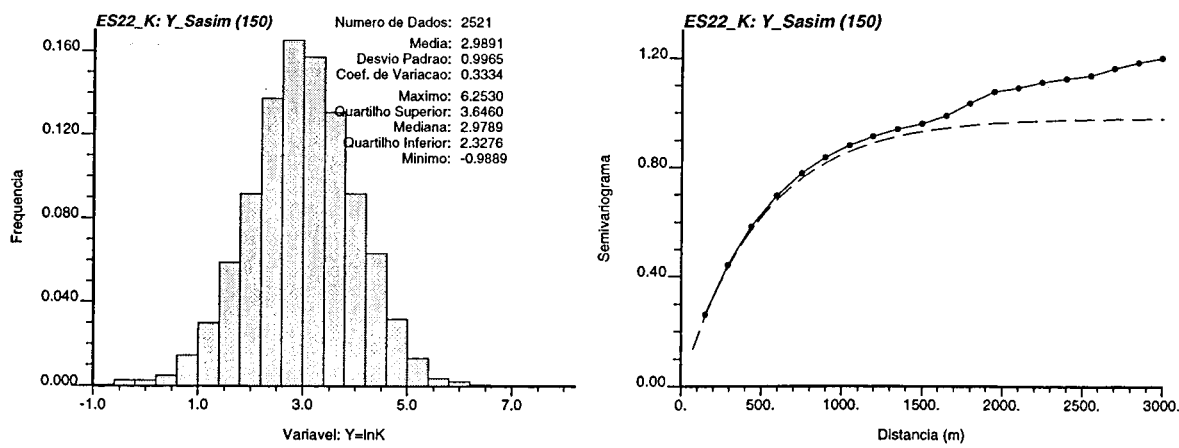



Figura 5.15 – ES22_K: Histograma e semivariograma experimentais da realização não condicionada nº 150 de $Y$=ln$K$. A tracejado, o semivariograma exponencial teórico adoptado.

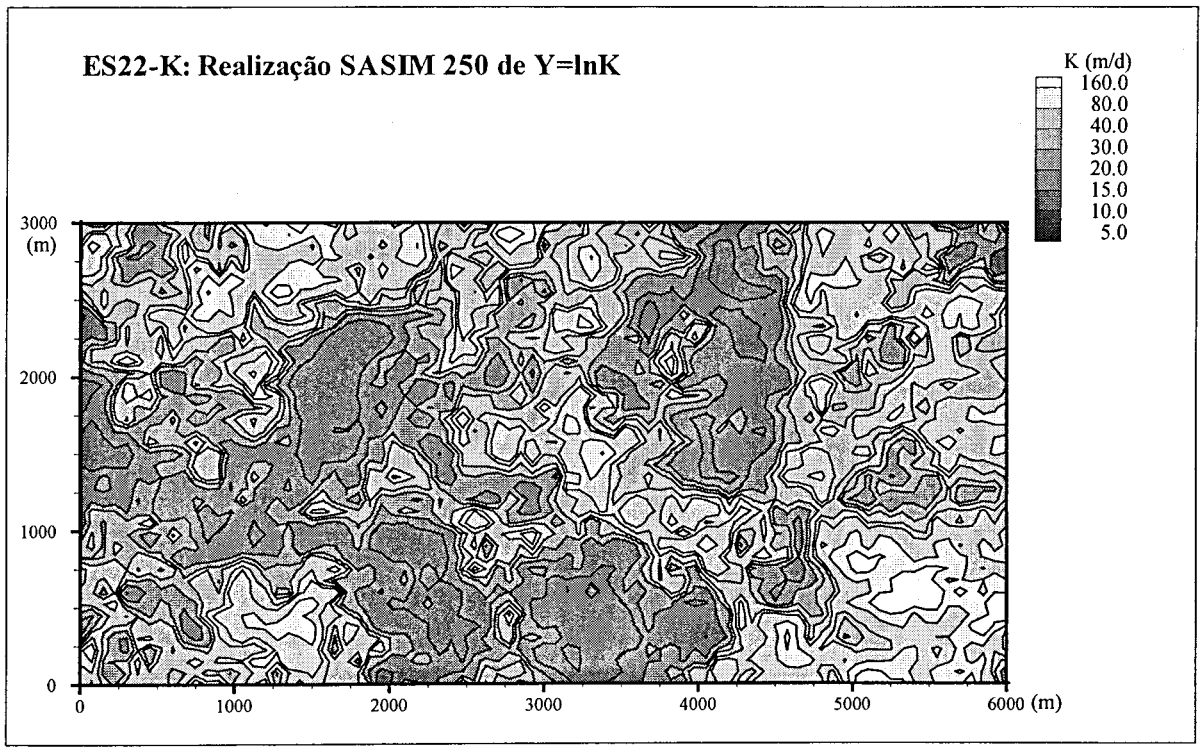



Figura 5.16 – ES22_K: Realização não condicionada nº 250 de $Y$=ln$K$.

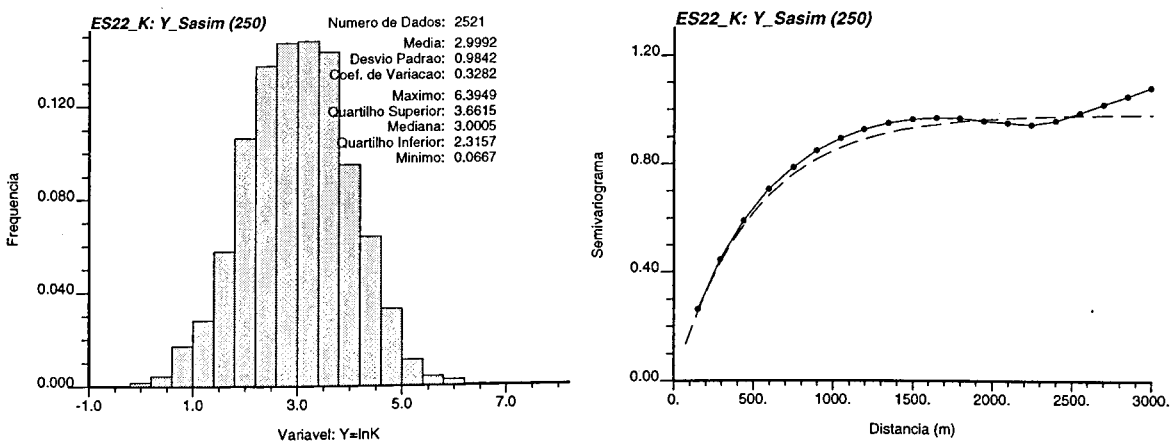



Figura 5.17 – ES22_K: Histograma e semivariograma experimentais da realização não condicionada nº 250 de $Y$=ln$K$. A tracejado, o semivariograma exponencial teórico adoptado.

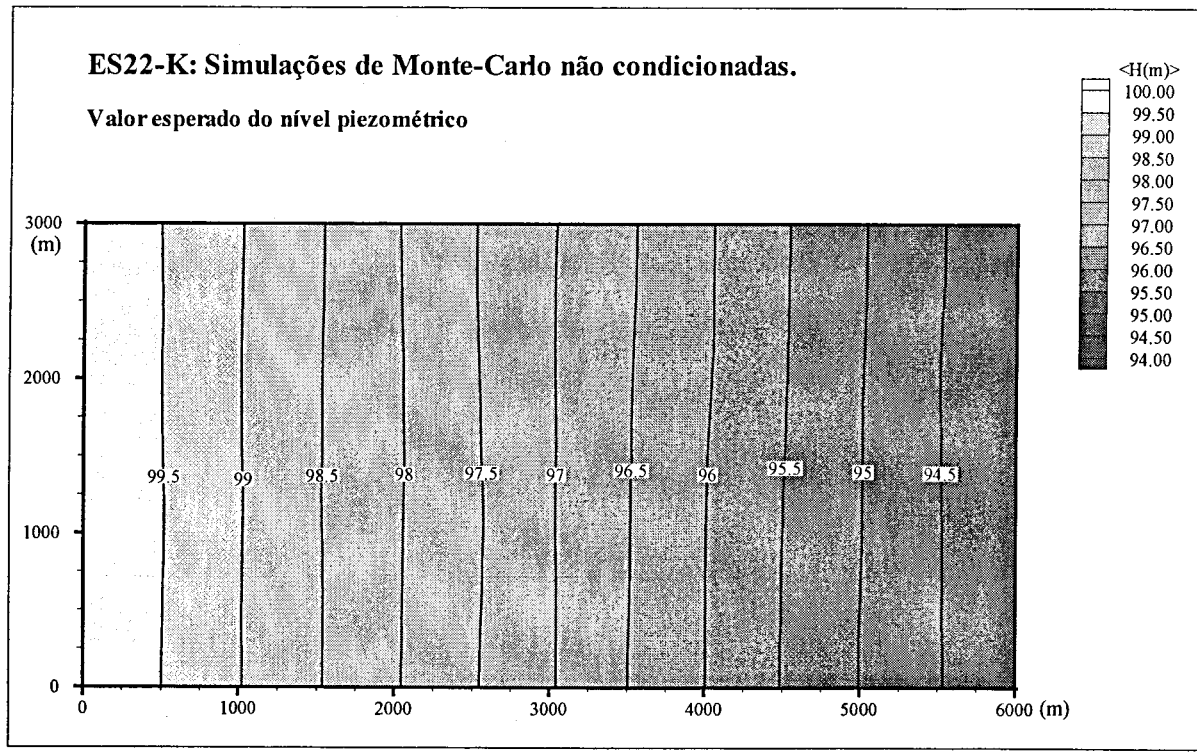



Figura 5.18 – ES22_K: Valor esperado do nível piezométrico.

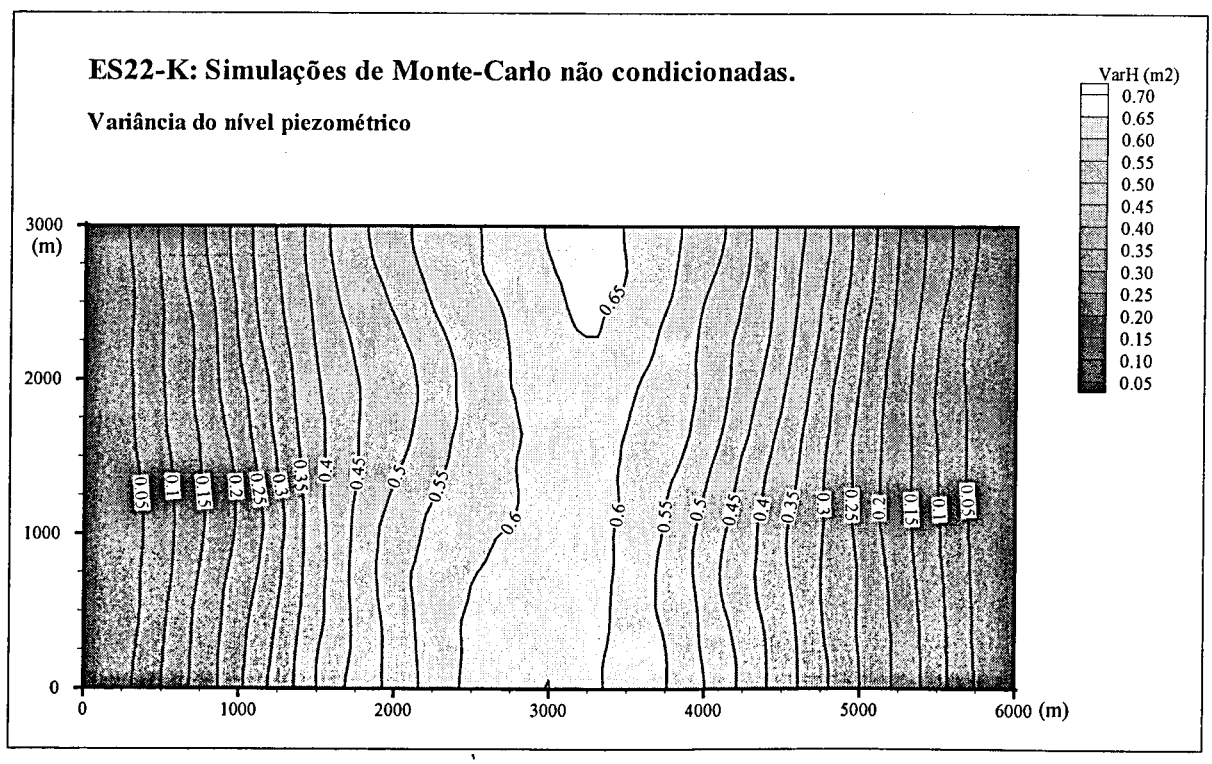



Figura 5.19 – ES22_K: Variância do nível piezométrico.

Conforme já se referiu, o problema aqui apresentado tem solução analítica conhecida para um aquífero com uma conductividade hidráulica isotrópica e homogénea, isto é, com um valor constante em todas as direcções e para todos os pontos do domínio. Tendo presente que a simulação directa estocástica não condicionada pode ser regida pela habitual equação diferencial rescrita para o nível piezométrico esperado, $\langle H \rangle$, e para o valor da *conductividade hidráulica efectiva*, $K_{ef}$, e que este valor é aproximadamente igual à média geométrica da conductividade hidráulica[27]

$$K_{ef} \approx K_G = \exp(m_Y) \tag{5.90}$$

é natural que se compare os resultados dos exercícios ES21_K e ES22_K, resolvidos pelo *msM-C* não condicionadas, com a solução analítica do mesmo problema resolvido para a média geométrica correspondente às *f.a.*'s utilizadas, $K_G = 20\,\text{m/d}$. Para o efeito, considere-se o exercício ES20_K, cuja solução analítica é a seguinte:

- $\langle i_x \rangle = (H_3 - H_1)/L_X = (94-100)/6000 = -0.001$ m/m ; $\langle i_y \rangle = 0.0$ m/m
- $\langle H(x) \rangle = H_1 + \langle i_x \rangle x \quad (m)$
- $\langle q_x \rangle = -K_G \langle D \rangle \langle i_x \rangle = -20 \times 50 \times (-0.001) = 1.0\ \text{m}^2/\text{d}$ ; $\langle q_y \rangle = 0.0\ \text{m}^2/\text{d}$
- $\langle Q \rangle_{\Gamma_1} = \int_{L_y}^{0} \langle q_x(0, y \rangle\, dy = -3000\ \text{m}^3/\text{d}$
- $\langle Q \rangle_{\Gamma_3} = \int_{0}^{L_Y} \langle q_x(6000, y) \rangle\, dy = +3000\ \text{m}^3/\text{d}$

| | ES20_K | ES21_K | desvio (%) | ES22_K | desvio (%) |
|---|---|---|---|---|---|
| $\langle Q \rangle_{\Gamma_1}$ (m$^3$/d) | − 3000 | − 2974 | − 0.9 | − 2893 | − 3.6 |
| $\langle Q \rangle_{\Gamma_3}$ (m$^3$/d) | + 3000 | + 2974 | − 0.9 | + 2893 | − 3.6 |

Tabela 5.2 – Caudais totais nas fronteiras $\Gamma_1$ e $\Gamma_3$. Desvio relativamente a ES20_K.

| | ES20_K | ES21_K | desvio (%) | ES22_K | desvio (%) |
|---|---|---|---|---|---|
| $K_{ef}$ (m/d) | 20 | 19.83 | − 0.9 | 19.29 | − 3.6 |

Tabela 5.3 – Conductividade hidráulica efectiva. Desvio relativamente a ES20_K.

[27] Este assunto é tratado com maior detalhe a propósito do método das perturbações.

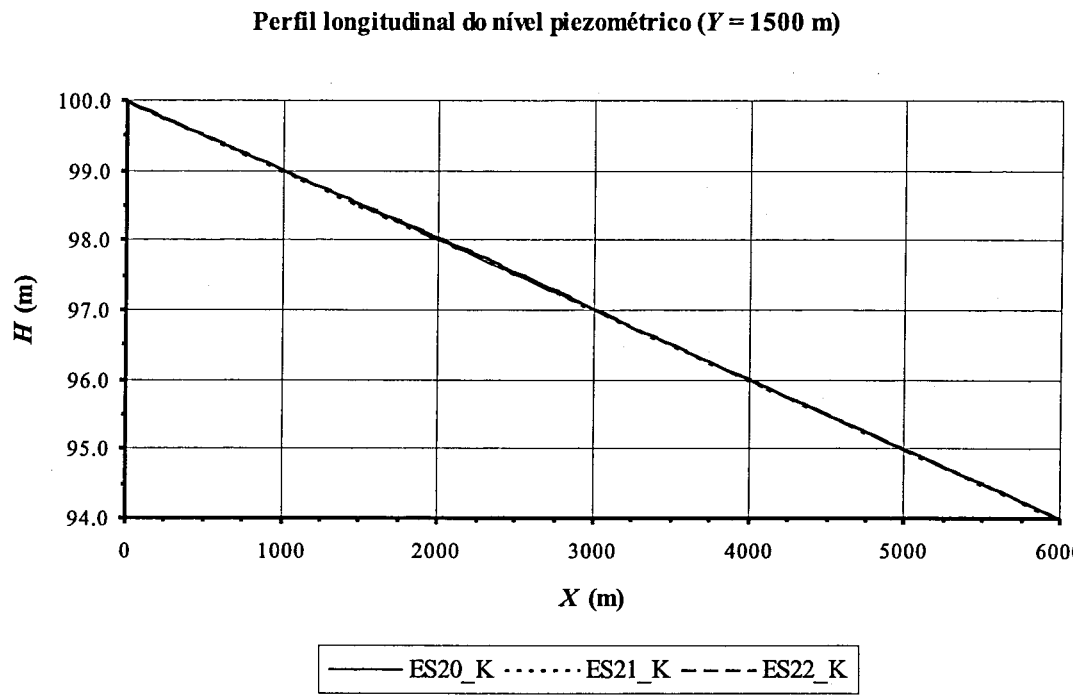



Figura 5.20 – ES20_K, ES21_K e ES22_K: Comparação dos perfis longitudinais do nível piezométrico esperado.

Na Tabela 5.2 e na Figura 5.20 são resumidos os resultados obtidos com o *msM-C* não condicionadas, os quais apresentam desvios pouco significativos relativamente aos valores correspondentes da solução analítica para $K_G = 20\,\text{m/d}$, tanto para os níveis piezométricos como para os caudais totais nas fronteiras permeáveis. Esta constatação, embora respeitante a um problema relativamente simples, poderá sugerir a ideia de que o *msM-C* não condicionadas pode ser substituído pela simulação directa baseada na conductividade hidráulica efectiva, uma vez que o esforço de cálculo é incomparavelmente menor. De facto, de acordo com Dagan (1989), trata-se de uma alternativa admissível para escoamentos permanentes e uniformes, em média, desde que os aquíferos em causa apresentem dimensões em planta substancialmente superiores à distância integral da conductividade hidráulica. Ainda segundo este autor, será igualmente aceitável para escoamentos não permanentes e não uniformes desde que o gradiente hidráulico médio apresente variações graduais, em ordem ao espaço e ao tempo. Contudo, a simulação com base no valor efectivo da conductividade hidráulica tem a desvantagem de não produzir uma medida da incerteza associada aos valores estimados. De facto, embora existam algumas expressões teóricas na bibliografia respeitante a esta matéria, a sua utilização prática é fortemente limitada por condições de validade muito particulares que lhes retiram qualquer aplicabilidade para a generalidade dos casos. São

expressões que, por exemplo, não reconhecem o efeito produzido na variância de $H$ pela proximidade às fronteiras. A este propósito, e título meramente exemplificativo, retome-se a expressão da variância de $H$, apresentada em Gelhar (1993) para um aquífero regional, isotrópico, de dimensão infinita, com um escoamento médio permanente e uniforme e com as transmissividade e espessura médias constantes

$$\sigma_H^2 = 0.37\sigma_f^2 l^2 J^2 \ln\left(\frac{1.21B}{Jl}\right) \tag{5.61}$$

Esta expressão, aplicada aos dados dos exercícios ES21_K e ES22_K, dá os seguintes resultados

- ES21_K: $\sigma_Y^2 = 0.23 \Rightarrow \sigma_H^2 = 0.102\ \mathrm{m}^2$
- ES22_K: $\sigma^2 = 0.98 \Rightarrow \sigma_H^2 = 0.435\ \mathrm{m}^2$

Comparando estes resultados com os perfis longitudinais da variância de $H$ representados na Figura 5.21, verifica-se que, embora um pouco inferiores, são da mesma ordem de grandeza dos valores máximos desses perfis, os quais se localizam na zona do domínio mais afastada das fronteiras, logo com condições mais próximas das condições de validade de (5.61). Contudo, e independentemente da bondade relativa das variâncias obtidas, esta expressão apresentada por Gelhar não reflecte a presença das fronteiras, ao contrário do que sucede com o *msM-C*.

Outra observação que se impõe face aos resultados obtidos com o *msM-C* respeita às "imagens" (Figura 5.11 e Figura 5.19) e aos perfis longitudinais (Figura 5.21) da variância. São "imagens" e perfis com um desenho irregular e com uma aproximação grosseira relativamente à simetria que deveriam evidenciar. Trata-se, claramente, de uma consequência do número insuficiente de realizações (300) utilizadas, mas cuja geração pelo método do recozimento simulado exigiu um enorme esforço computacional[28]. Em contrapartida, os valores esperados da piezometria revelaram um comportamento francamente bom.

[28] Cerca de duas semanas de trabalho ininterrupto de uma máquina UNIX do centro de cálculo da FEUP...

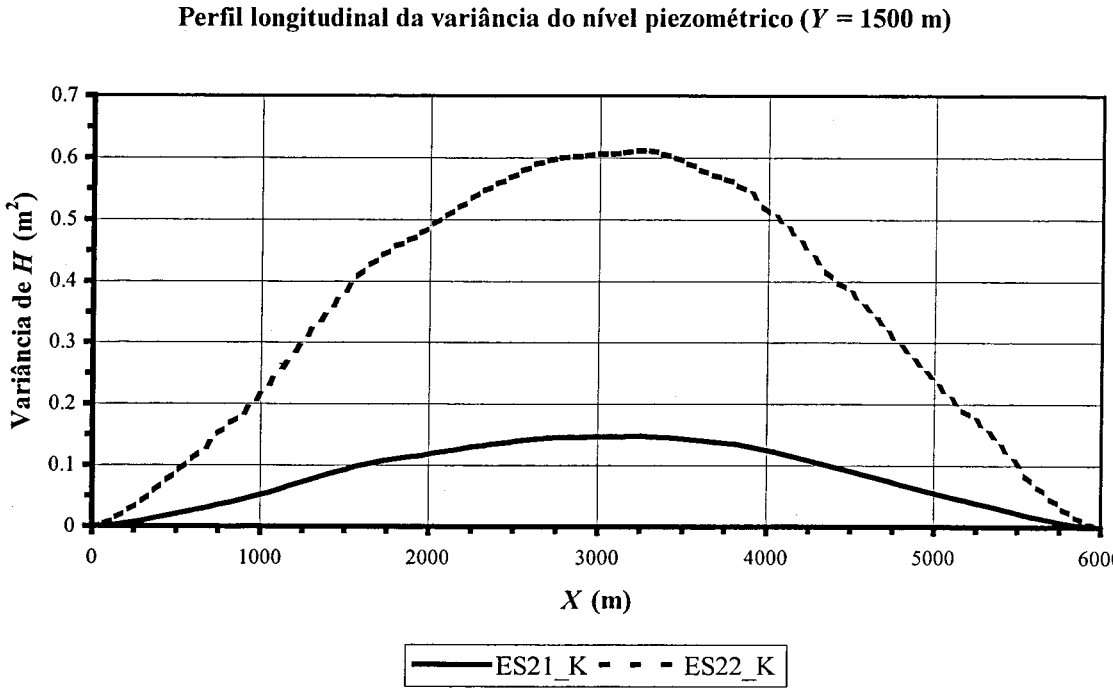



Figura 5.21 –ES21_K e ES22_K: Comparação dos perfis longitudinais da variância do nível piezométrico.

Finalmente, uma referência ao desvio padrão dos caudais totais nas fronteiras permeáveis (Tabela 5.4). Como seria de esperar, a maior variabilidade de $Y = \ln K$ no exercício ES22_K produz uma maior incerteza no valor do caudal total, o que se reflecte no aumento do correspondente desvio padrão.

| | ES21_K | ES22_K |
|---|---|---|
| $\Gamma_1$ : $\sigma_Q$ (m³/d) | 31 | 114 |
| $\Gamma_3$ : $\sigma_Q$ (m³/d) | 31 | 114 |

Tabela 5.4 – Desvio padrão dos caudais totais nas fronteiras $\Gamma_1$ e $\Gamma_3$.

### 5.4.5 Simulações de Monte-Carlo condicionadas

Nesta secção é apresentada uma aplicação do *msM-C* condicionadas a um problema idêntico ao da secção anterior no que respeita à definição da geometria do aquífero[29] e das

[29] Cota de fundo, inclusive.

condições iniciais e de fronteira (Figura 5.22). Mas agora acrescenta-se uma recarga superficial uniforme de 2mm/d e admite-se o conhecimento da distribuição "real" da conductividade hidráulica (Figura 5.23) do aquífero não confinado e, por conseguinte, da correspondente piezometria "real". O exercício proposto, ESC42_K, consiste na recolha de uma amostra aleatória de "dados de campo" da conductividade hidráulica, com base na qual são geradas as múltiplas realizações (1000) de $K$ sobre as quais são efectuadas as simulações de Monte-Carlo. A piezometria assim obtida é então comparada com a "real" e, também, com a que resultaria da aplicação do conceito de conductividade hidráulica efectiva. Esta última piezometria representa, aproximadamente, a que seria obtida pela aplicação do *msM-C* a um conjunto de realizações não condicionadas produzidas para os parâmetros estatísticos da amostra.

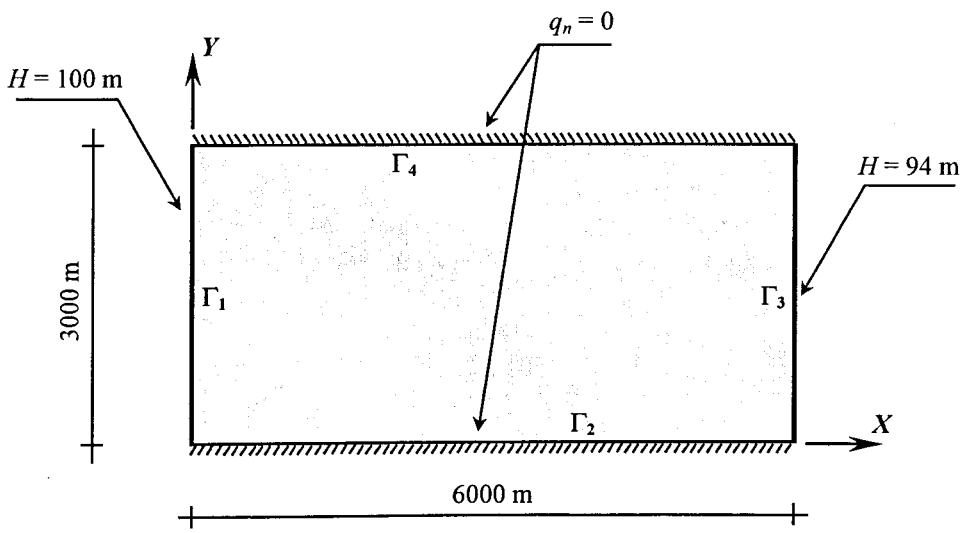



Figura 5.22 – ES40_K e ESC42_K: Planta do aquífero. Condições fronteira de Dirichlet e Neumann.

A amostragem de $K$ é efectuada em 16 pontos do aquífero escolhidos aleatoriamente (Figura 5.24). O tratamento estatístico e a análise estrutural são efectuados com os histograma e semivariograma experimentais (Figura 5.25). Para a geração das realizações condicionadas de $K$ admitiu-se que a *f.a.* $Y = \ln K$ é estacionária, isotrópica e multivariada normal. Os respectivos parâmetros estatísticos, inferidos da amostra, são os apresentados na Tabela 5.5. O efeito pepita, $w_Y$, e a distância integral, $l_Y$, foram estimados a sentimento[30].

[30] Num problema concreto, este seria um procedimento possível. Mas aqui, neste exercício, os valores "estimados a sentimento" correspondem aos utilizados na geração da distribuição "real" da conductividade hidráulica. Nas aplicações práticas, é desejável a utilização de um procedimento mais objectivo do que a

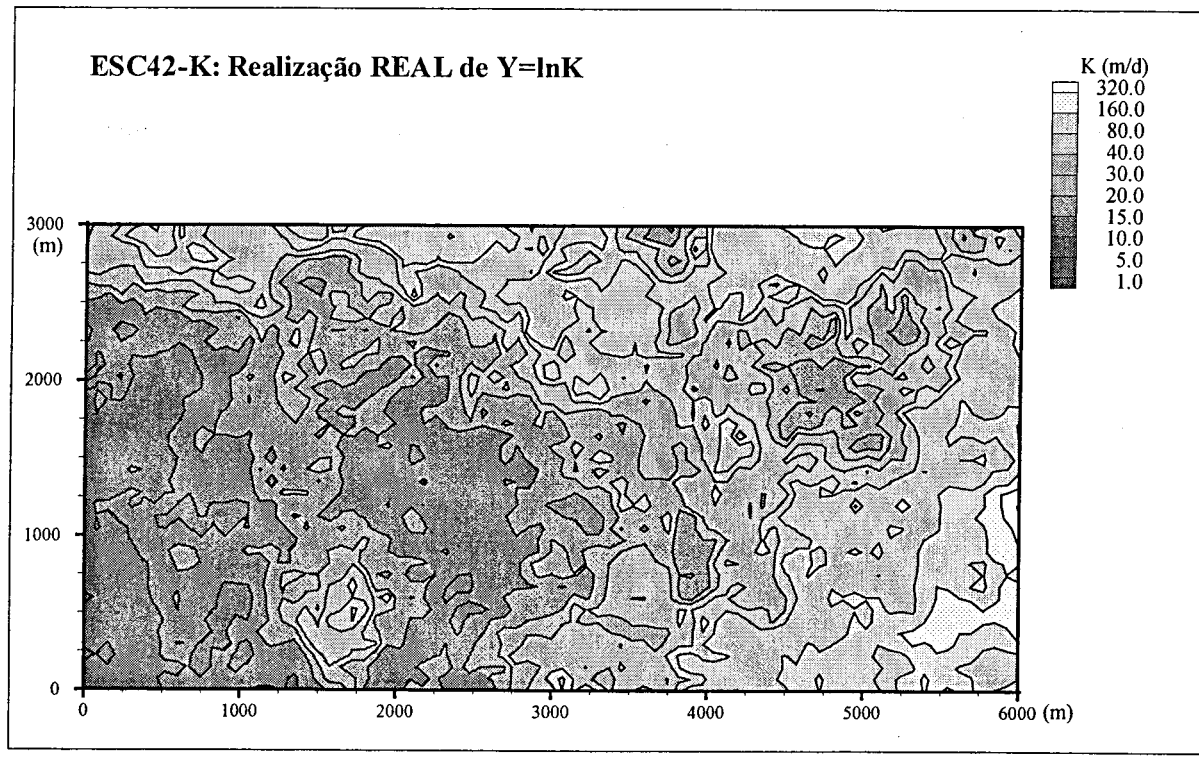



Figura 5.23 – ESC42_K: Distribuição espacial da conductividade hidráulica "real".

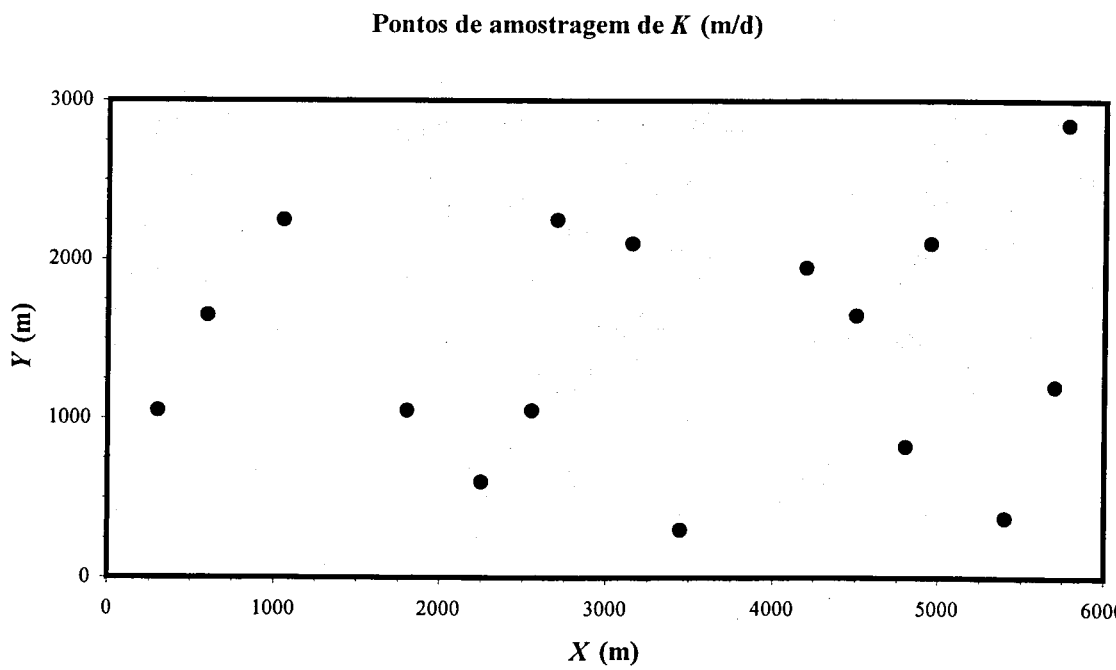



Figura 5.24 – ESC42_K: Localização dos pontos de amostragem da conductividade hidráulica.

estimação a sentimento. Um dos objectivos da modelação inversa estocástica é, precisamente, dar resposta a este tipo de problema.

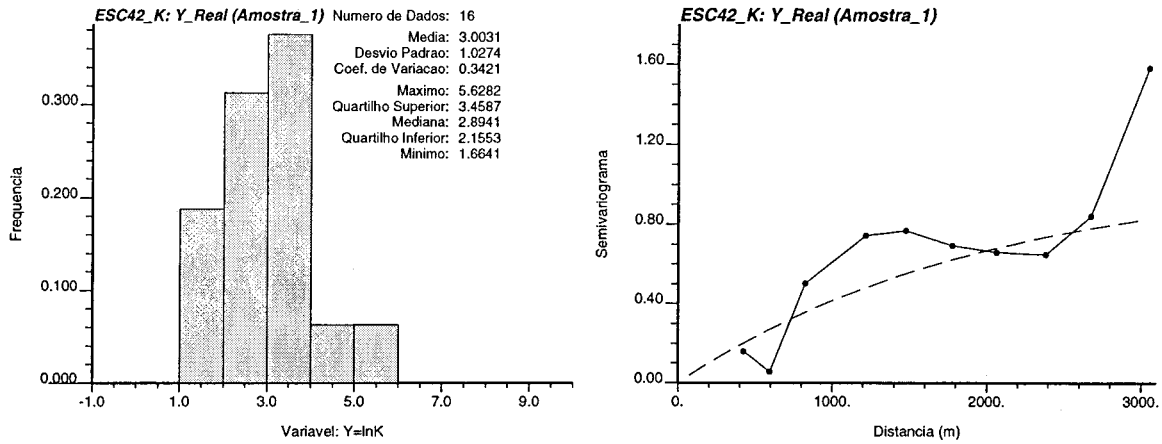



Figura 5.25 – ESC42_K: Histograma e semivariograma experimentais da amostra de $Y$=ln$K$. A tracejado, o semivariograma exponencial teórico adoptado.

| Conjunto de realizações | $m_Y$ | $w_Y$ | $\sigma_Y^2$ | $l_Y$ (m) |
|---|---|---|---|---|
| **ESC42_K** | 3.0031 | 0.0 | 1.056 | 2000 |

Tabela 5.5 – Parâmetros estatísticos da *f.a.* $Y$=ln$K$, estimados a partir da amostra de $K$(m/d) (semivariograma exponencial).

Tal como nos exercícios da secção anterior, o aquífero foi discretizado com uma malha de 800 elementos finitos isoparamétricos de oito nós de 150×150 m$^2$ e as realizações de $K$ foram geradas numa "grelha geoestatística" rectangular de 81×41 pontos com um espaçamento, segundo $x$ e $y$, de 75 metros. O programa de cálculo utilizado, **SGSIM**[31], começa por construir uma *FDP* experimental com os valores da amostra de $K$, a qual permite proceder à transformação de $K$ numa *f.a.* normal padrão ($K \rightarrow X$, $m_X = 1, w_X + \sigma_X^2 = 1$). Uma vez produzidas as realizações condicionadas desta *f.a.*, é efectuada a transformação inversa ($X \rightarrow K$), novamente com o auxílio da *FDP* experimental. Nas páginas seguintes são apresentadas, à semelhança da secção anterior, as imagens de algumas realizações condicionadas de $Y = \ln K$ e os respectivos histogramas e semivariogramas experimentais. São também apresentados o campo piezométrico "real", o calculado com $K_{ef}$, o estimado pelo *msM-C* condicionadas e, ainda, a variância deste último.

[31] Deutsch e Journel (1992).

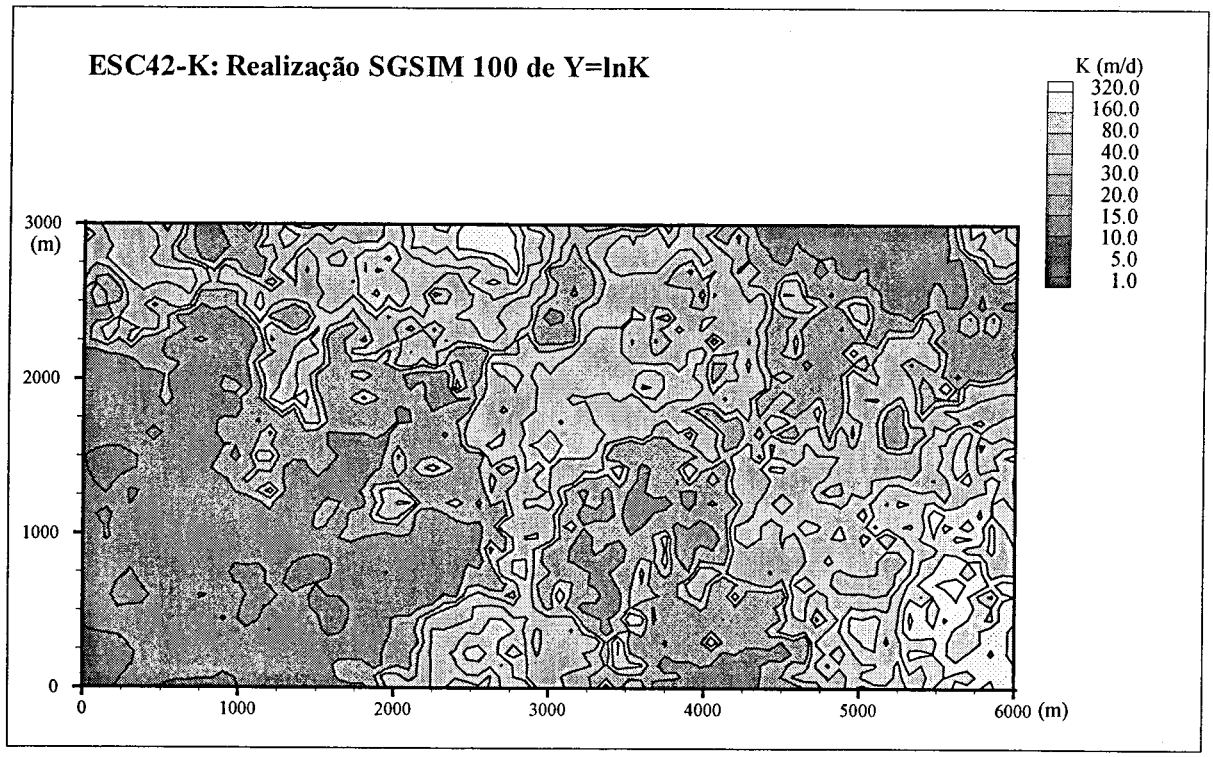



Figura 5.26 – ESC42_K: Realização condicionada nº 100 de $Y$=ln$K$.

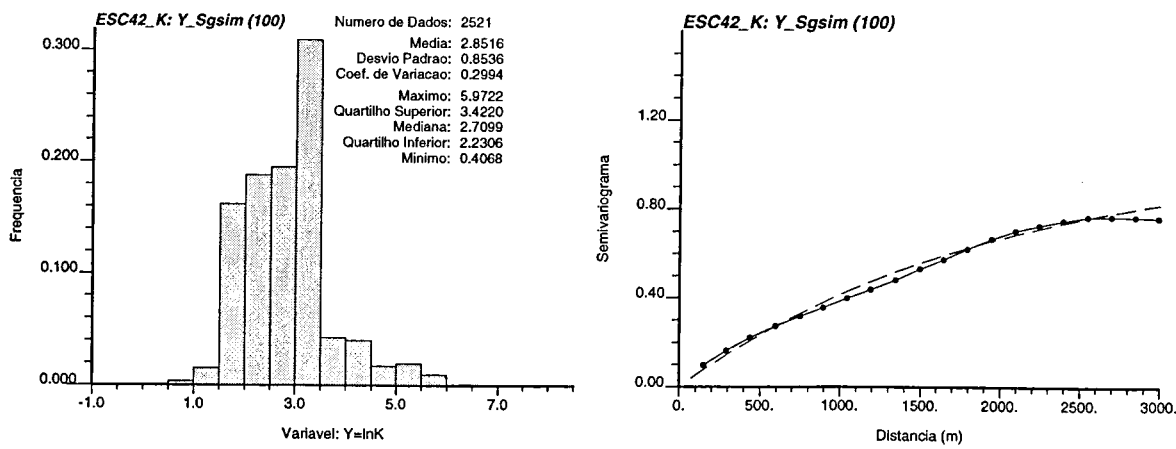



Figura 5.27 – ESC42_K: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 100 de $Y$=ln$K$. A tracejado, o semivariograma exponencial teórico adoptado.

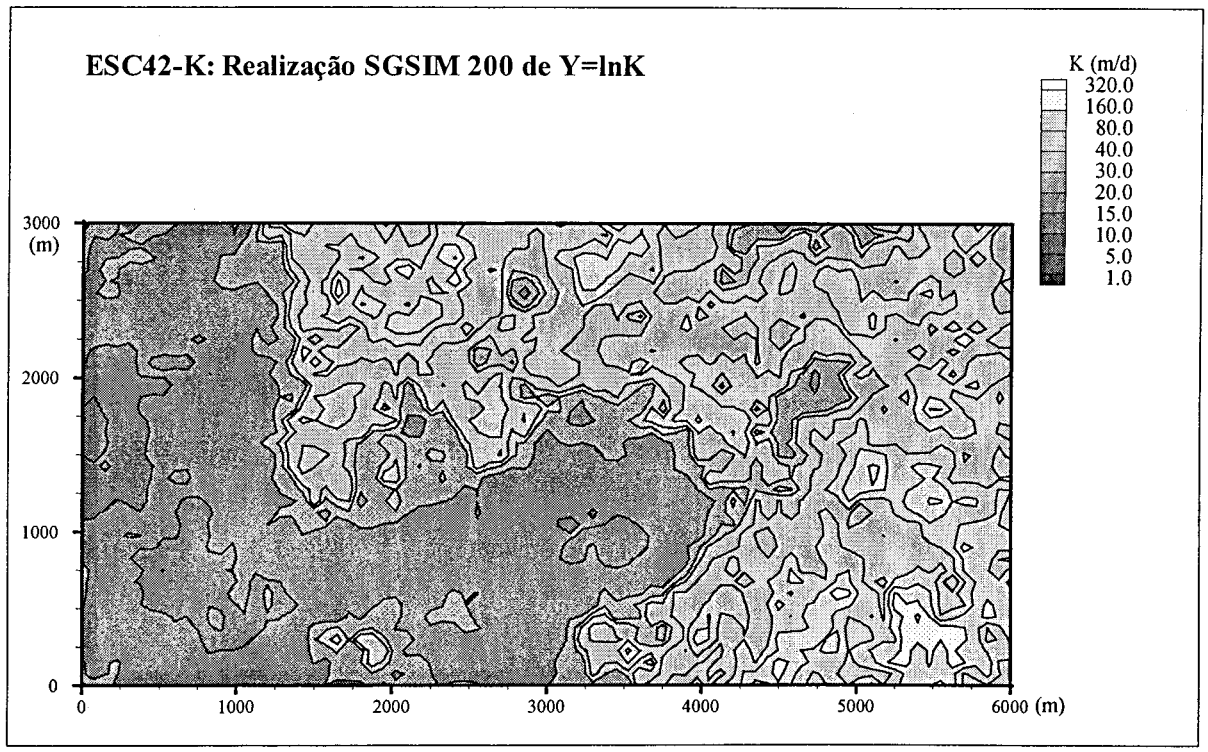



Figura 5.28 – ESC42_K: Realização condicionada nº 200 de $Y$=ln$K$.

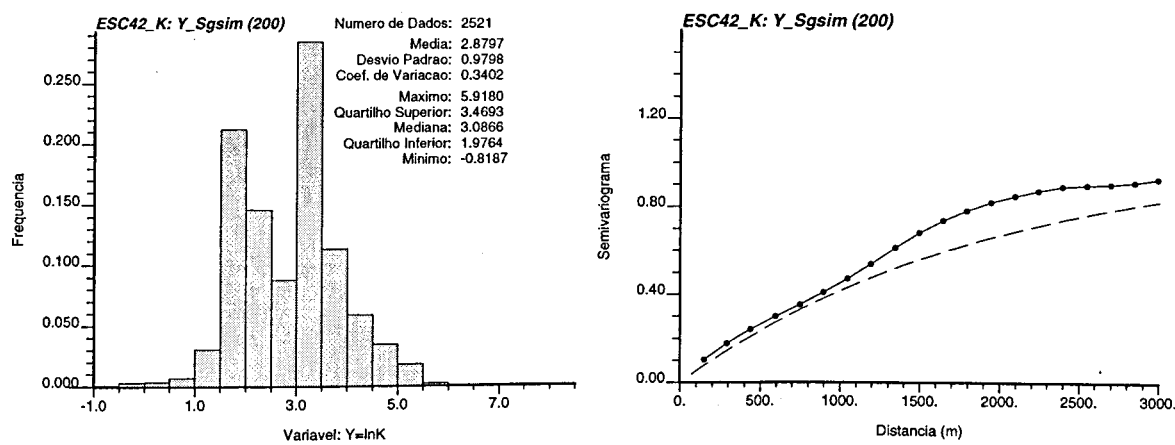



Figura 5.29 – ESC42_K: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 200 de $Y$=ln$K$. A tracejado, o semivariograma exponencial teórico adoptado.

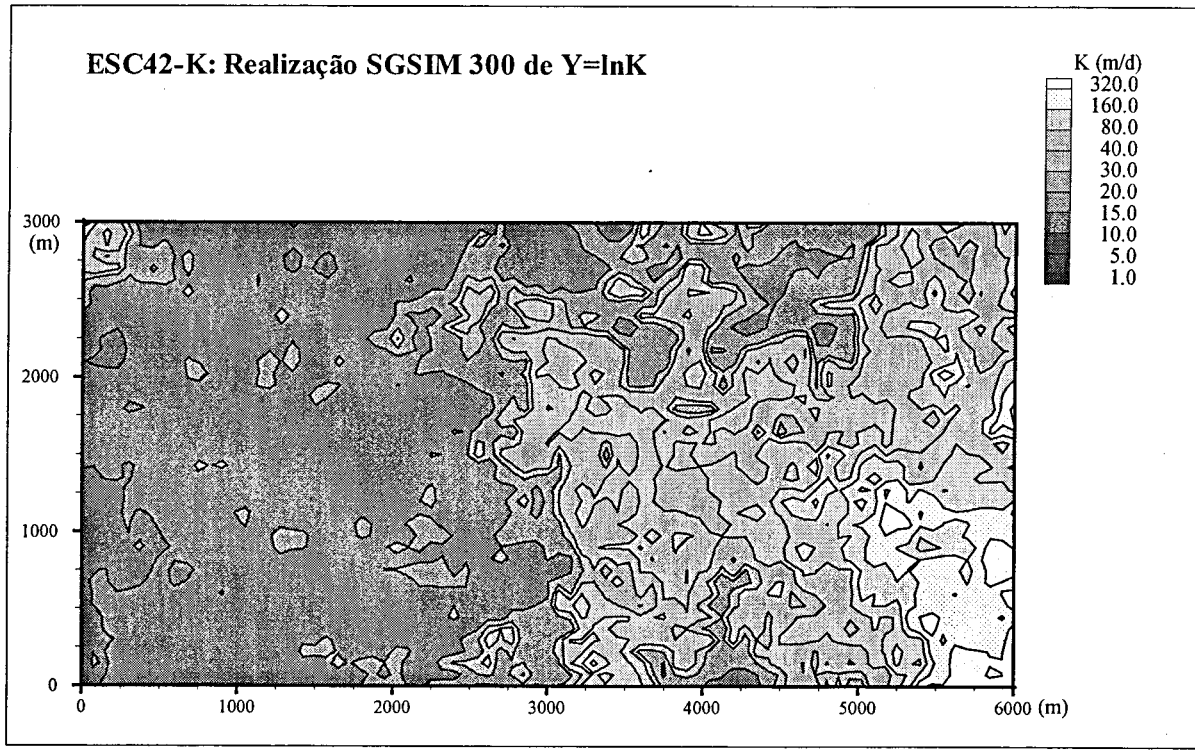



Figura 5.30 – ESC42_K: Realização condicionada nº 300 de $Y$=ln$K$.

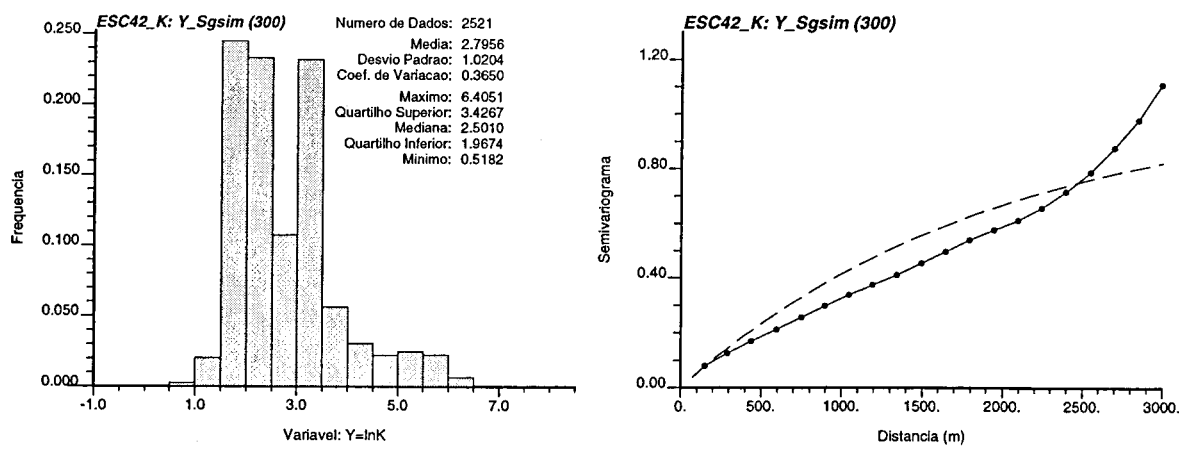



Figura 5.31 – ESC42_K: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 300 de $Y$=ln$K$. A tracejado, o semivariograma exponencial teórico adoptado.

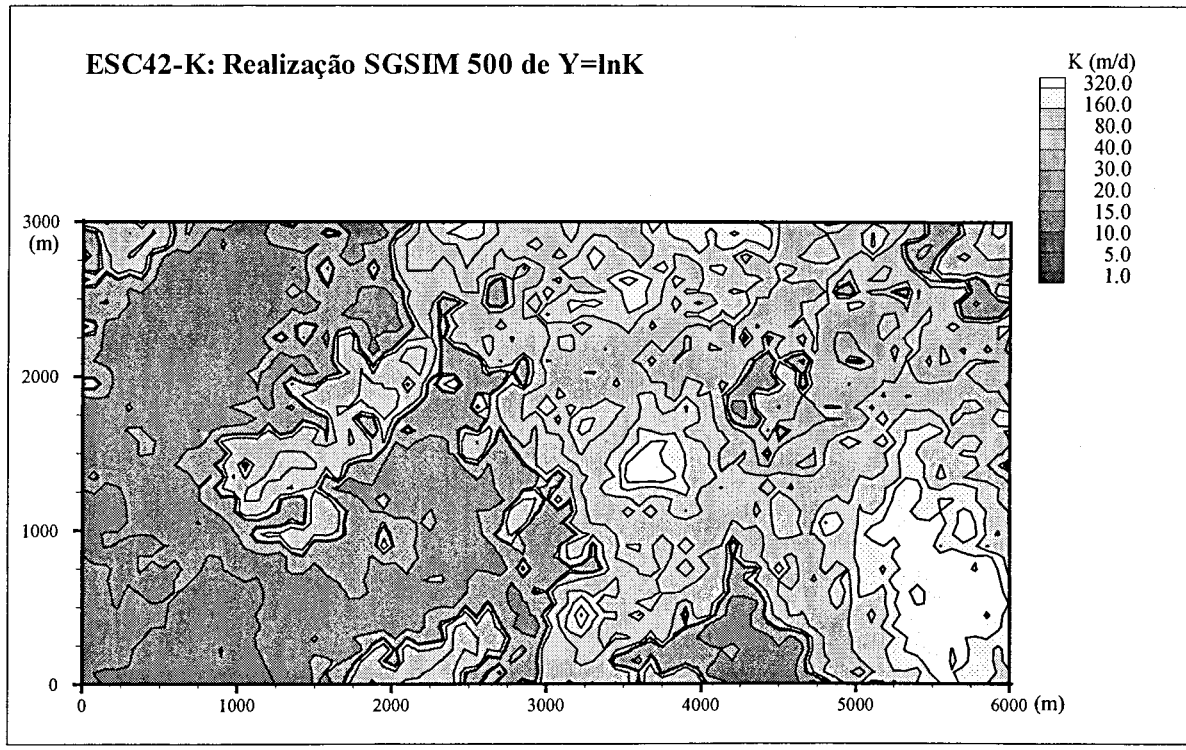



Figura 5.32 – ESC42_K: Realização condicionada nº 500 de $Y$=ln$K$.

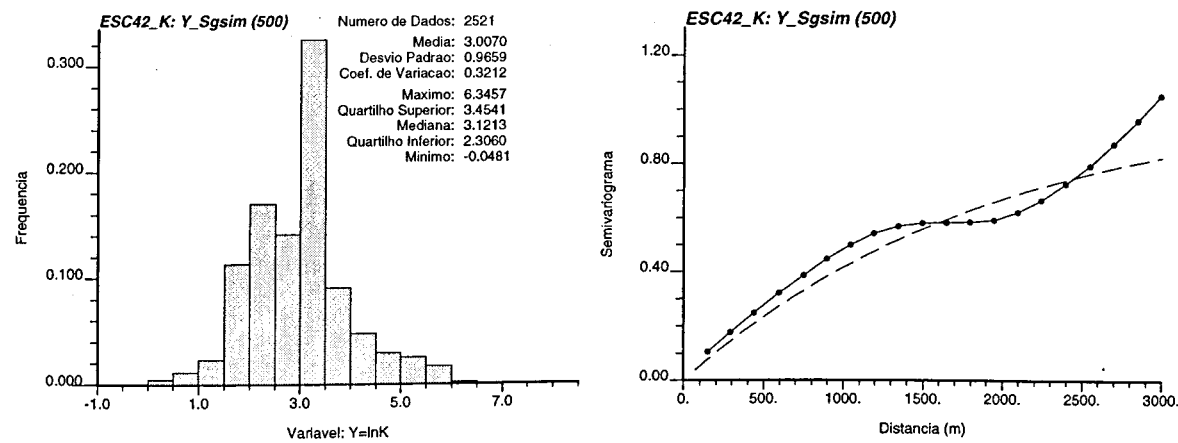



Figura 5.33 – ESC42_K: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 500 de $Y$=ln$K$. A tracejado, o semivariograma exponencial teórico adoptado.

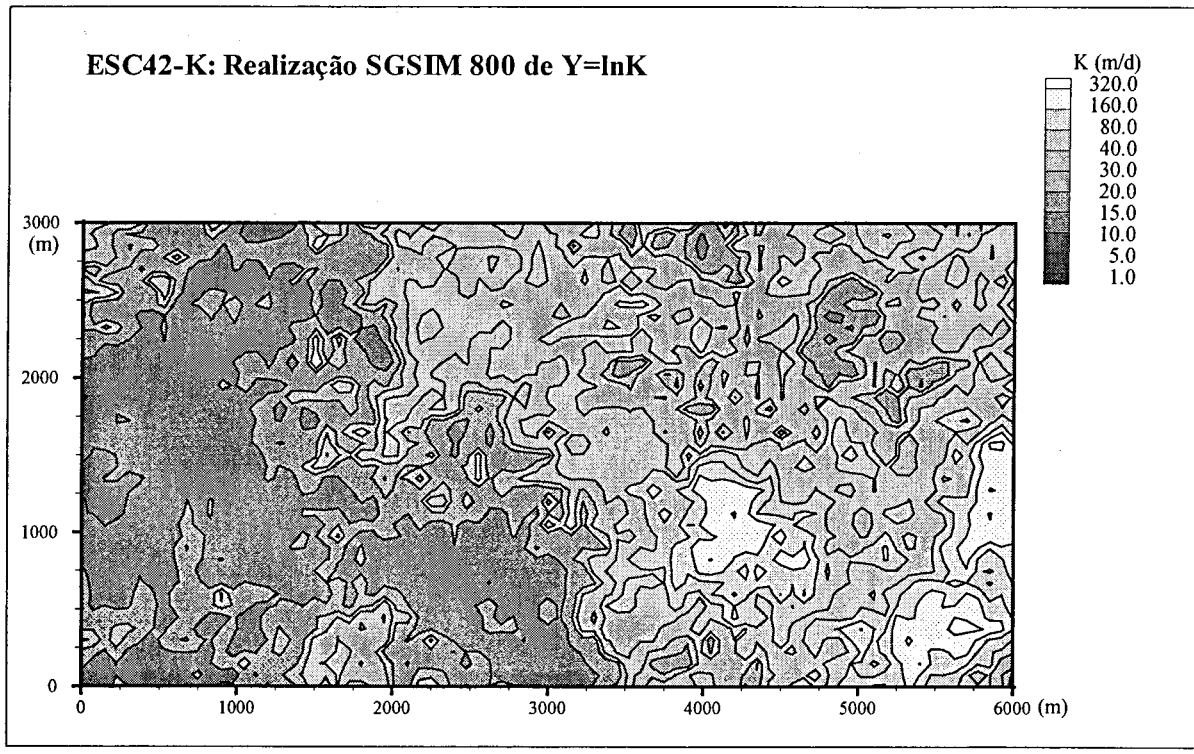



Figura 5.34 – ESC42_K: Realização condicionada nº 800 de $Y$=ln$K$.

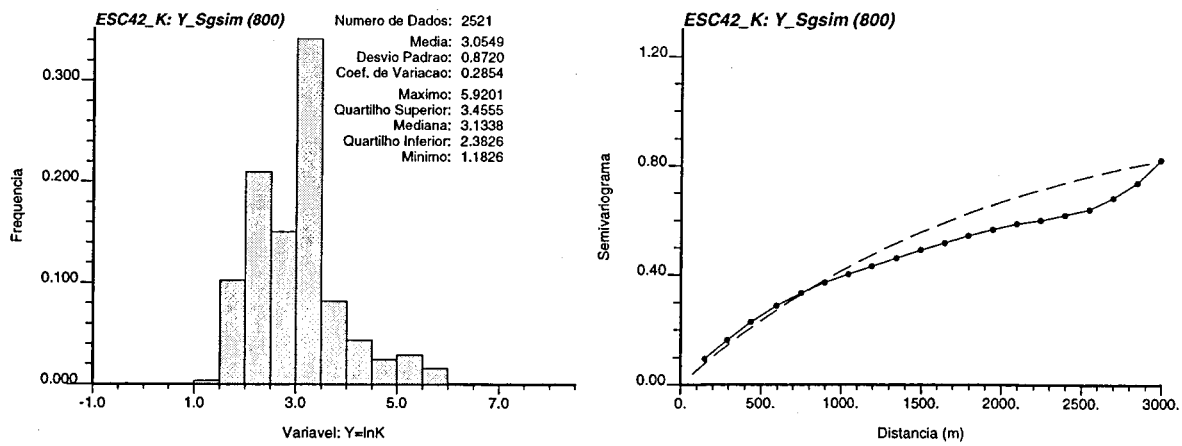



Figura 5.35 – ESC42_K: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 800 de $Y$=ln$K$. A tracejado, o semivariograma exponencial teórico adoptado.

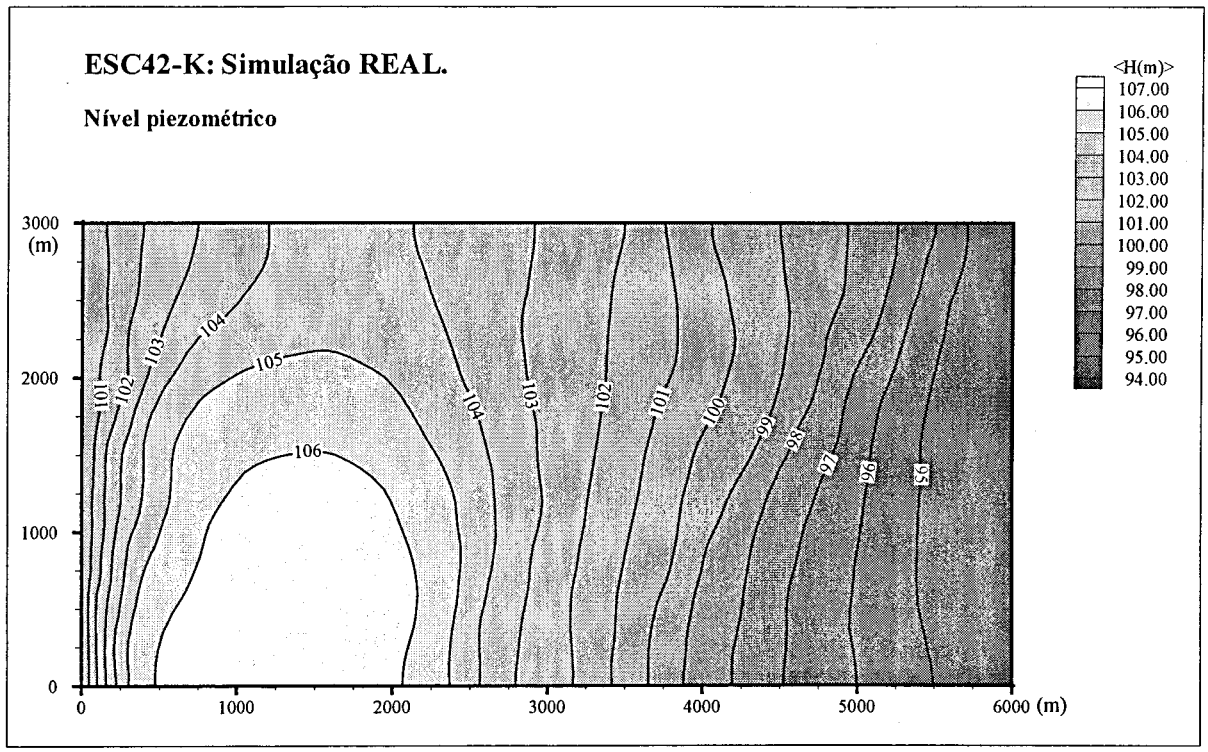



Figura 5.36 – ESC42_K: Nível piezométrico calculado para a distribuição "real" da conductividade hidráulica.

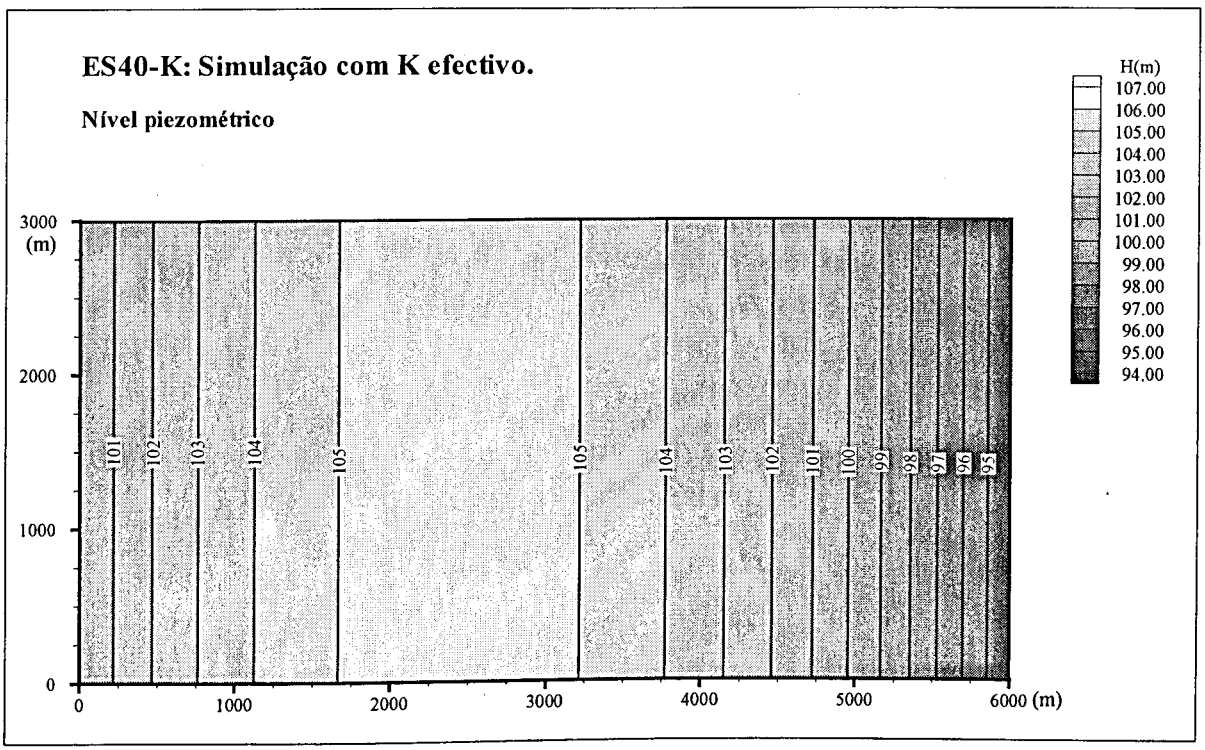



Figura 5.37 – ESC42_K: Níveis piezométricos calculados para a conductividade hidráulica efectiva (exercício ES40_K).

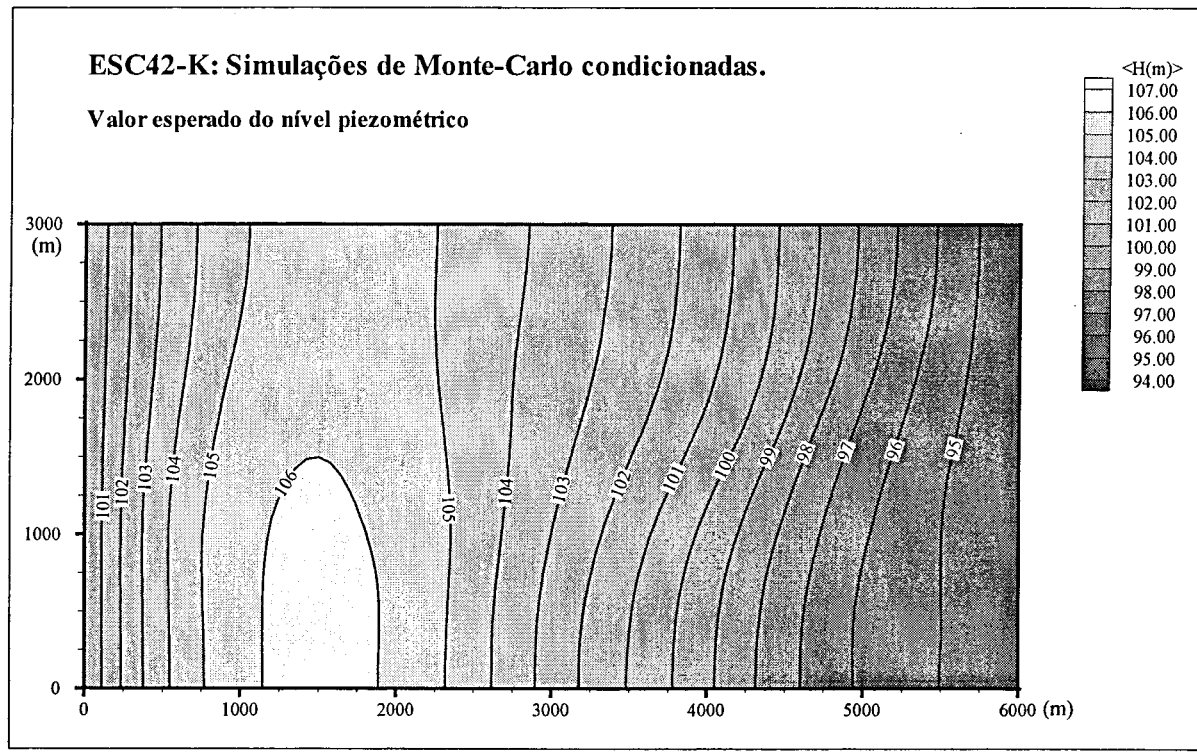



Figura 5.38 – Nível piezométrico esperado, calculado pelo método das simulações de Monte-Carlo condicionadas.

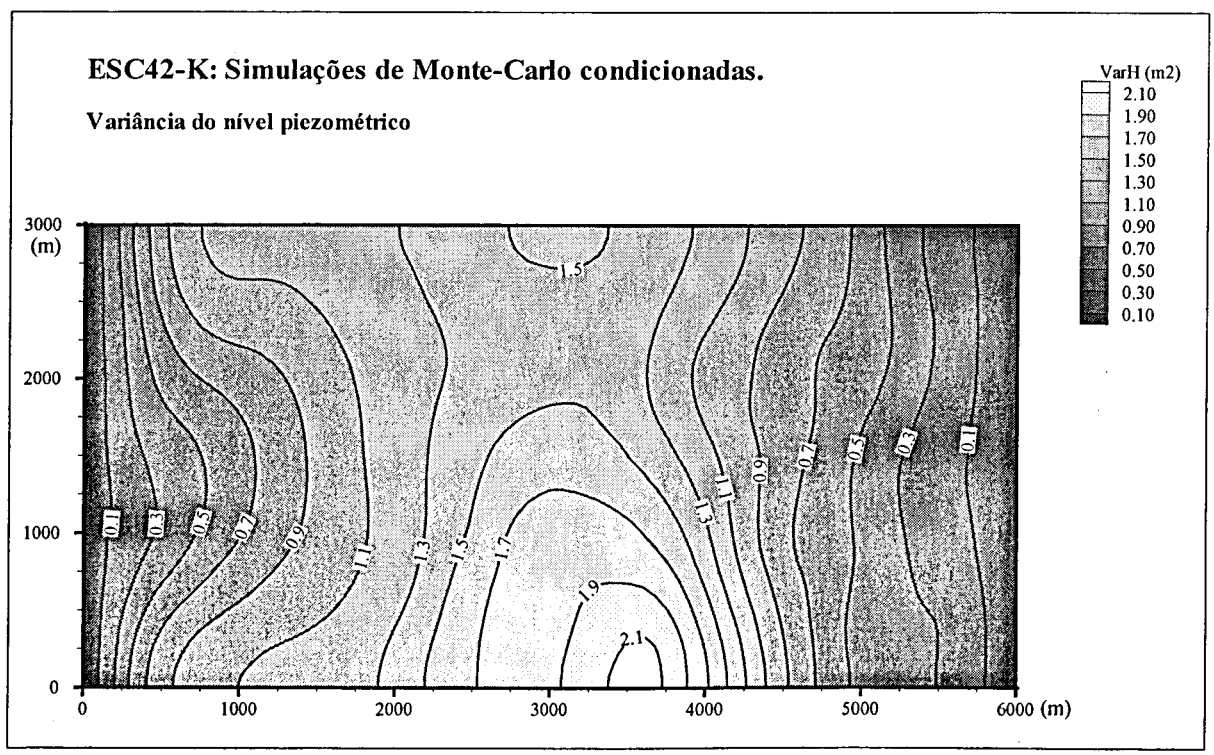



Figura 5.39 – ESC42_K: Variância do nível piezométrico, calculada pelo método das simulações de Monte-Carlo condicionadas.

A resolução do problema aqui proposto, mas com uma conductividade hidráulica constante e igual à efectiva, corresponde ao exercício ES40_K. Para o efeito tomou-se para $K_{ef}$ o valor da média geométrica da amostra, isto é, o exponencial da média das transformadas logarítmicas dos valores da amostra, $K_G = \exp(3.0031) \approx 20.15$ m/d. A correspondente piezometria é exibida na Figura 5.37.

| | $K_{real}$ | $K_{smM\text{-}C}$ | desvio (%) | $K_{ef}$ | desvio (%) |
|---|---|---|---|---|---|
| $\langle Q \rangle_{\Gamma_1}$ (m$^3$/d) | + 8 831 | + 9 146 | + 3.6 | + 14 640 | + 65.8 |
| $\langle Q \rangle_{\Gamma_3}$ (m$^3$/d) | + 27 169 | + 26 854 | − 1.2 | + 21 360 | − 21.5 |

Tabela 5.6 – ESC42_K e ES40_K: Caudais totais nas fronteiras $\Gamma_1$ e $\Gamma_3$. Desvio relativamente à simulação efectuada com a conductividade "real", $K_{real}$.

| | ESC42_K |
|---|---|
| $\Gamma_1$ : $\sigma_Q$ (m$^3$/d) | 831 |
| $\Gamma_3$ : $\sigma_Q$ (m$^3$/d) | 831 |

Tabela 5.7 – ESC42_K: Desvio padrão dos caudais totais nas fronteiras $\Gamma_1$ e $\Gamma_3$.

A Tabela 5.6 permite realizar uma análise comparativa dos caudais totais que atravessam as fronteiras permeáveis, $\Gamma_1$ e $\Gamma_3$, nomeadamente os desvios relativamente aos valores "correctos" correspondentes à conductividade hidráulica "real". Na Tabela 5.7 é registado o desvio padrão dos caudais totais estimados pelo *msM-C* condicionadas.

Embora esta secção se destine à apresentação das simulações de Monte-Carlo condicionadas, é oportuna uma análise da piezometria e dos caudais totais nas fronteiras permeáveis da simulação "real" e da simulação com $K_{ef}$ porque, deste modo, é possível comparar, indirectamente, o grau de aproximação aos resultados "reais" das simulações de Monte-Carlo condicionadas e das não condicionadas, visto que este último método apresenta resultados idênticos aos obtidos com $K_{ef}$. De facto, os resultados da simulação com a conductividade hidráulica efectiva são idênticos aos que seriam obtidos com o *msM-C* não condicionadas[32] aplicado a realizações de $K$ geradas com base na informação probabilística da amostra de "dados de campo".

[32] Pacheco Figueiredo (1997).

Na aplicação do *msM-C* condicionadas observa-se que, do ponto de vista qualitativo, a piezometria estimada apresenta uma distribuição espacial semelhante à do campo piezométrico "real", facto que resulta, certamente, de as realizações condicionadas de *K* identificarem, e incorporarem na simulação, as zonas de maior e menor conductividade do aquífero. Essa identificação será tanto mais apurada quanto maior for a amostra de *K* ou de outra variável com a qual for possível estabelecer uma correlação. Por outro lado, as simulações não condicionadas, aqui representados pelos resultados do exercício ES40_K, apresentam desvios muito significativos relativamente à simulação "real". Tendo presentes estas considerações, conclui-se facilmente pela indiscutível vantagem das simulações de Monte-Carlo condicionadas na estimação da piezometria e dos caudais totais que atravessam as fronteiras permeáveis, sendo de recomendar a utilização desta metodologia quando forem conhecidos dados de campo da conductividade hidráulica, ou da transmissividade.

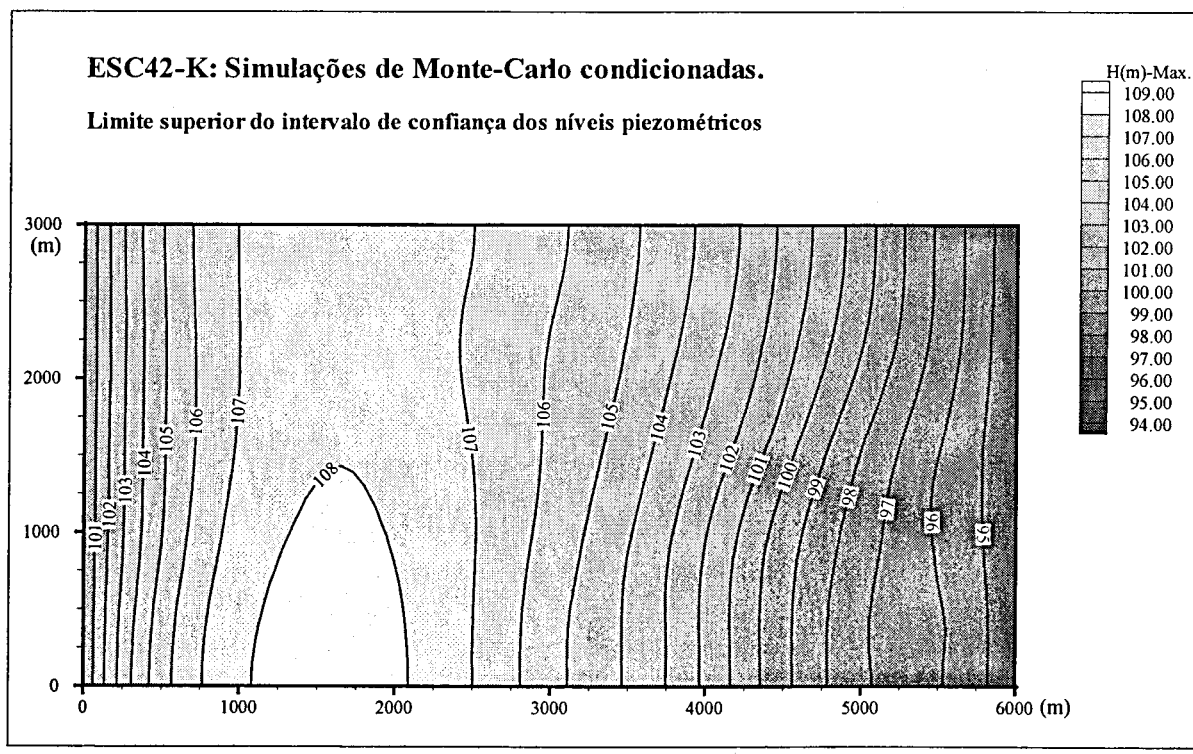



Figura 5.40 – ESC42_K: Limite superior do intervalo de confiança dos níveis piezométricos estimados pelo *msM-C* condicionadas.

A "imagem" da variância (Figura 5.39) permite identificar as zonas de maior incerteza na estimação de *H*. Admitindo que esta variável também pode ser representada por uma *f.a.* multivariada normal, é possível definir o intervalo de confiança de 95% dos resultados da

simulação estocástica directa $[\langle H\rangle - 2\sigma_H, \langle H\rangle + 2\sigma_H]$. A Figura 5.40 e a Figura 5.41 reproduzem, respectivamente, os limites superior e inferior deste intervalo de confiança.

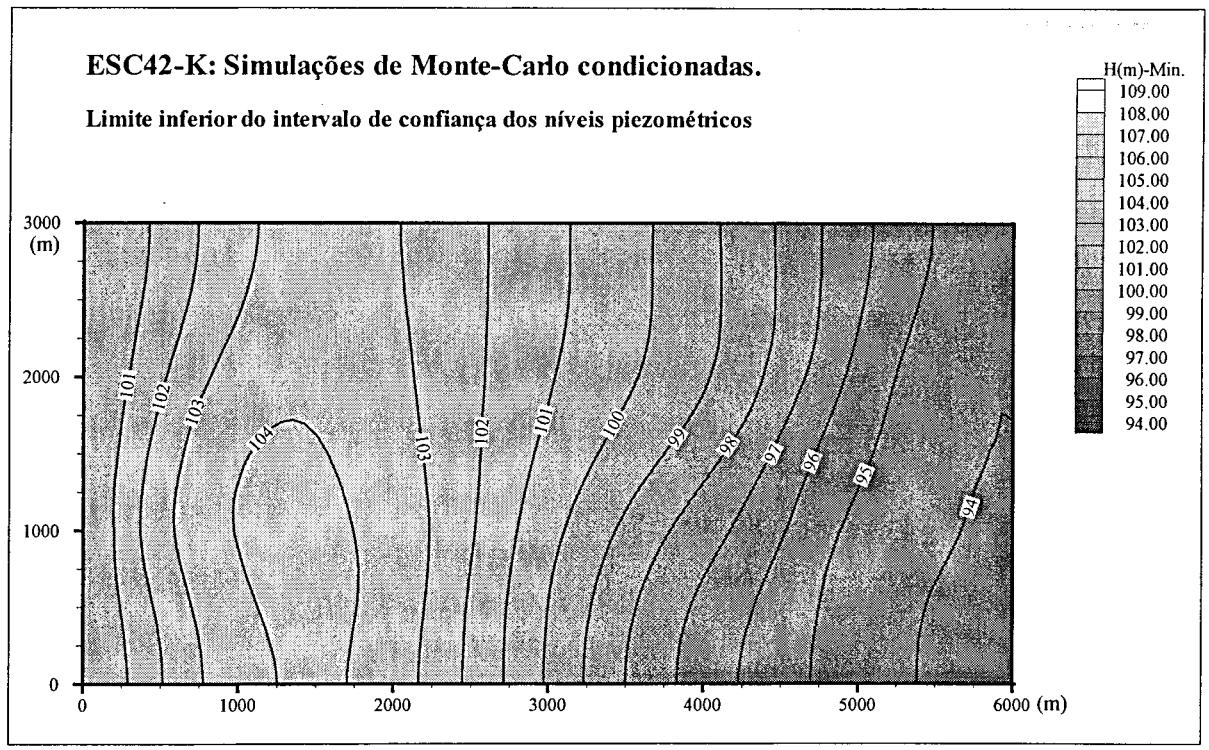



Figura 5.41 – ESC42_K: Limite inferior do intervalo de confiança dos níveis piezométricos estimados pelo *msM-C* condicionadas.

Finalmente, uma explicação para o facto de ter sido utilizado um número de realizações (1000) superior ao das simulações não condicionadas: o programa de geração sequencial gaussiana, **SGSIM**[33], das realizações condicionadas é incomparavelmente mais rápido do que o utilizado na geração das não condicionadas, **SASIM**[34], baseado no algoritmo de recozimento simulado. De facto, se a produção de 300 realizações não condicionadas consumiu cerca de duas semanas de operação ininterrupta de uma máquina UNIX relativamente moderna, as 1000 realizações condicionadas foram geradas pelo mesmo computador em menos de uma hora!

[33] Deutsch e Journel (1992).
[34] Deutsch e Journel (1992).

## 5.5 Método das perturbações

### 5.5.1 Considerações iniciais

O método das perturbações baseia-se no princípio de que uma *f.a.* pode ser interpretada como a soma duma componente estruturada e contínua com uma outra componente errática ou aleatória. A primeira é o *valor esperado* ou média da *f.a.* e a segunda é a flutuação ou *perturbação* em torno da primeira. Esta perturbação é, por sua vez, uma nova *f.a.*, estacionária[35], com valor esperado nulo em qualquer ponto do domínio e em qualquer instante. Exemplificando com a variável de estado das equações diferenciais que regem o escoamento em aquíferos, a carga hidráulica ou nível piezométrico

$$H(\vec{\mathbf{x}},t) = \langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle + h(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{com} \quad \langle h(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle = 0\,,\ \forall x \in \Omega \ \text{ e } \ \forall t \tag{5.91}$$

O valor esperado, $\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle$, pode ser condicionado, ou não, à informação conhecida, tal como a estrutura de correlação espacial da perturbação, $h(\vec{\mathbf{x}},t)$, definida pela respectiva covariância. Saliente-se ainda que a estrutura de correlação espacial de $H(\vec{\mathbf{x}},t)$ é coincidente com a da respectiva perturbação, tal como se deduz imediatamente da definição da covariância de $H(\vec{\mathbf{x}},t)$

$$\begin{aligned} C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_i,t_k;\vec{\mathbf{x}}_j,t_l) &= E\left[\left(H(\vec{\mathbf{x}}_i,t_k) - \langle H(\vec{\mathbf{x}}_i,t_k)\rangle\right)\left(H(\vec{\mathbf{x}}_j,t_l) - \langle H(\vec{\mathbf{x}}_j,t_l)\rangle\right)\right] = \\ &= E\left[h(\vec{\mathbf{x}}_i,t_k)\,h(\vec{\mathbf{x}}_j,t_l)\right] = \\ &= C_{hh}(\vec{\mathbf{x}}_i,t_k;\vec{\mathbf{x}}_j,t_l) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j \in \Omega \ \text{ e } \ \forall t_k,t_l \end{aligned} \tag{5.92}$$

O princípio exposto é igualmente válido para os parâmetros hidrogeológicos, ou para as respectivas transformadas logarítmicas. Assim, para $Y(\vec{\mathbf{x}}) = \ln K(\vec{\mathbf{x}})$ ou $Y(\vec{\mathbf{x}}) = \ln T(\vec{\mathbf{x}})$ também se escreve

---

[35] Estacionaridade de segunda ordem, tal como se definiu na secção 4.3.2 do capítulo anterior.

$$Y(\vec{\mathbf{x}}) = \langle Y(\vec{\mathbf{x}}) \rangle + f(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{com} \quad \langle f(\vec{\mathbf{x}}) \rangle = 0\,, \ \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{5.93}$$

e o mesmo para $G(\vec{\mathbf{x}}) = \ln \omega_d(\vec{\mathbf{x}})$ ou $G(\vec{\mathbf{x}}) = \ln S(\vec{\mathbf{x}})$

$$G(\vec{\mathbf{x}}) = \langle G(\vec{\mathbf{x}}) \rangle + g(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{com} \quad \langle g(\vec{\mathbf{x}}) \rangle = 0\,, \ \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{5.94}$$

Tal como anteriormente se exemplificou[36], a introdução das definições (5.91), (5.93) e (5.94) nas *f.a.*'s presentes na equação diferencial que rege o escoamento de um determinado tipo de aquífero dá lugar a um par de equações diferenciais que relacionam, respectivamente, os valores esperados e as perturbações. Nas secções seguintes são deduzidas e integradas numericamente, pelo método dos elementos finitos (MEF), as equações para aquíferos regionais porosos confinados e não confinados, sujeitos a condições iniciais e de fronteira determinísticas.

A dedução destas duas novas equações diferenciais implica a introdução de algumas simplificações, à semelhança do que se fez na secção 5.3.1. Estas simplificações, ou aproximações, são geradoras de um determinado erro na relação entre os valores esperados das diversas variáveis em jogo. O estudo desta problemática tem conhecido, recentemente, significativos avanços teóricos, aos quais está ligado um dos mais notáveis e produtivos cientistas e investigadores na área da modelação do escoamento e transporte em águas subterrâneas, Shlomo P. Neuman, Professor do Departamento de Hidrologia e Recursos Hídricos da Universidade do Arizona, Tucson, USA. Estes avanços teóricos demonstram, em particular, a não validade da relação local de Darcy entre os valores esperados da velocidade de percolação e do gradiente hidráulico e procuram estabelecer uma relação correcta entre estas duas grandezas que conduza à dedução de equações diferencias apropriadas para a simulação do comportamento dos valores esperados das variáveis em jogo e, ainda, para a avaliação da respectiva incerteza. Assim, antes de passar às secções deste sub-capítulo dedicadas à dedução e integração numérica das equações do método das perturbações aplicadas aos escoamentos em aquíferos regionais porosos confinados e não confinados, afigura-se apropriado fazer aqui uma breve referência a estes avanços teóricos, tomando como

---

[36] Secção 5.3.1 deste capítulo.

base os contributos de Neuman e Orr (1993), Neuman et al. (1996), Tartakovsky e Neuman (1998a,b).

Considere-se a lei de Darcy, escrita para um meio heterogéneo isotrópico

$$\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t) = -K(\vec{\mathbf{x}})\vec{\nabla}H(\vec{\mathbf{x}},t) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \, , \; \forall \mathrm{t} \tag{5.95}$$

com a velocidade de percolação, conductividade hidráulica e gradiente hidráulico definidos para um volume de controlo centrado em $\vec{\mathbf{x}}$, pequeno relativamente ao domínio, mas suficientemente grande para (5.95) ser válida em termos locais. O nível piezométrico, $H(\vec{\mathbf{x}},t)$, e a velocidade de percolação, $\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)$, devem satisfazer, localmente, a equação de continuidade

$$\vec{\nabla} \mid \vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t) + S_S(\vec{\mathbf{x}})\frac{\partial H(\vec{\mathbf{x}},t)}{\partial t} + q(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \, , \; \forall t \tag{5.96}$$

sujeita às condições iniciais e de fronteira

$$H(\vec{\mathbf{x}},t) = H_0(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{para} \quad t = 0 \, , \; \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{5.97}$$

$$H(\vec{\mathbf{x}},t) = H_d(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}} \, , \; \forall t \tag{5.98}$$

$$\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t) \mid \vec{\mathbf{n}}(\vec{\mathbf{x}}) = U_n(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Neumann}} \, , \; \forall t \tag{5.99}$$

Em (5.96), $S_S(\vec{\mathbf{x}})$ representa o coeficiente de armazenamento específico e $q(\vec{\mathbf{x}},t)$ a recarga ou extracção (difusa ou pontual). Nos artigos de Tartakovsky e Neuman (1998a,b), as condições fronteira e a recarga ou extracção são definidas por *f.a.*'s não correlacionadas, mas o coeficiente de armazenamento é considerado determinístico uma vez que estes autores admitem que apresenta uma variabilidade espacial muito inferior à conductividade hidráulica, $K(\vec{\mathbf{x}})$. Por sua vez, esta *f.a.* é decomposta da forma habitual

$$K(\vec{\mathbf{x}}) = \langle K(\vec{\mathbf{x}}) \rangle^{cd} + K'(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{com} \quad \langle K'(\vec{\mathbf{x}}) \rangle^{cd} = 0 \, , \; \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{5.100}$$

sendo $\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$ o valor esperado[37] de $K(\vec{\mathbf{x}})$ condicionado a um conjunto discreto de valores conhecidos. Estes autores partem do princípio que $\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$ e a covariância condicionada $C_{KK}^{cd}(\vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j)$ já são conhecidas[38]. As *f.a.*'s $H(\vec{\mathbf{x}},t)$ e $\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)$ são também representadas pela soma do valor esperado condicionado e das perturbações em torno deste

$$H(\vec{\mathbf{x}},t)=\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}+h(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{com} \quad \langle h(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}=0\,,\ \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega \ \text{ e } \ \forall t \tag{5.101}$$

$$\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)=\langle\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}+\vec{\mathbf{U}}'(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{com} \quad \langle\vec{\mathbf{U}}'(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}=\vec{\mathbf{0}}\,,\ \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega \ \text{ e } \ \forall t \tag{5.102}$$

Nas expressões (5.101) e (5.102) o índice *cd* significa que os valores esperados de $H(\vec{\mathbf{x}},t)$ e $\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)$ são condicionados aos mesmos dados que foram utilizados para obter $\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$. Operando a esperança matemática condicionada à equação diferencial (5.96) e às condições iniciais e de fronteira associadas (5.97), (5.98) e (5.99), estas ficam

$$\vec{\nabla}\,|\,\langle\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}+S_S(\vec{\mathbf{x}})\frac{\partial\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}}{\partial t}+\langle q(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle=0 \quad ,\quad \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega\,,\ \forall t \tag{5.103}$$

$$\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}=\langle H_0(\vec{\mathbf{x}})\rangle \quad \text{para} \quad t=0\,,\ \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega \tag{5.104}$$

$$\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}=\langle H_d(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Dirichlet}}\,,\ \forall t \tag{5.105}$$

$$\langle\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}\,|\,\vec{\mathbf{n}}(\vec{\mathbf{x}})=\langle U_n(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Neumann}}\,,\ \forall t \tag{5.106}$$

onde $\langle q(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle$, $\langle H_0(\vec{\mathbf{x}})\rangle$, $\langle H_d(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle$ e $\langle U_n(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle$ são os valores esperados não condicionados, previamente definidos, da recarga ou extracção e das condições iniciais e de fronteira.

---

[37] Valor esperado no sentido probabilístico, isto é, a média dos valores que as infinitas realizações da *f.a.* tomam em cada ponto.

[38] A quantificação destes momentos estatísticos condicionados pode ser previamente efectuada com base na inferência estatística apoiada nos dados de campo. O valor esperado de $K$ é obtido por krigagem e a covariância condicionada é dada pela covariância dos erros de estimação da krigagem, caso $K$ seja representada por uma *f.a.* multivariada normal.

Introduzindo em (5.95) as *f.a.*'s definidas por (5.100), (5.101) e (5.102)

$$\langle \vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} + \vec{\mathbf{U}}'(\vec{\mathbf{x}},t) = -\left(\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd} + K'(\vec{\mathbf{x}})\right)\vec{\nabla}\left[\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} + h(\vec{\mathbf{x}},t)\right] =$$

$$= -\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}\,\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} - \langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}\,\vec{\nabla}h(\vec{\mathbf{x}},t) - \tag{5.107}$$

$$- K'(\vec{\mathbf{x}})\,\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} - K'(\vec{\mathbf{x}})\,\vec{\nabla}h(\vec{\mathbf{x}},t)\ ,\ \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega\ ,\ \forall \mathrm{t}$$

e tomando a esperança matemática condicionada desta igualdade obtém-se

$$\langle \vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} = -\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}\,\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} - \langle K'(\vec{\mathbf{x}})\,\vec{\nabla}h(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}\ ,\ \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega\ ,\ \forall \mathrm{t} \tag{5.108}$$

É esta expressão que retira validade à versão local da relação de Darcy entre os valores esperados da velocidade de percolação e do gradiente hidráulico. O valor correcto de $\langle \vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}$ resulta da soma do vector correspondente à lei de Darcy $-\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}\,\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}$ com o valor esperado do produto da perturbação de $K(\vec{\mathbf{x}})$ com o gradiente da perturbação de $H(\vec{\mathbf{x}},t)$. A esta segunda parcela é dada a designação de *velocidade* de percolação *residual*[39]

$$\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) = -\langle K'(\vec{\mathbf{x}})\,\vec{\nabla}h(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} \tag{5.109}$$

Habitualmente, na dedução das equações do método das perturbações esta parcela residual não é considerada, uma vez que se admite desprezável o produto de perturbações ou de derivadas de perturbações. Contudo, este procedimento nem sempre é totalmente correcto. Neuman e Orr (1993) e Paleologos et al. (1996) demonstraram que esta velocidade ou fluxo residual pode, por vezes, dar uma contribuição significativa para a definição da conductividade hidráulica efectiva.

Face ao exposto duas questões se colocam: qual o peso relativo desta parcela na formação da velocidade esperada e, caso não seja desprezável, como quantificá-la? A primeira questão é, naturalmente, motivada pela dúvida instalada quanto à validade das

---

[39] Ou *fluxo residual*, segundo os autores já referidos a propósito deste assunto.

equações do método das perturbações deduzidas com base na eliminação dos produtos de perturbações ou de derivadas de perturbações. À segunda procuram responder, com os seus recentes trabalhos, alguns dos autores citados. Tartakovsky e Neuman (1998a) apresentam a seguinte expressão explícita para esta velocidade de percolação residual

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) = &\int_0^t \int_\Omega \mathbf{a}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\cdot\vec{\nabla}_y H^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\tau)\, d\Omega_y\, d\tau + \\ &+ \int_0^t \int_{\Gamma_N} \mathbf{b}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\,\langle U_n(\vec{\mathbf{y}},\tau)\rangle\, d\Gamma_y\, d\tau + \\ &+ \int_\Omega \int_{\Gamma_N} \int_0^t \int_0^\tau \mathbf{c}^{cd}(\vec{\mathbf{z}},\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau,\tau-\varepsilon)\,\langle U_n(\vec{\mathbf{z}},\varepsilon)\rangle\, d\varepsilon\, d\tau\, d\Gamma_z\, d\Omega_y\end{aligned} \tag{5.110}$$

onde a matriz $\mathbf{a}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)$ e os vectores $\mathbf{b}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)$ e $\mathbf{c}^{cd}(\vec{\mathbf{z}},\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau,\tau-\varepsilon)$ são determinadas pelas seguintes expressões

$$\mathbf{a}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau) = \langle K'(\vec{\mathbf{y}})\, K'(\vec{\mathbf{x}})\,\vec{\nabla}_x\cdot\vec{\nabla}_y^T G(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\rangle^{cd} \tag{5.111}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{b}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau) = &-\langle K'(\vec{\mathbf{x}})\left[K(\vec{\mathbf{y}})\right]^{-1}\rangle^{cd}\,\langle K(\vec{\mathbf{y}})\rangle^{cd}\,\vec{\nabla}_x G^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau) - \\ &-\langle K'(\vec{\mathbf{x}})\, K'(\vec{\mathbf{y}})\,\vec{\nabla}_x G(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\rangle^{cd}\left[\langle K(\vec{\mathbf{y}})\rangle^{cd}\right]^{-1}\end{aligned} \tag{5.112}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{c}^{cd}(\vec{\mathbf{z}},\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau,\tau-\varepsilon) = &\langle K'(\vec{\mathbf{x}})\,\vec{\nabla}_x G(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\,\vec{\nabla}_y\,|\left[K'(\vec{\mathbf{y}})\,\vec{\nabla}_y G^{cd}(\vec{\mathbf{z}},\vec{\mathbf{y}},\tau-\tau_1)\right]\times \\ &\times\left\{\langle K(\vec{\mathbf{z}})\rangle^{cd}\left[K(\vec{\mathbf{z}})\right]^{-1}-1\right\}\rangle^{cd}\end{aligned} \tag{5.113}$$

Em (5.110), $H^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ é a solução da equação diferencial determinística

$$-\vec{\nabla}\,|\left[\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}\,\vec{\nabla}H^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)\right] + S_S(\vec{\mathbf{x}})\frac{\partial H^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)}{\partial t} + \langle q(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle = 0 \quad , \quad \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega\,,\ \forall t \tag{5.114}$$

associada às condições iniciais e de fronteira

$$H^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)=\langle H_0(\vec{\mathbf{x}})\rangle \quad \text{para} \quad t=0\,,\ \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega \tag{5.115}$$

$$H^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)=\langle H_d(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Dirichlet}}\,,\ \forall t \tag{5.116}$$

$$-\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}\,\vec{\nabla}H^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)\,|\,\vec{\mathbf{n}}(\vec{\mathbf{x}})=\langle U_n(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Neumann}}\,,\ \forall t \tag{5.117}$$

Nas expressões (5.111) e (5.113), a função de Green $G(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)$ é uma *f.a.* que representa a solução da equação diferencial (5.96) associada à lei de Darcy (5.95)[40] e às condições iniciais e de fronteira (5.97), (5.98) e (5.99) homogéneas, isto é,

$$H(\vec{\mathbf{x}},t)=0 \quad \text{para} \quad t=0\,,\ \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega \tag{5.118}$$

$$H(\vec{\mathbf{x}},t)=0 \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Dirichlet}}\,,\ \forall t \tag{5.119}$$

$$\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\,|\,\vec{\mathbf{n}}(\vec{\mathbf{x}})=0 \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Neumann}}\,,\ \forall t \tag{5.120}$$

e para uma extracção de grandeza unitária, no ponto do domínio $\vec{\mathbf{y}}$ e no instante $\tau$, definida por

$$q(\vec{\mathbf{x}},t)=\delta(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{y}})\,\delta(t-\tau) \tag{5.121}$$

Nas expressões (5.112) e (5.113) $G^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)$ é a solução da equação diferencial determinística (5.114) associada a condições iniciais e de fronteira homogéneas e para a extracção esperada unitária e pontual dada por

$$\langle q(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle=\delta(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{y}})\,\delta(t-\tau) \tag{5.122}$$

Face à definição da *f.a.* $G(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)$ conclui-se que a utilização da definição explícita de $\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ implica a quantificação prévia, por simulações de Monte-Carlo ou por outro processo de aproximação, de momentos condicionados envolvendo $G(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)$.

---

[40] $G(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)$ é uma *f.a.* porque a equação diferencial (5.96) está associada à lei de Darcy (5.95) onde $K(\vec{\mathbf{x}})$ é uma *f.a.*.

Os mesmos autores, Tartakovsky e Neuman (1998a), apresentam, em alternativa, uma expressão implícita de $\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$

$$\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) = \int_0^t \int_\Omega \mathbf{a}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\cdot\vec{\nabla}_y\langle H(\vec{\mathbf{y}},\tau)\rangle^{cd}\, d\Omega_y\, d\tau + \\ + \int_0^t \int_\Omega \mathbf{d}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\cdot\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\tau)\, d\Omega_y\, d\tau \tag{5.123}$$

com a matriz $\mathbf{d}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)$ definida por

$$\mathbf{d}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau) = \langle K'(\vec{\mathbf{x}})\vec{\nabla}_x\cdot\vec{\nabla}_y^T G(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\rangle^{cd} \tag{5.124}$$

Observando as duas definições alternativas de $\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ apresentadas por Tartakovsky e Neuman (1998a) verifica-se imediatamente que a respectiva quantificação implica o cálculo de integrais estendidos aos domínios espacial e temporal, pelo que $\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ apresenta-se como *não local*, no espaço e no tempo, na medida em que depende de informação respeitante a outros pontos e instantes. Acresce ainda que, estando presentes nas expressões que formam $\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ valores esperados condicionados de diferentes variáveis e funções, a velocidade residual revela-se também dependente da quantidade e qualidade dos dados de campo conhecidos e que contribuem, por exemplo, para a estimação da distribuição espacial da conductividade hidráulica, $\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$. Como consequência, não só $\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$ não é único[41], como o mesmo acontece com $\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$. Face ao exposto retira-se que a velocidade de percolação esperada, definida pela soma vectorial

$$\langle\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} = -\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}\,\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} + \vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) \tag{5.125}$$

é *não local* e *não única*, para além do facto de não estar de acordo com o princípio de

[41] A estimação de $K$, por exemplo por krigagem, depende da amostra de dados de campo utilizada, em particular dos valores medidos e da respectiva localização espacial. Modificar a amostra, por exemplo por adição de mais alguns dados, implica uma redefinição da distribuição espacial da estimação de $K$ e, por consequência, de todos os outros valores esperados.

Darcy[42], pelo que, aparentemente, não faz sentido o conceito de conductividade hidráulica efectiva[43]. A reserva contida nesta afirmação resulta do facto de em Tartakovsky e Neuman (1998b) se analisarem algumas situações particulares em que a proporcionalidade local entre os valores esperados da velocidade de percolação e do gradiente hidráulico permanece válida, à custa de uma matriz de conductividade hidráulica equivalente.

Retome-se, agora, o problema da quantificação da parcela residual da velocidade de percolação no contexto mais vasto da determinação dos primeiro e segundo momentos condicionados da variável de estado do escoamento em meios porosos heterogéneos, isto é, o cálculo do valor esperado e da covariância de $H(\vec{\mathbf{x}},t)$, tendo em conta a definição probabilística de $K(\vec{\mathbf{x}})$ e os dados de campo conhecidos.

Uma das vias possíveis para a resolução deste problema reside nas simulações de Monte-Carlo condicionadas, já apresentadas na secção 5.4.5. Após a resolução da equação diferencial para um grande número de realizações de $K(\vec{\mathbf{x}})$ calcula-se $\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}$ e $\langle\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}$. Com base nestas grandezas vectoriais é possível quantificar uma matriz de conductividade hidráulica equivalente, $\mathbf{K}_{eqv}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$, recorrendo à versão vectorial da lei de Darcy

$$\langle\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} = -\mathbf{K}_{eqv}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)\cdot\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} \tag{5.126}$$

desde que se admita que as direcções principais de permeabilidade coincidem com os eixos coordenados[44].

Outra das vias foi a explorada por Tartakovsky e Neuman (1998a), primeiro, e Guadagnini e Neuman (1999a), depois. Estes autores desenvolveram aproximações recursivas, em potências do desvio padrão do logaritmo de $K(\vec{\mathbf{x}})$, das equações dos primeiros

---

[42] Velocidade de percolação directamente proporcional ao gradiente hidráulico local.

[43] Este conceito está habitualmente associado à média geométrica da conductividade hidráulica, $K_G$, para as simulações não condicionadas, ou à distribuição espacial de $K$ estimada por krigagem, ou cokrigagem, no caso das simulações condicionadas.

[44] Esta hipótese é necessária para que o sistema de equações seja determinado. No caso geral, a matriz de conductividade (simétrica) é definida por 6 elementos distintos, pelo que o sistema de 3 equações resultante de (5.126) é indeterminado.

e segundo momentos condicionados. Guadagnini e Neuman (1999a) foram mais longe e resolveram estas equações para um problema bidimensional, permanente e para uma aproximação de primeira ordem, pelo método dos elementos finitos.

Tartakovsky e Neuman (1998b) estudaram os problemas em que o gradiente hidráulico esperado, $\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}$, e a velocidade de percolação residual, $\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$, são aproximadamente uniformes em termos locais, isto é, variam muito lentamente com as coordenadas espaciais e temporal. Tomando como base esta hipótese, a expressão implícita de $\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ (5.123) pode ser reformulada, pondo em evidência dos integrais as grandezas vectoriais consideradas aproximadamente constantes

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) \approx &\left[\int_0^t \int_\Omega \mathbf{a}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\, d\Omega_y\, d\tau\right]\cdot \vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} + \\ &+\left[\int_0^t \int_\Omega \mathbf{d}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\, d\Omega_y\, d\tau\right]\cdot \vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)\end{aligned} \tag{5.127}$$

ou com uma apresentação simplificada

$$\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) \approx \mathbf{A}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)\cdot \vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} + \mathbf{D}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)\cdot \vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) \tag{5.128}$$

onde

$$\mathbf{A}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) = \int_0^t \int_\Omega \mathbf{a}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\, d\Omega_y\, d\tau \tag{5.129}$$

$$\mathbf{D}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) = \int_0^t \int_\Omega \mathbf{d}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\, d\Omega_y\, d\tau \tag{5.130}$$

Resolvendo (5.128) em ordem a $\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ obtém-se

$$\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) \approx \kappa^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)\cdot \vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} \tag{5.131}$$

com a matriz $\kappa^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ definida pela expressão matricial

$$\kappa^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)=\left[\mathbf{I}-\mathbf{D}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)\right]^{-1}\cdot\mathbf{A}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) \tag{5.132}$$

onde **I** representa a matriz identidade. Atendendo à definição de $\mathbf{d}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)$, expressa por (5.124), a matriz $\mathbf{D}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ não é simétrica, pelo que sucede o mesmo com $\kappa^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ apesar de $\mathbf{A}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ ser simétrica[45]. Substituindo (5.131) em (5.125) obtém-se uma expressão semelhante[46] à lei de Darcy

$$\langle\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}\approx-\mathbf{K}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)\cdot\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} \tag{5.133}$$

onde a matriz de conductividade hidráulica *equivalente*[47], $\mathbf{K}_{eqv}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$, é expressa por

$$\mathbf{K}_{eqv}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)=\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}\,\mathbf{I}-\kappa^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) \tag{5.134}$$

Trata-se de uma matriz, que varia com as coordenadas espaciais e com a coordenada temporal e que tanto pode ser simétrica positiva semidefinida como não simétrica, dependendo de $\kappa^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$. Esta, por sua vez, pode ser simétrica positiva semidefinida caso $\mathbf{D}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ seja nula. Se for o caso, então sim, a relação (5.133) pode ser interpretada como representando, localmente, a lei de Darcy generalizada, uma vez que $\mathbf{K}_{eqv}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ é definida para o volume de controlo em torno de $\vec{\mathbf{x}}$. Segundo os mesmos autores, $\mathbf{K}_{eqv}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ constitui uma estimativa enviesada da verdadeira conductividade hidráulica, $K(\vec{\mathbf{x}})$, a qual é muito melhor representada pela estimativa condicionada e não enviesada que é $\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$. Contudo, $\mathbf{K}_{eqv}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ contribui para uma melhor estimação de $H(\vec{\mathbf{x}},t)$ e $\vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)$ do que $\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$, desde que as condições de uniformidade local de $\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}$ e $\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ sejam razoavelmente satisfeitas.

---

[45] $\mathbf{A}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ é simétrica, atendendo à sua definição (5.111) e ao facto de a função de Green $G(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)$ ser simétrica no espaço (Tartakovsky e Neuman, 1998a).

[46] Semelhante, e não igual, porque na lei de Darcy generalizada a matriz de conductividade hidráulica é simétrica, o que, em princípio, não sucede neste caso.

[47] Optou-se pela designação de *equivalente* com a finalidade de estabelecer a distinção relativamente à conductividade *efectiva*.

Uma abordagem alternativa é possível, a partir da definição explícita de $\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ (5.110). Se as condições de fronteira de Neumann forem homogéneas, isto é, se

$$\langle \vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} \mid \vec{\mathbf{n}}(\vec{\mathbf{x}}) = 0 \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Neumann}} \,, \ \forall t \tag{5.135}$$

a velocidade de percolação residual $\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ é expressa unicamente por

$$\vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) = \int_0^t \int_\Omega \mathbf{a}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\cdot\vec{\nabla}_y H^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\tau)\, d\Omega_y\, d\tau \tag{5.136}$$

ou ainda

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{r}}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) &\approx \left[\int_0^t \int_\Omega \mathbf{a}^{cd}(\vec{\mathbf{y}},\vec{\mathbf{x}},t-\tau)\, d\Omega_y\, d\tau\right]\cdot\vec{\nabla}H^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) \\ &\approx \mathbf{A}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)\cdot\vec{\nabla}H^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) \end{aligned} \tag{5.137}$$

se o gradiente de $H^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ for aproximadamente uniforme, em termos locais. Nestas condições, (5.125) é rescrita com duas parcelas idênticas à lei de Darcy

$$\langle \vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} \approx -\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}\,\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} + \mathbf{A}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)\cdot\vec{\nabla}H^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) \tag{5.138}$$

Na primeira parcela o gradiente do campo piezométrico esperado é multiplicado por um escalar, $\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$, enquanto que na segunda o gradiente do campo piezométrico calculado para $\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$ [(5.114) – (5.117)] é multiplicado pela matriz simétrica positiva semidefinida $\mathbf{A}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$. Admitindo que $\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} \approx \vec{\nabla}H^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle \vec{\mathbf{U}}(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} &\approx \left[-\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}\,\mathbf{I} + \mathbf{A}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)\right]\cdot\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} \\ &\approx -\mathbf{K}_{eqv}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)\cdot\vec{\nabla}\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd} \end{aligned} \tag{5.139}$$

Esta formulação do conceito de conductividade hidráulica efectiva representa não só um esforço de *localização* da relação entre velocidades e gradientes hidráulicos esperados como também de recuperação da lei de Darcy, à custa da introdução de algumas hipóteses particulares que, naturalmente, dão lugar a um determinado erro. Contudo, estas definições de matriz de conductividade equivalente, (5.134) ou (5.139), permanecem de difícil quantificação, pelo que Guadagnini e Neuman (1999a,b) trataram a transformada logarítmica de $K(\vec{\mathbf{x}})$ como sendo localmente estacionária e isotrópica na vizinhança de $\vec{\mathbf{x}}$ e admitiram que $\mathbf{K}_{eqv}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t)$ pode, nestas condições, ser definida aproximadamente por

$$\begin{aligned}\mathbf{K}_{eqv}^{cd}(\vec{\mathbf{x}},t) &\approx K_G(\vec{\mathbf{x}})\,\mathbf{I} \\ &\approx \exp(\langle Y(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd})\,\mathbf{I} \quad ,\forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega,\ \forall t\end{aligned} \tag{5.140}$$

sendo $Y(\vec{\mathbf{x}}) = \ln K(\vec{\mathbf{x}})$. Deste modo, $K_G(\vec{\mathbf{x}})$ é a média geométrica condicionada da conductividade hidráulica em $\vec{\mathbf{x}}$ e pode ser calculada a partir das realizações condicionadas de $K(\vec{\mathbf{x}})$, ou então, por krigagem de $Y(\vec{\mathbf{x}})$. Contudo, qualquer que seja o procedimento adoptado para gerar a distribuição espacial de $K_G(\vec{\mathbf{x}})$, esta permanece *não única* uma vez que depende dos dados de campo.

Como se perceberá nas secções seguintes, é um retorno à abordagem proposta para o método das perturbações, onde habitualmente se desprezam as parcelas que contêm produtos de perturbações, ou de derivadas de perturbações, como é caso da que dá origem à velocidade residual $\langle K'(\vec{\mathbf{x}})\vec{\nabla}h(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle^{cd}$. Neste ponto da exposição justifica-se o regresso à questão já formulada quanto ao peso relativo desta parcela na formação da velocidade de percolação, ou de uma forma mais global, avaliar a ordem de grandeza do erro cometido ao desprezar este tipo de parcelas no desenvolvimento das equações do método das perturbações. Tartakovsky e Neuman (1998a) afirmam que quando a informação utilizada na estimação de $\langle K(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$ aumenta, isto é, quando cresce o número e qualidade dos dados de campo utilizados, o peso relativo da velocidade residual diminui. Por outro lado, os resultados apresentados por Neuman e Guadagnini (1999) para um escoamento bidimensional e permanente fazem crer que os erros cometidos pela localização (5.140) são pouco significativos. Por se tratar da

primeira análise comparativa desta recente metodologia não local, com a localizada, justifica-se a reprodução destes resultados. É o que se faz de imediato.

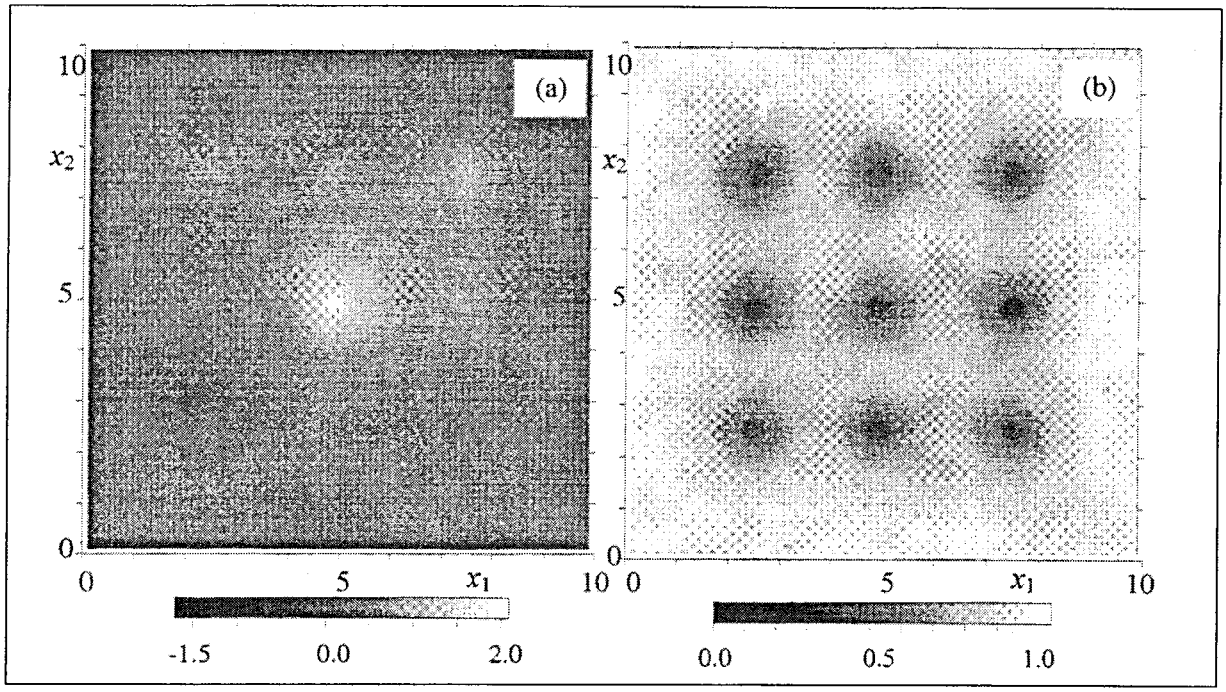



Figura 5.42 – Exemplo apresentado por Neuman e Guadagnini (1999). Imagens de $\langle Y(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$ (a) e de $\sigma_Y^{2,cd}(\vec{\mathbf{x}})$ (b) obtidas a partir de 2000 realizações condicionadas de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ para o problema TP2.

Com a finalidade de ilustrar os erros introduzidos pela localização, (5.134) ou (5.139), e pela adopção da média geométrica condicionada, (5.140), Neuman e Guadagnini (1999) apresentam um exemplo onde se estuda o escoamento num aquífero regional (bidimensional) quadrado ($L_1 = L_2 = 10$ unidades de comprimento). As fronteiras inferior ($x_2 = 0$) e superior ($x_2 = 10$) são consideradas impermeáveis. Na fronteira esquerda ($x_1 = 0$) é fixado o nível piezométrico $H_E = 10$ e para a fronteira direita ($x_1 = 10$) é atribuído o valor $H_D = 0$. Ao escoamento médio uniforme da esquerda para a direita, gerado por estas condições fronteira, é sobreposto um outro, radial, resultante de uma extracção pontual no centro do domínio quadrado ($x_1 = 5, x_2 = 5$) de $Q_w = 5$ unidades de caudal. Com estas condições fronteira determinísticas foram estudados três problemas: um (TP1) com a conductividade hidráulica não condicionada e outros dois (TP2 e TP3) com este parâmetro hidrogeológico condicionado por conjuntos diferentes de medições de $K(\vec{\mathbf{x}})$. Para os três problemas admite-se que a transformada logarítmica, $Y(\vec{\mathbf{x}}) = \ln K(\vec{\mathbf{x}})$, é estacionária, isotrópica e multivariada normal,

com uma função de covariância exponencial definida por uma variância $\sigma_Y^2$ e uma distância integral $l_Y$ unitárias. Cada um destes problemas (TP1, TP2 e TP3) é resolvido por três métodos distintos: (*i*) simulações de Monte-Carlo, (*ii*) aproximações recursivas não locais integradas por elementos finitos, desenvolvidas por Guadagnini e Neuman (1999a,b) e (*iii*) integração numérica da equação diferencial para a conductividade hidráulica localizada (5.140).

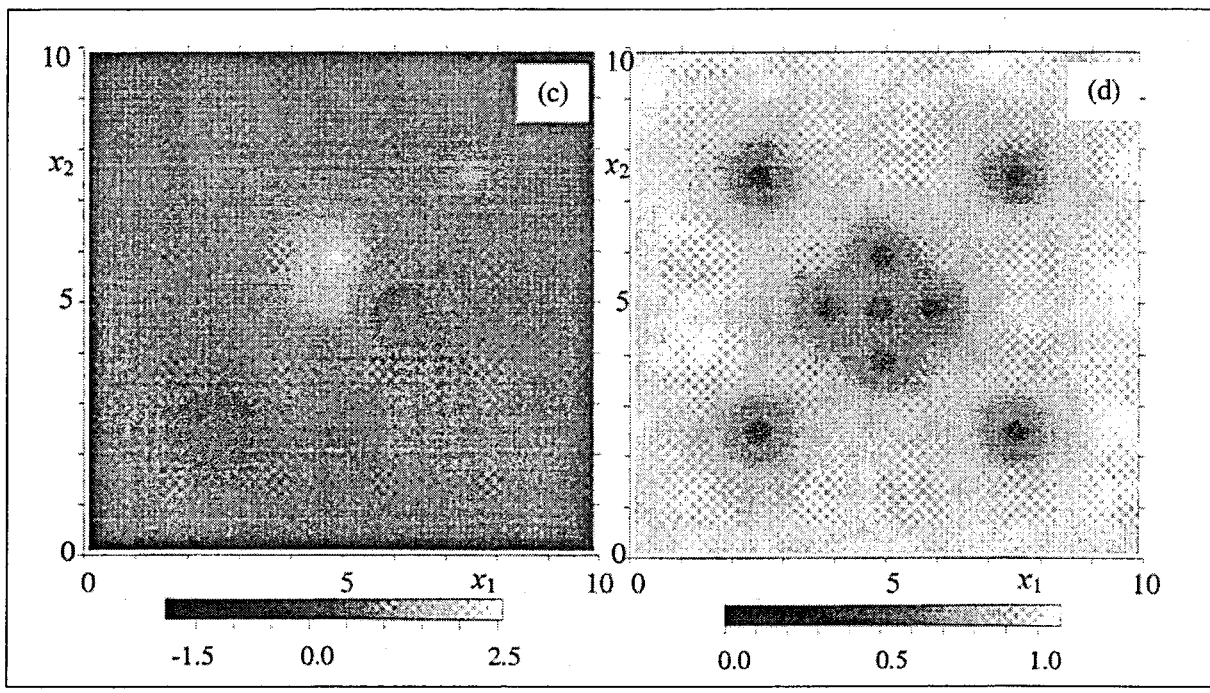



Figura 5.43 – Exemplo apresentado por Neuman e Guadagnini (1999). Imagens de $\langle Y(\vec{\mathbf{x}})\rangle^{cd}$ (c) e de $\sigma_Y^{2,cd}(\vec{\mathbf{x}})$ (d) obtidas a partir de 2000 realizações condicionadas de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ para o problema TP3.

O domínio foi discretizado em 50×50 elementos quadrados com $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 0.2$ de lado. A Figura 5.42 mostra as imagens da distribuição condicionada da conductividade hidráulica, $\langle Y(\vec{\mathbf{x}})\rangle$ , e da respectiva variância condicionada, $\sigma_Y^{2,}$ $(\vec{\mathbf{x}})$, determinadas para o problema TP2 a partir de 2000 realizações condicionadas de $Y(\vec{\mathbf{x}})$. A Figura 5.43 apresenta imagens idênticas para o problema TP3. A diferença entre os dois conjuntos de realizações resulta de terem sido geradas para distintas amostras de uma mesma realização não condicionada de $Y(\vec{\mathbf{x}})$. O número de elementos de cada amostra é o mesmo (9), mas a

localização dos pontos de leitura é que é distinta[48]. Para as simulações de Monte-Carlo é atribuído a cada elemento da malha o valor de $Y$ correspondente ao ponto central do elemento. Para a obtenção das três distribuições de $K_G(\vec{\mathbf{x}})$, que representam as conductividades hidráulicas equivalentes nos problemas TP1, TP2 e TP3, são calculadas, para cada elemento finito, as médias geométricas dos três conjuntos de 2000 realizações[49].

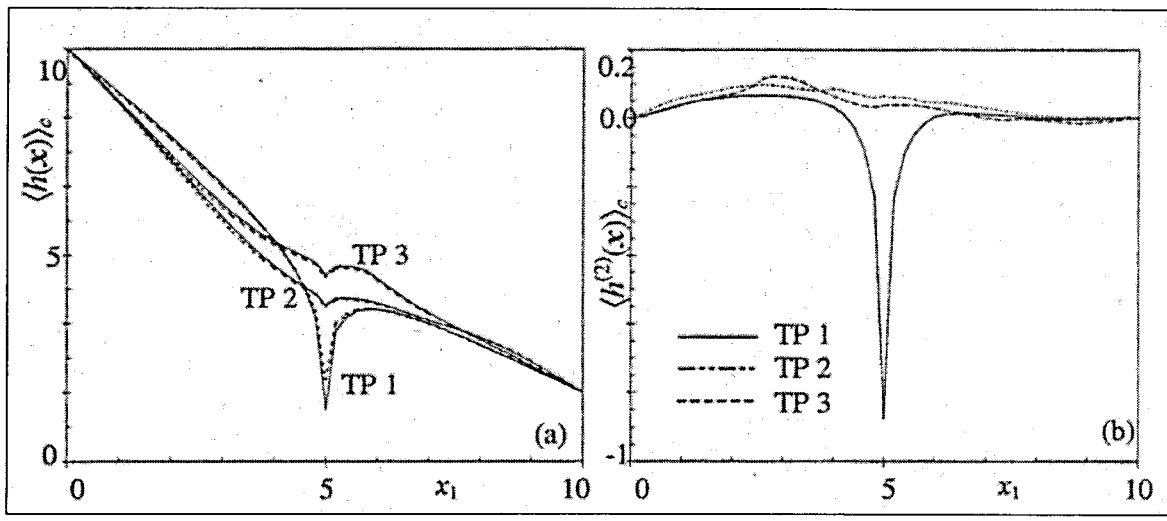



Figura 5.44 – Exemplo apresentado por Neuman e Guadagnini (1999). Em (a) representa-se $\langle H(\vec{\mathbf{x}})\rangle$ ao longo de uma secção longitudinal ($x_2 = 5$). Linha contínua para os métodos (*i*) e (*ii*) e linha tracejada para o método (*iii*). Em (b) representa-se a componente de segunda ordem, $\langle H^{(2)}(\vec{\mathbf{x}})\rangle$, do método não local (*ii*) ao longo da mesma secção.

Na Figura 5.44 (a) representa-se, para cada um dos problemas, o nível piezométrico esperado, $\langle H(\vec{\mathbf{x}})\rangle$ [50], ao longo de uma secção longitudinal ($x_2 = 5$) que passa pelo ponto de extracção. Os valores obtidos pelos métodos (*i*) e (*ii*) são praticamente coincidentes pelo que são representados pela mesma linha contínua. A Figura 5.44 (b) mostra, para a mesma secção longitudinal do domínio, a componente de segunda ordem, em $\sigma_Y$, do nível piezométrico esperado para o método não local das aproximações recursivas (*ii*) de Guadagnini e Neuman (1999a,b).

---

[48] Os locais de amostragem são facilmente identificados pelas imagens da variância. Como as realizações são condicionadas, isto é, respeitam os valores medidos, os pontos com variância nula correspondem aos locais de medição dos valores da *f.a.*.

[49] O conjunto de realizações para TP1 é não condicionado, e os conjuntos para TP2 e TP3 são gerados para duas amostras diferentes de uma realização não condicionada de $Y(\vec{\mathbf{x}})$.

[50] Não condicionado, para TP1, e condicionado para TP2 e TP3.

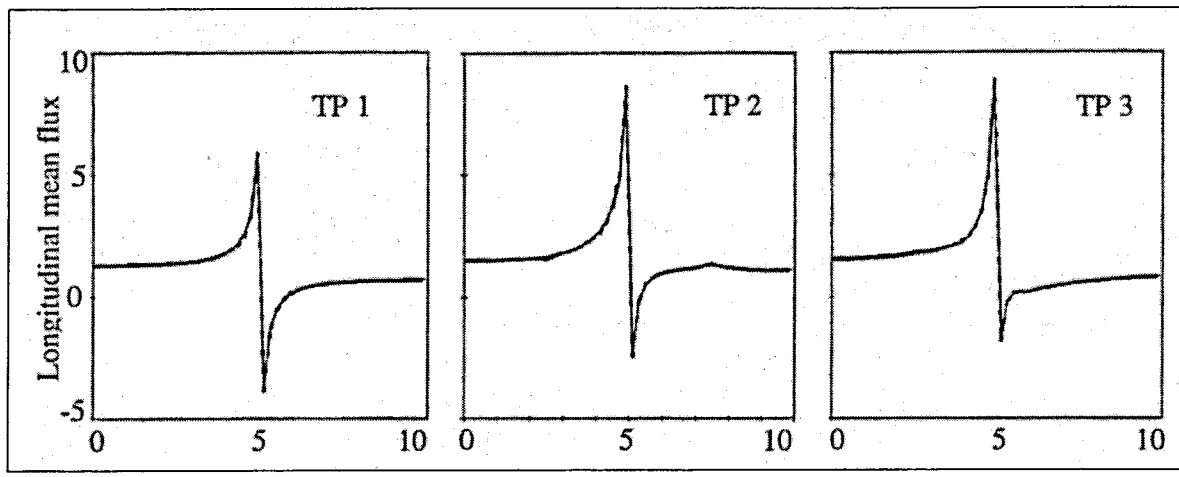



Figura 5.45 – Exemplo apresentado por Neuman e Guadagnini (1999). Valor esperado da componente longitudinal do fluxo, $\langle q_{x_1} \rangle$, ao longo da secção longitudinal ($x_2 = 4.9$). Linha contínua para os métodos (*i*) e (*ii*) e linha tracejada para o método (*iii*).

Na Figura 5.45 comparam-se as componentes segundo $x_2$ do fluxo esperado, $\langle \mathbf{q}(\vec{\mathbf{x}}) \rangle$, obtidas pelos três métodos para os três exemplos estudados, ao longo de uma secção longitudinal ($x_2 = 4.9$) que passa pelo centro da linha de elementos que contém o ponto de extracção. Uma vez mais, os valores correspondentes aos métodos (*i*) e (*ii*) são praticamente coincidentes, pelo são representados pela mesma linha contínua.

Observando estas figuras verifica-se que os valores esperados do nível piezométrico e do fluxo (longitudinal) obtidos pelos três métodos são muito próximos, para qualquer dos três problemas. Os resultados produzidos pela metodologia de Guadagnini e Neuman (1999a) são praticamente coincidentes com os das simulações de Monte-Carlo, não condicionadas para TP1 e condicionadas para TP2 e TP3, e semelhantes aos da simulação realizada para a conductividade hidráulica equivalente (localizada). Globalmente, a diferença entre os resultados dos três problemas TP1, TP2 e TP3 resulta de no primeiro problema não estarem condicionados e de nos dois últimos serem condicionados por duas amostras diferentes.

Em resumo, o que neste momento se sabe relativamente aos recentes avanços do conhecimento no domínio da simulação estocástica directa de escoamentos em meios porosos, nomeadamente a assunção de que a relação entre os valores esperados da velocidades e do gradiente hidráulico tem uma natureza não local, não "darciana" e não única, não retira validade à formulação localizada do problema, habitual no contexto do método das perturbações. Por outro lado, a já citada afirmação de Tartakovsky e Neuman (1998a) de que

o aumento, em quantidade e qualidade, da informação utilizada para a estimação da distribuição espacial da conductividade hidráulica contribui para a diminuição do peso relativo da componente residual da velocidade ou fluxo encoraja o recurso à modelação inversa como instrumento desse aumento de informação. De facto, esta metodologia permite não só, correlacionar o parâmetro hidrogeológico a estimar com dados de campo da mesma natureza, como também estabelecer uma correlação com dados de outra natureza (piezometria), em simultâneo com uma melhor estimação dos parâmetros estatísticos que definem a estrutura de correlação espacial da *f.a.* que representa a propriedade hidrogeológica em causa.

Uma vez feitas estas considerações iniciais relativamente à aplicação do método das perturbações à simulação estocástica directa do escoamento em meios porosos, com particular destaque para o facto de se introduzir algum erro com a eliminação de parcelas que contêm produtos de perturbações ou de derivadas de perturbações, as secções seguintes destinam-se à dedução e integração numérica das equações diferenciais que resultam da aplicação da formulação do método das perturbações, primeiro para os aquíferos regionais confinados, e depois, para os aquíferos regionais não confinados. Posteriormente, aplica-se esta metodologia aos mesmos exercícios que foram utilizados para a apresentação das simulações de Monte-Carlo com a finalidade de realizar uma comparação de resultados.

### 5.5.2 Aquíferos confinados. Equações diferenciais

Retome-se a equação diferencial que rege o escoamento em aquíferos regionais porosos confinados (5.1) rescrita para uma transmissividade isotrópica ($\mathbf{T} = T\,\mathbf{I}$)

$$-\vec{\nabla}\,|\left(T\,\vec{\nabla}H\right)+S\frac{\partial H}{\partial t}+Q_T+\frac{B+H}{A}=0 \tag{5.141}$$

e para a extracção (ou recarga) superficial $Q_T$ definida pela soma

$$Q_T = Q + rP + \sum_{i=1}^{N_w} Q_{w,i}\,\delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \tag{5.142}$$

com a extracção (ou recarga) difusa desdobrada em $Q + rP$ de modo a distinguir e identificar a recarga superficial por infiltração da água da chuva como uma percentagem, $r$, do valor da precipitação, $P$[51]. A terceira parcela de (5.142) representa as $N_w$ extracções (ou recargas) pontuais. A última parcela do primeiro membro de (5.141) representa a extracção (ou recarga), por unidade de área do aquífero, que varia linearmente com o nível piezométrico de acordo com uma expressão do tipo[52]

$$H(\vec{\mathbf{x}},t) - A(\vec{\mathbf{x}},t)\,Q(\vec{\mathbf{x}},t) + B(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \tag{5.143}$$

As condições iniciais e de fronteira são

$$H(\vec{\mathbf{x}},t) = H_0(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{para} \quad t = 0\,, \ \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{5.144}$$

$$H(\vec{\mathbf{x}},t) = H_{\text{definido}}(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}}\,, \ \forall t \tag{5.145}$$

$$-\left(T\,\vec{\nabla}H\right)\big|\,\vec{\mathbf{n}} = q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Neumann}}\,, \ \forall t \tag{5.146}$$

$$H + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(T\,\vec{\nabla}H\right)\big|\,\vec{\mathbf{n}} + b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Cauchy}}\,, \ \forall t \tag{5.147}$$

Na equação diferencial (5.141), $T$ e $S$ são função das coordenadas espaciais e $H$ e $Q_T$[53] são também função da coordenada temporal. Por agora admite-se que o parâmetro $r$, presente em (5.142), é constante. Tendo em conta a conveniência já referida em trabalhar com as transformadas logarítmicas dos parâmetros hidrogeológicos, introduzam-se as seguintes mudanças de variável

---

[51] Tendo em conta as convenções definidas quando da dedução das equações diferenciais, a recarga é negativa, pelo que o valor da precipitação, $P$, deverá ser introduzido com o sinal negativo. Importa salientar que devido às características dos aquíferos confinados, esta parcela não faz aqui muito sentido. Contudo, em benefício da elaboração de um modelo numérico que trate os dois tipos de aquíferos, entendeu-se introduzí-la neste ponto da exposição.

[52] Ver secção 2.5.3 do segundo capítulo.

[53] O mesmo acontece com $Q$, $P$ e $Q_{w,i}$ presentes em (5.142).

$$Y(\vec{\mathbf{x}}) = \ln T(\vec{\mathbf{x}}) \tag{5.148}$$

$$G(\vec{\mathbf{x}}) = \ln S(\vec{\mathbf{x}}) \tag{5.149}$$

na equação diferencial (5.141)

$$-\vec{\nabla} \cdot \left(\mathrm{e}^{Y}\, \vec{\nabla} H\right) + \mathrm{e}^{G} \frac{\partial H}{\partial t} + Q_T + \frac{B}{A} + \frac{H}{A} = 0 \tag{5.150}$$

Assumindo que $Q_T$, $A$ e $B$ são funções determinísticas do espaço e do tempo e que $H$, $Y$ e $G$ são *f.a.*'s definidas pela soma do valor esperado com uma perturbação estacionária de média nula

$$H(\vec{\mathbf{x}},t) = \langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle + h(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{com} \quad \langle h(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle = 0\,, \ \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \ \text{ e } \ \forall t \tag{5.151}$$

$$Y(\vec{\mathbf{x}}) = \langle Y(\vec{\mathbf{x}})\rangle + f(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{com} \quad \langle f(\vec{\mathbf{x}})\rangle = 0\,, \ \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{5.152}$$

$$G(\vec{\mathbf{x}}) = \langle G(\vec{\mathbf{x}})\rangle + g(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{com} \quad \langle g(\vec{\mathbf{x}})\rangle = 0\,, \ \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{5.153}$$

a equação (5.150) toma, sucessivamente, os seguintes aspectos

$$-\vec{\nabla} \cdot \left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle + f}\, \vec{\nabla}\left(\langle H\rangle + h\right)\right] + \mathrm{e}^{\langle G\rangle + g} \frac{\partial\left(\langle H\rangle + h\right)}{\partial t} + Q_T + \frac{B}{A} + \frac{\langle H\rangle + h}{A} = 0 \tag{5.154}$$

$$-\vec{\nabla} \cdot \left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\mathrm{e}^{f}\, \vec{\nabla}\left(\langle H\rangle + h\right)\right] + \mathrm{e}^{\langle G\rangle}\mathrm{e}^{g} \frac{\partial\left(\langle H\rangle + h\right)}{\partial t} + Q_T + \frac{B}{A} + \frac{\langle H\rangle}{A} + \frac{h}{A} = 0 \tag{5.155}$$

Admitindo que as perturbações são pequenas, introduzem-se as aproximações[54]

$$\mathrm{e}^{f} \approx 1 + f \tag{5.156}$$

---

[54] A função exponencial é definida por $\mathrm{e}^{x} = 1 + x + x^2/2! + \ldots + x^n/n! + \ldots$ Para valores pequenos de $x$ pode ser aproximada pelos dois primeiros termos.

$$e^{g} \approx 1+g \tag{5.157}$$

em (5.155), que fica sucessivamente

$$\begin{aligned} &-\vec{\nabla}\cdot\left[e^{\langle Y\rangle}(1+f)\vec{\nabla}(\langle H\rangle+h)\right]+ \\ &+e^{\langle G\rangle}(1+g)\frac{\partial(\langle H\rangle+h)}{\partial t}+ \\ &+Q_T+\frac{B}{A}+\frac{\langle H\rangle}{A}+\frac{h}{A}=0 \end{aligned} \tag{5.158}$$

$$\begin{aligned} &-\vec{\nabla}\cdot\left(e^{\langle Y\rangle}\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)-\vec{\nabla}\cdot\left(e^{\langle Y\rangle}f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)-\vec{\nabla}\cdot\left(e^{\langle Y\rangle}\vec{\nabla}h\right)-\vec{\nabla}\cdot\left(e^{\langle Y\rangle}f\,\vec{\nabla}h\right)+ \\ &+e^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}+e^{\langle G\rangle}g\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}+e^{\langle G\rangle}\frac{\partial h}{\partial t}+e^{\langle G\rangle}g\frac{\partial h}{\partial t}+ \\ &+Q_T+\frac{B}{A}+\frac{\langle H\rangle}{A}+\frac{h}{A}=0 \end{aligned} \tag{5.159}$$

Calculando o valor esperado desta equação obtém-se

$$\begin{aligned} &-\vec{\nabla}\cdot\left(e^{\langle Y\rangle}\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)-\vec{\nabla}\cdot\left(e^{\langle Y\rangle}\langle f\rangle\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)-\vec{\nabla}\cdot\left(e^{\langle Y\rangle}\vec{\nabla}\langle h\rangle\right)-\vec{\nabla}\cdot\left(e^{\langle Y\rangle}\langle f\,\vec{\nabla}h\rangle\right)+ \\ &+e^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}+e^{\langle G\rangle}\langle g\rangle\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}+e^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle h\rangle}{\partial t}+e^{\langle G\rangle}\langle g\frac{\partial h}{\partial t}\rangle+ \\ &+Q_T+\frac{B}{A}+\frac{\langle H\rangle}{A}+\frac{\langle h\rangle}{A}=0 \end{aligned} \tag{5.160}$$

e tendo presente que $\langle f\rangle=0$, $\langle g\rangle=0$ e $\langle h\rangle=0$[55], a equação (5.160) pode ser simplificada

[55] E as derivadas de uma *f.a.* estacionária são nulas, conforme se salienta no sub-capítulo 5.2.

$$
\begin{aligned}
&-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\,\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}+Q_T+\frac{B}{A}+\frac{\langle H\rangle}{A}-\\
&-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\langle f\,\vec{\nabla}h\rangle\right)+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\langle g\,\frac{\partial h}{\partial t}\rangle=0
\end{aligned}
\tag{5.161}
$$

Subtraindo esta equação de (5.159) obtém-se

$$
\begin{aligned}
&\frac{h}{A}-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}h\right)+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\,g\,\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\,\frac{\partial h}{\partial t}-\\
&-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,f\,\vec{\nabla}h\right)+\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\langle f\,\vec{\nabla}h\rangle\right)+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\,g\,\frac{\partial h}{\partial t}-\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\langle g\,\frac{\partial h}{\partial t}\rangle=0
\end{aligned}
\tag{5.162}
$$

Intencionalmente, nas segundas linhas das equações (5.161) e (5.162) estão as parcelas com os produtos de perturbações por derivadas de perturbações que, habitualmente, são desprezadas por serem consideradas de segunda ordem. Procedendo deste modo, as equações (5.161) e (5.162) tomam um aspecto mais simples

$$
\boxed{-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\,\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}+Q_T+\frac{B}{A}+\frac{\langle H\rangle}{A}=0}
\tag{5.163}
$$

$$
\frac{h}{A}-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}h\right)+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\,g\,\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\,\frac{\partial h}{\partial t}=0
\tag{5.164}
$$

A primeira destas duas equações (5.163) relaciona os valores esperados das variáveis em jogo e é idêntica à equação diferencial que rege o escoamento em aquíferos regionais porosos confinados (5.150). A segunda (5.164) relaciona as perturbações do nível piezométrico e das transformadas logarítmicas da transmissividade e do coeficiente de armazenamento, mas ainda carece de um arranjo de modo a apresentar uma configuração adequada para a integração numérica. Para o efeito, desenvolve-se a segunda parcela do primeiro membro

$$-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\, f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)=-\vec{\nabla}\,|\left[f\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)\right]= \\ =-\vec{\nabla}f\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)-f\,\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)= \tag{5.165}$$

ou ainda

$$-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\, f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)=-\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}f\,|\,\vec{\nabla}\langle H\rangle-f\,\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right) \tag{5.166}$$

Nesta igualdade, a segunda parcela do segundo membro pode ser reformulada. A perturbação $f$ multiplica $-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)$ que pode ser extraída de (5.163)

$$-f\,\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)=-f\,\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}-f\,Q_T-f\frac{B}{A}-f\frac{\langle H\rangle}{A} \tag{5.167}$$

Assim, rescrevendo (5.166) com o auxílio de (5.167)

$$-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\, f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)=-\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}f\,|\,\vec{\nabla}\langle H\rangle-f\,\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}- \\ -f\,Q_T-f\frac{B}{A}-f\frac{\langle H\rangle}{A} \tag{5.168}$$

e procedendo à substituição de (5.168) na segunda parcela do primeiro membro da equação das perturbações (5.164), esta fica finalmente

$$\frac{h}{A}-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}h\right)+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial h}{\partial t}-\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}f\,|\,\vec{\nabla}\langle H\rangle-f\,\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}+ \\ +g\,\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}-f\,Q_T-f\frac{B}{A}-f\frac{\langle H\rangle}{A}=0 \tag{5.169}$$

A integração da equação diferencial do escoamento (5.163), escrita para os valores esperados das variáveis e dos parâmetros em jogo, e da equação diferencial das perturbações (5.169) exige a prévia definição das correspondentes condições iniciais e de fronteira:

a) *Condições iniciais*: introduzindo na condição inicial (5.144) a definição de *f.a.* adoptada para $H$ (5.151) obtém-se a expressão

$$\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle + h(\vec{\mathbf{x}},t) = H_0(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{para} \quad t=0\,,\ \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{5.170}$$

escrita para o nível piezométrico inicial $H_0(\vec{\mathbf{x}})$ determinístico. Calculando o valor esperado de (5.170) deduz-se a condição inicial da equação diferencial do escoamento escrita para os valores esperados

$$\boxed{\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle = H_0(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{para} \quad t=0\,,\ \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega} \tag{5.171}$$

que subtraída a (5.170) dá lugar à condição inicial da equação diferencial das perturbações

$$h(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \quad \text{para} \quad t=0\,,\ \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{5.172}$$

b) *Condições fronteira de Dirichlet*: introduzindo na condição de Dirichlet (5.145) a definição de *f.a.* adoptada para $H$ (5.151) obtém-se a expressão

$$\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle + h(\vec{\mathbf{x}},t) = H_{\text{definido}}(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}}\,,\ \forall t \tag{5.173}$$

escrita para uma definição determinística do nível piezométrico em $\Gamma_{\text{Dirichlet}}$. Calculando o valor esperado de (5.173) deduz-se a condição fronteira de Dirichlet da equação diferencial do escoamento escrita para os valores esperados

$$\boxed{\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle = H_{\text{definido}}(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}}\,,\ \forall t} \tag{5.174}$$

que subtraída a (5.173) dá lugar à condição fronteira de Dirichlet da equação diferencial das perturbações

$$h(\vec{\mathbf{x}},t)=0 \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Dirichlet}}\ ,\ \forall t \tag{5.175}$$

c) *Condições fronteira de Neumann*: introduzindo na condição de Neumann (5.146) a mudança de variável $T=\mathrm{e}^{Y}$, a definição de *f.a.* adoptada para $H$ (5.151) e para $Y$ (5.152) e a aproximação (5.156) obtém-se, sucessivamente, e para um fluxo determinístico através da fronteira $q_n(\vec{\mathbf{x}},t)$

$$-\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle+f}\,\vec{\nabla}\left(\langle H\rangle+h\right)\right]\vert\,\vec{\mathbf{n}}=q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \tag{5.176}$$

$$-\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\mathrm{e}^{f}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle+\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\mathrm{e}^{f}\,\vec{\nabla}h\right]\vert\,\vec{\mathbf{n}}=q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \tag{5.177}$$

$$-\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(1+f)\,\vec{\nabla}\langle H\rangle+\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(1+f)\,\vec{\nabla}h\right]\vert\,\vec{\mathbf{n}}=q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \tag{5.178}$$

$$\begin{aligned}&-\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)\vert\,\vec{\mathbf{n}}-\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)\vert\,\vec{\mathbf{n}}-\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}h\right)\vert\,\vec{\mathbf{n}}-\\&-\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,f\,\vec{\nabla}h\right)\vert\,\vec{\mathbf{n}}=q_n(\vec{\mathbf{x}},t)\end{aligned} \tag{5.179}$$

Eliminando a parcela de segunda ordem $\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,f\,\vec{\nabla}h\right)\vert\,\vec{\mathbf{n}}$ de (5.179)

$$-\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)\vert\,\vec{\mathbf{n}}-\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)\vert\,\vec{\mathbf{n}}-\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}h\right)\vert\,\vec{\mathbf{n}}=q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \tag{5.180}$$

e calculando o valor esperado de (5.180) obtém-se a condição fronteira de Neumann da equação diferencial do escoamento escrita para os valores esperados

$$\boxed{-\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)\vert\,\vec{\mathbf{n}}=q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Neumann}}\ ,\ \forall t} \tag{5.181}$$

que subtraída a (5.180) dá lugar à expressão

$$-\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\, f\, \vec{\nabla}\langle H\rangle\right)|\,\vec{\mathbf{n}} - \left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\, \vec{\nabla} h\right)|\,\vec{\mathbf{n}} = 0 \tag{5.182}$$

cuja primeira parcela do primeiro membro pode ser reformulada como o produto da perturbação $f$ pelo primeiro membro de (5.181), facto que dá lugar à condição fronteira de Neumann da equação diferencial das perturbações com o seguinte aspecto

$$\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\, \vec{\nabla} h\right)|\,\vec{\mathbf{n}} = f\, q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Neumann}}\,,\ \forall t \tag{5.183}$$

d) *Condições fronteira de Cauchy*: introduzindo na condição de Cauchy (5.147) a mudança de variável $T = \mathrm{e}^{Y}$, a definição de *f.a.* adoptada para $H$ (5.151) e para $Y$ (5.152) e a aproximação (5.156) obtém-se, sucessivamente, para uma definição determinística dos parâmetros $a(\vec{\mathbf{x}},t)$ e $b(\vec{\mathbf{x}},t)$

$$\langle H\rangle + h + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle + f}\, \vec{\nabla}\left(\langle H\rangle + h\right)\right]|\,\vec{\mathbf{n}} + b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \tag{5.184}$$

$$\langle H\rangle + h + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\mathrm{e}^{f}\, \vec{\nabla}\langle H\rangle + \mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\mathrm{e}^{f}\, \vec{\nabla} h\right]|\,\vec{\mathbf{n}} + b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \tag{5.185}$$

$$\langle H\rangle + h + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(1+f)\,\vec{\nabla}\langle H\rangle + \mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(1+f)\,\vec{\nabla} h\right]|\,\vec{\mathbf{n}} + b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \tag{5.186}$$

$$\begin{aligned}&\langle H\rangle + h + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\, \vec{\nabla}\langle H\rangle\right)|\,\vec{\mathbf{n}} + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\, f\, \vec{\nabla}\langle H\rangle\right)|\,\vec{\mathbf{n}} + \\ &+ a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\, \vec{\nabla} h\right)|\,\vec{\mathbf{n}} + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\, f\, \vec{\nabla} h\right)|\,\vec{\mathbf{n}} + b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0\end{aligned} \tag{5.187}$$

Eliminando a parcela de segunda ordem $a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\, f\, \vec{\nabla} h\right)|\,\vec{\mathbf{n}}$ de (5.187)

$$\langle H\rangle + h + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)|\,\vec{\mathbf{n}} + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)|\,\vec{\mathbf{n}} + \\ + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}h\right)|\,\vec{\mathbf{n}} + b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \tag{5.188}$$

e calculando o valor esperado de (5.188) obtém-se a condição fronteira de Cauchy da equação diferencial do escoamento escrita para os valores esperados

$$\boxed{\langle H\rangle + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)|\,\vec{\mathbf{n}} + b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Cauchy}}\,,\ \forall t} \tag{5.189}$$

que subtraída a (5.188) dá lugar à expressão

$$h + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)|\,\vec{\mathbf{n}} + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}h\right)|\,\vec{\mathbf{n}} = 0 \tag{5.190}$$

cuja segunda parcela do primeiro membro pode ser rescrita como o produto da perturbação $f$ pela segunda parcela de (5.189), facto que dá lugar à condição fronteira de Cauchy da equação diferencial das perturbações com o seguinte aspecto

$$h + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}h\right)|\,\vec{\mathbf{n}} - f\langle H\rangle - f\,b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Cauchy}}\,,\ \forall t \tag{5.191}$$

### 5.5.3 Aquíferos não confinados. Equações diferenciais

Retome-se a equação diferencial que rege o escoamento em aquíferos regionais porosos não confinados (5.2) rescrita para uma conductividade hidráulica isotrópica ($\mathbf{K} = K\,\mathbf{I}$)

$$-\vec{\nabla}\,|\left[(H - Z_{\text{fundo}})\,K\,\vec{\nabla}H\right] + \omega_d\,\frac{\partial H}{\partial t} + Q_T + \frac{B+H}{A} = 0 \tag{5.192}$$

e para a extracção (ou recarga) superficial $Q_T$ definida pela soma apresentada na secção anterior

$$Q_T = Q + rP + \sum_{i=1}^{N_w} Q_{w,i}\delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \tag{5.142}$$

com a extracção (ou recarga) difusa igualmente desdobrada em $Q + rP$ de modo a distinguir e identificar a recarga superficial por infiltração da água da chuva como uma percentagem, *r*, do valor da precipitação, *P*. Tal como para os aquíferos confinados, a última parcela do primeiro membro (5.192) representa a extracção (ou recarga) superficial que pode ser definida como uma função linear do nível piezométrico (5.143). As condições iniciais e de fronteira são

$$H(\vec{\mathbf{x}},t) = H_0(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{para} \quad t = 0\,, \ \forall \vec{\mathbf{x}} \in \Omega \tag{5.144}$$

$$H(\vec{\mathbf{x}},t) = H_{\text{definido}}(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}}\,, \ \forall t \tag{5.145}$$

$$-\left[(H - Z_{\text{fundo}})\,K\,\vec{\nabla}H\right]\big|\,\vec{\mathbf{n}} = q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Neumann}}\,, \ \forall t \tag{5.193}$$

$$H + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[(H - Z_{\text{fundo}})\,K\,\vec{\nabla}H\right]\big|\,\vec{\mathbf{n}} + b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Cauchy}}\,, \ \forall t \tag{5.194}$$

Na equação diferencial (5.192), $K$ e $\omega_d$ são função das coordenadas espaciais e $H$ e $Q_T$ são também função da coordenada temporal. Também aqui se admite que o parâmetro *r* é constante. Tendo novamente em conta a vantagem em trabalhar com as transformadas logarítmicas dos parâmetros hidrogeológicos, introduzam-se as seguintes mudanças de variável

$$Y(\vec{\mathbf{x}}) = \ln K(\vec{\mathbf{x}}) \tag{5.195}$$

$$G(\vec{\mathbf{x}}) = \ln \omega_d(\vec{\mathbf{x}}) \tag{5.196}$$

na equação diferencial (5.192)

$$-\vec{\nabla}\cdot\left[(H-Z_{\text{fundo}})\,\mathrm{e}^{Y}\,\vec{\nabla}H\right]+\mathrm{e}^{G}\frac{\partial H}{\partial t}+Q_T+\frac{B}{A}+\frac{H}{A}=0 \tag{5.197}$$

Assumindo novamente que $Q_T$, $A$ e $B$ são funções determinísticas do espaço e do tempo e que $H$, $Y$ e $G$ são *f.a.*'s definidas pela soma do valor esperado com uma perturbação estacionária de média nula

$$H(\vec{\mathbf{x}},t)=\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle+h(\vec{\mathbf{x}},t)\quad\text{com}\quad\langle h(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle=0\,,\ \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega\ \text{ e }\ \forall t \tag{5.151}$$

$$Y(\vec{\mathbf{x}})=\langle Y(\vec{\mathbf{x}})\rangle+f(\vec{\mathbf{x}})\quad\text{com}\quad\langle f(\vec{\mathbf{x}})\rangle=0\,,\ \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega \tag{5.152}$$

$$G(\vec{\mathbf{x}})=\langle G(\vec{\mathbf{x}})\rangle+g(\vec{\mathbf{x}})\quad\text{com}\quad\langle g(\vec{\mathbf{x}})\rangle=0\,,\ \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega \tag{5.153}$$

a equação diferencial (5.197) toma, sucessivamente, os seguintes aspectos

$$-\vec{\nabla}\cdot\left[(\langle H\rangle+h-Z_{\text{fundo}})\,\mathrm{e}^{\langle Y\rangle+f}\,\vec{\nabla}(\langle H\rangle+h)\right]+\mathrm{e}^{\langle G\rangle+g}\frac{\partial(\langle H\rangle+h)}{\partial t}+$$
$$+Q_T+\frac{B}{A}+\frac{\langle H\rangle+h}{A}=0 \tag{5.198}$$

$$-\vec{\nabla}\cdot\left[(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}}+h)\,\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\mathrm{e}^{f}\,\vec{\nabla}(\langle H\rangle+h)\right]+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\mathrm{e}^{g}\frac{\partial(\langle H\rangle+h)}{\partial t}+$$
$$+Q_T+\frac{B}{A}+\frac{\langle H\rangle}{A}+\frac{h}{A}=0 \tag{5.199}$$

Admitindo que as perturbações são pequenas introduzem-se as aproximações (5.156) e (5.157) em (5.199)

$$-\vec{\nabla}\cdot\left[(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}} + h)\,e^{\langle Y\rangle}(1+f)\,\vec{\nabla}(\langle H\rangle + h)\right]+$$

$$+\,e^{\langle G\rangle}(1+g)\frac{\partial(\langle H\rangle + h)}{\partial t}+ \qquad (5.200)$$

$$+\,Q_T + \frac{B}{A} + \frac{\langle H\rangle}{A} + \frac{h}{A} = 0$$

Desenvolvendo esta equação e procedendo à reorganização das parcelas, obtém-se

$$-\vec{\nabla}\cdot\left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]-\vec{\nabla}\cdot\left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]-$$

$$-\vec{\nabla}\cdot\left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}h\right]-\vec{\nabla}\cdot\left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,f\,\vec{\nabla}h\right]-$$

$$-\vec{\nabla}\cdot\left(e^{\langle Y\rangle}\,h\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)-\vec{\nabla}\cdot\left(e^{\langle Y\rangle}\,h\vec{\nabla}h\right)-$$

$$-\vec{\nabla}\cdot\left(e^{\langle Y\rangle}\,h\,f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)-\vec{\nabla}\cdot\left(e^{\langle Y\rangle}\,h\,f\,\vec{\nabla}h\right)+ \qquad (5.201)$$

$$+\,e^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}+e^{\langle G\rangle}\frac{\partial h}{\partial t}+e^{\langle G\rangle}\,g\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}+e^{\langle G\rangle}\,g\frac{\partial h}{\partial t}+$$

$$+\,Q_T + \frac{B}{A} + \frac{\langle H\rangle}{A} + \frac{h}{A} = 0$$

Eliminando as parcelas de segunda ordem e calculando o valor esperado chega-se à equação diferencial do escoamento em aquíferos regionais porosos não confinados, escrita para os valores esperados das variáveis em jogo

$$\boxed{-\vec{\nabla}\cdot\left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]+e^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}+Q_T+\frac{B}{A}+\frac{\langle H\rangle}{A}=0} \qquad (5.202)$$

Subtraindo esta equação da anterior (5.201), já sem as parcelas de segunda ordem, obtém-se a equação diferencial que relaciona as perturbações do nível piezométrico e das transformadas logarítmicas da conductividade hidráulica e da porosidade

$$\frac{h}{A}-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,h\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)-\vec{\nabla}\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}h\right]+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial h}{\partial t}-$$

$$-\vec{\nabla}\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}})f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]+g\,\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}=0 \tag{5.203}$$

Com a finalidade de a configurar para a integração numérica é preciso desenvolver a quinta parcela do primeiro membro

$$-\vec{\nabla}\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}})f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]=-\vec{\nabla}\,|\left\{f\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]\right\}=$$

$$=-\vec{\nabla}f\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]- \tag{5.204}$$

$$-f\,\vec{\nabla}\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]$$

ou ainda

$$-\vec{\nabla}\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}})f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]=-\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}f\,|\,\vec{\nabla}\langle H\rangle-$$

$$-f\,\vec{\nabla}\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right] \tag{5.205}$$

Na segunda parcela do segundo membro, a perturbação $f$ multiplica a primeira parcela do primeiro membro de (5.202), o que permite rescrever (5.205)

$$-\vec{\nabla}\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}})f\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]=-\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}f\,|\,\vec{\nabla}\langle H\rangle-$$

$$-f\,\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}-f\,Q_T-f\frac{B}{A}-f\frac{\langle H\rangle}{A} \tag{5.206}$$

Finalmente, procedendo à substituição da quinta parcela do primeiro membro de (5.203) pelo segundo membro da igualdade (5.206) obtém-se a equação diferencial das perturbações na sua configuração final

$$\frac{h}{A}-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,h\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)-\vec{\nabla}\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}h\right]+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial h}{\partial t}-$$
$$-\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}f\,|\,\vec{\nabla}\langle H\rangle-f\,\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}+g\,\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}- \qquad (5.207)$$
$$-f\,Q_T-f\frac{B}{A}-f\frac{\langle H\rangle}{A}=0$$

A integração da equação diferencial do escoamento (5.202), escrita para os valores esperados das variáveis e dos parâmetros em jogo, e da equação diferencial das perturbações (5.207) exige a prévia definição das condições iniciais e de fronteira associadas[56]:

a) *Condições iniciais*: introduzindo na condição inicial (5.144) a definição de *f.a.* adoptada para $H$ (5.151) obtém-se a expressão

$$\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle+h(\vec{\mathbf{x}},t)=H_0(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{para} \quad t=0\,,\ \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega \qquad (5.170)$$

escrita para o nível piezométrico inicial $H_0(\vec{\mathbf{x}})$ determinístico. Calculando o valor esperado de (5.170) deduz-se a condição inicial da equação diferencial do escoamento escrita para os valores esperados

$$\boxed{\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle=H_0(\vec{\mathbf{x}}) \quad \text{para} \quad t=0\,,\ \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega} \qquad (5.171)$$

que subtraída a (5.170) dá lugar à condição inicial da equação diferencial das perturbações

$$h(\vec{\mathbf{x}},t)=0 \quad \text{para} \quad t=0\,,\ \forall\vec{\mathbf{x}}\in\Omega \qquad (5.172)$$

[56] As condições iniciais e de fronteira de Dirichlet são idênticas às dos aquíferos confinados. Em benefício da unidade da exposição são aqui repetidas.

b) *Condições fronteira de Dirichlet*: introduzindo na condição de Dirichlet (5.145) a definição de *f.a.* adoptada para $H$ (5.151) obtém-se a expressão

$$\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle + h(\vec{\mathbf{x}},t) = H_{\text{definido}}(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}} \,, \ \forall t \tag{5.173}$$

escrita para uma definição determinística do nível piezométrico em $\Gamma_{\text{Dirichlet}}$. Calculando o valor esperado de (5.173) deduz-se a condição fronteira de Dirichlet da equação diferencial do escoamento escrita para os valores esperados

$$\boxed{\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle = H_{\text{definido}}(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}} \,, \ \forall t} \tag{5.174}$$

que subtraída a (5.173) dá lugar à condição fronteira de Dirichlet da equação diferencial das perturbações

$$h(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Dirichlet}} \,, \ \forall t \tag{5.175}$$

c) *Condições fronteira de Neumann*: introduzindo na condição de Neumann (5.193) a mudança de variável $K = \mathrm{e}^{Y}$, a definição de *f.a.* adoptada para $H$ (5.151) e para $Y$ (5.152) e a aproximação (5.156) obtém-se, sucessivamente, e para um fluxo determinístico através da fronteira $q_n(\vec{\mathbf{x}},t)$

$$-\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle + f}\left(\langle H\rangle + h - Z_{\text{fundo}}\right)\vec{\nabla}\left(\langle H\rangle + h\right)\right] | \, \vec{\mathbf{n}} = q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \tag{5.208}$$

$$\begin{aligned} &-\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(1+f)\left(\langle H\rangle + h - Z_{\text{fundo}}\right)\vec{\nabla}\langle H\rangle\right] | \, \vec{\mathbf{n}} - \\ &-\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(1+f)\left(\langle H\rangle + h - Z_{\text{fundo}}\right)\vec{\nabla}h\right] | \, \vec{\mathbf{n}} = q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \end{aligned} \tag{5.209}$$

$$
\begin{aligned}
&-\left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\,\vec{\mathbf{n}} - \left[e^{\langle Y\rangle}\,h\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\,\vec{\mathbf{n}} - \\
&-\left[e^{\langle Y\rangle}\,f\,(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\,\vec{\mathbf{n}} - \left[e^{\langle Y\rangle}\,f\,h\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\,\vec{\mathbf{n}} - \\
&-\left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}h\right]|\,\vec{\mathbf{n}} - \left[e^{\langle Y\rangle}\,h\,\vec{\nabla}h\right]|\,\vec{\mathbf{n}} - \\
&-\left[e^{\langle Y\rangle}\,f\,(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}h\right]|\,\vec{\mathbf{n}} - \left[e^{\langle Y\rangle}\,f\,h\,\vec{\nabla}h\right]|\,\vec{\mathbf{n}} = q_n(\vec{\mathbf{x}},t)
\end{aligned}
\tag{5.210}
$$

Eliminando-se as parcelas de segunda ordem de (5.210)

$$
\begin{aligned}
&-\left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\,\vec{\mathbf{n}} - \left[e^{\langle Y\rangle}\,f\,(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\,\vec{\mathbf{n}} - \\
&-\left[e^{\langle Y\rangle}\,h\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\,\vec{\mathbf{n}} - \left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}h\right]|\,\vec{\mathbf{n}} = q_n(\vec{\mathbf{x}},t)
\end{aligned}
\tag{5.211}
$$

e calculando o valor esperado de (5.211) obtém-se a condição fronteira de Neumann da equação diferencial do escoamento escrita para os valores esperados

$$
\boxed{-\left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\,\vec{\mathbf{n}} = q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Neumann}}\ ,\ \forall t}
\tag{5.212}
$$

que subtraída a (5.211) dá lugar à expressão

$$
\begin{aligned}
&-\left[e^{\langle Y\rangle}\,h\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\,\vec{\mathbf{n}} - \left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}h\right]|\,\vec{\mathbf{n}} - \\
&-\left[e^{\langle Y\rangle}\,f\,(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\,\vec{\mathbf{n}} = 0
\end{aligned}
\tag{5.213}
$$

cuja terceira parcela do primeiro membro é igual ao produto da perturbação $f$ pelo primeiro membro de (5.212), facto que permite escrever a condição fronteira de Neumann da equação diferencial das perturbações com o seguinte aspecto

$$\left[e^{\langle Y\rangle}\, h\, \vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\, \vec{\mathbf{n}} + \left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}h\right]|\, \vec{\mathbf{n}} = f\, q_n(\vec{\mathbf{x}},t) \qquad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}} \in \Gamma_{\text{Neumann}}\ ,\ \forall t \tag{5.214}$$

d) *Condições fronteira de Cauchy*: introduzindo na condição de Cauchy (5.194) a mudança de variável $K = e^{Y}$, a definição de *f.a.* adoptada para $H$ (5.151) e para $Y$ (5.152) e a aproximação (5.156) obtém-se, sucessivamente, e para uma definição determinística dos parâmetros $a(\vec{\mathbf{x}},t)$ e $b(\vec{\mathbf{x}},t)$

$$\langle H\rangle + h + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[e^{\langle Y\rangle + f}(\langle H\rangle + h - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}(\langle H\rangle + h)\right]|\, \vec{\mathbf{n}} + b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \tag{5.215}$$

$$\begin{aligned} & a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[e^{\langle Y\rangle}(1+f)(\langle H\rangle + h - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\, \vec{\mathbf{n}} + \\ & + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[e^{\langle Y\rangle}(1+f)(\langle H\rangle + h - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}h\right]|\, \vec{\mathbf{n}} + \\ & + \langle H\rangle + h + b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \end{aligned} \tag{5.216}$$

$$\begin{aligned} & a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\, \vec{\mathbf{n}} + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[e^{\langle Y\rangle}\, h\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\, \vec{\mathbf{n}} + \\ & + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[e^{\langle Y\rangle}\, f\,(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\, \vec{\mathbf{n}} + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[e^{\langle Y\rangle}\, f\, h\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\, \vec{\mathbf{n}} + \\ & + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}h\right]|\, \vec{\mathbf{n}} + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[e^{\langle Y\rangle}\, h\,\vec{\nabla}h\right]|\, \vec{\mathbf{n}} + \\ & + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[e^{\langle Y\rangle}\, f\,(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\,\vec{\nabla}h\right]|\, \vec{\mathbf{n}} + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[e^{\langle Y\rangle}\, f\, h\,\vec{\nabla}h\right]|\, \vec{\mathbf{n}} + \\ & + \langle H\rangle + h + b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \end{aligned} \tag{5.217}$$

Eliminando as parcelas de segunda ordem de (5.217)

$$a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\vec{\mathbf{n}} +$$

$$+a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle} f\,(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\vec{\mathbf{n}} + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle} h\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\vec{\mathbf{n}} + \tag{5.218}$$

$$+a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}h\right]|\vec{\mathbf{n}} + \langle H\rangle + h + b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0$$

e calculando o valor esperado de (5.218) obtém-se a condição fronteira de Cauchy da equação diferencial do escoamento escrita para os valores esperados

$$\boxed{\langle H\rangle + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\vec{\mathbf{n}} + b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Cauchy}}\ ,\ \forall t} \tag{5.219}$$

que subtraída a (5.218) dá lugar à expressão

$$h + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle} f\,(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\vec{\mathbf{n}} +$$

$$+a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle} h\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\vec{\mathbf{n}} + +a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}h\right]|\vec{\mathbf{n}} = 0 \tag{5.220}$$

cuja segunda parcela do primeiro membro é igual ao produto da perturbação $f$ pelo segundo membro de (5.219), facto que permite escrever a condição fronteira de Cauchy da equação diferencial das perturbações com o seguinte aspecto

$$\boxed{h + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle} h\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\vec{\mathbf{n}} + a(\vec{\mathbf{x}},t)\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}h\right]|\vec{\mathbf{n}} - f\langle H\rangle - f\,b(\vec{\mathbf{x}},t) = 0 \quad \text{para} \quad \vec{\mathbf{x}}\in\Gamma_{\text{Cauchy}}\ ,\ \forall t} \tag{5.221}$$

### 5.5.4 Valor esperado e covariância do nível piezométrico

A simulação estocástica directa de um aquífero é caracterização probabilística da variável de estado do problema, a carga hidráulica ou nível piezométrico $H(\vec{\mathbf{x}},t)$, a partir do conhecimento prévio da descrição probabilística dos parâmetros do sistema, que representam as propriedades hidrogeológicas ($T$ ou $K$, $S$ ou $\omega_d$), e ou de algumas variáveis de controlo ($Q$, $rP$, $Q_{w,i}$, $q_n$ ou $a$ e $b$). Tal como já foi referido, neste trabalho as variáveis de controlo são consideradas determinísticas, sendo apenas tratada a incerteza associada à variabilidade natural das propriedades hidrogeológicas. Assim, a questão que aqui se coloca é a de caracterizar probabilisticamente $H(\vec{\mathbf{x}},t)$ sendo conhecida, ou estimada, a descrição probabilística da transmissividade e do coeficiente de armazenamento, no caso dos aquíferos confinados, ou da conductividade hidráulica e da porosidade drenável, no caso dos aquíferos não confinados. Face à dificuldade prática em quantificar a função de distribuição de probabilidade conjunta (*FDP*), ou a função de densidade de probabilidade conjunta (*fdp*), do nível piezométrico e dos parâmetros hidrogeológicos, a caracterização probabilística destas variáveis é geralmente realizada pelos dois primeiros momentos estatísticos, o valor esperado (ou média) e a covariância. Se for válida a hipótese, frequentemente admitida, de o comportamento das variáveis ser representado por *f.a.*'s multivariadas normais, então, estes dois primeiros momentos são suficientes para uma caracterização probabilística completa.

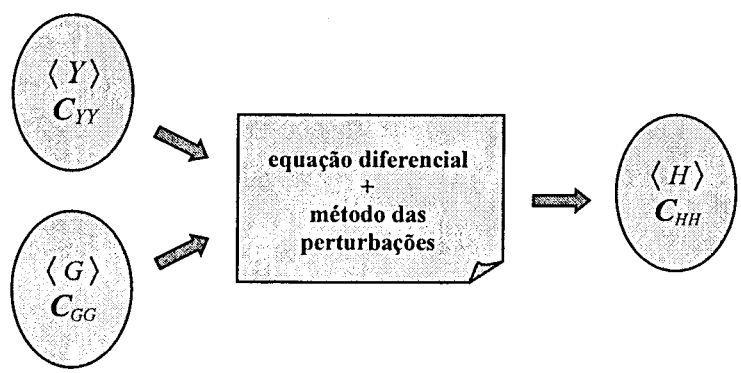



Figura 5.46 – Esquema da simulação estocástica directa, pelo método das perturbações.

Em termos mais concretos, o problema que aqui se estuda é o de calcular o valor esperado $\langle H(\vec{\mathbf{x}}_i,t_k)\rangle$ do nível piezométrico, para qualquer instante, $t_k$, e ponto do domínio, $\vec{\mathbf{x}}_i$, assim como a correspondente covariância $C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_i,t_k;\vec{\mathbf{x}}_j,t_l)$, para qualquer par de pontos e de instantes, a partir do conhecimento prévio do valor esperado e da covariância das

transformadas logarítmicas dos parâmetros hidrogeológicos, $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $G(\vec{\mathbf{x}})$, tendo em conta as leis físicas que regem os escoamentos nestes tipos de meios (Figura 5.46). Na prática, e porque se recorre à integração numérica das equações diferenciais, os referidos momentos são calculados para um conjunto discreto de pontos do domínio, os nós da malha de elementos finitos, e para os instantes temporais impostos pelo incremento ($\Delta t$) da integração em ordem ao tempo. Para a determinação desses momentos nos restantes pontos do domínio e instantes temporais deverão ser adoptados procedimentos de interpolação ou ponderação.

Se os momentos das transformadas logarítmicas das propriedades hidrogeológicas forem condicionados a valores medidos[57], o valor esperado e a covariância de $H(\vec{\mathbf{x}},t)$ são considerados condicionados. Caso contrário, dizem-se não condicionados. A formulação que a seguir se apresenta é indiferente ao condicionamento, ou à ausência deste, uma vez que esta classificação respeita exclusivamente à forma como os momentos estatísticos das transformadas dos parâmetros hidrogeológicos são determinados. A qualidade dos resultados finais produzidos, o valor esperado e a covariância de $H(\vec{\mathbf{x}},t)$, reflectem a qualidade da informação probabilística sobre $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $G(\vec{\mathbf{x}})$ introduzida no problema. Os valores esperados condicionados estimam melhor o comportamento de uma variável do que os não condicionados, facto que se reflecte na redução da correspondente variância. E a qualidade da estimação é apurada com o aumento da informação sobre $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $G(\vec{\mathbf{x}})$, como é o caso, por exemplo, do estabelecimento de correlações cruzadas com o nível piezométrico. Servem estas observações para sublinhar que a metodologia que a seguir se apresenta é sempre válida, independentemente do modo como são determinados os momentos estatísticos de $Y(\vec{\mathbf{x}})$ e $G(\vec{\mathbf{x}})$. Por este motivo, a simbologia respeitante aos valores esperados é omissa quanto seu condicionamento.

O valor esperado do nível piezométrico $\langle H(\vec{\mathbf{x}},t)\rangle$ resulta da integração numérica da equação diferencial do escoamento escrita para valores esperados. Para os aquíferos confinados utiliza-se a equação (5.163) e para os não confinados a (5.202). As respectivas condições iniciais e de fronteira são as definidas nas secções anteriores. Na próxima secção é

---

[57] A krigagem, apresentada no capítulo anterior, estima a distribuição espacial de uma *f.a.* e avalia os erros dessa estimação através da respectiva matriz de covariância. Tal como então se demonstrou, para uma *f.a.* multivariada normal o valor estimado pela krigagem e a matriz de covariância dos erros de estimação correspondem exactamente ao valor esperado e à covariância condicionados da *f.a.*.

desenvolvida, para estas equações diferenciais, a formulação de resíduos pesados que suporta a aplicação do MEF à resolução numérica destas equações.

A covariância entre o nível piezométrico nos ponto $\vec{\mathbf{x}}_i$ (no instante $t_k$) e $\vec{\mathbf{x}}_j$ (no instante $t_l$) define-se da forma habitual

$$\begin{aligned} C_{HH}(\vec{\mathbf{x}}_i,t_k;\vec{\mathbf{x}}_j,t_l) &= E\left[\left(H(\vec{\mathbf{x}}_i,t_k)-\langle H(\vec{\mathbf{x}}_i,t_k)\rangle\right)\left(H(\vec{\mathbf{x}}_j,t_l)-\langle H(\vec{\mathbf{x}}_j,t_l)\rangle\right)\right]= \\ &= E\left[h(\vec{\mathbf{x}}_i,t_k)\,h(\vec{\mathbf{x}}_j,t_l)\right]= \\ &= C_{hh}(\vec{\mathbf{x}}_i,t_k;\vec{\mathbf{x}}_j,t_l) \quad , \quad \forall \vec{\mathbf{x}}_i,\vec{\mathbf{x}}_j \in \Omega \text{ e } \forall t_k,t_l \end{aligned} \tag{5.92}$$

e coincide com a covariância da perturbação do nível piezométrico $h(\vec{\mathbf{x}},t)$. A já referida discretização dos domínios espacial e temporal conduz à formação de uma matriz de covariância entre os valores de $H$ nos nós da malha de elementos finitos e nos instantes determinados pelo passo da integração numérica em ordem ao tempo

$$\mathbf{C}_{HH} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{H_1H_1} & \mathbf{C}_{H_1H_2} & & \mathbf{C}_{H_1H_n} \\ \mathbf{C}_{H_2H_1} & \mathbf{C}_{H_2H_2} & & \mathbf{C}_{H_2H_n} \\ & & & \\ \mathbf{C}_{H_nH_1} & \mathbf{C}_{H_nH_2} & & \mathbf{C}_{H_nH_n} \end{bmatrix} \tag{5.222}$$

Esta matriz, $\mathbf{C}_{HH}$, pode ser dividida em sub-matrizes, $\mathbf{C}_{H_kH_l}$, que quantificam a covariância entre os valores de $H$ nos nós da malha, para os instantes genéricos $t_k$ e $t_l$, e que são o valor esperado do produto dos vectores das perturbações, nos nós da malha, em $t_k$ e $t_l$

$$\mathbf{C}_{H_kH_l} = \langle \mathbf{h}_k \cdot \mathbf{h}_l^T \rangle \equiv E\left[\mathbf{h}_k \cdot \mathbf{h}_l^T\right] \tag{5.223}$$

Atendendo à definição (5.223), são matrizes com o número de linhas e colunas igual ao número de nós da malha, $N_N$. Admita-se que o vector das perturbações de $H$, num instante qualquer $t_k$, pode ser expresso em função dos vectores das perturbações de $Y$ e $G$

$$\mathbf{h}_k = \mathbf{A}_k \cdot \mathbf{f} + \mathbf{B}_k \cdot \mathbf{g} \quad \text{para} \quad t_1, t_2, ..., t_k, ..., t_n \tag{5.224}$$

sendo **f** o vector das perturbações de $Y$ e **g** o vector das perturbações de $G$. Introduzindo esta expressão em (5.223) obtém-se sucessivamente

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{H_k H_l} &= \langle \mathbf{h}_k \cdot \mathbf{h}_l^T \rangle = \langle (\mathbf{A}_k \cdot \mathbf{f} + \mathbf{B}_k \cdot \mathbf{g}) \cdot (\mathbf{A}_l \cdot \mathbf{f} + \mathbf{B}_l \cdot \mathbf{g})^T \rangle = \\ &= \langle \mathbf{A}_k \cdot \mathbf{f} \cdot (\mathbf{A}_l \cdot \mathbf{f})^T \rangle + \langle \mathbf{A}_k \cdot \mathbf{f} \cdot (\mathbf{B}_l \cdot \mathbf{g})^T \rangle + \\ &+ \langle \mathbf{B}_k \cdot \mathbf{g} \cdot (\mathbf{A}_l \cdot \mathbf{f})^T \rangle + \langle \mathbf{B}_k \cdot \mathbf{g} \cdot (\mathbf{B}_l \cdot \mathbf{g})^T \rangle \end{aligned} \tag{5.225}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{H_k H_l} &= \mathbf{A}_k \cdot \langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{f}^T \rangle \cdot \mathbf{A}_l^T + \mathbf{A}_k \cdot \langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{g}^T \rangle \cdot \mathbf{B}_l^T + \\ &+ \mathbf{B}_k \cdot \langle \mathbf{g} \cdot \mathbf{f}^T \rangle \cdot \mathbf{A}_l^T + \mathbf{B}_k \cdot \langle \mathbf{g} \cdot \mathbf{g}^T \rangle \cdot \mathbf{B}_l^T \end{aligned} \tag{5.226}$$

Analogamente a $H$, as matrizes de covariância de $Y$ e de $G$ e de covariância cruzada entre estas *f.a.*'s são definidas por

$$\mathbf{C}_{YY} = \langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{f}^T \rangle \tag{5.227}$$

$$\mathbf{C}_{GG} = \langle \mathbf{g} \cdot \mathbf{g}^T \rangle \tag{5.228}$$

$$\mathbf{C}_{YG} = \langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{g}^T \rangle \quad \text{e} \quad \mathbf{C}_{GY} = \langle \mathbf{g} \cdot \mathbf{f}^T \rangle \tag{5.229}$$

Introduzindo estas definições em (5.226) obtém-se

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{H_k H_l} &= \mathbf{A}_k \cdot \mathbf{C}_{YY} \cdot \mathbf{A}_l^T + \mathbf{A}_k \cdot \mathbf{C}_{YG} \cdot \mathbf{B}_l^T + \\ &+ \mathbf{B}_k \cdot \mathbf{C}_{GY} \cdot \mathbf{A}_l^T + \mathbf{B}_k \cdot \mathbf{C}_{GG} \cdot \mathbf{B}_l^T \end{aligned} \tag{5.230}$$

$$\text{para} \quad t_1, t_2, ..., t_k, ..., t_n$$

Admitindo que as *f.a.*'s $Y$ e $G$ são independentes[58], isto é, não correlacionadas, as matrizes de covariância cruzada são nulas, ficando (5.230) com um aspecto mais simples

$$\mathbf{C}_{H_k H_l} = \mathbf{A}_k \cdot \mathbf{C}_{YY} \cdot \mathbf{A}_l^T + \mathbf{B}_k \cdot \mathbf{C}_{GG} \cdot \mathbf{B}_l^T$$
$$\text{para} \quad t_1, t_2, ..., t_k, ..., t_n \tag{5.231}$$

Uma vez estabelecida a relação matricial entre as covariâncias das transformadas logarítmicas das propriedades hidrogeológicas e do nível piezométrico, retome-se a expressão (5.224) que a sustenta com a finalidade de analisar o significado das matrizes $\mathbf{A}_k$ e $\mathbf{B}_l$ e estudar o modo de as calcular. Considere-se, por exemplo, o produto da matriz $\mathbf{A}_k$ pelo vector das perturbações $\mathbf{f}$ com todos os elementos nulos excepto o de ordem $i$

$$\begin{Bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ . \\ . \\ . \\ h_{N_N} \end{Bmatrix}_k = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & . & A_{1,i} & . & A_{1,N_N} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & . & A_{2,i} & . & A_{2,N_N} \\ . & . & & . & & . \\ . & . & & . & & . \\ . & . & & . & & . \\ A_{N_N,1} & A_{N_N,2} & . & A_{N_N,i} & . & A_{N_N,N_N} \end{bmatrix}_k \times \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ . \\ 1 \\ . \\ 0 \end{Bmatrix} \tag{5.232}$$

Nestas condições, o vector $\mathbf{h}_k$ é igual à coluna de ordem $i$ da matriz $\mathbf{A}_k$

$$\begin{cases} h_1 = 0+0+...+A_{1,i}+0+... \\ h_2 = 0+0+...+A_{2,i}+0+... \\ \\ h_{N_N} = 0+0+...+A_{N_N,i}+0+... \end{cases}_k \tag{5.233}$$

Por outras palavras, a coluna de ordem $i$ da matriz $\mathbf{A}_k$ é o vector das perturbações do nível piezométrico nos nós da malha produzido por uma perturbação unitária de $Y$ no nó de ordem $i$. Analogamente, a coluna de ordem $j$ da matriz $\mathbf{B}_k$ é o vector das perturbações de $H$ gerado por uma perturbação unitária de $G$ no nó $j$ da malha.

---

[58] Como se verá no capítulo próprio, esta hipótese é admitida na formulação do problema inverso.

Face ao exposto, a determinação da coluna $i$ das matrizes $\mathbf{A}_k$ nos sucessivos instantes, $(t_1, t_2, ..., t_k, ...)$, exige a resolução da equação diferencial das perturbações para $f = 1$ no nó $i$ e $f = 0$ nos restantes nós, enquanto que a perturbação $g$ é nula em todos os nós. Para a determinação das matrizes $\mathbf{B}_k$, procede-se de modo idêntico, isto é, a coluna $j$ é a solução da equação diferencial das perturbações para $g = 1$ no nó $j$ e $g = 0$ nos restantes nós, com $f$ nula em todo o domínio. Com esta metodologia, a equação diferencial das perturbações dá lugar a duas: uma, para determinar $\mathbf{A}_k$, sem as parcelas com a perturbação $g$, e outra, para calcular $\mathbf{B}_k$, sem as parcelas com $f$. Estas novas equações diferenciais, as respectivas condições iniciais e de fronteira e a sua integração numérica constituem matérias a ser tratadas com detalhe em secções específicas.

### 5.5.5 Integração numérica da equação diferencial dos valores esperados

Com o objectivo de elaborar um programa de cálculo automático que trate os dois tipos de aquíferos procedeu-se a uma abordagem conjunta das duas equações diferenciais do escoamento, escritas para os valores esperados. Transcrevendo para aqui as referidas equações observa-se que o que as distingue, do ponto de vista da elaboração de um modelo numérico,

$$\boxed{-\vec{\nabla} \cdot \left( \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) + \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} + Q_T + \frac{B}{A} + \frac{\langle H \rangle}{A} = 0} \qquad (5.163)$$

Aquíferos confinados

$$\boxed{-\vec{\nabla} \cdot \left[ \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \left( \langle H \rangle - Z_{\text{fundo}} \right) \vec{\nabla} \langle H \rangle \right] + \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} + Q_T + \frac{B}{A} + \frac{\langle H \rangle}{A} = 0} \qquad (5.202)$$

Aquíferos não confinados

é o factor $\langle D \rangle = \langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}$ presente na segunda[59]. Acresce ainda que este factor é função de $H$, isto é, da solução do problema. Este facto, que já foi salientado no segundo capítulo, torna (5.202) numa equação diferencial não linear e exige que o programa de cálculo realize o procedimento iterativo, para cada incremento da integração em ordem ao tempo, descrito na

[59] Naturalmente que $Y$ e $G$ têm significados diferentes. Mas para a elaboração do modelo numérico isso não é relevante. Os dados que alimentarão o modelo é que terão de estar de acordo com o tipo de aquífero simulado.

secção 3.4.4 do terceiro capítulo. Quando se tratar de um aquífero confinado, o modelo numérico assume $\langle D \rangle = 1$ e efectua a integração em ordem ao tempo sem os procedimentos iterativos. Analogamente, nas condições fronteira de Neumann e Cauchy, o programa deve assumir $\langle D \rangle = 1$ quando simular um aquífero confinado.

Tendo presentes estas observações gerais, estão reunidas as condições para deduzir as equações algébricas que materializam a aplicação do método dos elementos finitos à integração numérica da equação diferencial do escoamento médio com base na equação diferencial, e respectivas condições iniciais e de fronteira, dos aquíferos não confinados. Aplicando a formulação fraca de resíduos pesados apresentada no terceiro capítulo, $H$ é aproximado por uma combinação linear de funções de aproximação construídas com as funções de interpolação, ou de forma, dos elementos finitos

$$H \approx \sum_{j=1}^{N_N} H_j N_j \tag{5.234}$$

Tal como então se explicou, ao introduzir a aproximação (5.234) na equação diferencial, esta passa a representar o resíduo, cujo integral estendido ao domínio e pesado de diferentes modos[60] se pretende anular

$$\int_\Omega N_i \, R_\Omega \, d\Omega = 0 \quad , \quad i = 1, \ldots, N_N \tag{5.235}$$

$$\int_\Omega N_i \left\{ -\vec{\nabla} \cdot \left[ \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \left( \langle H \rangle - Z_{\text{fundo}} \right) \vec{\nabla} \langle H \rangle \right] + \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} + Q_T + \frac{B}{A} + \frac{\langle H \rangle}{A} \right\} d\Omega = 0 \tag{5.236}$$

$$i = 1, \ldots, N_N$$

Decompondo o integral (5.236) nas suas parcelas

[60] Recorrendo à abordagem de Bubnov-Galerkin, as funções de aproximação são usadas como funções de peso.

$$-\int_\Omega N_i\,\vec{\nabla}\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]d\Omega+\int_\Omega N_i\,\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}d\Omega+\int_\Omega N_i\,Q_T\,d\Omega+$$

$$+\int_\Omega N_i\frac{B}{A}d\Omega+\int_\Omega N_i\frac{\langle H\rangle}{A}d\Omega=0\quad,\quad i=1,\ldots,N_N \tag{5.237}$$

e aplicando o primeiro teorema de Green[61] à primeira parcela de (5.237) obtém-se

$$-\int_\Omega N_i\,\vec{\nabla}\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]d\Omega=\int_\Omega \vec{\nabla}N_i\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]d\Omega-$$

$$-\int_\Gamma N_i\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\,\vec{\mathbf{n}}\,d\Gamma \tag{5.238}$$

Uma vez que a formulação fraca se apoia no facto de a aproximação (5.234) ser exacta no trecho de fronteira de Dirichlet, o integral de contorno em (5.238) respeita apenas aos trechos com condição de Neumann e Cauchy

$$-\int_\Omega N_i\,\vec{\nabla}\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]d\Omega=\int_\Omega \vec{\nabla}N_i\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]d\Omega-$$

$$-\int_{\Gamma_N} N_i\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\,\vec{\mathbf{n}}\,d\Gamma-$$

$$-\int_{\Gamma_C} N_i\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]|\,\vec{\mathbf{n}}\,d\Gamma \tag{5.239}$$

Introduzindo nos integrais de contorno desta igualdade as condições fronteira de Neumann (5.212) e de Cauchy (5.219) e reorganizando a primeira parcela do segundo membro de (5.239), esta igualdade fica

$$-\int_\Omega N_i\,\vec{\nabla}\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}\langle H\rangle\right]d\Omega=\int_\Omega \mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}N_i\,|\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\,d\Omega+$$

$$+\int_{\Gamma_N} N_i\,q_n\,d\Gamma+\int_{\Gamma_C} N_i\left(\frac{b}{a}+\frac{\langle H\rangle}{a}\right)d\Gamma \tag{5.240}$$

---

[61] $\int_\Omega \alpha\,\vec{\nabla}\,|\,\vec{\mathbf{F}}\,d\Omega=-\int_\Omega \vec{\nabla}\alpha\,|\,\vec{\mathbf{F}}\,d\Omega+\int_\Gamma \alpha\,\vec{\mathbf{F}}\,|\,\vec{\mathbf{n}}\,d\Gamma$

Desdobrando em duas parcelas o integral na fronteira de Cauchy presente no segundo membro da igualdade (5.240) e introduzindo a expressão assim obtida no integral do resíduo pesado (5.237), este fica

$$\begin{aligned}&\int_\Omega \mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\left(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}}\right)\vec{\nabla}N_i \mid \vec{\nabla}\langle H\rangle\, d\Omega + \int_\Omega N_i\, \mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}\, d\Omega + \\ &+ \int_\Omega N_i\, Q_T\, d\Omega + \int_\Omega N_i \frac{B}{A}\, d\Omega + \int_\Omega N_i \frac{\langle H\rangle}{A}\, d\Omega + \int_{\Gamma_N} N_i\, q_n\, d\Gamma + \\ &+ \int_{\Gamma_C} N_i \frac{b}{a}\, d\Gamma + \int_{\Gamma_C} N_i \frac{\langle H\rangle}{a}\, d\Gamma = 0 \quad , \quad i = 1,\ldots,N_N\end{aligned} \tag{5.241}$$

Substituindo $Q_T$ pela respectiva definição (5.142) e admitindo que a extracção (ou recarga) superficial, função linear do nível piezométrico, pode ser difusa ou pontual[62], isto é,

$$\frac{B(\vec{\mathbf{x}},t)}{A(\vec{\mathbf{x}},t)} + \frac{H(\vec{\mathbf{x}},t)}{A(\vec{\mathbf{x}},t)} + \sum_{m=1}^{M_w} \frac{B_{w,m}(t)}{A_{w,m}(t)}\delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) + \sum_{m=1}^{M_w} \frac{H_m(t)}{A_{w,m}(t)}\delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \tag{5.242}$$

o integral do resíduo pesado, de $N_N$ diferentes modos, vem finalmente

$$\begin{aligned}&\int_\Omega N_i \frac{\langle H\rangle}{A}\, d\Omega + \int_\Omega N_i \left(\sum_{m=1}^{M_w} \frac{\langle H_m\rangle}{A_{w,m}}\delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m)\right) d\Omega + \int_{\Gamma_C} N_i \frac{\langle H\rangle}{a}\, d\Gamma + \\ &+ \int_\Omega \mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\left(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}}\right)\vec{\nabla}N_i \mid \vec{\nabla}\langle H\rangle\, d\Omega + \int_\Omega N_i\, \mathrm{e}^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}\, d\Omega + \int_\Omega N_i\, Q\, d\Omega + \\ &+ \int_\Omega N_i\, rP\, d\Omega + \int_\Omega N_i \frac{B}{A}\, d\Omega + \int_\Omega N_i \left(\sum_{n=1}^{N_w} Q_{w,n}\delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_n)\right) d\Omega + \\ &+ \int_\Omega N_i \left(\sum_{m=1}^{M_w} \frac{B_{w,m}}{A_{w,m}}\delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m)\right) d\Omega + \int_{\Gamma_N} N_i\, q_n\, d\Gamma + \int_{\Gamma_C} N_i \frac{b}{a}\, d\Gamma = 0 \quad , \quad i = 1,\ldots,N_N\end{aligned} \tag{5.243}$$

[62] $M_w$ é o número de diferentes pontos do domínio onde existe uma relação linear entre o caudal extraído e o nível piezométrico.

Introduzindo a aproximação (5.234) e procedendo aos arranjos adequados chega-se à seguinte equação diferencial matricial

$$\mathbf{T}\cdot\langle\mathbf{H}\rangle+\mathbf{S}\cdot\frac{\partial\langle\mathbf{H}\rangle}{\partial t}=\mathbf{q} \tag{5.244}$$

onde $\langle\mathbf{H}\rangle$ e $\partial\langle\mathbf{H}\rangle/\partial t$ representam, respectivamente, o vector e a derivada em ordem ao tempo do vector do nível piezométrico esperado nos $N_N$ nós da malha de elementos finitos. As matrizes **T** e **S** e o vector **q** resultam da resolução numérica dos diversos integrais que constituem (5.243) com os procedimentos próprios do MEF e que a seguir se apresentam com maior detalhe.

» 1ª parcela da equação (5.243):

$$\int_\Omega N_i\frac{\langle H\rangle}{A}d\Omega=\int_\Omega N_i\frac{1}{A}\left(\sum_{j=1}^{N_N}\langle H_j\rangle N_j\right)d\Omega=\sum_{j=1}^{N_N}\langle H_j\rangle\int_\Omega\frac{1}{A}N_iN_j\,d\Omega=$$

$$=\sum_{j=1}^{N_N}\langle H_j\rangle T_{i,j}^{(1)}\quad,\quad i=1,\ldots,N_N \tag{5.245}$$

com $T_{i,j}^{(1)}$ definido por

$$T_{i,j}^{(1)}=\int_\Omega\frac{1}{A}N_iN_j\,d\Omega\quad,\quad\forall i,j=1,\ldots,N_N \tag{5.246}$$

» 2ª parcela da equação (5.243):

$$\int_\Omega N_i \left( \sum_{m=1}^{M_w} \frac{\langle H_m \rangle}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \right) d\Omega = \int_\Omega N_i \left[ \sum_{m=1}^{M_w} \frac{1}{A_{w,m}} \left( \sum_{j=1}^{N_N} \langle H_j \rangle N_j(\vec{\mathbf{x}}_m) \right) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \right] d\Omega =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} \langle H_j \rangle \int_\Omega N_i \left( \sum_{m=1}^{M_w} \frac{N_j(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \right) d\Omega = \sum_{j=1}^{N_N} \langle H_j \rangle \left( \sum_{m=1}^{M_w} \frac{N_i(\vec{\mathbf{x}}_m) N_j(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_w(\vec{\mathbf{x}}_m)} \right) = \tag{5.247}$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} \langle H_j \rangle T_{i,j}^{(2)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N$$

com $T_{i,j}^{(2)}$ definido por

$$T_{i,j}^{(2)} = \sum_{m=1}^{M_w} \frac{N_i(\vec{\mathbf{x}}_m) N_j(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_w(\vec{\mathbf{x}}_m)} \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \tag{5.248}$$

» 3ª parcela da equação (5.243):

$$\int_{\Gamma_c} N_i \frac{\langle H \rangle}{a} d\Gamma = \int_{\Gamma_c} N_i \frac{1}{a} \left( \sum_{j=1}^{N_N} \langle H_j \rangle N_j \right) d\Gamma = \sum_{j=1}^{N_N} \langle H_j \rangle \int_{\Gamma_c} \frac{1}{a} N_i N_j \, d\Gamma =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} \langle H_j \rangle T_{i,j}^{(3)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.249}$$

com $T_{i,j}^{(3)}$ definido por

$$T_{i,j}^{(3)} = \int_{\Gamma_c} \frac{1}{a} N_i N_j \, d\Gamma \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \tag{5.250}$$

» 4ª parcela da equação (5.243):

$$\int_\Omega e^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla}N_i \mid \vec{\nabla}\langle H\rangle\, d\Omega = \int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\langle D\rangle\,\vec{\nabla}N_i \mid \vec{\nabla}\langle H\rangle\, d\Omega =$$

$$= \int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\langle D\rangle\,\vec{\nabla}N_i \mid \vec{\nabla}\left(\sum_{j=1}^{N_N}\langle H_j\rangle N_j\right)d\Omega = \sum_{j=1}^{N_N}\langle H_j\rangle\int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\langle D\rangle\,\vec{\nabla}N_i \mid \vec{\nabla}N_j\, d\Omega = \tag{5.251}$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N}\langle H_j\rangle T_{i,j}^{(4)} \quad , \quad i = 1,\ldots,N_N$$

com $\langle D\rangle = \langle H\rangle - Z_{\text{fundo}}$ e $T_{i,j}^{(4)}$ definido por

$$T_{i,j}^{(4)} = \int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\langle D\rangle\,\vec{\nabla}N_i \mid \vec{\nabla}N_j\, d\Omega = \int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\langle D\rangle\left(\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y}\right)d\Omega \tag{5.252}$$

$$\forall i, j = 1,\ldots,N_N$$

» 5ª parcela da equação (5.243):

$$\int_\Omega N_i\, e^{\langle G\rangle}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}\,d\Omega = \int_\Omega N_i\, e^{\langle G\rangle}\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{j=1}^{N_N}\langle H_j\rangle N_j\right)d\Omega =$$

$$= \int_\Omega N_i\, e^{\langle G\rangle}\left(\sum_{j=1}^{N_N}\frac{\partial\langle H_j\rangle}{\partial t}N_j\right)d\Omega = \sum_{j=1}^{N_N}\frac{\partial\langle H_j\rangle}{\partial t}\int_\Omega e^{\langle G\rangle}\, N_i N_j\, d\Omega = \tag{5.253}$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N}\frac{\partial\langle H_j\rangle}{\partial t}S_{i,j} \quad , \quad i = 1,\ldots,N_N$$

com $S_{i,j}$ definido por

$$S_{i,j} = \int_\Omega e^{\langle G\rangle}\, N_i N_j\, d\Omega \quad , \quad \forall i, j = 1,\ldots,N_N \tag{5.254}$$

» 6ª parcela da equação (5.243):

$$\int_{\Omega} N_i \, Q \, d\Omega = -q_i^{(1)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.255}$$

» 7ª parcela da equação (5.243):

$$\int_{\Omega} N_i \, r \, P \, d\Omega = -q_i^{(2)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.256}$$

» 8ª parcela da equação (5.243):

$$\int_{\Omega} N_i \frac{B}{A} d\Omega = -q_i^{(3)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.257}$$

» 9ª parcela da equação (5.243):

$$\int_{\Omega} N_i \left( \sum_{n=1}^{N_w} Q_{w,n} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_n) \right) d\Omega =$$

$$= \sum_{n=1}^{N_w} N_i(\vec{\mathbf{x}}_n) \, Q_w(\vec{\mathbf{x}}_n) = -q_i^{(4)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.258}$$

» 10ª parcela da equação (5.243):

$$\int_{\Omega} N_i \left( \sum_{m=1}^{M_w} \frac{B_{w,m}}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \right) d\Omega =$$

$$= \sum_{m=1}^{M_w} N_i(\vec{\mathbf{x}}_m) \frac{B_w(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_w(\vec{\mathbf{x}}_m)} = -q_i^{(5)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.259}$$

» 11ª parcela da equação (5.243):

$$\int_{\Gamma_N} N_i \, q_n \, d\Gamma = -q_i^{(6)} \quad , \quad i = 1,...,N_N \tag{5.260}$$

» 12ª parcela da equação (5.243):

$$\int_{\Gamma_C} N_i \frac{b}{a} d\Gamma = -q_i^{(7)} \quad , \quad i = 1,...,N_N \tag{5.261}$$

Rescrevendo (5.243) à custa destes desenvolvimentos para as suas parcelas, obtém-se

$$\begin{aligned} &\sum_{j=1}^{N_N} \langle H_j \rangle \left( T_{i,j}^{(1)} + T_{i,j}^{(2)} + T_{i,j}^{(3)} + T_{i,j}^{(4)} \right) + \sum_{j=1}^{N_N} \frac{\partial \langle H_j \rangle}{\partial t} S_{i,j} = \\ &= q_i^{(1)} + q_i^{(2)} + q_i^{(3)} + q_i^{(4)} + q_i^{(5)} + q_i^{(6)} + q_i^{(7)} \quad , \quad i = 1,...,N_N \end{aligned} \tag{5.262}$$

cuja forma matricial compacta já foi apresentada (5.244).

Para a quantificação dos elementos das matrizes **T** e **S** e do vector **q** é necessário efectuar o cálculo dos diversos integrais acima definidos. A titulo exemplificativo são aqui apresentados os procedimentos fundamentais para a resolução numérica de $T_{i,j}^{(4)}$, $S_{i,j}$ e $q_i^{(6)}$, sendo os restantes integrais resolvidos de modo análogo.

Assim, atendendo a que um integral estendido a um determinado domínio é igual à soma dos integrais referentes aos sub-domínios em que é possível dividir o domínio total, pode-se escrever

$$T_{i,j}^{(4)} = \int_{\Omega} e^{\langle Y \rangle} \langle D \rangle \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) d\Omega =$$

$$= \sum_{el=1}^{N_E} \int_{\Omega_{el}} e^{\langle Y \rangle} \langle D \rangle \left( \frac{\partial N_i^{el}}{\partial x} \frac{\partial N_j^{el}}{\partial x} + \frac{\partial N_i^{el}}{\partial y} \frac{\partial N_j^{el}}{\partial y} \right) d\Omega = \tag{5.263}$$

$$= \sum_{el=1}^{N_E} T_{i,j}^{(4),el} \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N$$

$$S_{i,j} = \int_{\Omega} e^{\langle G \rangle} N_i N_j \, d\Omega = \sum_{el=1}^{N_E} \int_{\Omega_{el}} e^{\langle G \rangle} N_i^{el} N_j^{el} \, d\Omega =$$

$$= \sum_{el=1}^{N_E} S_{i,j}^{el} \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \tag{5.264}$$

$$q_i^{(6)} = -\int_{\Gamma_N} N_i \, q_n \, d\Gamma = \sum_{el=1}^{N_E} \left( - \int_{\Gamma_{N,el}^{frt}} N_i^{el} \, q_n \, d\Gamma \right) =$$

$$= \sum_{el=1}^{N_E} q_i^{(6),el} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.265}$$

Os integrais estendidos ao domínio, Ω, ou à fronteira, Γ, resultam das contribuições dos $N_E$ elementos da malha. Deste modo, as integrações são realizadas nos elementos finitos e as funções de aproximação utilizadas são as locais, isto é, as funções de interpolação, ou de forma, dos elementos finitos. Relativamente a (5.265) importa referir que o integral de contorno só é efectuado para os lados dos elementos que coincidam com um trecho de fronteira do domínio do problema.

O elemento finito utilizado para a elaboração dos programas de cálculo foi o isoparamétrico de 8 nós (Figura 5.47)[63], cujas funções de interpolação em coordenadas locais $(\varepsilon, \eta)$ são

[63] É um elemento quadrático, conhecido na literatura especializada pela designação de Serendipity.

$$N_1^{el} = (1-\varepsilon)(1-\eta)(-1-\varepsilon-\eta)/4 \tag{5.266}$$

$$N_2^{el} = (1-\varepsilon^2)(1-\eta)/2 \tag{5.267}$$

$$N_3^{el} = (1+\varepsilon)(1-\eta)(-1+\varepsilon-\eta)/4 \tag{5.268}$$

$$N_4^{el} = (1+\varepsilon)(1-\eta^2)/2 \tag{5.269}$$

$$N_5^{el} = (1+\varepsilon)(1+\eta)(-1+\varepsilon+\eta)/4 \tag{5.270}$$

$$N_6^{el} = (1-\varepsilon^2)(1+\eta)/2 \tag{5.271}$$

$$N_7^{el} = (1-\varepsilon)(1+\eta)(-1-\varepsilon+\eta)/4 \tag{5.272}$$

$$N_8^{el} = (1-\varepsilon)(1-\eta^2)/2 \tag{5.273}$$

com $\varepsilon$ e $\eta$ compreendidas no intervalo [−1,+1].

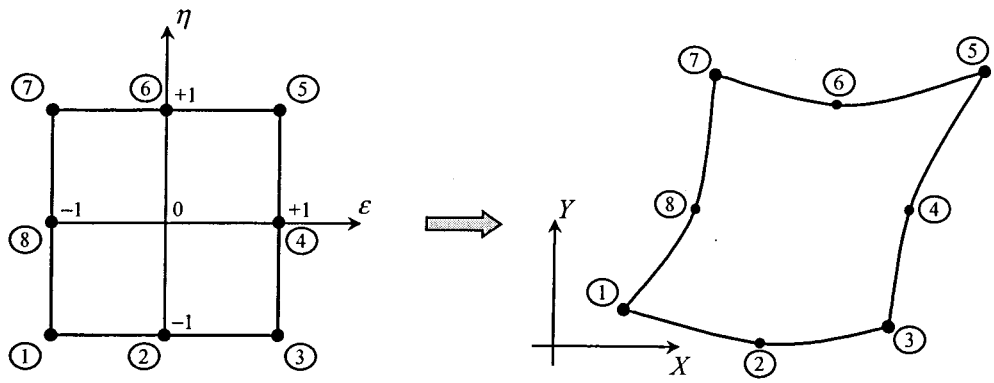



Figura 5.47 – Elemento finito isoparamétrico de 8 nós, em coordenadas locais e globais.

Este elemento, rectangular em coordenadas locais, pode gerar um elemento de fronteiras curvas (quadráticas) no sistema de coordenadas globais $(x, y)$. A transformação de coordenadas é definida por

$$x(\varepsilon,\eta) = \sum_{j=1}^{N_{ELM}} x_j N_j^{el}(\varepsilon,\eta) \tag{5.274}$$

$$y(\varepsilon,\eta) = \sum_{j=1}^{N_{ELM}} y_j N_j^{el}(\varepsilon,\eta) \tag{5.275}$$

sendo o número de nós por elemento, $N_{ELM}$, igual a 8 e $(x_j, y_j)$ as coordenadas globais dos nós do elemento finito. A aproximação de $H$ (ou de outra variável qualquer) é realizada por

$$H[x(\varepsilon,\eta), y(\varepsilon,\eta)] = \sum_{j=1}^{N_{ELM}} H(x_j, y_j) N_j^{el}(\varepsilon,\eta) \tag{5.276}$$

sendo $H(x_j, y_j)$ o valor do nível piezométrico no nó local $j$ do elemento finito, o qual tem a designação de isoparamétrico porque as funções utilizadas nesta aproximação (5.276) são as mesmas da transformação de coordenadas, (5.274) e (5.275). Este modo de gerar os elementos finitos é particularmente vantajoso para o processamento das integrações numéricas pelo método de Gauss, que se introduz de seguida.

Considere-se o integral de uma qualquer função $F(\varepsilon,\eta)$ estendido a um domínio bidimensional

$$I = \int_\Omega F(\varepsilon,\eta)\, d\Omega \quad \text{e} \quad d\Omega = d\varepsilon\, d\eta \tag{5.277}$$

Se os limites de integração para cada uma das coordenadas $(\varepsilon,\eta)$ forem –1 e +1, é possível efectuar a integração com o método de Gauss

$$\begin{aligned} I &= \int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} F(\varepsilon,\eta)\, d\varepsilon\, d\eta = \int_{-1}^{+1}\left[\int_{-1}^{+1} F(\varepsilon,\eta)\, d\varepsilon\right] d\eta \approx \\ &\approx \int_{-1}^{+1}\left[\sum_{i=1}^{N_\varepsilon} F(\varepsilon_i,\eta) W_i\right] d\eta \approx \sum_{i=1}^{N_\varepsilon}\sum_{j=1}^{N_\eta} F(\varepsilon_i,\eta_j) W_i W_j \end{aligned} \tag{5.278}$$

O integral é substituído por um somatório de valores pesados da função $F(\varepsilon,\eta)$, calculados em determinados pontos do domínio, os designados pontos de Gauss. Em (5.278), $N_\varepsilon$ e $N_\eta$ são o número de pontos de Gauss segundo $\varepsilon$ e $\eta$, respectivamente, e $W_i$ e $W_j$ os correspondentes coeficientes de peso (Tabela 5.8). Nos programas de cálculo as integrações numéricas são realizadas para 3×3 pontos de Gauss[64].

[64] Com este número de pontos, o método de Gauss é exacto para polinómios até à quinta potência em $\varepsilon$ e $\eta$.

| $\varepsilon_i$ ou $\eta_j$ | $W_i$ ou $W_j$ |
|---|---|
| – 0.774596669241483 | 0.555555555555556 |
| 0.0 | 0.888888888888889 |
| + 0.774596669241483 | 0.555555555555556 |

Tabela 5.8 – Coordenadas locais dos 3×3 pontos de Gauss e os respectivos coeficientes de peso.

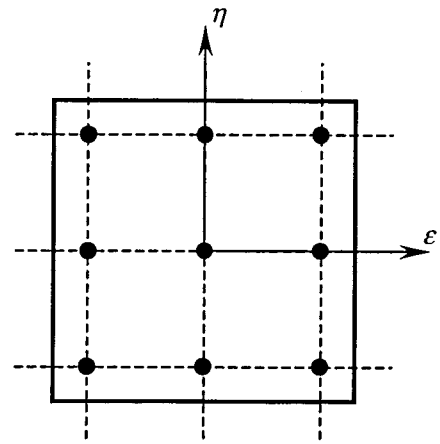



Figura 5.48 – Elemento finito em coordenadas locais. Localização dos 3×3 pontos de Gauss.

Quando se pretende calcular o integral estendido ao domínio elemento, $\Omega_{el}$, de fronteiras eventualmente curvas, de uma função $G(x, y)$ expressa em coordenadas globais

$$I = \int_{\Omega_{el}} G(x, y)\, d\Omega \quad \text{e} \quad d\Omega = dx\, dy \tag{5.279}$$

convém convertê-lo num integral como o da expressão (5.278), o que é possível porque o elemento em coordenadas globais é gerado a partir de um elemento rectangular em coordenadas locais, com estas a variar entre –1 e +1. A função $G(x, y)$ também depende de $\varepsilon$ e $\eta$ devido à transformação de coordenadas definida por (5.274) e (5.275)

$$G(x, y) = G[x(\varepsilon, \eta), y(\varepsilon, \eta)] \equiv G'(\varepsilon, \eta) \tag{5.280}$$

O elemento de área $d\Omega$ é substituído por um equivalente, em coordenadas locais

$$d\Omega = dx\,dy = |\mathbf{J}|\,d\varepsilon\,d\eta \tag{5.281}$$

onde |**J**| é o determinante da matriz Jacobiana da transformação de coordenadas. O integral (5.279) é então rescrito

$$I = \int_{\Omega_{el}} G(x,y)\,d\Omega = \int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} G'(\varepsilon,\eta)\,|\mathbf{J}|\,d\varepsilon\,d\eta \approx$$
$$\approx \sum_{i=1}^{N_G}\sum_{j=1}^{N_G} G'(\varepsilon_i,\eta_j)\,|\mathbf{J}(\varepsilon_i,\eta_j)|\,W_i\,W_j \tag{5.282}$$

para $N_G \times N_G$ pontos de Gauss. A matriz Jacobiana da transformação de coordenadas é definida por

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial x}{\partial \varepsilon} & \dfrac{\partial y}{\partial \varepsilon} \\ \dfrac{\partial x}{\partial \eta} & \dfrac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \tag{5.283}$$

e o respectivo determinante expresso por

$$|\mathbf{J}| = \frac{\partial x}{\partial \varepsilon}\frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta}\frac{\partial y}{\partial \varepsilon} \tag{5.284}$$

As derivadas parciais das coordenadas globais em ordem às locais são obtidas por derivação das expressões da transformação de coordenadas (5.274) e (5.275)

$$\frac{\partial x}{\partial \varepsilon} = \sum_{j=1}^{N_{ELM}} x_i \frac{\partial N_j^{el}}{\partial \varepsilon} \tag{5.285}$$

$$\frac{\partial x}{\partial \eta} = \sum_{j=1}^{N_{ELM}} x_i \frac{\partial N_j^{el}}{\partial \eta} \tag{5.286}$$

$$\frac{\partial y}{\partial \varepsilon} = \sum_{j=1}^{N_{ELM}} y_i \frac{\partial N_j^{el}}{\partial \varepsilon} \tag{5.287}$$

$$\frac{\partial y}{\partial \eta} = \sum_{j=1}^{N_{ELM}} y_i \frac{\partial N_j^{el}}{\partial \eta} \tag{5.288}$$

o que permite calcular a matriz Jacobiana à custa do seguinte produto matricial

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial N_1^{el}}{\partial \varepsilon} & \dfrac{\partial N_2^{el}}{\partial \varepsilon} & \cdot & \cdot & \dfrac{\partial N_{N_{ELM}}^{el}}{\partial \varepsilon} \\ \dfrac{\partial N_1^{el}}{\partial \eta} & \dfrac{\partial N_2^{el}}{\partial \eta} & \cdot & \cdot & \dfrac{\partial N_{N_{ELM}}^{el}}{\partial \eta} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ x_{N_{ELM}} & y_{N_{ELM}} \end{bmatrix} \tag{5.289}$$

Com o exposto já é possível determinar a "matriz de armazenamento" $\mathbf{S}^{el}$ de um elemento finito

$$\begin{aligned} S_{i,j}^{el} &= \int_{\Omega_{el}} \mathrm{e}^{\langle G \rangle} N_i^{el} N_j^{el} \, d\Omega = \int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} \mathrm{e}^{\langle G(\varepsilon,\eta) \rangle} N_i^{el}(\varepsilon,\eta) N_j^{el}(\varepsilon,\eta) |\mathbf{J}(\varepsilon,\eta)| \, d\varepsilon \, d\eta \approx \\ &\approx \sum_{k=1}^{N_G}\sum_{l=1}^{N_G} \mathrm{e}^{\langle G(\varepsilon_k,\eta_l) \rangle} N_i^{el}(\varepsilon_k,\eta_l) N_j^{el}(\varepsilon_k,\eta_l) |\mathbf{J}(\varepsilon_k,\eta_l)| W_k W_l \quad , \quad \forall i,j = 1,...,N_{ELM} \end{aligned} \tag{5.290}$$

com $N_G = 3$ e $\mathrm{e}^{\langle G(\varepsilon_k,\eta_l) \rangle}$ calculado à custa da combinação linear dos valores de $\langle G \rangle$ nos $N_{ELM}$ nós do elemento $(x_m, y_m)$

$$\mathrm{e}^{\langle G(\varepsilon_k,\eta_l) \rangle} \equiv \exp\left[\langle G(\varepsilon_k,\eta_l) \rangle\right] = \exp\left[\sum_{m=1}^{N_{ELM}} \langle G(x_m,y_m) \rangle N_m^{el}(\varepsilon_k,\eta_l)\right] \tag{5.291}$$

O cálculo da "matriz de transmissividade" $\mathbf{T}^{(4),el}$ de um elemento finito

$$T_{i,j}^{(4),el} = \int_{\Omega_{el}} \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \langle D \rangle \left( \frac{\partial N_i^{el}}{\partial x}\frac{\partial N_j^{el}}{\partial x} + \frac{\partial N_i^{el}}{\partial y}\frac{\partial N_j^{el}}{\partial y} \right) d\Omega \quad , \quad \forall i,j = 1,...,N_{ELM} \tag{5.292}$$

envolve a determinação das derivadas das funções de interpolação em ordem às coordenadas globais. Como estas funções estão definidas para as coordenadas locais, recorre-se à regra da derivação das funções compostas

$$\frac{\partial N_i^{el}}{\partial x} = \frac{\partial N_i^{el}}{\partial \varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x} + \frac{\partial N_i^{el}}{\partial \eta}\frac{\partial \eta}{\partial x} \tag{5.293}$$

$$\frac{\partial N_i^{el}}{\partial y} = \frac{\partial N_i^{el}}{\partial \varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial y} + \frac{\partial N_i^{el}}{\partial \eta}\frac{\partial \eta}{\partial y} \tag{5.294}$$

Estas expressões podem tomar uma apresentação matricial

$$\begin{Bmatrix} \dfrac{\partial N_i^{el}}{\partial x} \\ \dfrac{\partial N_i^{el}}{\partial y} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \varepsilon}{\partial x} & \dfrac{\partial \eta}{\partial x} \\ \dfrac{\partial \varepsilon}{\partial y} & \dfrac{\partial \eta}{\partial y} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} \dfrac{\partial N_i^{el}}{\partial \varepsilon} \\ \dfrac{\partial N_i^{el}}{\partial \eta} \end{Bmatrix} \tag{5.295}$$

ou ainda

$$\begin{Bmatrix} \dfrac{\partial N_i^{el}}{\partial x} \\ \dfrac{\partial N_i^{el}}{\partial y} \end{Bmatrix} = \left[\mathbf{J}^*\right] \times \begin{Bmatrix} \dfrac{\partial N_i^{el}}{\partial \varepsilon} \\ \dfrac{\partial N_i^{el}}{\partial \eta} \end{Bmatrix} \tag{5.296}$$

onde $\mathbf{J}^*$ é a inversa da matriz Jacobiana da transformação de coordenadas. Para o demonstrar atenda-se a que as variações das coordenadas globais se exprimem por

$$dx = \frac{\partial x}{\partial \varepsilon} d\varepsilon + \frac{\partial x}{\partial \eta} d\eta \tag{5.297}$$

$$dy = \frac{\partial y}{\partial \varepsilon} d\varepsilon + \frac{\partial y}{\partial \eta} d\eta \tag{5.298}$$

as quais podem ser escritas com uma forma matricial

$$\begin{Bmatrix} dx \\ dy \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial x}{\partial \varepsilon} & \dfrac{\partial x}{\partial \eta} \\ \dfrac{\partial y}{\partial \varepsilon} & \dfrac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} d\varepsilon \\ d\eta \end{Bmatrix} \tag{5.299}$$

ou ainda

$$\begin{Bmatrix} dx \\ dy \end{Bmatrix} = \left[ \mathbf{J}^T \right] \times \begin{Bmatrix} d\varepsilon \\ d\eta \end{Bmatrix} \tag{5.300}$$

onde $\mathbf{J}^T$ é a transposta da matriz Jacobiana, definida em (5.283). Resolvendo (5.299) em ordem ao vector $(d\varepsilon, d\eta)$ obtém-se

$$\begin{Bmatrix} d\varepsilon \\ d\eta \end{Bmatrix} = \frac{1}{\dfrac{\partial x}{\partial \varepsilon}\dfrac{\partial y}{\partial \eta} - \dfrac{\partial x}{\partial \eta}\dfrac{\partial y}{\partial \varepsilon}} \times \begin{bmatrix} \dfrac{\partial y}{\partial \eta} & -\dfrac{\partial x}{\partial \eta} \\ -\dfrac{\partial y}{\partial \varepsilon} & \dfrac{\partial x}{\partial \varepsilon} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} dx \\ dy \end{Bmatrix} \tag{5.301}$$

ou ainda

$$\begin{Bmatrix} d\varepsilon \\ d\eta \end{Bmatrix} = \left[ \mathbf{J}^{-1} \right]^T \times \begin{Bmatrix} dx \\ dy \end{Bmatrix} \tag{5.302}$$

onde a matriz $[\mathbf{J}^{-1}]^T$ é a transposta da inversa da matriz Jacobiana

$$\left[ \mathbf{J}^{-1} \right] = \frac{1}{|\mathbf{J}|} \times \begin{bmatrix} \dfrac{\partial y}{\partial \eta} & -\dfrac{\partial y}{\partial \varepsilon} \\ -\dfrac{\partial x}{\partial \eta} & \dfrac{\partial x}{\partial \varepsilon} \end{bmatrix} \tag{5.303}$$

Por outro lado, as variações das coordenadas locais exprimem-se por

$$d\varepsilon = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} dx + \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} dy \tag{5.304}$$

$$d\eta = \frac{\partial \eta}{\partial x} dx + \frac{\partial \eta}{\partial y} dy \tag{5.305}$$

ou na forma matricial

$$\begin{Bmatrix} d\varepsilon \\ d\eta \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \varepsilon}{\partial x} & \dfrac{\partial \varepsilon}{\partial y} \\ \dfrac{\partial \eta}{\partial x} & \dfrac{\partial \eta}{\partial y} \end{bmatrix} \times \begin{Bmatrix} dx \\ dy \end{Bmatrix} \tag{5.306}$$

ou ainda, por comparação com (5.295) e (5.296)

$$\begin{Bmatrix} d\varepsilon \\ d\eta \end{Bmatrix} = \left[ \mathbf{J}^* \right]^T \times \begin{Bmatrix} dx \\ dy \end{Bmatrix} \tag{5.307}$$

Finalmente, comparando (5.302) com (5.307) demonstra-se a igualdade entre $\mathbf{J}^*$ e $\mathbf{J}^{-1}$, isto é, que $\mathbf{J}^*$ é igual à inversa da matriz Jacobiana da transformação de coordenadas.

Face ao exposto, nomeadamente a relação matricial (5.296), as expressões das derivadas das funções de interpolação em ordem às coordenadas globais, (5.293) e (5.294), podem ser rescritas em função das coordenadas locais $(\varepsilon,\eta)$

$$\frac{\partial N_i^{el}(\varepsilon,\eta)}{\partial x} = J_{11}^*(\varepsilon,\eta) \frac{\partial N_i^{el}(\varepsilon,\eta)}{\partial \varepsilon} + J_{12}^*(\varepsilon,\eta) \frac{\partial N_i^{el}(\varepsilon,\eta)}{\partial \eta} \tag{5.308}$$

$$\frac{\partial N_i^{el}(\varepsilon,\eta)}{\partial y} = J_{21}^*(\varepsilon,\eta) \frac{\partial N_i^{el}(\varepsilon,\eta)}{\partial \varepsilon} + J_{22}^*(\varepsilon,\eta) \frac{\partial N_i^{el}(\varepsilon,\eta)}{\partial \eta} \tag{5.309}$$

A matriz de transmissividade $\mathbf{T}^{(4),el}$ em coordenadas locais fica então

$$T_{i,j}^{(4),el} = \int_{\Omega_{el}} \mathrm{e}^{\langle Y\rangle} \langle D\rangle \left( \frac{\partial N_i^{el}}{\partial x}\frac{\partial N_j^{el}}{\partial x} + \frac{\partial N_i^{el}}{\partial y}\frac{\partial N_j^{el}}{\partial y} \right) d\Omega =$$

$$= \int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} \mathrm{e}^{\langle Y(\varepsilon,\eta)\rangle} \langle D(\varepsilon,\eta)\rangle \left( \frac{\partial N_i^{el}(\varepsilon,\eta)}{\partial x}\frac{\partial N_j^{el}(\varepsilon,\eta)}{\partial x} + \right.$$

$$\left. + \frac{\partial N_i^{el}(\varepsilon,\eta)}{\partial y}\frac{\partial N_j^{el}(\varepsilon,\eta)}{\partial y} \right) |\mathbf{J}(\varepsilon,\eta)|\, d\varepsilon\, d\eta \approx \tag{5.310}$$

$$\approx \sum_{k=1}^{N_G}\sum_{l=1}^{N_G} \mathrm{e}^{\langle Y(\varepsilon_k,\eta_l)\rangle} \langle D(\varepsilon_k,\eta_l)\rangle \left( \frac{\partial N_i^{el}(\varepsilon_k,\eta_l)}{\partial x}\frac{\partial N_j^{el}(\varepsilon_k,\eta_l)}{\partial x} + \right.$$

$$\left. + \frac{\partial N_i^{el}(\varepsilon_k,\eta_l)}{\partial y}\frac{\partial N_j^{el}(\varepsilon_k,\eta_l)}{\partial y} \right) |\mathbf{J}(\varepsilon_k,\eta_l)| W_k W_l \quad , \quad \forall i,j = 1,\ldots,N_{ELM}$$

com $N_G = 3$, $\mathrm{e}^{\langle Y(\varepsilon_k,\eta_l)\rangle}$ e $\langle D(\varepsilon_k,\eta_l)\rangle$ calculados à custa da combinação linear dos valores de $\langle Y\rangle$ e $\langle D\rangle$ nos $N_{ELM}$ nós do elemento $(x_m, y_m)$

$$\mathrm{e}^{\langle Y(\varepsilon_k,\eta_l)\rangle} \equiv \exp\left[\langle Y(\varepsilon_k,\eta_l)\rangle\right] = \exp\left[ \sum_{m=1}^{N_{ELM}} \langle Y(x_m,y_m)\rangle\, N_m^{el}(\varepsilon_k,\eta_l) \right] \tag{5.311}$$

$$\langle D(\varepsilon_k,\eta_l)\rangle = \sum_{m=1}^{N_{ELM}} \langle D(x_m,y_m)\rangle\, N_m^{el}(\varepsilon_k,\eta_l) \tag{5.312}$$

e as derivadas das funções de interpolação nos pontos de Gauss $(\varepsilon_k,\eta_l)$ quantificadas pelas expressões (5.308) e (5.309).

Para a resolução de $q_i^{(6),el}$

$$q_i^{(6),el} = -\int_{\Gamma_{N,el}^{frt}} N_i^{el}\, q_n\, d\Gamma \quad , \quad i = 1,\ldots,N_N \tag{5.313}$$

recorre-se igualmente ao método numérico de Gauss. O elemento de fronteira, $d\Gamma$, é substituído por um equivalente em coordenadas locais (Figura 5.49)

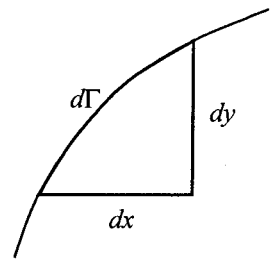



Figura 5.49 – Elemento de fronteira, em coordenadas globais.

$$d\Gamma \cong \sqrt{dx^2 + dy^2} \tag{5.314}$$

sendo

$$dx = \frac{\partial x}{\partial \varepsilon} d\varepsilon + \frac{\partial x}{\partial \eta} d\eta \tag{5.297}$$

$$dy = \frac{\partial y}{\partial \varepsilon} d\varepsilon + \frac{\partial y}{\partial \eta} d\eta \tag{5.298}$$

Percorrer o trecho de fronteira, correspondente a um dos lados do elemento, significa tomar para uma das coordenadas locais o valor de –1 ou +1 enquanto a outra varia entre –1 e +1. Assim, percorrer os lados definidos pelos nós locais 1, 2, 3 ou 5,6,7 (Figura 5.47) equivale a assumir

$$\eta = -1 \quad \text{ou} \quad \eta = +1 \quad \Rightarrow d\eta = 0 \tag{5.315}$$

logo

$$dx = \frac{\partial x}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \tag{5.316}$$

$$dy = \frac{\partial y}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \tag{5.317}$$

que substituídas em (5.314) dão lugar a

$$d\Gamma = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \varepsilon}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \varepsilon}\right)^2}\, d\varepsilon \tag{5.318}$$

ou ainda

$$d\Gamma = \sqrt{J_{11}^2 + J_{12}^2}\, d\varepsilon \tag{5.319}$$

atendendo a (5.283). Analogamente, percorrer os lados definidos pelos nós locais 1,8,7 ou 3,4,5 (Figura 5.47) equivale a assumir

$$\varepsilon = -1 \quad \text{ou} \quad \varepsilon = +1 \quad \Rightarrow d\varepsilon = 0 \tag{5.320}$$

logo

$$dx = \frac{\partial x}{\partial \eta} d\eta \tag{5.321}$$

$$dy = \frac{\partial y}{\partial \eta} d\eta \tag{5.322}$$

que substituídas em (5.314) dão lugar a

$$d\Gamma = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta}\right)^2}\, d\eta \tag{5.323}$$

ou ainda

$$d\Gamma = \sqrt{J_{21}^2 + J_{22}^2}\, d\varepsilon \tag{5.324}$$

atendendo a (5.283). A resolução do integral de contorno também implica o conhecimento da variação de $q_n$ ao longo da fronteira. Uma vez que habitualmente os valores de $q_n$ são quantificados para os nós da malha localizados na fronteira, é necessário construir uma expressão, em função de $(\varepsilon,\eta)$, para $q_n$. Recorrendo novamente às funções de aproximação escreve-se

$$q_n(\varepsilon,\eta) = \sum_{j=1}^{N_{NLD}} q_n(x_j, y_j) N_j^{el}(\varepsilon,\eta) \tag{5.325}$$

sendo $q_n(x_j, y_j)$ o valor de $q_n$ nos nós pertencentes ao lado do elemento através do qual é definido o fluxo e $N_{NLD}$ o número desses nós. Assim, $q_i^{(6),el}$ em coordenadas locais fica

$$q_i^{(6),el} = -\int_{\Gamma_{N,el}^{frt}} N_i^{el}\, q_n\, d\Gamma = -\int_{-1}^{+1} N_i^{el}(\varepsilon,\eta)\, q_n(\varepsilon,\eta) \sqrt{J_{11}^2(\varepsilon,\eta) + J_{12}^2(\varepsilon,\eta)}\, d\varepsilon \approx$$

$$\approx -\sum_{k=1}^{N_G} N_i^{el}(\varepsilon_k,\eta)\, q_n(\varepsilon_k,\eta) \sqrt{J_{11}^2(\varepsilon_k,\eta) + J_{12}^2(\varepsilon_k,\eta)}\; W_k \tag{5.326}$$

$$\text{para} \quad \eta = -1 \quad \text{ou} \quad \eta = +1 \qquad , \quad i = 1,\ldots,N_N$$

para os lados do elemento definidos pelos nós locais 1, 2, 3 ou 5,6,7 ou

$$q_i^{(6),el} = -\int_{\Gamma_{N,el}^{frt}} N_i^{el}\, q_n\, d\Gamma = -\int_{-1}^{+1} N_i^{el}(\varepsilon,\eta)\, q_n(\varepsilon,\eta) \sqrt{J_{21}^2(\varepsilon,\eta) + J_{22}^2(\varepsilon,\eta)}\, d\eta \approx$$

$$\approx -\sum_{l=1}^{N_G} N_i^{el}(\varepsilon,\eta_l)\, q_n(\varepsilon,\eta_l) \sqrt{J_{21}^2(\varepsilon,\eta_l) + J_{22}^2(\varepsilon,\eta_l)}\; W_l \tag{5.327}$$

$$\text{para} \quad \varepsilon = -1 \quad \text{ou} \quad \varepsilon = +1 \qquad , \quad i = 1,\ldots,N_N$$

para os lados do elemento definidos pelos nós locais 1,8,7 ou 3,4,5.

Uma vez expostos os procedimentos fundamentais para construir a equação diferencial matricial (5.244), analise-se agora a respectiva integração numérica em ordem ao tempo à custa de um sistema de equações idêntico ao apresentado no terceiro capítulo

$$\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{S}+\theta\,\mathbf{T}_{(k+\gamma)}\right]\cdot\langle\mathbf{H}_{(k+1)}\rangle =$$

$$=\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{S}-(1-\theta)\mathbf{T}_{(k+\gamma)}\right]\cdot\langle\mathbf{H}_{(k)}\rangle+(1-\theta)\mathbf{q}_{(k)}+\theta\,\mathbf{q}_{(k+1)} \qquad (5.328)$$

$$\text{para}\quad t_{k+1}=t_k+\Delta t\quad\text{e}\quad k=0,1,2,...,\infty$$

que permite calcular o vector do nível piezométrico esperado, nos nós da malha de elementos finitos, num qualquer instante $t_{k+1}$, a partir do conhecimento do vector de $\langle H\rangle$ no instante anterior $t_k$. Como já foi salientado, a matriz de transmissividade, **T**, é função de $\langle D\rangle=\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}}$ para os aquíferos não confinados e por este motivo o sistema de equações (5.328) depende da solução do próprio sistema, uma vez que **T** é calculada para $\langle\mathbf{H}_{(k+\gamma)}\rangle$ que, por sua vez, é determinado pela seguinte expressão

$$\langle\mathbf{H}_{(k+\gamma)}\rangle=(1-\gamma)\langle\mathbf{H}_{(k)}\rangle+\gamma\langle\mathbf{H}_{(k+1)}\rangle\quad\text{com}\quad\gamma\in[0,1] \qquad (5.329)$$

Como $\langle\mathbf{H}_{(k+1)}\rangle$ ainda não foi calculado recorre-se ao procedimento iterativo descrito na secção 3.4.4 do terceiro capítulo, com os parâmetros de controlo da integração numérica em ordem ao tempo com os valores $\gamma=0.5$ e $\theta=0.67$. Na simulação dos aquíferos confinados **T** não depende da solução, pelo que o programa de cálculo não executa o procedimento iterativo, sendo apenas definido $\theta=0.67$.

As condições fronteira de Neumann e de Cauchy, assim como as extracções ou recargas superficiais, contribuem para a formação do vector **q**. A respectiva introdução no modelo numérico recomenda uma pequena modificação em (5.328). Para a compreender, admita-se que se pretende estabelecer estas condições com um valor constante, e igual ao inicial, durante cada incremento da integração em ordem ao tempo, $\Delta t$ (Figura 5.50).

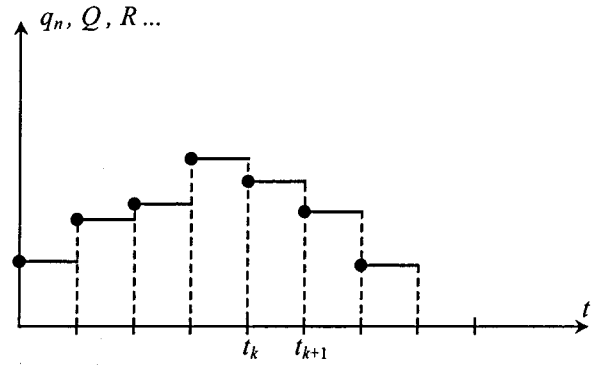



Figura 5.50 – Variáveis de controlo ($q_n$, $Q$, $R$, $a$, $b$, etc.) constantes durante cada intervalo de tempo. Valor em cada $\Delta t$ igual ao do instante inicial.

Adoptando $\theta = 0.67$ obtém-se uma média ponderada dos valores inicial e final[65] de $\mathbf{q}$ no intervalo $\Delta t$. A imposição de um valor constante e igual ao inicial, em cada $\Delta t$, implica a adopção de $\theta = 0$. Mas, para não interferir com selecção de $\theta$, que é o parâmetro que controla a estabilidade e convergência da integração numérica em ordem ao tempo, convém introduzir um novo parâmetro, $\theta_{cf}$, na equação (5.328), que fica então

$$\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{S} + \theta\,\mathbf{T}_{(k+\gamma)}\right]\cdot\langle\mathbf{H}_{(k+1)}\rangle =$$

$$= \left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{S} - (1-\theta)\mathbf{T}_{(k+\gamma)}\right]\cdot\langle\mathbf{H}_{(k)}\rangle + (1-\theta_{cf})\mathbf{q}_{(k)} + \theta_{cf}\,\mathbf{q}_{(k+1)} \qquad (5.330)$$

$$\text{para} \quad t_{k+1} = t_k + \Delta t \quad \text{e} \quad k = 0,1,2,...,\infty$$

Para a introdução das condições fronteira de Dirichlet no sistema de equações (5.330) são impostos aos nós, em cada instante $t_{k+1}$, os respectivos valores de $H$ predefinidos. Os procedimentos específicos são os descritos no final da secção 3.3.7 do terceiro capítulo.

Para simulação directa pelo MEF foi escrito um programa de cálculo baseado nas equações acima descritas, **FLWM2**, cuja execução é precedida por outros dois programas, **GCFH2** e **GCFS**. São programas preparados para efectuar uma ou mais simulações do escoamento, para outras tantas realizações dos parâmetros hidrogeológicos, o que permite a sua utilização na simulação estocástica directa pelo método das simulações de Monte-Carlo.

---

[65] Neste caso concreto ($\theta = 0.67$), um peso de 33% para o valor inicial e de 67% para o final.

O programa **GCFH2** prepara um ficheiro binário para registar os valores de $H$ em todos os nós da malha de elementos finitos e em todos os instantes do período de tempo estudado, para cada uma das simulações efectuadas. Inicia o registo de $H$ para o instante inicial e introduz as condições fronteira de Dirichlet para os restantes instantes a simular. O registo inicial pode ser gravado com base nas informações do ficheiro de dados ou extraído do registo final de um ficheiro binário idêntico, respeitante a um período de tempo imediatamente anterior. Deste modo é possível encadear a simulação do escoamento em sucessivos períodos de tempo, independentemente do número de incrementos da integração em ordem ao tempo e da respectiva dimensão temporal, em cada período estudado. Na Figura 5.51 é apresentado o ficheiro tipo com os dados que alimentam este programa.

```
>GCFH2.EXE - Condições fronteira de Dirichlet (t1,...,tn c/ n=NINT)
>ICOMP                          \tipo de máquina: PC->1; CRAZY->2; CIVILW1->3
>NNM                            \número de nós da malha
>NSR                            \número de simulações
>NINT                           \número de incrementos da integração no tempo (Δt)
>NDCFH                          \número de diferentes condições fronteira de Dirichlet
>file??.hhh                     \ficheiro para registar {H} em todos os instantes e
                                 simulações
>QUEST1                         \gerar {H0} a partir de {Hf} anterior (S/N)?
>file??.hhh                     \ficheiro c/ {Hf} anterior (nofile.hhh se QUEST1=N)
>  NNCFH(n)                     \número de nós (n=1,NDCFH)
>  NOCFH(n,1), ...., NOCFH(n,j) \lista dos nós(c/ j=NNCFH(n))
>  VCFH(n,1), ....., VCFH((n,k) \valor de H nos instantes (c/ k=NINT); Unidades: m
   (repetir NDCFH vezes)
>Condições iniciais (t0) (válido se QUEST1=N)
>VHINI                          \valor inicial de H em todos os nós (H0); Unidades: m
>NDCFHI                         \número de diferentes conjuntos de condições iniciais
                                 principais (NDCFHI)
>  NNCFHI(n)                    \número de nós (n=1,NDCFHI)
>  NOCFHI(n,1), ...., NOCFHI(n,j) \lista dos nós(c/ j=NNCFH(n))
>  VCFHI(n)                     \valor de H0; Unidades: m
   (repetir NDCFHI vezes)
```

Figura 5.51 – Ficheiro de dados tipo para o programa GCFH2 que introduz as condições fronteira de Dirichlet.

O programa **GCFS** cria três ficheiros binários onde são registadas as contribuições para o vector **q** de (5.244) e para a matriz global de transmissividade **T** da mesma equação diferencial matricial. Para a preparação destes ficheiros são processadas as informações respeitantes às condições fronteira de Neumann e de Cauchy e ainda as extracções ou recargas superficiais, difusas ou pontuais[66]. Na Figura 5.52 é apresentado o ficheiro tipo com os dados que alimentam este programa.

[66] Para usar a mesma terminologia na organização do ficheiro de dados de **GCFS**, as extracções ou recargas superficiais são também designadas por condições fronteira. Embora não seja formalmente correcto, não deixa de fazer sentido face à representação bidimensional dos aquíferos regionais.

```
>NINT                                  \n° de incrementos da integração no tempo (Δt)
>NDCF1                                 \n° de diferentes conjuntos de condição fronteira tipo 1
>NDCF2                                 \n° de diferentes conjuntos de condição fronteira tipo 2
>NDCF3                                 \n° de diferentes conjuntos de condição fronteira tipo 3
>NDCF4                                 \n° de diferentes conjuntos de condição fronteira tipo 4
>NDCF5                                 \n° de diferentes conjuntos de condição fronteira tipo 5
>NDCF6                                 \n° de diferentes conjuntos de condição fronteira tipo 6
>NDCF7                                 \n° de diferentes conjuntos de condição fronteira tipo 7
>  NECF1(n)                            \n° de elementos do conjunto "n" da condição fronteira 1;
                                        n=1,...NDCF1
>  NELCF1(n,1), ..., NELCF1(n,j)       \lista dos elementos do conj. "n"; j=1,...,NECF1(n)
>  VQCF1(n,1), ..., VQCF1(n,k)         \lista dos valores de Q nos instantes t0,t1,...,tNINT;
                                        k=1,...,NINT+1; Unidades: m/d
   (repetir NDCF1 vezes)
>  NECF2(n)                            \n° de elementos do conjunto "n" da condição fronteira 2;
                                        n=1,...NDCF2
>  NELCF2(n,1), ..., NELCF2(n,j)       \lista dos elementos do conjunto "n"; j=1,...,NECF2(n)
>  VACF2(n,1), ..., VACF2(n,k)         \lista dos valores de A nos instantes t0,t1,...,tNINT;
                                        k=1,...,NINT+1; Unidades: d
>  VBCF2(n,1), ..., VBCF2(n,k)         \lista dos valores de B nos instantes t0,t1,...,tNINT;
                                        k=1,...,NINT+1; Unidades: m
   (repetir NDCF2 vezes)
>  NNCF3(n)                            \n° de nós do conjunto "n" da condição fronteira 3;
                                        n=1,...NDCF3
>  NOCF3(n,1), ..., NOCF3(n,j)         \lista dos nós do conjunto "n"; j=1,...,NNCF3(n)
>  VQCF3(n,1), ..., VQCF3(n,k)         \lista dos valores de Qw,j nos instantes t0,t1,...,tNINT;
                                        k=1,...,NINT+1; Unidades: m³/d
   (repetir NDCF3 vezes)
>  NNCF4(n)                            \n° de nós do conjunto "n" da condição fronteira 4;
                                        n=1,...NDCF4
>  NOCF4(n,1), ..., NOCF4(n,j)         \lista dos nós do conjunto "n"; j=1,...,NNCF4(n)
>  VACF4(n,1), ..., VACF4(n,k)         \lista dos valores de Aw,j nos instantes t0,t1,...,tNINT;
                                        k=1,...,NINT+1; Unidades: d/m²
>  VBCF4(n,1), ..., VBCF4(n,k)         \lista dos valores de Bw,j nos instantes t0,t1,...,tNINT;
                                        k=1,...,NINT+1; Unidades: m
   (repetir NDCF4 vezes)
>  NECF5(n)                            \n° de elementos do conj. "n" da condição fronteira 5;
                                        n=1,...NDCF5
>  NELCF5(n,1), NQ5(n,1,1) , NQ5(n,1,2) , NQ5(n,1,3)
>       .          .          .          .
>  NELCF5(n,j), NQ5(n,j,1) , NQ5(n,j,2) , NQ5(n,j,3)
                                        \lista dos elementos do conj. "n" (j=1,...,NECF5(n)),
                                        numeração dos 3 nós do elemento que pertencem à fronteira
                                        e para os quais estão definidos os valores de qn
>  VQNCF5(n,1), ..., VQNCF5(n,k)       \lista dos valores de qn nos instantes t0,t1,...,tNINT;
                                        k=1,...,NINT+1; Unidades: m²/d
   (repetir NDCF5 vezes)
>  NECF6(n)                            \n° de elementos do conjunto "n" da condição fronteira 6;
                                        n=1,...NDCF6
>  NELCF6(n,1), NQ6(n,1,1) , NQ6(n,1,2) , NQ6(n,1,3)
>       .          .          .          .
>  NELCF6(n,j), NQ6(n,j,1) , NQ6(n,j,2) , NQ6(n,j,3)
                                        \lista dos elementos do conjunto "n" (j=1,...,NECF6(n)),
                                        numeração dos 3 nós do elemento que pertencem à fronteira
                                        e para os quais estão definidos os valores de a e b
>  VACF6(n,1), ..., VACF6(n,k)         \lista dos valores de a nos instantes t0,t1,...,tNINT;
                                        k=1,...,NINT+1; Unidades: d/m
>  VBCF6(n,1), ..., VBCF6(n,k)         \lista dos valores de b nos instantes t0,t1,...,tNINT;
                                        k=1,...,NINT+1; Unidades: m
   (repetir NDCF6 vezes)
>  NECF7(n)                            \n° de elementos do conjunto "n" da condição fronteira 7;
                                        n=1,...NDCF7
>  NELCF7(n,1), ..., NELCF7(n,j)       \lista dos elementos do conjunto "n"; j=1,...,NECF7(n)
>  VPCF7(n,1), ..., VPCF7(n,k)         \lista dos valores de P nos instantes t0,t1,...,tNINT;
                                        k=1,...,NINT+1; Unidades: m/d
   (repetir NDCF7 vezes)
```

Figura 5.52 – Ficheiro tipo dos dados para o programa GCFS que introduz as condições fronteira secundárias (Neumann e Cauchy) e as extracções (ou recargas) superficiais.

Como se pode observar na Figura 5.52, foram definidos 7 tipos de condições fronteira. Uma vez que serão referidos algumas vezes ao longo deste trabalho convém precisar melhor o significado de cada tipo de condição assim como a respectiva contribuição para a formação da equação diferencial matricial (5.244):

a) *condição fronteira tipo* 1:

$Q$: caudal extraído por unidade de superfície de aquífero, expresso em **m/d**; valor constante em cada elemento finito; variável com o tempo; pode ser interpretado como uma condição fronteira de Neumann; contribui para o vector **q** através de

$$q_i^{(1)} = -\int_\Omega N_i \, Q \, d\Omega \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.331}$$

b) *condição fronteira tipo* 2:

$A$ e $B$: parâmetros da relação linear (5.143) entre o caudal extraído por unidade de superfície de aquífero e o nível piezométrico; $A$ é expresso em **dias** e $B$ em **metros**; são constantes em cada elemento finito e variáveis com o tempo; podem ser interpretados como definindo uma condição fronteira de Cauchy; contribuem para o vector **q** e para a matriz **T** através de

$$q_i^{(3)} = -\int_\Omega N_i \frac{B}{A} d\Omega \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.332}$$

$$T_{i,j}^{(1)} = \int_\Omega \frac{1}{A} N_i N_j \, d\Omega \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \tag{5.246}$$

c) *condição fronteira tipo* 3:

$Q_{w,i}$: caudal extraído no ponto $\vec{\mathbf{x}}_i$ do aquífero, expresso em $\mathbf{m^3/d}$; variável com o tempo; pode ser interpretado como uma condição fronteira de Neumann; o

programa **GCFS** apenas aceita pontos coincidentes com os nós da malha de elementos finitos; contribui para o vector **q** através de

$$q_i^{(4)} = -\sum_{n=1}^{N_w} N_i(\vec{\mathbf{x}}_n) Q_w(\vec{\mathbf{x}}_n) \quad , \quad i = 1,...,N_N \tag{5.333}$$

d) *condição fronteira tipo* 4:

$A_{w,i}$ e $B_{w,i}$: parâmetros da relação linear entre o caudal extraído no ponto $\vec{\mathbf{x}}_i$ do aquífero e o nível piezométrico nesse ponto; $A_{w,i}$ é expresso em $\mathbf{d/m^2}$ e $B_{w,i}$ em **metros**; variáveis com o tempo; podem ser interpretados como definindo uma condição fronteira de Cauchy; o programa **GCFS** apenas aceita pontos coincidentes com os nós da malha de elementos finitos; contribuem para o vector **q** e para a matriz **T** através de

$$q_i^{(5)} = -\sum_{m=1}^{M_w} N_i(\vec{\mathbf{x}}_m) \frac{B_w(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_w(\vec{\mathbf{x}}_m)} \quad , \quad i = 1,...,N_N \tag{5.334}$$

$$T_{i,j}^{(2)} = \sum_{m=1}^{M_w} \frac{N_i(\vec{\mathbf{x}}_m) N_j(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_w(\vec{\mathbf{x}}_m)} \quad , \quad \forall i,j = 1,...,N_N \tag{5.248}$$

e) *condição fronteira tipo* 5:

$q_n$: caudal extraído por unidade de comprimento de fronteira do aquífero, expresso em $\mathbf{m^2/d}$; o valor é definido para os nós da malha pertencentes à fronteira; o programa **GCFS** só aceita o mesmo valor para os 3 nós de cada elemento; variável com o tempo; é uma condição fronteira de Neumann; contribui para o vector **q** através de

$$q_i^{(6)} = -\int_{\Gamma_N} N_i \, q_n \, d\Gamma \quad , \quad i = 1,...,N_N \tag{5.335}$$

f) *condição fronteira tipo* 6:

*a* e *b*: parâmetros da relação linear (5.147) ou (5.194) entre o caudal extraído por unidade de comprimento de fronteira do aquífero e o nível piezométrico; *a* é expresso em **d/m** e *b* em **m**; os valores são definidos para os nós da malha pertencentes à fronteira; o programa **GCFS** só aceita o mesmo valor para os 3 nós de cada elemento; variáveis com o tempo; representam uma condição fronteira de Cauchy; contribuem para o vector **q** e para a matriz **T** através de

$$q_i^{(7)} = -\int_{\Gamma_c} N_i \frac{b}{a} d\Gamma \quad , \quad i = 1,...,N_N \tag{5.336}$$

$$T_{i,j}^{(3)} = \int_{\Gamma_c} \frac{1}{a} N_i N_j \, d\Gamma \quad , \quad \forall i,j = 1,...,N_N \tag{5.250}$$

g) *condição fronteira tipo* 7:

*P*: precipitação; exprime-se em **m/d** como *Q*; valor constante em cada elemento; variável com o tempo; atendendo à convenção adoptada, deve ser introduzida com um valor negativo; pode ser interpretada como uma condição fronteira de Neumann; contribui para o vector **q** através de

$$q_i^{(2)} = -\int_{\Omega} N_i \, r \, P \, d\Omega \quad , \quad i = 1,...,N_N \tag{5.337}$$

Depois de executados os programas **GCFH2** e **GCFS**, o programa **FLWM2** realiza a simulação ou simulações pretendidas. No ficheiro binário anteriormente preparado por **GCFH2** ficam gravados os valores de *H* em todos os nós da malha e em todos instantes do período de tempo estudado, para cada uma das simulações. Trata-se de um ficheiro com uma informação fundamental não só para o posterior tratamento estatístico das simulações de Monte-Carlo, se for o caso, como para vários outros programas que resolvem equações diferenciais que na sua formulação envolvem o conhecimento do valor esperado do nível

piezométrico. Uma outra particularidade deste programa consiste na possibilidade de registar num ficheiro ASCII o valor calculado de $H$ e o atribuído às transformadas logarítmicas dos parâmetros hidrogeológicos num pequeno número de pontos (nós) e instantes. Trata-se de uma informação que no contexto da modelação inversa é considerada a resposta do modelo nos pontos de medição de níveis piezométricos e de parâmetros hidrogeológicos. Na Figura 5.53 é exibido o ficheiro tipo com os dados que comandam a execução deste programa.

```
>FLWM2.EXE - Ficheiro de parâmetros
>file??.dat                    \ficheiro de dados gerais s/ a malha de elementos finitos
>IFR                           \IFR=1 -> gravar em [file??.dbg];IFR=0 -> não gravar
>file??.dbg                    \ficheiro de resultados (debug)
>file??.kxx                    \ficheiro c/ Kxx (ou Txx) simulado (NSR simulações);
                               Unidades: m/d (ou m²/d)
>file??.kyy                    \ficheiro c/ Kyy (ou Tyy) simulado (NSR simulações);
                               (=file??.kxx); Unidades: m/d (ou m²/d)
>file??.kxy                    \ficheiro c/ Kxy (ou Txy) simulado (NSR simulações);
                               (=file??.TXX); Unidades: m/d (ou m²/d)
>file??.cst                    \ficheiro c/ ωd (ou S) simulado (NSR simulações);
                               Unidades: m/m (ou m⁻¹)
>file??.zbt                    \ficheiro c/ Zfundo simulado (1 simulação); Unidades: m
>file??.hhh                    \ficheiro para registar {H} em todos os instantes e
                               simulações
>file??.fff                    \ficheiro c/ {q} (c. front. Neumann e Cauchy + extracções)
>file??.ppp                    \ficheiro c/ {qR} (extracção especial (-precipitação): -R)
>file??.aaa                    \ficheiro c/ contr. p/ [T] (c. front. Cauchy)
>file??_teta.par               \ficheiro c/ parâmetros "TETA" do problema inverso (c/ "r")
>NSR                           \número de simulações a realizar
>NINT, DELTA                   \número de incrementos da integração no tempo (Δt),
                               dimensão do intervalo Δt (Unidades: d)
>TETA, TETACF, GAMA            \parâmetros da integração no tempo: θ, θcf, γ
>IPCS                          \usar IPCS=4 -> interpolar G=lnωd (ou G=lnS)
>IPCT                          \usar IPCT=4 -> interpolar Y=lnK (ou Y=lnT)
>IAQUIF                        \tipo de aquífero (IAQUIF=1 -> confinado,
                               IAQUIF=2 -> não confinado)
>IMODEL                        \resposta do modelo nos nós e instantes com medições
                               (IMODEL=0 -> não gravar, IMODEL=1 -> gravar)
>file??.ndg                    \ficheiro com a informação dos instantes e nós com medições
                               (IMODEL=0 -> nofile.ndg)
>file??.mdd                    \ficheiro para gravar resposta do modelo
                               (IMODEL=0 -> nofile.mdd)
>ICOMP                         \tipo de máquina: PC->1; CRAZY->2; CIVILW1->3
```

Figura 5.53 – Ficheiro tipo dos parâmetros gerais do programa FLWM2 que realiza as simulações do escoamento em aquíferos regionais porosos confinados ou não confinados.

### 5.5.6 Integração numérica da equação diferencial das perturbações de *H* e *Y*

No parágrafo final da secção 5.5.4 expôs-se a metodologia para a determinação das matrizes $\mathbf{A}_k$ que relacionam as perturbações de $H$ e $Y$ para os diferentes instantes $t_k$: a coluna de ordem $i$ da matriz é obtida por integração da equação diferencial das perturbações para $f = 1$ no nó $i$ e $f = 0$ nos restantes nós, sendo a perturbação $g$ nula em todos os nós. Desta metodologia resulta uma equação diferencial das perturbações onde as parcelas com $g$ são omitidas

$$\frac{h}{A} - \vec{\nabla} \mid \left(\mathrm{e}^{\langle Y \rangle}\, \vec{\nabla} h\right) + \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial h}{\partial t} - \mathrm{e}^{\langle Y \rangle}\, \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle - f\, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} - f\, Q_T - f \frac{B}{A} - f \frac{\langle H \rangle}{A} = 0 \tag{5.338}$$

Aquíferos confinados

$$\frac{h}{A} - \vec{\nabla} \mid \left(\mathrm{e}^{\langle Y \rangle}\, h \vec{\nabla} \langle H \rangle\right) - \vec{\nabla} \mid \left[\mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \left(\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}\right) \vec{\nabla} h\right] + \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial h}{\partial t} - \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \left(\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}\right) \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle - f\, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} - f\, Q_T - f \frac{B}{A} - f \frac{\langle H \rangle}{A} = 0 \tag{5.339}$$

Aquíferos não confinados

Analisando estas duas equações diferenciais verifica-se, na segunda, a presença do factor $\langle D \rangle = \langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}$ e da parcela $-\vec{\nabla} \mid \left(\mathrm{e}^{\langle Y \rangle}\, h \vec{\nabla} \langle H \rangle\right)$. Com a finalidade de elaborar um programa de cálculo que trate os dois tipos de aquíferos o modelo numérico das perturbações é construído com base na equação (5.339). Quando se tratar de um aquífero confinado omite-se a matriz que resulta da parcela referida e assume-se $\langle D \rangle = 1$. Saliente-se que qualquer uma destas duas equações diferenciais é linear, na medida em que nenhuma das respectivas parcelas depende da solução, e que a sua integração implica a resolução prévia da equação diferencial do escoamento, escrita para os valores esperados. Na sequência desta última observação refira-se que o algoritmo numérico que resolve a equação diferencial das perturbações recorre aos valores do nível piezométrico esperado que se encontram armazenados no ficheiro binário produzido por **FLWM2**.

A integração numérica da equação diferencial (5.339) assenta na aplicação da formulação fraca de resíduos pesados, isto é, na anulação do integral do resíduo pesado de diferentes modos

$$\int_\Omega N_i \, R_\Omega \, d\Omega = 0 \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.340}$$

$$\int_\Omega N_i \left\{ \frac{h}{A} - \vec{\nabla} \mid \left( \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \, h \, \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) - \vec{\nabla} \mid \left[ \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \left( \langle H \rangle - Z_{\text{fundo}} \right) \vec{\nabla} h \right] + \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial h}{\partial t} - \right.$$

$$\left. - \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \left( \langle H \rangle - Z_{\text{fundo}} \right) \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle - f \, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} - f \, Q_T - f \frac{B}{A} - f \frac{\langle H \rangle}{A} \right\} d\Omega = 0 \tag{5.341}$$

$$i = 1, ..., N_N$$

Decompondo o integral (5.341) nas suas parcelas obtém-se

$$\int_\Omega N_i \frac{h}{A} d\Omega - \int_\Omega N_i \, \vec{\nabla} \mid \left( \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \, h \, \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) d\Omega - \int_\Omega N_i \, \vec{\nabla} \mid \left[ \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \left( \langle H \rangle - Z_{\text{fundo}} \right) \vec{\nabla} h \right] d\Omega +$$

$$+ \int_\Omega N_i \, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial h}{\partial t} d\Omega - \int_\Omega N_i \, \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \left( \langle H \rangle - Z_{\text{fundo}} \right) \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega - \int_\Omega N_i \, f \, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} d\Omega - \tag{5.342}$$

$$- \int_\Omega N_i \, f \, Q_T \, d\Omega - \int_\Omega N_i \, f \frac{B}{A} d\Omega - \int_\Omega N_i \, f \frac{\langle H \rangle}{A} d\Omega = 0 \quad , \quad i = 1, ..., N_N$$

A segunda parcela de (5.342) pode ser rescrita com o auxílio do primeiro teorema de Green

$$- \int_\Omega N_i \, \vec{\nabla} \mid \left( \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \, h \, \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) d\Omega = \int_\Omega \vec{\nabla} N_i \mid \left( \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \, h \, \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) d\Omega -$$

$$- \int_\Gamma N_i \left( \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \, h \, \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) \mid \vec{\mathbf{n}} \, d\Gamma \tag{5.343}$$

tal como a terceira parcela de (5.342)

$$-\int_{\Omega} N_i \vec{\nabla} \cdot \left[ e^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} h \right] d\Omega = \int_{\Omega} \vec{\nabla} N_i \cdot \left[ e^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} h \right] d\Omega - \\ - \int_{\Gamma} N_i \left[ e^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} h \right] \cdot \vec{\mathbf{n}} \, d\Gamma \tag{5.344}$$

Adicionando estas duas igualdades, com as primeiras parcelas dos segundos membros reorganizadas, obtém-se

$$-\int_{\Omega} N_i \vec{\nabla} \cdot \left( e^{\langle Y \rangle} h \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) d\Omega - \int_{\Omega} N_i \vec{\nabla} \cdot \left[ e^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} h \right] d\Omega = \\ = \int_{\Omega} e^{\langle Y \rangle} h \vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega + \int_{\Omega} e^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla} h \, d\Omega - \\ - \int_{\Gamma} N_i \left\{ \left( e^{\langle Y \rangle} h \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) \cdot \vec{\mathbf{n}} + \left[ e^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} h \right] \cdot \vec{\mathbf{n}} \right\} d\Gamma \tag{5.345}$$

Tendo presente que o integral de contorno pode ser desdobrado nos trechos com condição de Neumann e Cauchy e introduzindo em (5.345) estas condições fronteira, traduzidas pelas expressões (5.214) e (5.221), obtém-se uma nova versão para a igualdade (5.345)

$$-\int_{\Omega} N_i \vec{\nabla} \cdot \left( e^{\langle Y \rangle} h \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) d\Omega - \int_{\Omega} N_i \vec{\nabla} \cdot \left[ e^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} h \right] d\Omega = \\ = \int_{\Omega} e^{\langle Y \rangle} h \vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega + \int_{\Omega} e^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla} h \, d\Omega - \\ - \int_{\Gamma_N} N_i f q_n \, d\Gamma + \int_{\Gamma_C} N_i \frac{h}{a} d\Gamma - \int_{\Gamma_C} N_i f \frac{\langle H \rangle}{a} d\Gamma - \int_{\Gamma_C} N_i f \frac{b}{a} d\Gamma \tag{5.346}$$

Substituindo as segunda e terceira parcelas de (5.342) pelo segundo membro de (5.346) e tratando os integrais com $Q_T$, $1/A$, $B/A$ e $\langle H \rangle / A$ de modo análogo ao efectuado na secção anterior para a integração numérica da equação diferencial do escoamento escrita para os valores esperados, os integrais dos resíduos pesados ficam

$$\int_\Omega N_i \frac{h}{A} d\Omega + \int_\Omega N_i \left( \sum_{m=1}^{M_w} \frac{h_m}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \right) d\Omega + \int_{\Gamma_C} N_i \frac{h}{a} d\Gamma +$$

$$+ \int_\Omega \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} h \, \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega + \int_\Omega \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla} h \, d\Omega + \int_\Omega N_i \, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial h}{\partial t} d\Omega -$$

$$- \int_\Omega N_i \, \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega - \int_\Omega N_i \, f \, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} d\Omega -$$

$$- \int_\Omega N_i \, f \, Q \, d\Omega - \int_\Omega N_i \, f \, rP \, d\Omega - \int_\Omega N_i \, f \left( \sum_{n=1}^{N_w} Q_{w,n} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_n) \right) d\Omega - \tag{5.347}$$

$$- \int_\Omega N_i \, f \frac{B}{A} d\Omega - \int_\Omega N_i \, f \left( \sum_{m=1}^{M_w} \frac{B_{w,m}}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \right) d\Omega - \int_{\Gamma_C} N_i \, f \frac{b}{a} d\Gamma -$$

$$- \int_\Omega N_i \, f \frac{\langle H \rangle}{A} d\Omega - \int_\Omega N_i \, f \left( \sum_{m=1}^{M_w} \frac{\langle H_m \rangle}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \right) d\Omega - \int_{\Gamma_C} N_i \, f \frac{\langle H \rangle}{a} d\Gamma -$$

$$- \int_{\Gamma_N} N_i \, f \, q_n \, d\Gamma = 0 \quad , \quad i = 1, \ldots, N_N$$

Introduzindo em (5.347) as aproximações

$$h \approx \sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j \tag{5.348}$$

$$f \approx \sum_{j=1}^{N_N} f_j N_j \tag{5.349}$$

e procedendo aos adequados desenvolvimentos chega-se à seguinte equação diferencial matricial

$$\mathbf{C} \cdot \mathbf{h} + \mathbf{D} \cdot \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{f} \tag{5.350}$$

onde $\mathbf{h}$ e $\partial\mathbf{h}/\partial t$ representam, respectivamente, o vector e a derivada em ordem ao tempo do vector das perturbações de $H$ e $\mathbf{f}$ o vector das perturbações de $Y$, nos $N_N$ nós da malha de elementos finitos.

» 1ª parcela da equação (5.347)

$$\int_\Omega N_i \frac{h}{A} d\Omega = \int_\Omega N_i \frac{1}{A}\left(\sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j\right) d\Omega = \sum_{j=1}^{N_N} h_j \int_\Omega \frac{1}{A} N_i N_j \, d\Omega =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} h_j C_{i,j}^{(1)} \quad , \quad i = 1,...,N_N \tag{5.351}$$

com $C_{i,j}^{(1)}$ definido por

$$C_{i,j}^{(1)} = \int_\Omega \frac{1}{A} N_i N_j \, d\Omega \quad , \quad \forall i,j = 1,...,N_N \tag{5.352}$$

» 2ª parcela da equação (5.347)

$$\int_\Omega N_i \left(\sum_{m=1}^{M_w} \frac{h_m}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m)\right) d\Omega = \int_\Omega N_i \left[\sum_{m=1}^{M_w} \frac{1}{A_{w,m}} \left(\sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j(\vec{\mathbf{x}}_m)\right) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m)\right] d\Omega =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} h_j \int_\Omega N_i \left(\sum_{m=1}^{M_w} \frac{N_j(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m)\right) d\Omega = \sum_{j=1}^{N_N} h_j \left(\sum_{m=1}^{M_w} \frac{N_i(\vec{\mathbf{x}}_m) N_j(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_w(\vec{\mathbf{x}}_m)}\right) = \tag{5.353}$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} h_j C_{i,j}^{(2)} \quad , \quad i = 1,...,N_N$$

com $C_{i,j}^{(2)}$ definido por

$$C_{i,j}^{(2)} = \sum_{m=1}^{M_w} \frac{N_i(\vec{\mathbf{x}}_m) N_j(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_w(\vec{\mathbf{x}}_m)} \quad , \quad \forall i,j = 1,...,N_N \tag{5.354}$$

» 3ª parcela da equação (5.347)

$$\int_{\Gamma_C} N_i \frac{h}{a} d\Gamma = \int_{\Gamma_C} N_i \frac{1}{a} \left( \sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j \right) d\Gamma = \sum_{j=1}^{N_N} h_j \int_{\Gamma_C} \frac{1}{a} N_i N_j \, d\Gamma =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} h_j C_{i,j}^{(3)} \quad , \quad i = 1,...,N_N \tag{5.355}$$

com $C_{i,j}^{(3)}$ definido por

$$C_{i,j}^{(3)} = \int_{\Gamma_C} \frac{1}{a} N_i N_j \, d\Gamma \quad , \quad \forall i,j = 1,...,N_N \tag{5.356}$$

» 4ª parcela da equação (5.347)

$$\int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} h \, \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \left( \sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j \right) \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} h_j \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} N_j \, \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega = \sum_{j=1}^{N_N} h_j C_{i,j}^{(4)} \quad , \quad i = 1,...,N_N \tag{5.357}$$

com $C_{i,j}^{(4)}$ definido por

$$C_{i,j}^{(4)} = \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} N_j \, \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} N_j \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial y} \right) d\Omega \tag{5.358}$$

$$\forall i,j = 1,...,N_N$$

» 5ª parcela da equação (5.347)

$$\int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\left(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}}\right)\vec{\nabla}N_i \mid \vec{\nabla}h\, d\Omega = \int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\langle D\rangle\,\vec{\nabla}N_i \mid \vec{\nabla}h\, d\Omega =$$

$$= \int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\langle D\rangle\,\vec{\nabla}N_i \mid \vec{\nabla}\left(\sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j\right) d\Omega = \sum_{j=1}^{N_N} h_j \int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\langle D\rangle\,\vec{\nabla}N_i \mid \vec{\nabla}N_j\, d\Omega = \tag{5.359}$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} h_j\, C_{i,j}^{(5)} \quad , \quad i = 1,\ldots,N_N$$

com $\langle D\rangle = \langle H\rangle - Z_{\text{fundo}}$ e $C_{i,j}^{(5)}$ definido por

$$C_{i,j}^{(5)} = \int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\langle D\rangle\,\vec{\nabla}N_i \mid \vec{\nabla}N_j\, d\Omega = \int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\langle D\rangle\left(\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y}\right) d\Omega \tag{5.360}$$

$$\forall i, j = 1,\ldots,N_N$$

» 6ª parcela da equação (5.347)

$$\int_\Omega N_i\, e^{\langle G\rangle}\frac{\partial h}{\partial t}\, d\Omega = \int_\Omega N_i\, e^{\langle G\rangle}\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j\right) d\Omega = \int_\Omega N_i\, e^{\langle G\rangle}\left(\sum_{j=1}^{N_N}\frac{\partial h_j}{\partial t} N_j\right) d\Omega = \tag{5.361}$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N}\frac{\partial h_j}{\partial t}\int_\Omega e^{\langle G\rangle}\, N_i\, N_j\, d\Omega = \sum_{j=1}^{N_N}\frac{\partial h_j}{\partial t} D_{i,j} \quad , \quad i = 1,\ldots,N_N$$

com $D_{i,j}$ definido por

$$D_{i,j} = \int_\Omega e^{\langle G\rangle}\, N_i\, N_j\, d\Omega \quad , \quad \forall i, j = 1,\ldots,N_N \tag{5.362}$$

» 7ª parcela da equação (5.347)

$$-\int_{\Omega} N_i \, \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \left( \langle H \rangle - Z_{\text{fundo}} \right) \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega = -\int_{\Omega} N_i \, \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \langle D \rangle \, \vec{\nabla} f \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega =$$

$$= -\int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \langle D \rangle \, N_i \, \vec{\nabla} \left( \sum_{j=1}^{N_N} f_j N_j \right) \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega = -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \langle D \rangle \, N_i \, \vec{\nabla} N_j \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega = \tag{5.363}$$

$$= -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \, E_{i,j}^{(1)} \quad , \quad i = 1, \ldots, N_N$$

com $\langle D \rangle = \langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}$ e $E_{i,j}^{(1)}$ definido por

$$E_{i,j}^{(1)} = \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \langle D \rangle \, N_i \, \vec{\nabla} N_j \mid \vec{\nabla} \langle H \rangle \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \langle D \rangle \, N_i \left( \frac{\partial N_j}{\partial x} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial x} + \frac{\partial N_j}{\partial y} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial y} \right) d\Omega \tag{5.364}$$

$$\forall i, j = 1, \ldots, N_N$$

» 8ª parcela da equação (5.347)

$$-\int_{\Omega} N_i \, f \, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} d\Omega = -\int_{\Omega} N_i \left( \sum_{j=1}^{N_N} f_j N_j \right) \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} d\Omega =$$

$$= -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \, N_i \, N_j \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} d\Omega = -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \, E_{i,j}^{(2)} \quad , \quad i = 1, \ldots, N_N \tag{5.365}$$

com $E_{i,j}^{(2)}$ definido por

$$E_{i,j}^{(2)} = \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \, N_i \, N_j \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} d\Omega \quad , \quad \forall i, j = 1, \ldots, N_N \tag{5.366}$$

» 9ª parcela da equação (5.347)

$$-\int_\Omega N_i\, f\, Q\, d\Omega = -\int_\Omega N_i \left( \sum_{j=1}^{N_N} f_j N_j \right) Q\, d\Omega =$$

$$= -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \int_\Omega Q\, N_i\, N_j\, d\Omega = -\sum_{j=1}^{N_N} f_j\, E_{i,j}^{(3)} \quad , \quad i = 1, \ldots, N_N \tag{5.367}$$

com $E_{i,j}^{(3)}$ definido por

$$E_{i,j}^{(3)} = \int_\Omega Q\, N_i\, N_j\, d\Omega \quad , \quad \forall i, j = 1, \ldots, N_N \tag{5.368}$$

» 10ª parcela da equação (5.347)

$$-\int_\Omega N_i\, f\, rP\, d\Omega = -\int_\Omega N_i \left( \sum_{j=1}^{N_N} f_j N_j \right) rP\, d\Omega =$$

$$= -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \int_\Omega rP\, N_i\, N_j\, d\Omega = -\sum_{j=1}^{N_N} f_j\, E_{i,j}^{(4)} \quad , \quad i = 1, \ldots, N_N \tag{5.369}$$

com $E_{i,j}^{(4)}$ definido por

$$E_{i,j}^{(4)} = \int_\Omega rP\, N_i\, N_j\, d\Omega \quad , \quad \forall i, j = 1, \ldots, N_N \tag{5.370}$$

» 11ª parcela da equação (5.347)

$$-\int_{\Omega} N_i \, f \left( \sum_{n=1}^{N_w} Q_{w,n} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_n) \right) d\Omega = -\int_{\Omega} N_i \left( \sum_{j=1}^{N_N} f_j N_j \right) \left( \sum_{n=1}^{N_w} Q_{w,n} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_n) \right) d\Omega =$$

$$-\sum_{j=1}^{N_N} f_j \int_{\Omega} N_i \, N_j \left( \sum_{n=1}^{N_w} Q_{w,n} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_n) \right) d\Omega = -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \sum_{n=1}^{N_w} N_i(\vec{\mathbf{x}}_n) \, N_j(\vec{\mathbf{x}}_n) \, Q_w(\vec{\mathbf{x}}_n) = \qquad (5.371)$$

$$= -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \, E_{i,j}^{(5)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N$$

com $E_{i,j}^{(5)}$ definido por

$$E_{i,j}^{(5)} = \sum_{n=1}^{N_w} N_i(\vec{\mathbf{x}}_n) \, N_j(\vec{\mathbf{x}}_n) \, Q_w(\vec{\mathbf{x}}_n) \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \qquad (5.372)$$

» 12ª parcela da equação (5.347)

$$-\int_{\Omega} N_i \, f \frac{B}{A} d\Omega = -\int_{\Omega} N_i \left( \sum_{j=1}^{N_N} f_j N_j \right) \frac{B}{A} d\Omega =$$

$$= -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \int_{\Omega} \frac{B}{A} N_i \, N_j \, d\Omega = -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \, E_{i,j}^{(6)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \qquad (5.373)$$

com $E_{i,j}^{(6)}$ definido por

$$E_{i,j}^{(6)} = \int_{\Omega} \frac{B}{A} N_i \, N_j \, d\Omega \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \qquad (5.374)$$

» 13ª parcela da equação (5.347)

$$-\int_{\Omega} N_i\, f\left(\sum_{m=1}^{M_w}\frac{B_{w,m}}{A_{w,m}}\delta(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_m)\right)d\Omega=-\int_{\Omega} N_i\left(\sum_{j=1}^{N_N} f_j N_j\right)\left(\sum_{m=1}^{M_w}\frac{B_{w,m}}{A_{w,m}}\delta(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_m)\right)d\Omega=$$

$$=-\sum_{j=1}^{N_N} f_j\int_{\Omega} N_i\, N_j\left(\sum_{m=1}^{M_w}\frac{B_{w,m}}{A_{w,m}}\delta(\vec{\mathbf{x}}-\vec{\mathbf{x}}_m)\right)d\Omega= \tag{5.375}$$

$$=-\sum_{j=1}^{N_N} f_j\sum_{m=1}^{M_w} N_i(\vec{\mathbf{x}}_m)\, N_j(\vec{\mathbf{x}}_m)\frac{B_w(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_w(\vec{\mathbf{x}}_m)}=-\sum_{j=1}^{N_N} f_j\, E_{i,j}^{(7)}\quad,\quad i=1,\ldots,N_N$$

com $E_{i,j}^{(7)}$ definido por

$$E_{i,j}^{(7)}=\sum_{m=1}^{M_w} N_i(\vec{\mathbf{x}}_m)\, N_j(\vec{\mathbf{x}}_m)\frac{B_w(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_w(\vec{\mathbf{x}}_m)}\quad,\quad \forall i,j=1,\ldots,N_N \tag{5.376}$$

» 14ª parcela da equação (5.347)

$$-\int_{\Gamma_C} N_i\, f\frac{b}{a}d\Gamma=-\int_{\Gamma_C} N_i\left(\sum_{j=1}^{N_N} f_j N_j\right)\frac{b}{a}d\Gamma=$$

$$=-\sum_{j=1}^{N_N} f_j\int_{\Gamma_C}\frac{b}{a}N_i\, N_j\, d\Gamma=-\sum_{j=1}^{N_N} f_j\, E_{i,j}^{(8)}\quad,\quad i=1,\ldots,N_N \tag{5.377}$$

com $E_{i,j}^{(8)}$ definido por

$$E_{i,j}^{(8)}=\int_{\Gamma_C}\frac{b}{a}N_i\, N_j\, d\Gamma\quad,\quad \forall i,j=1,\ldots,N_N \tag{5.378}$$

» 15ª parcela da equação (5.347)

$$-\int_{\Omega} N_i \, f \frac{\langle H \rangle}{A} d\Omega = -\int_{\Omega} N_i \left( \sum_{j=1}^{N_N} f_j N_j \right) \frac{\langle H \rangle}{A} d\Omega =$$

$$= -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \int_{\Omega} \frac{\langle H \rangle}{A} N_i \, N_j \, d\Omega = -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \, E_{i,j}^{(9)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.379}$$

com $E_{i,j}^{(9)}$ definido por

$$E_{i,j}^{(9)} = \int_{\Omega} \frac{\langle H \rangle}{A} N_i \, N_j \, d\Omega \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \tag{5.380}$$

» 16ª parcela da equação (5.347)

$$-\int_{\Omega} N_i \, f \left( \sum_{m=1}^{M_w} \frac{\langle H_m \rangle}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \right) d\Omega = -\int_{\Omega} N_i \left( \sum_{j=1}^{N_N} f_j N_j \right) \left( \sum_{m=1}^{M_w} \frac{\langle H_m \rangle}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \right) d\Omega =$$

$$= -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \int_{\Omega} N_i \, N_j \left( \sum_{m=1}^{M_w} \frac{\langle H_m \rangle}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \right) d\Omega = -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \sum_{m=1}^{M_w} N_i(\vec{\mathbf{x}}_m) \, N_j(\vec{\mathbf{x}}_m) \frac{\langle H(\vec{\mathbf{x}}_m) \rangle}{A_w(\vec{\mathbf{x}}_m)} = \tag{5.381}$$

$$= -\sum_{j=1}^{N_N} f_j \, E_{i,j}^{(10)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N$$

com $E_{i,j}^{(10)}$ definido por

$$E_{i,j}^{(10)} = \sum_{m=1}^{M_w} N_i(\vec{\mathbf{x}}_m) \, N_j(\vec{\mathbf{x}}_m) \frac{\langle H(\vec{\mathbf{x}}_m) \rangle}{A_w(\vec{\mathbf{x}}_m)} \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \tag{5.382}$$

» 17ª parcela da equação (5.347)

$$-\int_{\Gamma} N_i \, f \frac{\langle H \rangle}{a} d\Gamma = -\int_{\Gamma} N_i \left( \sum_{j=1}^{N} f_j N_j \right) \frac{\langle H \rangle}{a} d\Gamma =$$

$$= -\sum_{j=1}^{N} f_j \int_{\Gamma} \frac{\langle H \rangle}{a} N_i \, N_j \, d\Gamma = -\sum_{j=1}^{N} f_j \, E_{i,j}^{(11)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.383}$$

com $E_{i,j}^{(11)}$ definido por

$$E_{i,j}^{(11)} = \int_{\Gamma_C} \frac{\langle H \rangle}{a} N_i \, N_j \, d\Gamma \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \tag{5.384}$$

» 18ª parcela da equação (5.347)

$$-\int_{\Gamma} N_i \, f \, q_n \, d\Gamma = -\int_{\Gamma} N_i \left( \sum_{j=1}^{N} f_j N_j \right) q_n \, d\Gamma =$$

$$= -\sum_{j=1}^{N} f_j \int_{\Gamma} q_n \, N_i \, N_j \, d\Gamma = -\sum_{j=1}^{N} f_j \, E_{i,j}^{(12)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.385}$$

com $E_{i,j}^{(12)}$ definido por

$$E_{i,j}^{(12)} = \int_{\Gamma_N} q_n \, N_i \, N_j \, d\Gamma \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \tag{5.386}$$

Rescrevendo (5.347) à custa destes desenvolvimentos para as suas parcelas, obtém-se

$$\sum_{j=1}^{N_N} h_j \left( C_{i,j}^{(1)} + C_{i,j}^{(2)} + C_{i,j}^{(3)} + C_{i,j}^{(4)} + C_{i,j}^{(5)} \right) + \sum_{j=1}^{N_N} \frac{\partial h_j}{\partial t} D_{i,j} =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} f_j \left( E_{i,j}^{(1)} + E_{i,j}^{(2)} + E_{i,j}^{(3)} + E_{i,j}^{(4)} + E_{i,j}^{(5)} + E_{i,j}^{(6)} + \right. \tag{5.387}$$

$$\left. + E_{i,j}^{(7)} + E_{i,j}^{(8)} + E_{i,j}^{(9)} + E_{i,j}^{(10)} + E_{i,j}^{(11)} + E_{i,j}^{(12)} \right)$$

$$i = 1, \ldots, N_N$$

cuja forma matricial compacta já foi apresentada (5.350).

A quantificação dos elementos das matrizes **C**, **D** e **E** implica a resolução numérica dos diversos integrais acima definidos. Os procedimentos fundamentais, inerentes à aplicação do MEF, são análogos aos apresentados na secção anterior, pelo que são omitidos. Contudo, importa aqui analisar a equação (5.350) face ao objectivo final da sua resolução: a determinação das matrizes $\mathbf{A}_k$ que relacionam as perturbações de $H$ e $Y$ para os sucessivos instantes $t_k$. Como oportunamente se explicou, a coluna de ordem $i$ da matriz $\mathbf{A}_k$, para os sucessivos instantes $t_k$, é a solução da equação diferencial das perturbações para $f = 1$ no nó $i$, com $f = 0$ nos restantes nós, ou seja, é o vector **h** nesses instantes obtido por integração em ordem ao tempo da equação diferencial matricial (5.350)

$$\mathbf{C} \cdot \mathbf{h} + \mathbf{D} \cdot \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{f} \tag{5.350}$$

escrita para o vector **f** com todas as componentes nulas, excepto a de ordem $i$, que toma o valor unitário. Posto o problema nestes termos, imediatamente se retira que a equação (5.350) tem de ser integrada tantas vezes quantas as componentes de **f**, para se obter as $N_N$ colunas de cada uma das matrizes $\mathbf{A}_k$. Afortunadamente, algumas particularidades desta equação permitem a elaboração de um algoritmo numérico que efectua a integração simultânea das $N_N$ equações. Para o explicar escreva-se o sistema de equações que realiza a integração em ordem ao tempo de (5.350)

$$\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{D}+\theta\,\mathbf{C}_{(k+\gamma)}\right]\cdot\mathbf{h}_{(k+1)}=$$

$$=\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{D}-(1-\theta)\,\mathbf{C}_{(k+\gamma)}\right]\cdot\mathbf{h}_{(k)}+(1-\theta_{\mathrm{cf}})\,\mathbf{E}_{(k)}\cdot\mathbf{f}+\theta_{\mathrm{cf}}\,\mathbf{E}_{(k+1)}\cdot\mathbf{f} \qquad (5.388)$$

$$\text{para}\quad t_{k+1}=t_k+\Delta t\quad\text{e}\quad k=0,1,2,...,\infty$$

No início desta secção salientou-se o facto de as equações diferenciais das perturbações (5.338) e (5.339) serem lineares, isto é, não dependerem da respectiva solução. O facto de no sistema de equações (5.388) as matrizes **C** e **E** apresentarem um sub-índice temporal não constitui uma contradição a essa afirmação inicial uma vez que a "localização" temporal dessas matrizes resulta da contribuição dos valores esperados de $H$ que foram previamente determinados. Para o constatar observem-se as definições de $C_{i,j}^{(4)}$, $C_{i,j}^{(5)}$, $E_{i,j}^{(1)}$, $E_{i,j}^{(2)}$, $E_{i,j}^{(9)}$, $E_{i,j}^{(1)}$ e $E_{i,j}^{(11)}$. Servem estas considerações para sublinhar que a formulação das matrizes **C**, **D** e **E** é única para cada instante, independentemente do vector **f** considerado, pelo que a matriz do sistema de equações (5.388) que multiplica o vector das incógnitas $\mathbf{h}_{(k+1)}$ também é única para cada incremento da integração em ordem ao tempo. Assim, uma modificação do vector **f** implica somente uma reformulação do segundo membro do sistema de equações (5.388), isto é, do vector dos termos independentes. Expresso de outro modo, aos $N_N$ diferentes vectores **f** correspondem outros tantos vectores dos termos independentes, para uma mesma matriz do sistema de equações (5.388). Em resumo, o algoritmo numérico deverá efectuar, em cada instante $t_{k+1}$, a resolução simultânea dos $N_N$ sistemas de equações gerados por outros tantos vectores dos termos independentes. Atendendo ao significado dos vectores $\mathbf{h}_{(k)}$ obtidos para os vectores **f** com a componente de ordem $i$ unitária, o sistema de equações múltiplas pode ser escrito com o seguinte aspecto

$$\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{D}+\theta\,\mathbf{C}_{(k+\gamma)}\right]\cdot\mathbf{A}_{(k+1)}=$$

$$=\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{D}-(1-\theta)\,\mathbf{C}_{(k+\gamma)}\right]\cdot\mathbf{A}_{(k)}+(1-\theta_{\mathrm{cf}})\,\mathbf{E}_{(k)}\cdot\mathbf{I}+\theta_{\mathrm{cf}}\,\mathbf{E}_{(k+1)}\cdot\mathbf{I} \qquad (5.389)$$

$$\text{para}\quad t_{k+1}=t_k+\Delta t\quad\text{e}\quad k=0,1,2,...,\infty$$

sendo **I** a matriz identidade.

A resolução de (5.389) para os sucessivos instantes é precedida pela introdução das condições fronteira de Dirichlet. São condições homogéneas (5.175), tanto para os aquíferos confinados como para os não confinados, pelos que aos respectivos nós é imposta uma perturbação nula ($h = 0$). No primeiro incremento da integração em ordem ao tempo, a condição inicial também é homogénea (5.172).

Para a determinação numérica das matrizes $\mathbf{A}_k$, pelo MEF, foi escrito um programa de cálculo baseado nas equações acima descritas, **FLWPY2**, cuja execução é precedida pela resolução da equação diferencial do escoamento, escrita para os valores esperados, com o programa **FLWM2**. Uma vez encontrada a matriz $\mathbf{A}_k$ para cada instante, e antes de passar ao incremento seguinte, o programa calcula a matriz de covariância de $H$ para esse instante, efectuando o seguinte produto matricial

$$\mathbf{C}_{H_k H_k} = \mathbf{A}_k \cdot \mathbf{C}_{YY} \cdot \mathbf{A}_k^T \tag{5.390}$$

e regista em ficheiro ASCII os valores da diagonal principal de $\mathbf{C}_{H_k H_k}$ que representam, nesse instante, a variância da estimação de $H$ resultante da incerteza associada à estimação de $Y$.

Para os aquíferos confinados o programa **FLWPY2** assume $\langle D \rangle = 1$ e não considera a contribuição de $C_{i,j}^{(4)}$ (5.358) para a formação da matriz **C**, uma vez que resulta directamente da parcela $-\bar{\nabla} \cdot \left( e^{\langle Y \rangle} h \bar{\nabla} \langle H \rangle \right)$ que só existe na equação diferencial das perturbações dos aquíferos não confinados (5.339).

A versão actual do programa **FLWPY2** ainda não contempla as *condições fronteira tipo* 2, 4 e 6 definidas no final da secção 5.5.5, ou seja, as condições fronteira de Cauchy e as extracções ou recargas superficiais (tipo Cauchy), difusas ou pontuais, estabelecidas através de uma relação linear com o nível piezométrico. Refira-se também, que numa fase inicial da elaboração do algoritmo da modelação inversa foi necessário gravar em ficheiro binário as linhas das matrizes $\mathbf{A}_k$ correspondentes aos nós com medições de níveis piezométricos, pelo

este programa contempla essa possibilidade, embora sem interesse no âmbito da simulação estocástica directa. Na Figura 5.54 é exibido o ficheiro tipo com os dados que comandam a execução deste programa.

```
>FLWPY2.EXE - Ficheiro de parâmetros
>file??.dat                    \ficheiro de dados gerais s/ a malha de elementos finitos
>IFR                           \IFR=1 -> gravar em [file??.dbg];IFR=0 -> não gravar
>file??.dbg                    \ficheiro de resultados (debug)
>file??.cfh                    \ficheiro c/ as condições fronteira de Dirichlet
>file??.cfs                    \ficheiro c/ as condições fronteira de Neumann e Cauchy
>file??.kkk                    \ficheiro c/ K (ou T) esperado (condicionado ou não);
                               Unidades: m/d (ou m²/d)
>file??.cst                    \ficheiro c/ ω_d (ou S) esperado (condicionado ou não);
                               Unidades: m/m (ou m⁻¹)
>file??.zbt                    \ficheiro c/ Z_fundo; Unidades: m
>file??.hhh                    \ficheiro c/ {<H>} (valores esperados de H)
>file??.hpy                    \ficheiro c/ a matriz A_k das perturbações de H
>file??_teta.par               \ficheiro c/ parâmetros "TETA" do problema inverso (c/ "r")
>NINT, DELTA                   \número de incrementos da integração no tempo (Δt),
                               dimensão do intervalo Δt (Unidades: d)
>TETA, TETACF, GAMA            \parâmetros da integração no tempo: θ, θ_cf, γ
>IPCS                          \usar IPCS=4 -> interpolar G=lnω_d (ou G=lnS)
>IPCT                          \usar IPCT=4 -> interpolar Y=lnK (ou Y=lnT)
>IAQUIF                        \tipo de aquífero (IAQUIF=1 -> confinado,
                               IAQUIF=2 -> não confinado)
>ICOV                          \calcular variância de H (ICOV=0 -> não calcular;
                               ICOV=1 -> calcular)
>file??.cyy                    \ficheiro com a matriz C_YY (condicionada ou não);
                               (ICOV=0 -> nofile.cyy)
>jobname                       \nome para definir os ficheiros com a variância de H;
                               (ICOV=0 -> nojob)
>IPERTD                        \gravar linhas de A_k correspondentes aos pontos de medição
                               de H (IPERTD=0 -> não gravar; IPERTD=1 -> gravar)
>file??.ndg                    \ficheiro com a informação dos instantes e nós com medições
                               de H (IPERTD =0 -> nofile.ndg)
>file??.add                    \ficheiro p/ gravar linhas de A_k correspondentes aos pontos
                               de medição de H (IPERTD =0 -> nofile.add)
>ICOMP                         \tipo de máquina: PC->1; CRAZY->2; CIVILW1->3
```

Figura 5.54 – Ficheiro tipo dos parâmetros gerais do programa FLWPY2 que calcula a covariância do nível piezométrico, para escoamentos em aquíferos regionais porosos confinados ou não confinados.

### 5.5.7 Integração numérica da equação diferencial das perturbações de $H$ e $G$

No parágrafo final da secção 5.5.4 expôs-se a metodologia para a determinação das matrizes $\mathbf{B}_k$ que relacionam as perturbações de $H$ e $G$ para os diferentes instantes $t_k$: a coluna de ordem $i$ da matriz é obtida por integração da equação diferencial das perturbações para $g=1$ no nó $i$ e $g=0$ nos restantes nós, sendo a perturbação $f$ nula em todos os nós. Desta metodologia resulta uma equação diferencial das perturbações onde as parcelas com $f$ são omitidas

$$\frac{h}{A}-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,\vec{\nabla}h\right)+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\,\frac{\partial h}{\partial t}+g\,\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\,\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}=0 \qquad (5.391)$$

Aquíferos confinados

$$\frac{h}{A}-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,h\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)-\vec{\nabla}\,|\left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\left(\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}}\right)\vec{\nabla}h\right]+$$
$$+\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\,\frac{\partial h}{\partial t}+g\,\mathrm{e}^{\langle G\rangle}\,\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial t}=0 \qquad (5.392)$$

Aquíferos não confinados

Analisando estas duas equações diferenciais verifica-se, na segunda, a presença do factor $\langle D\rangle=\langle H\rangle-Z_{\text{fundo}}$ e da parcela $-\vec{\nabla}\,|\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}\,h\,\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)$. Com a finalidade de elaborar um programa de cálculo que trate os dois tipos de aquíferos o modelo numérico das perturbações é construído com base na equação (5.392). Quando se tratar de um aquífero confinado omite-se a matriz que resulta da parcela referida e assume-se $\langle D\rangle=1$. Qualquer uma destas duas equações diferenciais é linear, na medida em que nenhuma das respectivas parcelas depende da solução, e a sua integração implica a resolução prévia da equação diferencial do escoamento, escrita para os valores esperados. O algoritmo numérico que resolve esta equação diferencial das perturbações recorre aos valores do nível piezométrico esperado que se encontram armazenados no ficheiro binário produzido por **FLWM2**.

Para a integração numérica da equação diferencial (5.392) recorre-se novamente à formulação fraca de resíduos pesados, ou seja, à anulação do integral do resíduo pesado de diferentes modos

$$\int_\Omega N_i \, R_\Omega \, d\Omega = 0 \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.393}$$

$$\int_\Omega N_i \left\{ \frac{h}{A} - \vec{\nabla} \mid \left( \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \, h \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) - \vec{\nabla} \mid \left[ \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} h \right] + \right.$$

$$\left. + \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial h}{\partial t} + g \, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} \right\} d\Omega = 0 \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.394}$$

Decompondo o integral (5.394) nas suas parcelas obtém-se

$$\int_\Omega N_i \frac{h}{A} d\Omega - \int_\Omega N_i \, \vec{\nabla} \mid \left( \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \, h \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) d\Omega - \int_\Omega N_i \, \vec{\nabla} \mid \left[ \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} h \right] d\Omega +$$

$$+ \int_\Omega N_i \, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial h}{\partial t} d\Omega + \int_\Omega N_i \, g \, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} d\Omega = 0 \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.395}$$

A segunda parcela de (5.395) pode ser rescrita com o auxílio do primeiro teorema de Green

$$- \int_\Omega N_i \, \vec{\nabla} \mid \left( \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \, h \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) d\Omega = \int_\Omega \vec{\nabla} N_i \mid \left( \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \, h \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) d\Omega -$$

$$- \int_\Gamma N_i \left( \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} \, h \vec{\nabla} \langle H \rangle \right) \mid \vec{\mathbf{n}} \, d\Gamma \tag{5.343}$$

tal como a terceira parcela de (5.395)

$$- \int_\Omega N_i \, \vec{\nabla} \mid \left[ \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} h \right] d\Omega = \int_\Omega \vec{\nabla} N_i \mid \left[ \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} h \right] d\Omega -$$

$$- \int_\Gamma N_i \left[ \mathrm{e}^{\langle Y \rangle} (\langle H \rangle - Z_{\text{fundo}}) \vec{\nabla} h \right] \mid \vec{\mathbf{n}} \, d\Gamma \tag{5.344}$$

Tal como na secção anterior, adiciona-se estas duas igualdades, com as primeiras parcelas dos segundos membros reorganizadas, e obtém-se

$$-\int_{\Omega} N_i \vec{\nabla} \cdot \left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle} h \vec{\nabla}\langle H\rangle\right) d\Omega - \int_{\Omega} N_i \vec{\nabla} \cdot \left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla} h\right] d\Omega =$$

$$= \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y\rangle} h \vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla}\langle H\rangle \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla} h \, d\Omega - \tag{5.345}$$

$$- \int_{\Gamma} N_i \left\{\left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle} h \vec{\nabla}\langle H\rangle\right) \cdot \vec{\mathbf{n}} + \left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla} h\right] \cdot \vec{\mathbf{n}}\right\} d\Gamma$$

Desdobrando o integral de contorno nos trechos com condição de Neumann e Cauchy e introduzindo em (5.345) estas condições fronteira, traduzidas pelas expressões (5.214) e (5.221) com $f = 0$, obtém-se uma nova versão para a igualdade (5.345)

$$-\int_{\Omega} N_i \vec{\nabla} \cdot \left(\mathrm{e}^{\langle Y\rangle} h \vec{\nabla}\langle H\rangle\right) d\Omega - \int_{\Omega} N_i \vec{\nabla} \cdot \left[\mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla} h\right] d\Omega =$$

$$= \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y\rangle} h \vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla}\langle H\rangle \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla} h \, d\Omega + \int_{\Gamma_C} N_i \frac{h}{a} d\Gamma \tag{5.396}$$

Substituindo as segunda e terceira parcelas de (5.395) pelo segundo membro de (5.396) e tratando o integral com $1/A$ de modo análogo ao efectuado nas duas secções anteriores, os integrais dos resíduos pesados ficam

$$\int_{\Omega} N_i \frac{h}{A} d\Omega + \int_{\Omega} N_i \left(\sum_{m=1}^{M_w} \frac{h_m}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m)\right) d\Omega + \int_{\Gamma_C} N_i \frac{h}{a} d\Gamma +$$

$$+ \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y\rangle} h \vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla}\langle H\rangle \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathrm{e}^{\langle Y\rangle}(\langle H\rangle - Z_{\text{fundo}})\vec{\nabla} N_i \cdot \vec{\nabla} h \, d\Omega + \tag{5.397}$$

$$+ \int_{\Omega} N_i \, \mathrm{e}^{\langle G\rangle} \frac{\partial h}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} N_i \, g \, \mathrm{e}^{\langle G\rangle} \frac{\partial \langle H\rangle}{\partial t} d\Omega = 0 \quad , \quad i = 1, \ldots, N_N$$

Introduzindo em (5.397) as aproximações

$$h \approx \sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j \tag{5.348}$$

$$g \approx \sum_{j=1}^{N_N} g_j N_j \tag{5.398}$$

e procedendo aos adequados desenvolvimentos chega-se à seguinte equação diferencial matricial

$$\mathbf{C} \cdot \mathbf{h} + \mathbf{D} \cdot \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{g} \tag{5.399}$$

onde $\mathbf{h}$ e $\partial \mathbf{h}/\partial t$ representam, respectivamente, o vector e a derivada em ordem ao tempo do vector das perturbações de $H$ e $\mathbf{g}$ o vector das perturbações de $G$, nos $N_N$ nós da malha de elementos finitos.

» 1ª parcela da equação (5.397)

$$\int_\Omega N_i \frac{h}{A} d\Omega = \int_\Omega N_i \frac{1}{A} \left( \sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j \right) d\Omega = \sum_{j=1}^{N_N} h_j \int_\Omega \frac{1}{A} N_i N_j \, d\Omega =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} h_j C_{i,j}^{(1)} \quad , \quad i = 1, \ldots, N_N \tag{5.351}$$

com $C_{i,j}^{(1)}$ definido por

$$C_{i,j}^{(1)} = \int_\Omega \frac{1}{A} N_i N_j \, d\Omega \quad , \quad \forall i, j = 1, \ldots, N_N \tag{5.352}$$

» 2ª parcela da equação (5.397)

$$\int_\Omega N_i \left( \sum_{m=1}^{M_w} \frac{h_m}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \right) d\Omega = \int_\Omega N_i \left[ \sum_{m=1}^{M_w} \frac{1}{A_{w,m}} \left( \sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j(\vec{\mathbf{x}}_m) \right) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \right] d\Omega =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} h_j \int_\Omega N_i \left( \sum_{m=1}^{M_w} \frac{N_j(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_{w,m}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_m) \right) d\Omega = \sum_{j=1}^{N_N} h_j \left( \sum_{m=1}^{M_w} \frac{N_i(\vec{\mathbf{x}}_m) N_j(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_w(\vec{\mathbf{x}}_m)} \right) = \tag{5.353}$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} h_j \, C_{i,j}^{(2)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N$$

com $C_{i,j}^{(2)}$ definido por

$$C_{i,j}^{(2)} = \sum_{m=1}^{M_w} \frac{N_i(\vec{\mathbf{x}}_m) N_j(\vec{\mathbf{x}}_m)}{A_w(\vec{\mathbf{x}}_m)} \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \tag{5.354}$$

» 3ª parcela da equação (5.397)

$$\int_{\Gamma_c} N_i \frac{h}{a} d\Gamma = \int_{\Gamma_c} N_i \frac{1}{a} \left( \sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j \right) d\Gamma = \sum_{j=1}^{N_N} h_j \int_{\Gamma_c} \frac{1}{a} N_i \, N_j \, d\Gamma =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} h_j \, C_{i,j}^{(3)} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.355}$$

com $C_{i,j}^{(3)}$ definido por

$$C_{i,j}^{(3)} = \int_{\Gamma_c} \frac{1}{a} N_i \, N_j \, d\Gamma \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \tag{5.356}$$

» 4ª parcela da equação (5.397)

$$\int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\, h\, \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla}\langle H\rangle \, d\Omega = \int_\Omega e^{\langle Y\rangle} \left( \sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j \right) \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla}\langle H\rangle \, d\Omega =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} h_j \int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\, N_j\, \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla}\langle H\rangle \, d\Omega = \sum_{j=1}^{N_N} h_j\, C_{i,j}^{(4)} \quad , \quad i = 1,\ldots,N_N \tag{5.357}$$

com $C_{i,j}^{(4)}$ definido por

$$C_{i,j}^{(4)} = \int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\, N_j\, \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla}\langle H\rangle \, d\Omega = \int_\Omega e^{\langle Y\rangle}\, N_j \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial \langle H\rangle}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial \langle H\rangle}{\partial y} \right) d\Omega$$

$$\forall i, j = 1,\ldots,N_N \tag{5.358}$$

» 5ª parcela da equação (5.397)

$$\int_\Omega e^{\langle Y\rangle} \left( \langle H\rangle - Z_{\text{fundo}} \right) \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla} h \, d\Omega = \int_\Omega e^{\langle Y\rangle} \langle D\rangle \, \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla} h \, d\Omega =$$

$$= \int_\Omega e^{\langle Y\rangle} \langle D\rangle \, \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla} \left( \sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j \right) d\Omega = \sum_{j=1}^{N_N} h_j \int_\Omega e^{\langle Y\rangle} \langle D\rangle \, \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla} N_j \, d\Omega = \tag{5.359}$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} h_j\, C_{i,j}^{(5)} \quad , \quad i = 1,\ldots,N_N$$

com $\langle D\rangle = \langle H\rangle - Z_{\text{fundo}}$ e $C_{i,j}^{(5)}$ definido por

$$C_{i,j}^{(5)} = \int_\Omega e^{\langle Y\rangle} \langle D\rangle \, \vec{\nabla} N_i \mid \vec{\nabla} N_j \, d\Omega = \int_\Omega e^{\langle Y\rangle} \langle D\rangle \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) d\Omega$$

$$\forall i, j = 1,\ldots,N_N \tag{5.360}$$

» 6ª parcela da equação (5.397)

$$\int_\Omega N_i \, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial h}{\partial t} d\Omega = \int_\Omega N_i \, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_{j=1}^{N_N} h_j N_j \right) d\Omega = \int_\Omega N_i \, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \left( \sum_{j=1}^{N_N} \frac{\partial h_j}{\partial t} N_j \right) d\Omega =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} \frac{\partial h_j}{\partial t} \int_\Omega \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \, N_i \, N_j \, d\Omega = \sum_{j=1}^{N_N} \frac{\partial h_j}{\partial t} D_{i,j} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.361}$$

com $D_{i,j}$ definido por

$$D_{i,j} = \int_\Omega \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \, N_i \, N_j \, d\Omega \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \tag{5.362}$$

» 7ª parcela da equação (5.397)

$$\int_\Omega N_i \, g \, \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} d\Omega = \int_\Omega N_i \left( \sum_{j=1}^{N_N} g_j N_j \right) \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} d\Omega =$$

$$= \sum_{j=1}^{N_N} g_j \int_\Omega \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \, N_i \, N_j \, \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} d\Omega = - \sum_{j=1}^{N_N} g_j \, F_{i,j} \quad , \quad i = 1, ..., N_N \tag{5.400}$$

com $F_{i,j}$ definido por

$$F_{i,j} = - \int_\Omega \mathrm{e}^{\langle G \rangle} \, N_i \, N_j \, \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} d\Omega \quad , \quad \forall i, j = 1, ..., N_N \tag{5.401}$$

Rescrevendo (5.397) à custa destes desenvolvimentos para as suas parcelas, obtém-se

$$\sum_{j=1}^{N_N} h_j \left( C_{i,j}^{(1)} + C_{i,j}^{(2)} + C_{i,j}^{(3)} + C_{i,j}^{(4)} + C_{i,j}^{(5)} \right) + \sum_{j=1}^{N_N} \frac{\partial h_j}{\partial t} D_{i,j} = \sum_{j=1}^{N_N} g_j \, F_{i,j}$$

$$i = 1, , , , N_N \tag{5.402}$$

cuja forma matricial compacta já foi apresentada (5.399).

A coincidência da simbologia utilizada na equação diferencial matricial que relaciona as perturbações de $H$ e $G$ (5.399) relativamente a idêntica equação deduzida, na secção anterior, para as perturbações de $H$ e $Y$ (5.350) não é fruto do acaso, mas antes resultado da igualdade verificada nas respectivas expressões. A diferença reside no segundo membro destas equações matriciais, sendo $F_{i,j} = -E^{(2)}_{i,j}$. As considerações elaboradas na secção anterior relativamente à obtenção das matrizes $\mathbf{A}_k$, a partir da integração em ordem ao tempo da equação diferencial matricial (5.350), são transponíveis para esta secção. Assim, o algoritmo numérico que procede à determinação das matrizes $\mathbf{B}_k$ deverá efectuar, em cada instante $t_{k+1}$, a resolução simultânea dos $N_N$ sistemas de equações gerados pela expressão

$$\left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{D} + \theta\,\mathbf{C}_{(k+\gamma)}\right]\cdot\mathbf{B}_{(k+1)} =$$

$$= \left[\frac{1}{\Delta t}\mathbf{D} - (1-\theta)\,\mathbf{C}_{(k+\gamma)}\right]\cdot\mathbf{B}_{(k)} + (1-\theta_{\mathrm{cf}})\,\mathbf{F}_{(k)}\cdot\mathbf{I} + \theta_{\mathrm{cf}}\,\mathbf{F}_{(k+1)}\cdot\mathbf{I} \qquad (5.403)$$

$$\text{para} \quad t_{k+1} = t_k + \Delta t \quad \text{e} \quad k = 0,1,2,\ldots,\infty$$

onde $\mathbf{I}$ representa a matriz identidade.

A resolução de (5.403) para os sucessivos instantes é precedida pela introdução das condições fronteira de Dirichlet. São condições homogéneas (5.175), tanto para os aquíferos confinados como para os não confinados, pelo que aos respectivos nós é imposta uma perturbação nula $h = 0$. No primeiro incremento da integração em ordem ao tempo, a condição inicial também é homogénea (5.172).

A semelhança dos sistemas de equações múltiplas (5.389) e (5.403) recomenda a elaboração de um programa de cálculo que efectue a determinação conjunta das matrizes $\mathbf{A}_k$ e $\mathbf{B}_k$, tirando partido da igualdade das matrizes $\mathbf{C}$ e $\mathbf{D}$ presentes nos dois sistemas de equações. Deste modo economizar-se-ia um significativo esforço computacional. Contudo, as circunstâncias inerentes às sucessivas fases do trabalho que aqui se apresenta não favoreceram a percepção, em momento oportuno, das vantagens inerentes a uma abordagem conjunta.

Assim, para a determinação numérica das matrizes $\mathbf{B}_k$, pelo MEF, foi escrito um programa de cálculo baseado nas equações acima descritas, **FLWPG2**, cuja execução é precedida pela resolução da equação diferencial do escoamento, escrita para os valores esperados, com o programa **FLWM2**. Uma vez encontrada a matriz $\mathbf{B}_k$ para cada instante, e antes de passar ao incremento seguinte, o programa calcula a matriz de covariância de $H$ para esse instante, efectuando o seguinte produto matricial

$$\mathbf{C}_{H_kH_k} = \mathbf{B}_k \cdot \mathbf{C}_{GG} \cdot \mathbf{B}_k^T \tag{5.404}$$

e regista em ficheiro ASCII os valores da diagonal principal de $\mathbf{C}_{H_kH_k}$ que representam, nesse instante, a variância da estimação de $H$ resultante da incerteza associada à estimação de $G$.

```
>FLWPG2.EXE - Ficheiro de parâmetros
>file??.dat                    \ficheiro de dados gerais s/ a malha de elementos finitos
>IFR                           \IFR=1 -> gravar em [file??.dbg];IFR=0 -> não gravar
>file??.dbg                    \ficheiro de resultados (debug)
>file??.cfh                    \ficheiro c/ as condições fronteira de Dirichlet
>file??.kkk                    \ficheiro c/ K (ou T) esperado (condicionado ou não);
                                Unidades: m/d (ou m²/d)
>file??.cst                    \ficheiro c/ ω_d (ou S) esperado (condicionado ou não);
                                Unidades: m/m (ou m⁻¹)
>file??.zbt                    \ficheiro c/ Z_fundo; Unidades: m
>file??.hhh                    \ficheiro c/ {<H>} (valores esperados de H)
>file??.hpg                    \ficheiro c/ a matriz B_k das perturbações de H
>NINT, DELTA                   \número de incrementos da integração no tempo (Δt),
                                dimensão do intervalo Δt (Unidades: d)
>TETA, TETACF, GAMA            \parâmetros da integração no tempo: θ, θ_cf, γ
>IPCS                          \usar IPCS=4 -> interpolar G=lnω_d (ou G=lnS)
>IPCT                          \usar IPCT=4 -> interpolar Y=lnK (ou Y=lnT)
>IAQUIF                        \tipo de aquífero (IAQUIF=1 -> confinado,
                                IAQUIF=2 -> não confinado)
>ICOV                          \calcular variância de H (ICOV=0 -> não calcular;
                                ICOV=1 -> calcular)
>file??.cgg                    \ficheiro com a matriz C_GG (condicionada ou não);
                                (ICOV=0 -> nofile.cgg)
>jobname                       \nome para definir os ficheiros com a variância de H;
                                (ICOV=0 -> nojob)
>IPERTD                        \gravar linhas de B_k correspondentes aos pontos de medição
                                de H (IPERTD=0 -> não gravar; IPERTD=1 -> gravar)
>file??.ndg                    \ficheiro com a informação dos instantes e nós com medições
                                de H (IPERTD =0 -> nofile.ndg)
>file??.bdd                    \ficheiro p/ gravar linhas de B_k correspondentes aos pontos
                                de medição de H (IPERTD =0 -> nofile.bdd)
>ICOMP                         \tipo de máquina: PC->1; CRAZY->2; CIVILW1->3
```

Figura 5.55 – Ficheiro tipo dos parâmetros gerais do programa FLWPG2 que calcula a covariância do nível piezométrico, para escoamentos em aquíferos regionais porosos confinados ou não confinados.

Para os aquíferos confinados o programa **FLWPG2** assume $\langle D \rangle = 1$ e não considera a contribuição de $C_{i,j}^{(4)}$ (5.358) para a formação da matriz $\mathbf{C}$, uma vez que resulta directamente

da parcela $-\vec{\nabla}\left|\left(e^{\langle Y\rangle}\, h\vec{\nabla}\langle H\rangle\right)\right.$ que só existe na equação diferencial das perturbações dos aquíferos não confinados (5.392).

A versão actual do programa **FLWPG2** também não contempla[67] as *condições fronteira tipo* 2, 4 e 6 definidas no final da secção 5.5.5, ou seja, as condições fronteira de Cauchy e as extracções ou recargas superficiais (tipo Cauchy), difusas ou pontuais, estabelecidas através de uma relação linear com o nível piezométrico. Refira-se também, que numa fase inicial da elaboração do algoritmo da modelação inversa foi necessário gravar em ficheiro binário as linhas das matrizes $\mathbf{B}_k$ correspondentes aos nós com medições de níveis piezométricos, pelo este programa contempla essa possibilidade, embora sem interesse no âmbito da simulação estocástica directa. Na Figura 5.55 é exibido o ficheiro tipo com os dados que comandam a execução deste programa.

[67] À semelhança do programa FLWPY2.

### 5.5.8 Exemplos de aplicação do método das perturbações. Comparação com simulações de Monte-Carlo não condicionadas.

Nas secções 5.4.4 e 5.4.5 foram apresentados exercícios simples para exemplificar a aplicação do método das simulações de Monte-Carlo. Tratavam-se de problemas permanentes, onde apenas se avaliava o impacto da variabilidade de um dos parâmetros hidrogeológicos, a conductividade hidráulica. Uma vez terminada a exposição do método das perturbações, afigura-se como oportuna a realização de uma comparação de resultados, entre os dois métodos, para esses exercícios. O método das perturbações é primeiro aplicado ao domínio discretizado por uma malha bastante aberta, apenas com 72 elementos finitos de 500×500 $m^2$ e 253 nós. Nestas condições, os exemplos ES21_K e ES22_K são resolvidos pelo método das perturbações com as designações, respectivamente, de EP21_K e EP22_K. Em seguida, os mesmos exemplos são resolvidos para a malha utilizada nas simulações de Monte-Carlo (800 elementos de 150×150 $m^2$ e 2521 nós) com as designações, respectivamente, de EP210_K e EP220_K. Ao resolver duas vezes os mesmos exercícios pelo método das perturbações pretende-se também avaliar a sensibilidade dos resultados ao grau de discretização do domínio, uma vez que existem limitações computacionais[68] a considerar.

A equação diferencial dos valores esperados do escoamento é resolvida com o programa **FLMW2** para a média geométrica da conductividade hidráulica, $K_G = 20\,\mathrm{m/d}$, correspondente ao exponencial do valor médio da *f.a.* $Y = \ln K$ (Tabela 5.1). Como consequência, os valores esperados de $H$ correspondem aos da solução analítica conhecida (exercício ES20_K apresentado na secção 5.4.4). Para a determinação da variância de $H$ nos nós da malha, com o programa **FLWPY2**, a matriz de covariância não condicionada de $Y$ nos nós da malha é previamente calculada com o programa **COVNC** para os parâmetros estatísticos utilizados na geração das realizações não condicionadas de $Y = \ln K$ na secção 5.4.4 (Tabela 5.1).

---

[68] Para compreender estas limitações, refira-se que para a malha de 800 elementos e 2521 nós, utilizada nas simulações de Monte-Carlo, a matriz $\mathbf{A}_k$ ocupa 48.5 Mb de memória, a matriz de covariância de $Y$ ocupa espaço igual e o cálculo da covariância de $H$ (5.231) obriga a definir mais uma matriz com a mesma dimensão. Só estas três matrizes ocupam mais de 145 Mb de memória.

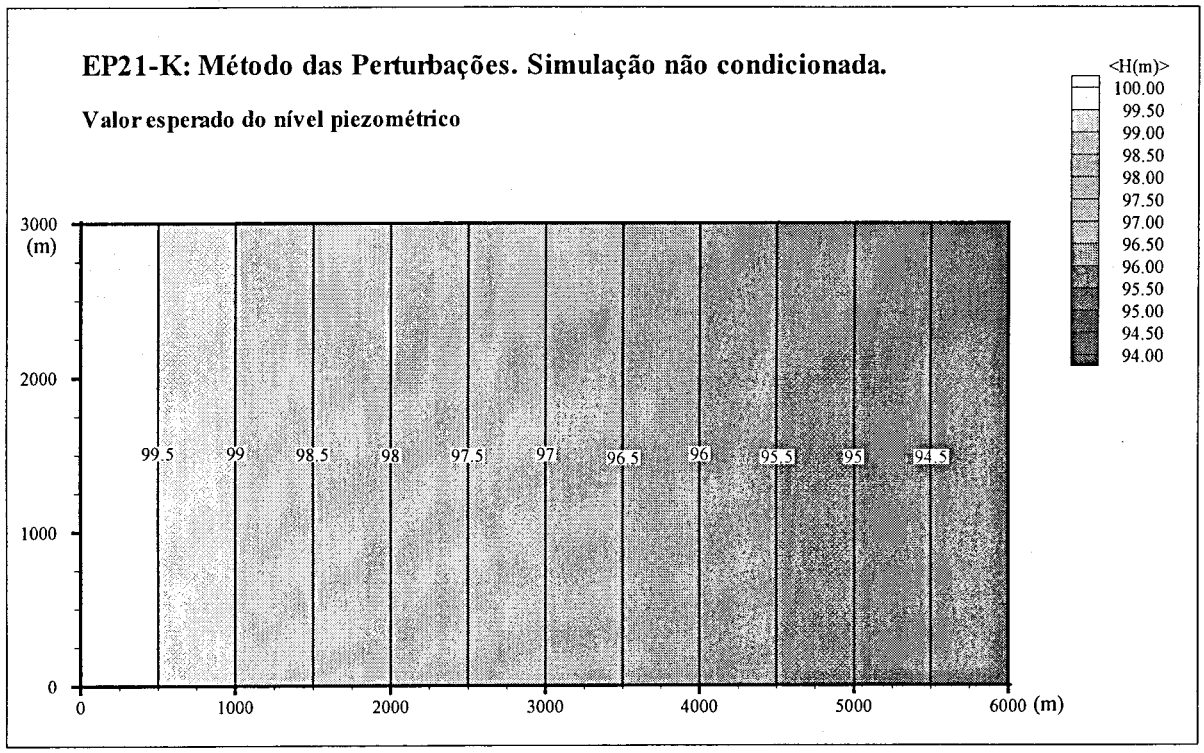



Figura 5.56 – EP21_K: Valor esperado do nível piezométrico (72 elementos).

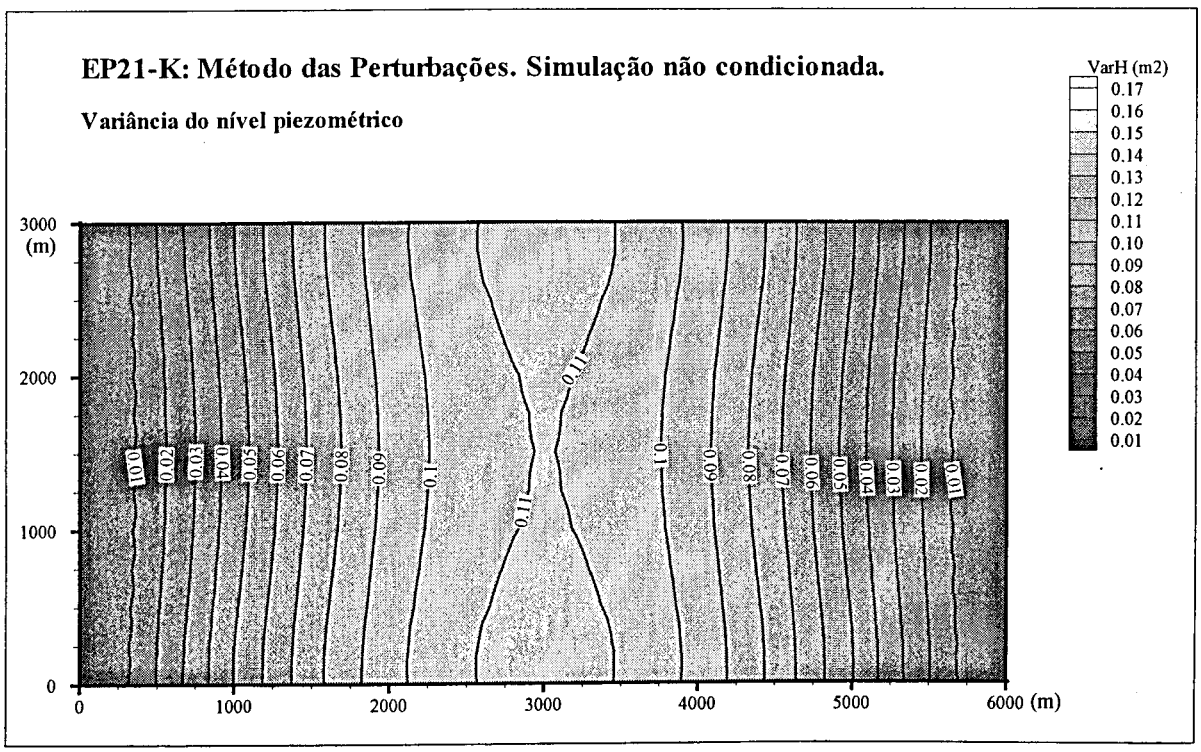



Figura 5.57 – EP21_K: Variância do nível piezométrico (72 elementos).

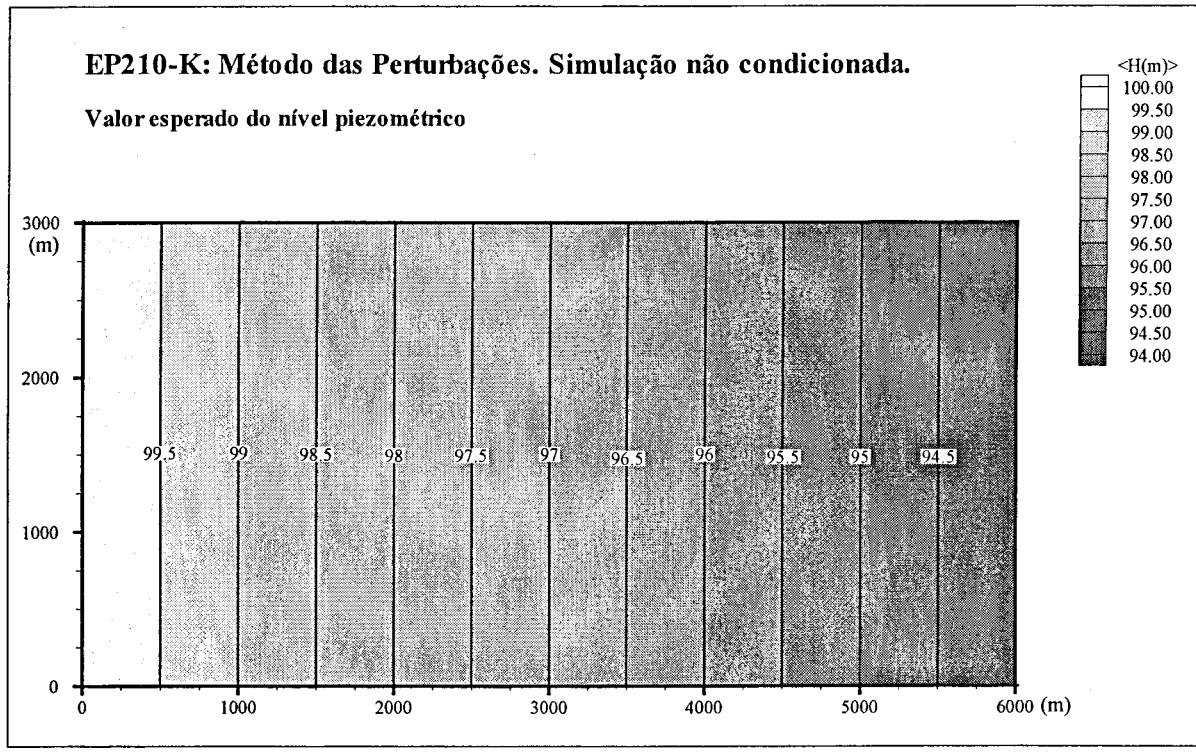



Figura 5.58 – EP210_K: Valor esperado do nível piezométrico (800 elementos).

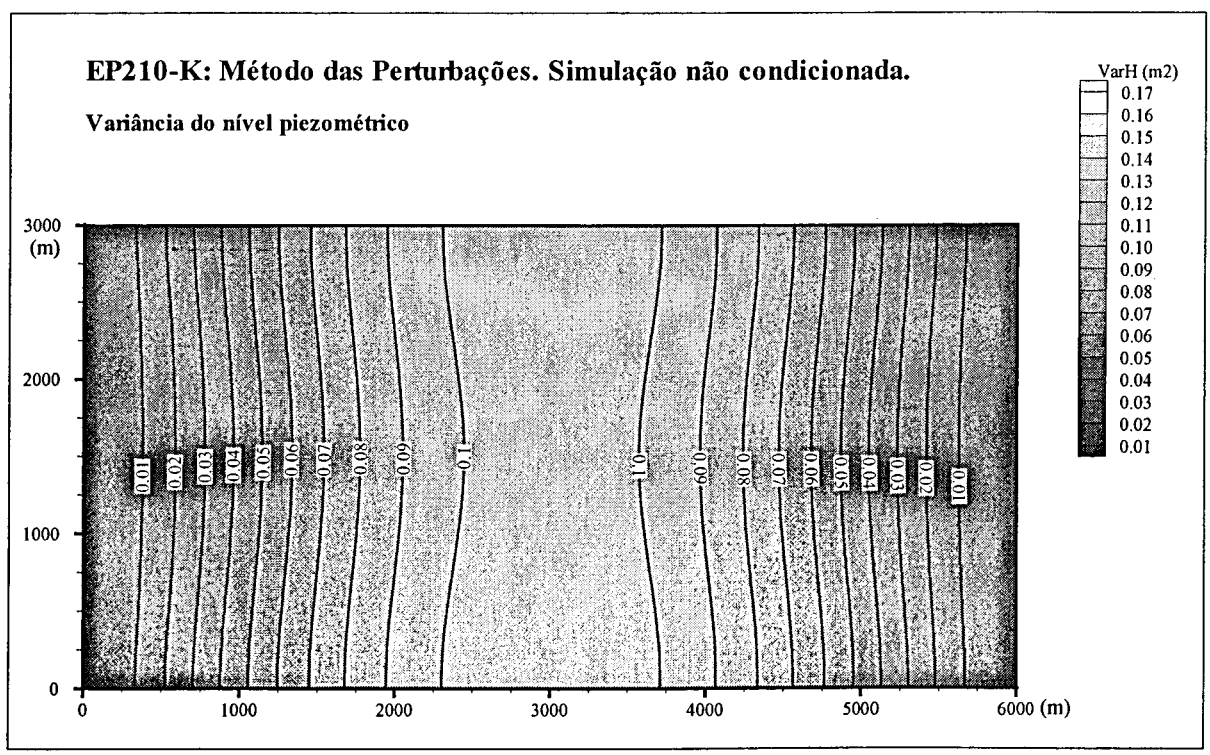



Figura 5.59 – EP210_K: Variância do nível piezométrico (800 elementos).

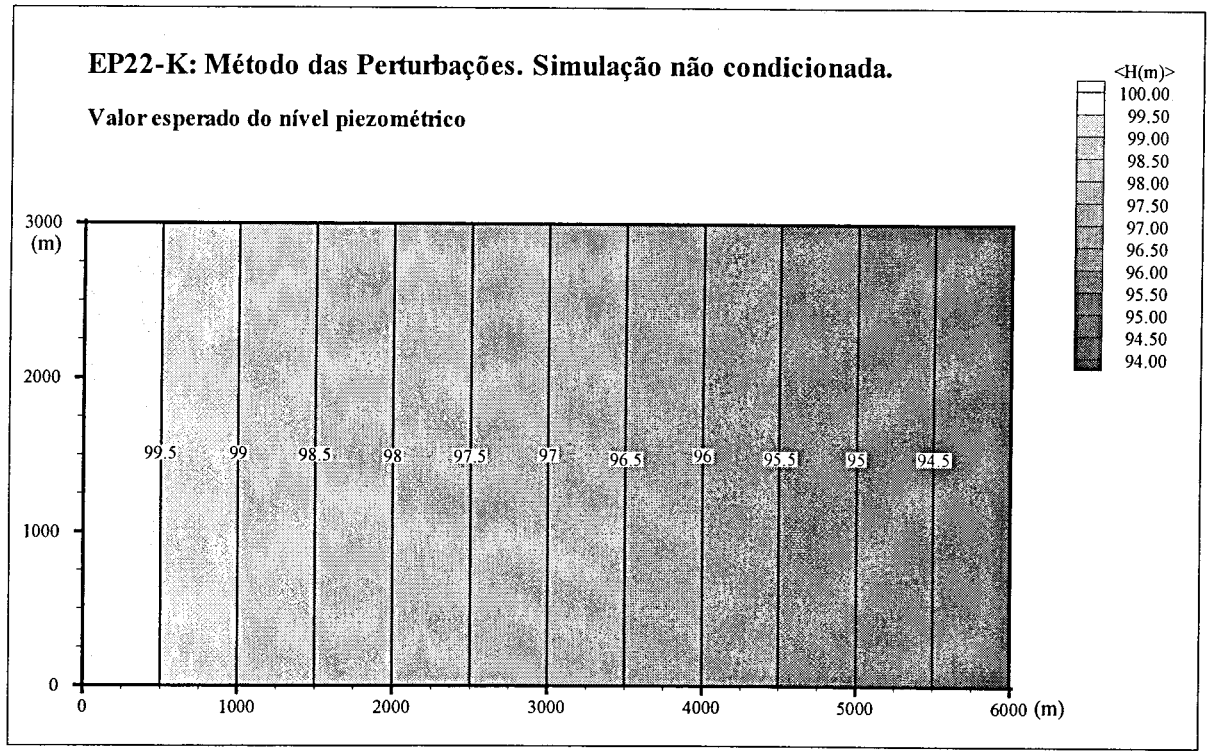



Figura 5.60 – EP22_K: Valor esperado do nível piezométrico (72 elementos).

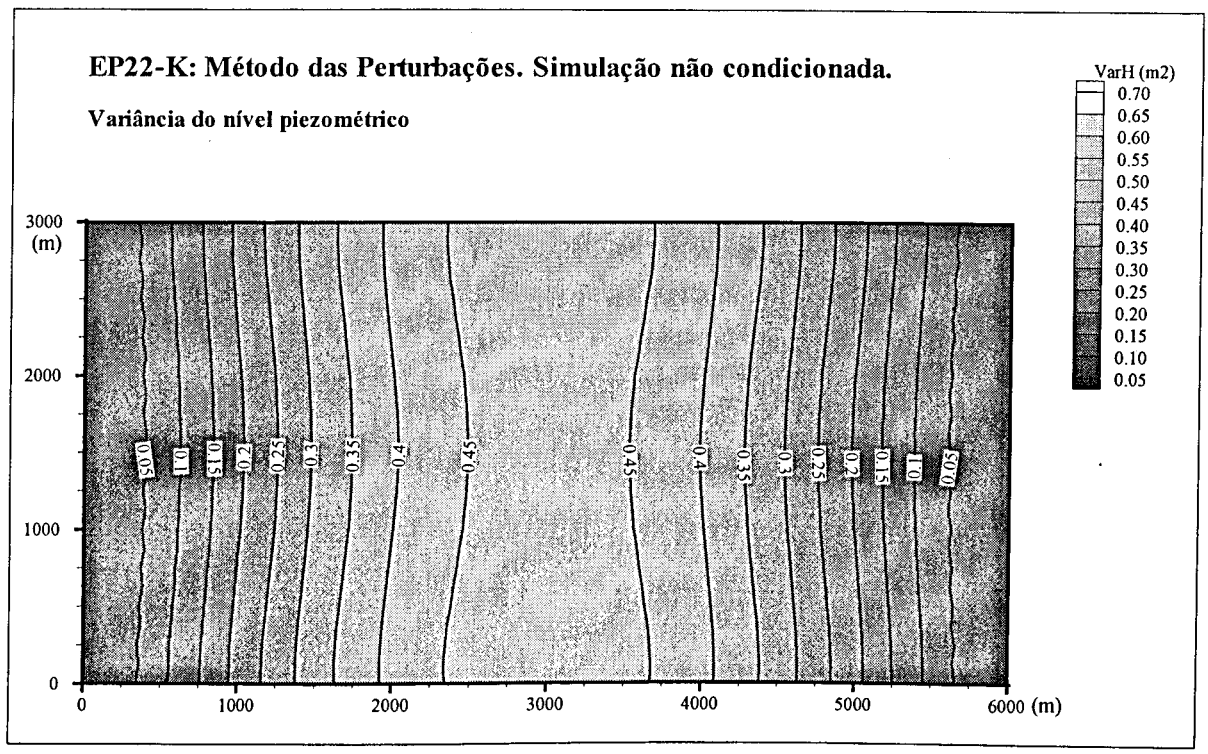



Figura 5.61 – EP22_K: Variância do nível piezométrico (malha de 72 elementos).

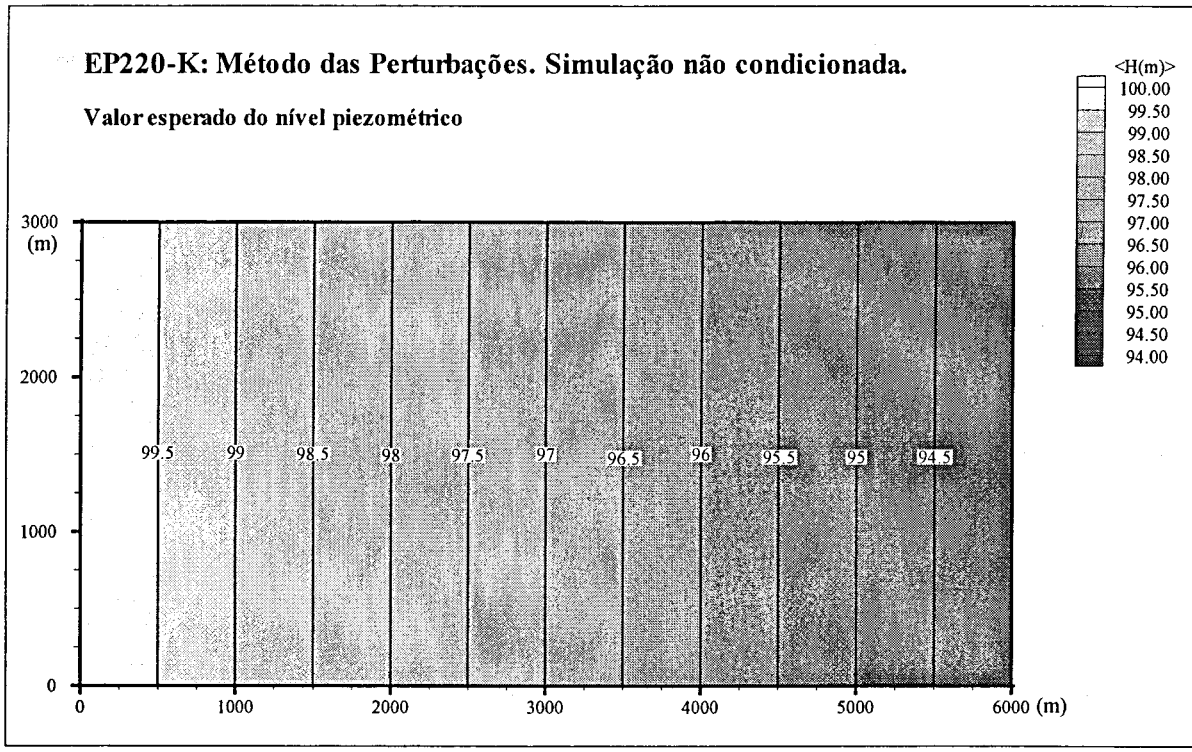



Figura 5.62 – EP220_K: Valor esperado do nível piezométrico (800 elementos).

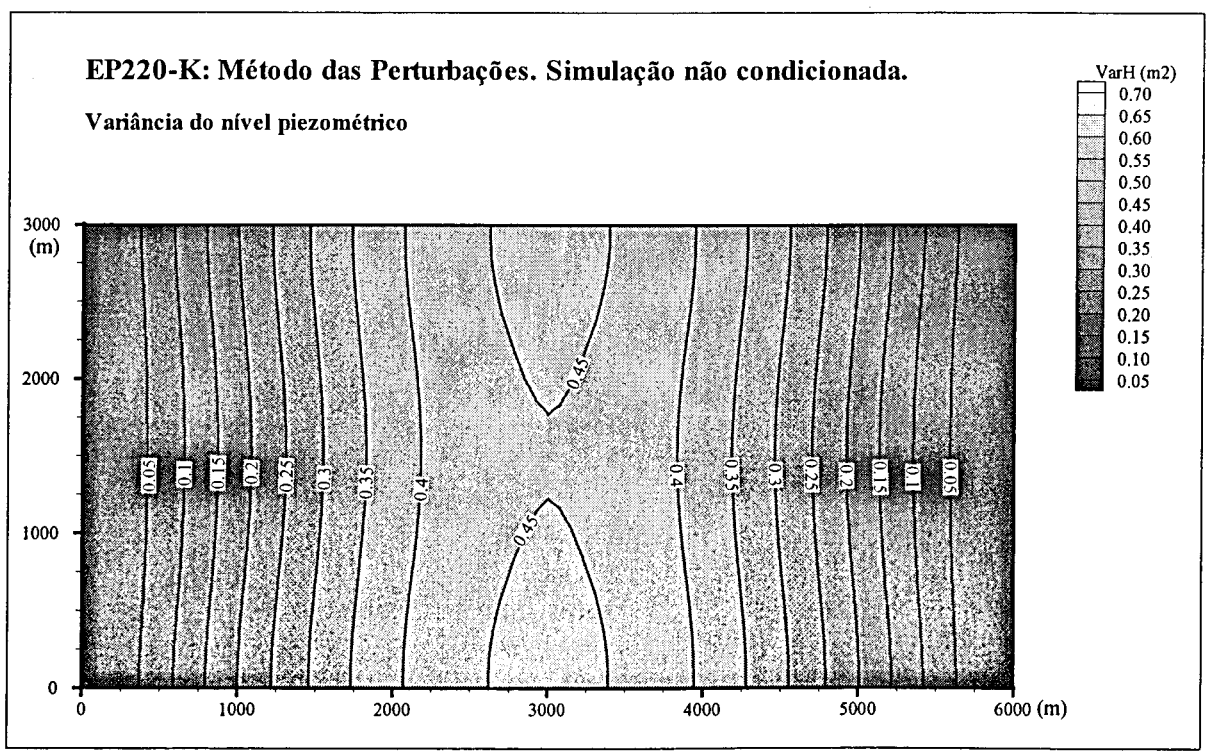



Figura 5.63 – EP220_K: Variância do nível piezométrico (800 elementos).

Uma breve análise destas figuras permite constatar que se para o valor esperado de $H$ não verifica qualquer diferença entre as simulações com 72 e 800 elementos, o mesmo não acontece com a variância de $H$. De facto, a variância produzida pelo método das perturbações revela-se sensível ao grau de discretização do domínio. Sob o ponto de vista qualitativo, observa-se que esta sensibilidade não afecta significativamente a "imagem" da distribuição espacial da variância. Já do ponto de vista quantitativo é de assinalar um pequeno agravamento dos valores da variância com a diminuição do grau de discretização do domínio, facto que se afigura como "saudável" na medida em que, intuitivamente, a um maior refinamento da malha deverá corresponder uma redução da incerteza associada aos resultados esperados. O ligeiro agravamento da variância pode ser facilmente observado na Figura 5.64 e na Figura 5.65 onde são representados os perfis longitudinais da variância para cada par de exercícios resolvidos para a mesma variância de $Y = \ln K$.

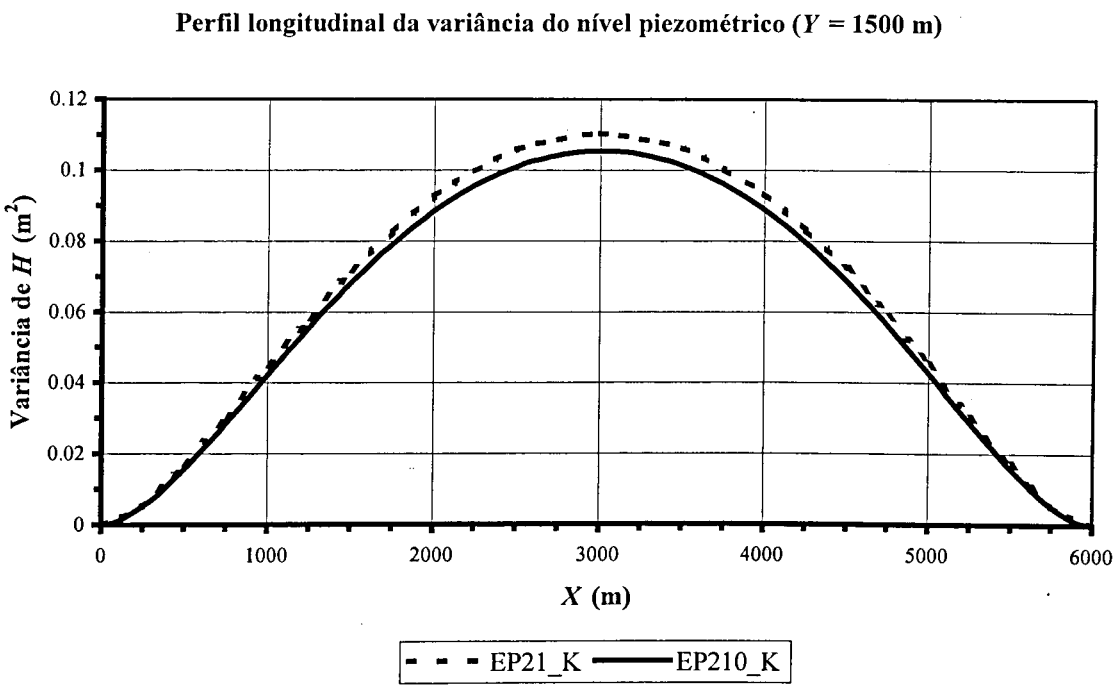



Figura 5.64 – EP21_K e EP210_K: Comparação dos perfis longitudinais da variância do nível piezométrico obtida pelo método das perturbações para dois graus de discretização do domínio ($\sigma_Y^2 = 0.23$).

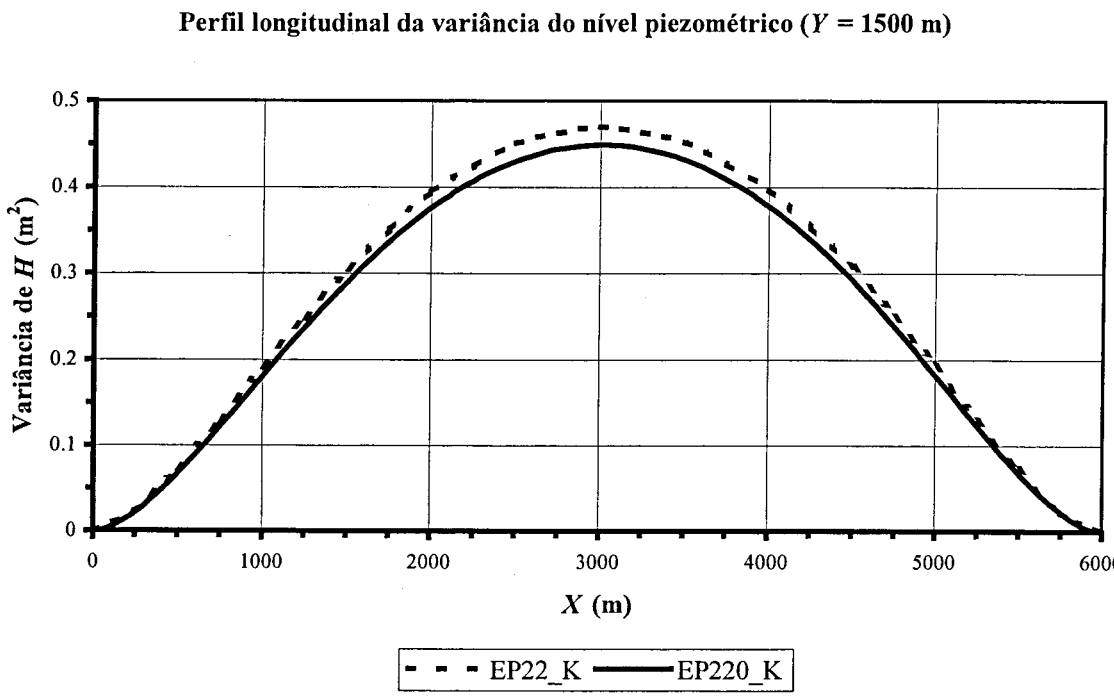



Figura 5.65 – EP22_K e EP220_K: Comparação dos perfis longitudinais da variância do nível piezométrico obtida pelo método das perturbações para dois graus de discretização do domínio ($\sigma_Y^2 = 0.98$).

Nos exercícios com a malha mais refinada (800 elementos) encontram-se nós separados por 75m, enquanto que na malha mais aberta (72 elementos) os pontos mais próximos estão separados de 250m. Esta distância é metade da distância integral, $l_Y$, arbitrada para este conjunto de simulações não condicionadas (Tabela 5.1), ou seja, 1/6 do alcance (ou distância de correlação)[69]. Mas aparentemente, e de acordo com os resultados destes exercícios, a malha mais aberta ainda captura uma parcela importante da estrutura de correlação espacial. Estas observações, embora respeitantes a exercícios simples e para simulações não condicionadas, parecem autorizar um certo relaxamento da discretização do domínio, em benefício da economia do esforço computacional[70].

Outra análise comparativa oportuna envolve os perfis das variâncias obtidas pelas simulações de Monte-Carlo não condicionadas (secção 5.4.4, Figura 5.21) e os valores da expressão de Gelhar para um aquífero regional, isotrópico, de dimensão infinita, com um

[69] Para semivariogramas exponenciais, o alcance (ou distância de correlação) é triplo da distância integral.
[70] Este assunto é retomado na secção seguinte, a propósito das simulações condicionadas.

escoamento médio permanente e uniforme e com as transmissividade e espessura médias constantes

$$\sigma_H^2 = 0.37\,\sigma_f^2\, l^2 J^2 \ln\left(\frac{1.21B}{Jl}\right) \tag{5.61}$$

aplicada aos dados dos exercícios ES21_K, EP21_K, EP210_K e ES22_K, EP22_K, EP220_K que aqui se recordam

- ES21_K, EP21_K, EP210_K: $\sigma_Y^2 = 0.23 \Rightarrow \sigma_H^2 = 0.102\ \mathrm{m}^2$
- ES22_K, EP22_K, EP220_K: $\sigma^2 = 0.98 \Rightarrow \sigma_H^2 = 0.435\ \mathrm{m}^2$

Os máximos dos perfis longitudinais das variâncias obtidas pelo método das perturbações para a malha mais refinada, localizados no ponto mais afastado das fronteira[71], são os que se aproximam mais dos resultados da expressão de Gelhar. Os que se afastam mais são os das variâncias produzidas pelas simulações de Monte-Carlo não condicionadas. Contudo, estes últimos deverão ser observados com a reserva que resulta do facto de as 300 realizações utilizadas serem claramente insuficientes[72]. É convicção do autor que um aumento significativo das realizações de $K$, logo das correspondentes simulações, deverá proporcionar, por um lado, a estabilização das imagens e dos perfis longitudinais das variâncias, e por outro, uma redução dos valores máximos e uma aproximação aos resultados do método das perturbações e da fórmula de Gelhar.

[71] Os pontos mais afastados das fronteiras são os que se encontram mais próximos das condições de validade da expressão de Gelhar (5.61).

[72] Não se investiu mais na análise das simulações não condicionadas, em particular pelo método de Monte-Carlo, visto terem reduzido interesse prático.

### 5.5.9 Exemplos de aplicação do método das perturbações. Comparação com simulações de Monte-Carlo condicionadas.

Nesta secção o método das perturbações é aplicado ao mesmo exercício que, na secção 5.4.5, serviu para exemplificar o *msM-C* condicionadas. À semelhança da secção anterior, o problema é resolvido duas vezes, primeiro com a malha mais aberta (72 elementos) e depois com a mais refinada (800 elementos), com as designações, respectivamente, de EPC42_K e EPC420_K. Assim, tomando como base de trabalho a mesma amostra de "dados de campo" da conductividade hidráulica, extraída da distribuição "real" (Figura 5.23), e os parâmetros estatísticos então considerados (Tabela 5.5), estima-se a distribuição espacial de $K$ por krigagem simples[73] e calcula-se a matriz de covariância dos erros de estimação de $Y = \ln K$, que corresponde à matriz de covariância condicionada da transformada logarítmica da conductividade hidráulica, $\mathbf{C}^{cd}$, se $Y$ for uma *f.a.* multivariada normal. Para o efeito são executados os programas **SKSIM** e **COVCD**, cujos ficheiros de parâmetros para o exercício EPC42_K são apresentados a título exemplificativo (Figura 5.66 e Figura 5.67).

```
>EPC42_K - Ficheiro de parâmetros para SKSIM.EXE
>epc42_k.dat                    \ficheiro de dados gerais s/ a malha de elementos finitos
>esc42_k_amostra_1.dat          \ficheiro com a amostra da função aleatória (FA)
>2  3  4                        \colunas com X(m), Y(m) e FA no ficheiro da amostra
>1                              \ITR=0 -> não transformar; ITR =1 -> exp(FA);
                                 ITR =2 -> ln(FA)
>epc42_k_sksim.pva              \ficheiro ASCII para gravar a FA estimada e transformada
>epc42_k_sksim.mns              \ficheiro BINÁRIO p/ gravar a FA estimada e transformada
>0                              \IRO=0 -> não calcular ρy; IRO=1 -> calcular e gravar ρy
>nofile.roy                     \ficheiro BINÁRIO para gravar o parâmetro ρy;
                                 (se IRO=0 -> nofile.roy)
>-93939                         \valor da média da FA;
                                 (VMED=-93939 -> calcular a partir da amostra)
>2                              \tipo de semivariograma:
                                 (ISEMIV=1-> esférico; ISEMIV=2-> exponencial;
                                  ISEMIV=3-> gaussiano)
>1.056                          \variância da FA (sem o efeito pepita)
>0.00                           \efeito pepita da FA
>2000                           \aa: parâmetro relacionado com a distância integral(ly)
                                 (ISEMIV=1 -> ly=3*aa/8, alcance=aa;
                                  ISEMIV=2 -> ly=aa, alcance=3*aa;
                                  ISEMIV=3 -> Iy=aa/2*sqrt(PI), alcance=aa*sqrt(3))
>1                              \Tipo de máquina: PC->1; CRAZY->2; CIVILW1->3
```

Figura 5.66 – EPC42_K: Ficheiro de parâmetros do programa SKSIM que estima, por krigagem simples, os valores de $K$ nos nós da malha de elementos finitos.

[73] Em rigor, a krigagem estima os valores de $Y$=ln$K$ nos nós da malha de elementos finitos, os quais são depois convertidos, por exponenciação, em valores de $K$.

```
>EPC42_K - Ficheiro de parâmetros para COVCD.EXE
>epc42_k.dat                    \ficheiro de dados gerais s/ a malha de elementos finitos
>esc42_k_amostra_1.dat          \ficheiro com a amostra da função aleatória (FA)
>2  3                           \colunas com X(m) e Y(m) no ficheiro da amostra
>epc42_k_y_cd.cyy               \ficheiro BINÁRIO para gravar a matriz de covariância
                                 condicionada de Y=lnK (C_YY)
>epc42_k_vary_cd.pva            \ficheiro ASCII para gravar a variância condicionada
                                 de Y=lnK (σ_Y²)
>2                              \tipo de semivariograma
                                 (ISEMIV=1-> esférico; ISEMIV=2-> exponencial;
                                  ISEMIV=3-> gaussiano)
>1.056                          \variância da FA (sem o efeito pepita)
>0.00                           \efeito pepita da FA
>2000                           \aa: parâmetro relacionado com a distância integral(I_Y)
                                 (ISEMIV=1 -> I_Y=3*aa/8, alcance=aa;
                                  ISEMIV=2 -> I_Y=aa, alcance=3*aa;
                                  ISEMIV=3 -> Iy=aa/2*sqrt(PI), alcance=aa*sqrt(3))
>1                              \Tipo de máquina: PC->1; CRAZY->2; CIVILW1->3
```

Figura 5.67 – EPC42_K: Ficheiro de parâmetros do programa COVCD que calcula a matriz de covariância condicionada de $Y$=ln$K$ nos nós da malha de elementos finitos.

A equação diferencial dos valores esperados do escoamento é resolvida com o programa **FLWM2** para a distribuição espacial de $K$ estimada pelo programa **SKSIM**. Para a determinação da variância condicionada nos nós da malha, $\sigma_Y^{2,cd}$, o programa **FLWPY2** recorre à matriz de covariância condicionada, $\mathbf{C}_{YY}^{cd}$, previamente calculada pelo programa **COVCD**.

Nas páginas seguintes são exibidas as imagens das distribuições estimadas de $K$, das variâncias dos erros de estimação da transformada logarítmica de $K$ (que correspondem às variâncias condicionadas de $Y = \ln K$), dos valores esperados e variâncias do nível piezométrico e dos intervalos de confiança de 95% dos resultados da simulação estocástica directa $[\langle H\rangle - 2\sigma_H, \langle H\rangle + 2\sigma_H]$ realizada pelo método das perturbações para os exemplos EPC42_K e EPC420_K, os quais correspondem à resolução do mesmo problema para diferentes graus de discretização do domínio.

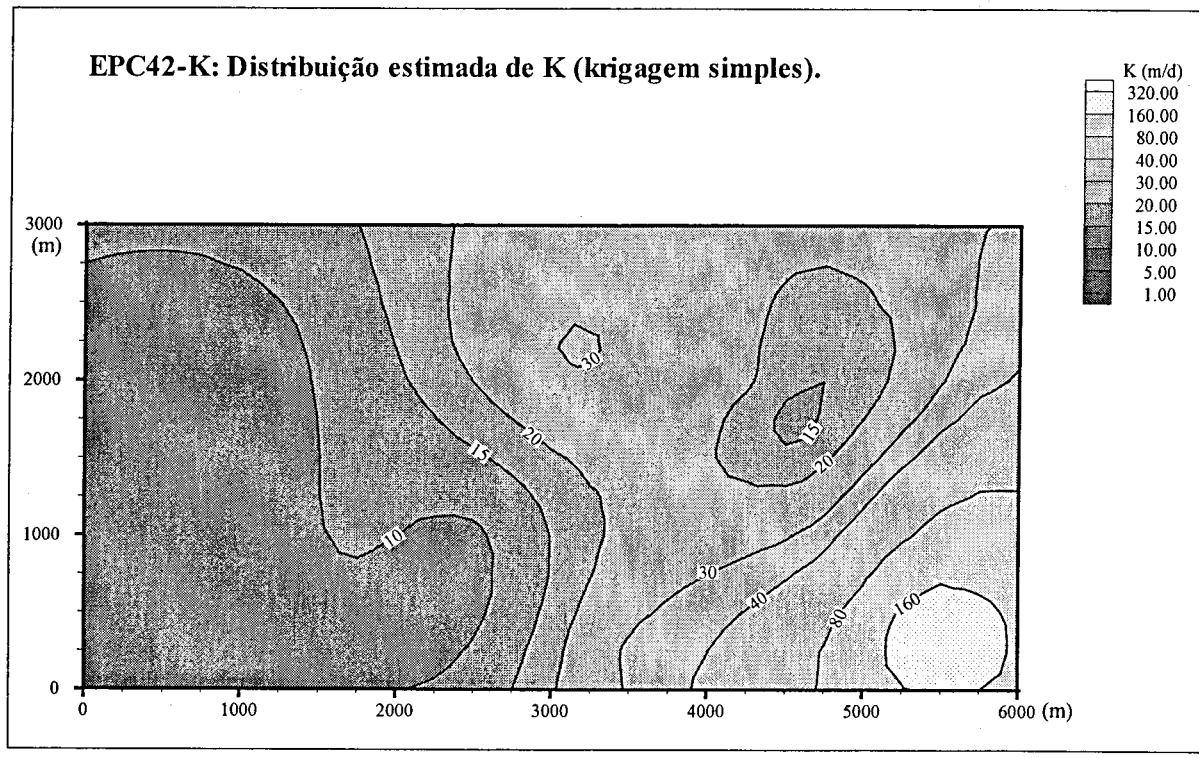



Figura 5.68 – EPC42_K: Imagem da conductividade hidráulica, estimada por krigagem simples (72 elementos).

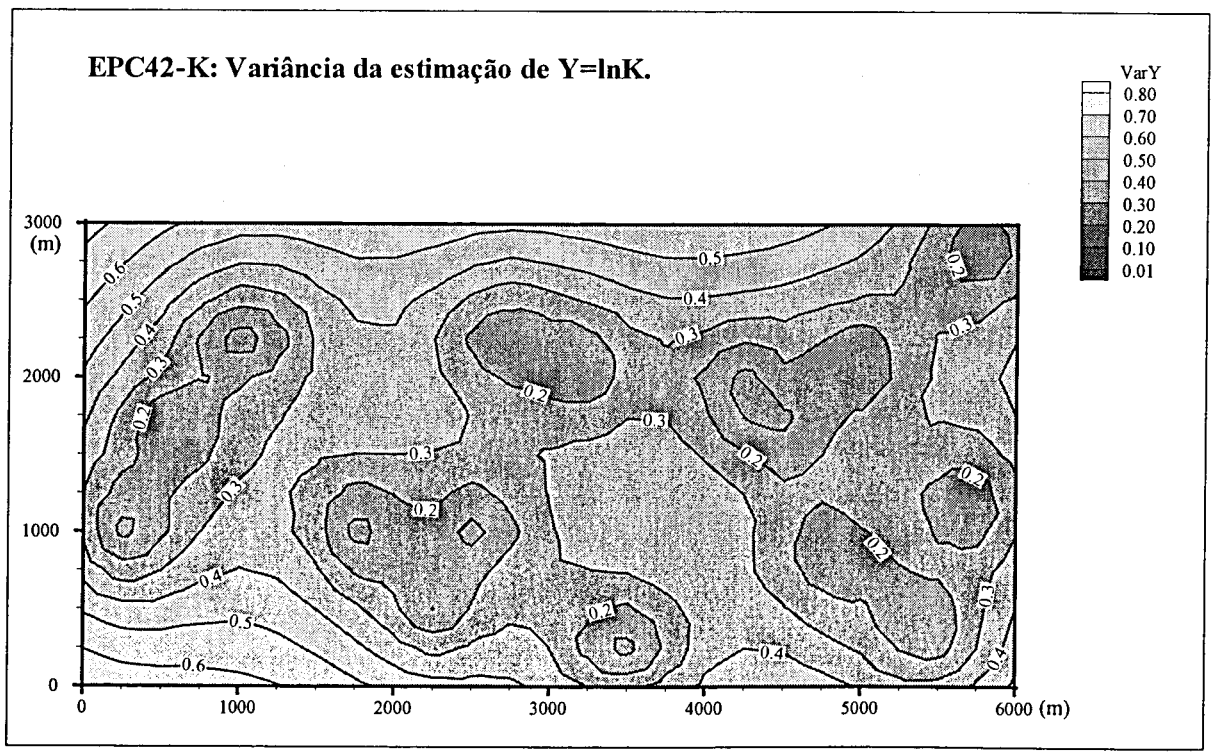



Figura 5.69 – EPC42_K: Imagem da variância condicionada da transformada logarítmica da conductividade hidráulica, $Y$=ln$K$ (72 elementos).

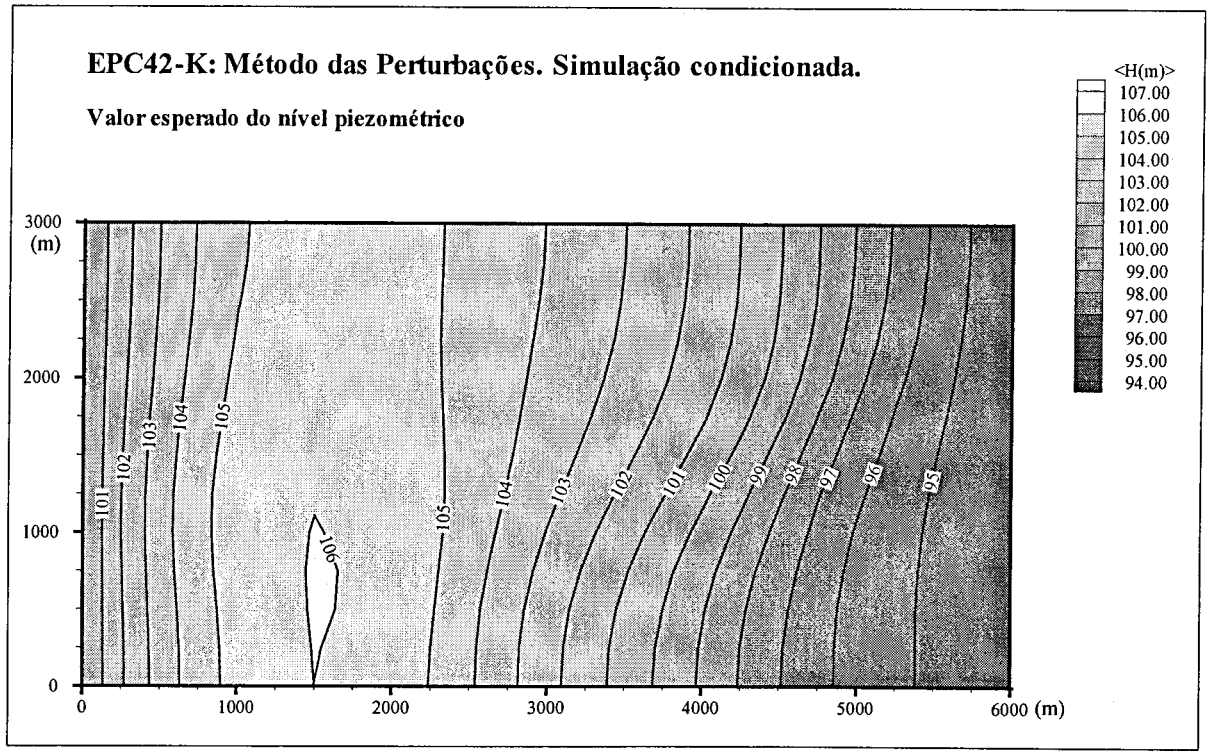



Figura 5.70 – EPC42_K: Valor esperado do nível piezométrico (72 elementos).

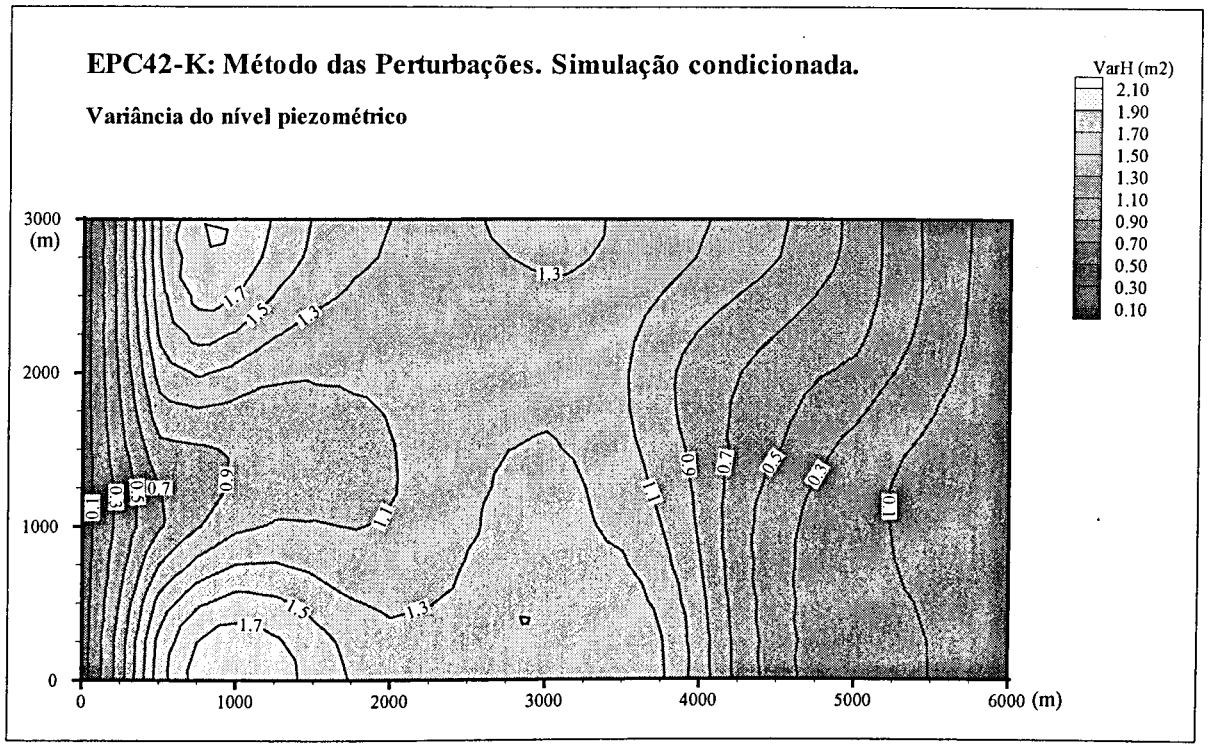



Figura 5.71 – EPC42_K: Variância do nível piezométrico (72 elementos).

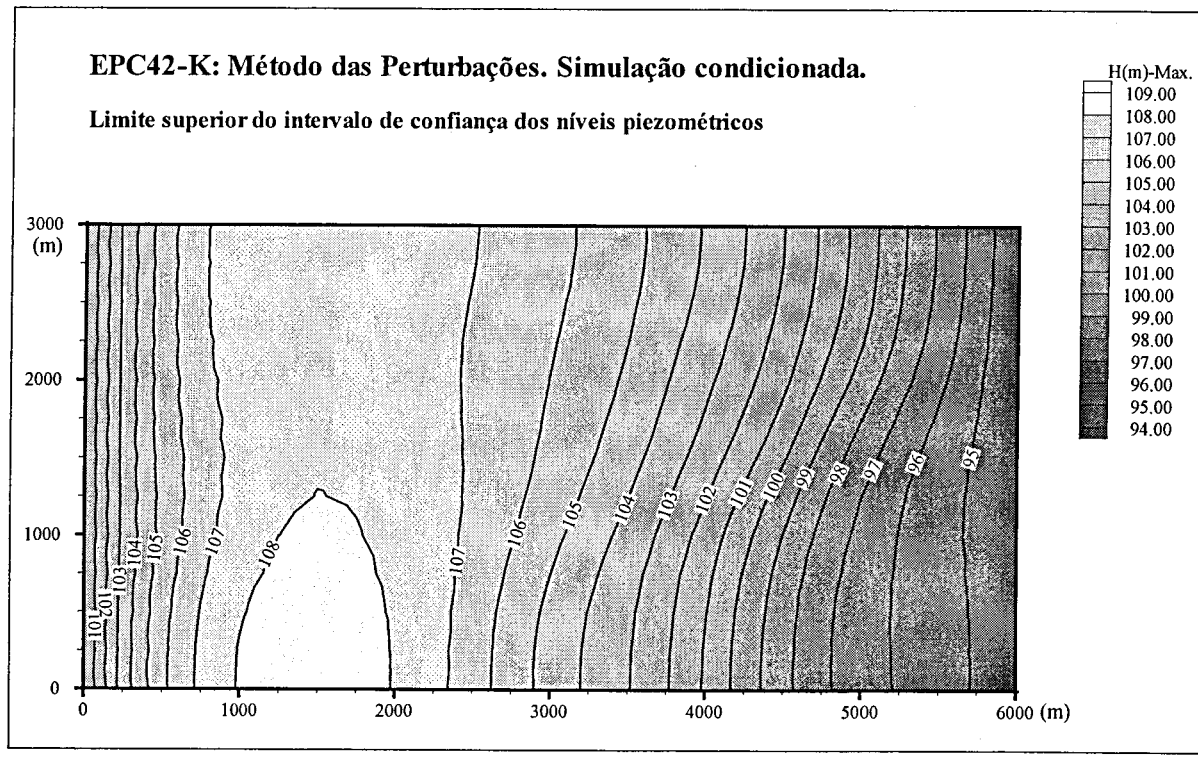



Figura 5.72 – EPC42_K: Limite superior do intervalo de confiança dos níveis piezométricos estimados pelo método das perturbações (72 elementos).

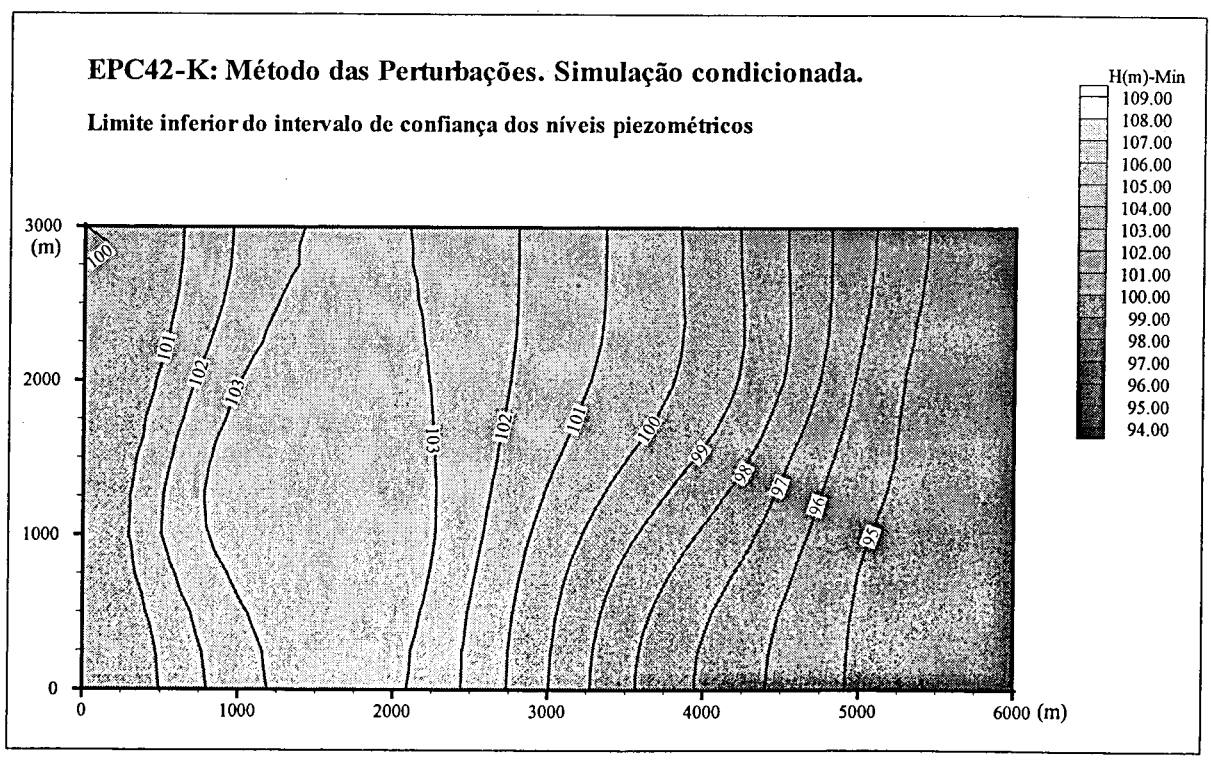



Figura 5.73 – EPC42_K: Limite inferior do intervalo de confiança dos níveis piezométricos estimados pelo método das perturbações (72 elementos).

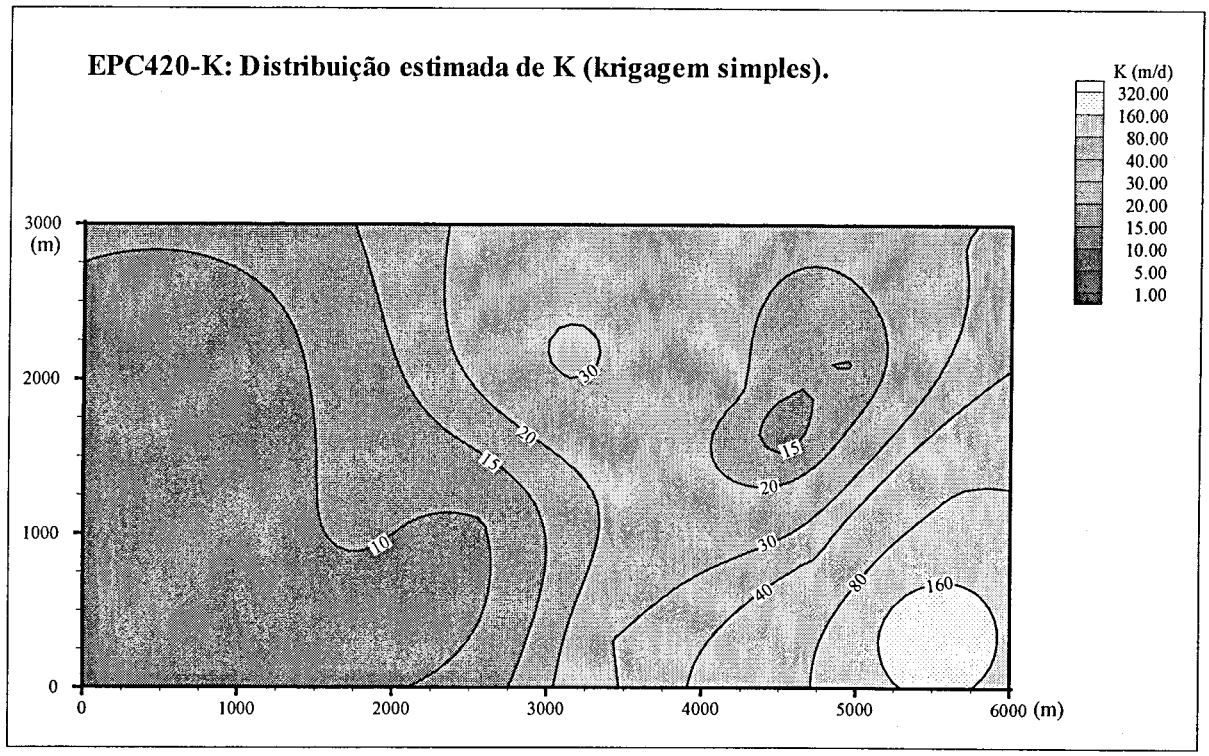



Figura 5.74 – EPC420_K: Imagem da conductividade hidráulica, estimada por krigagem simples (800 elementos).

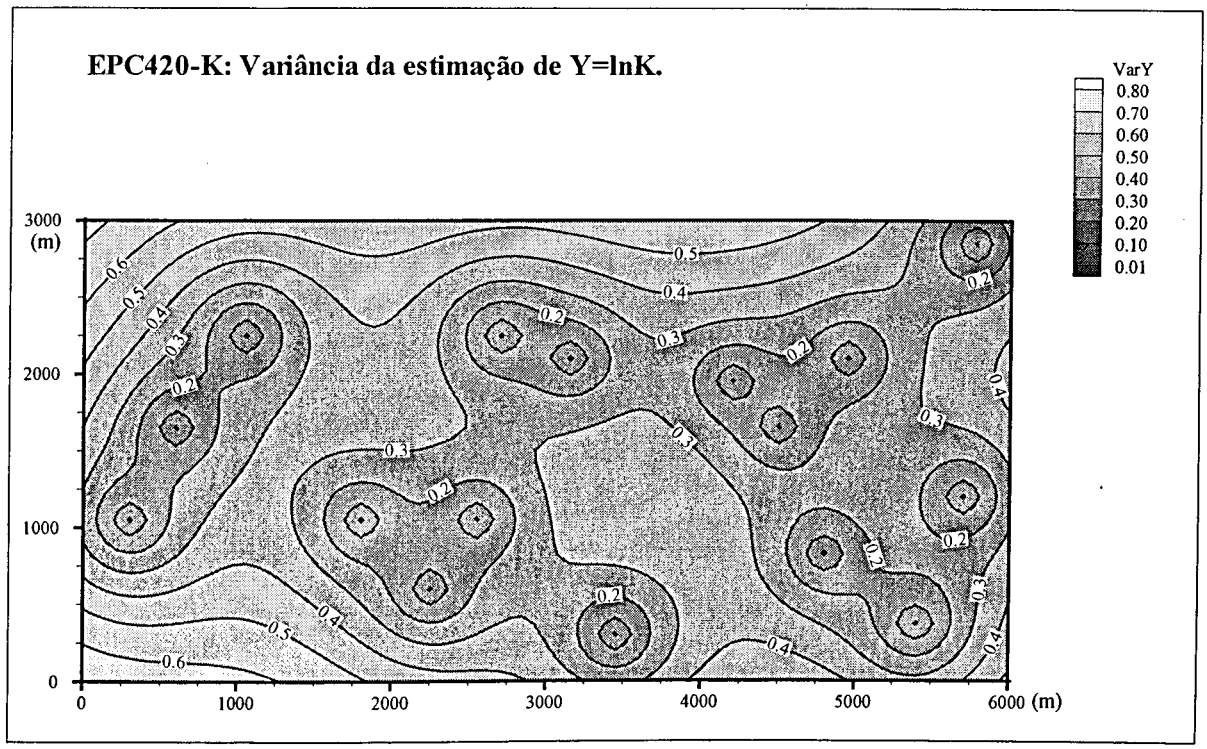



Figura 5.75 – EPC420_K: Imagem da variância condicionada da transformada logarítmica da conductividade hidráulica, $Y=\ln K$ (800 elementos).

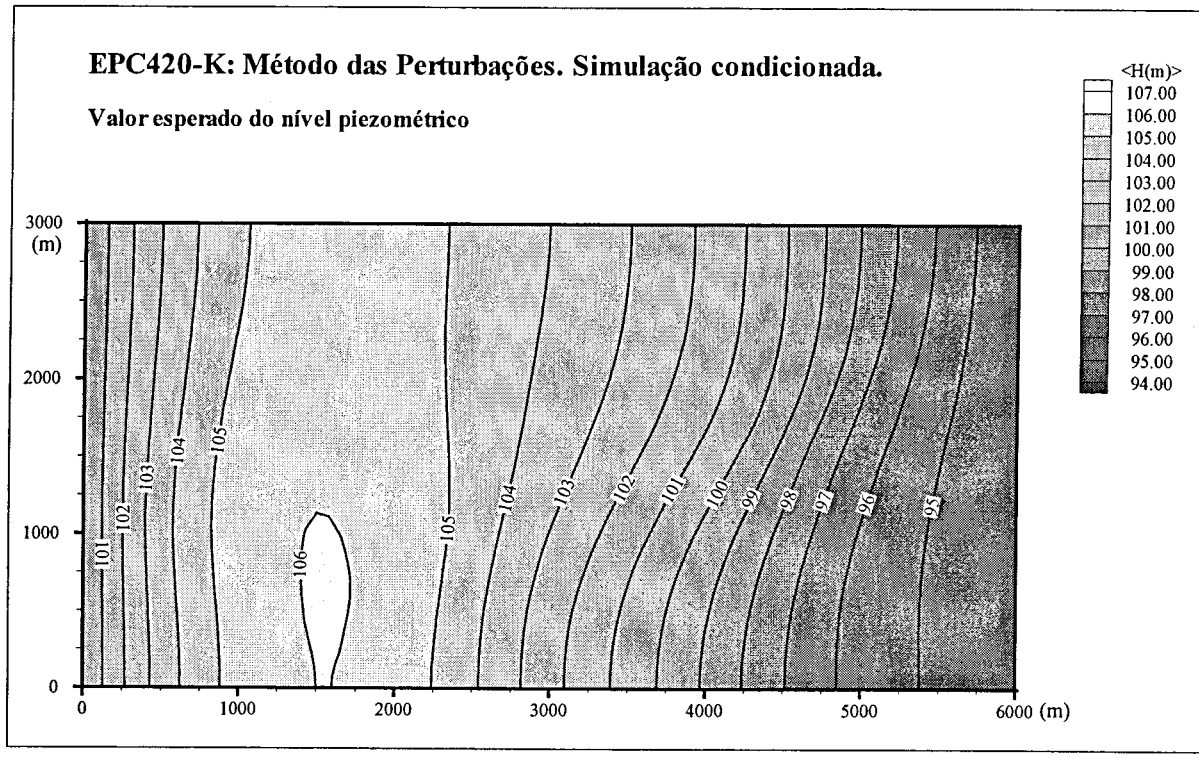



Figura 5.76 – EPC420_K: Valor esperado do nível piezométrico (800 elementos).

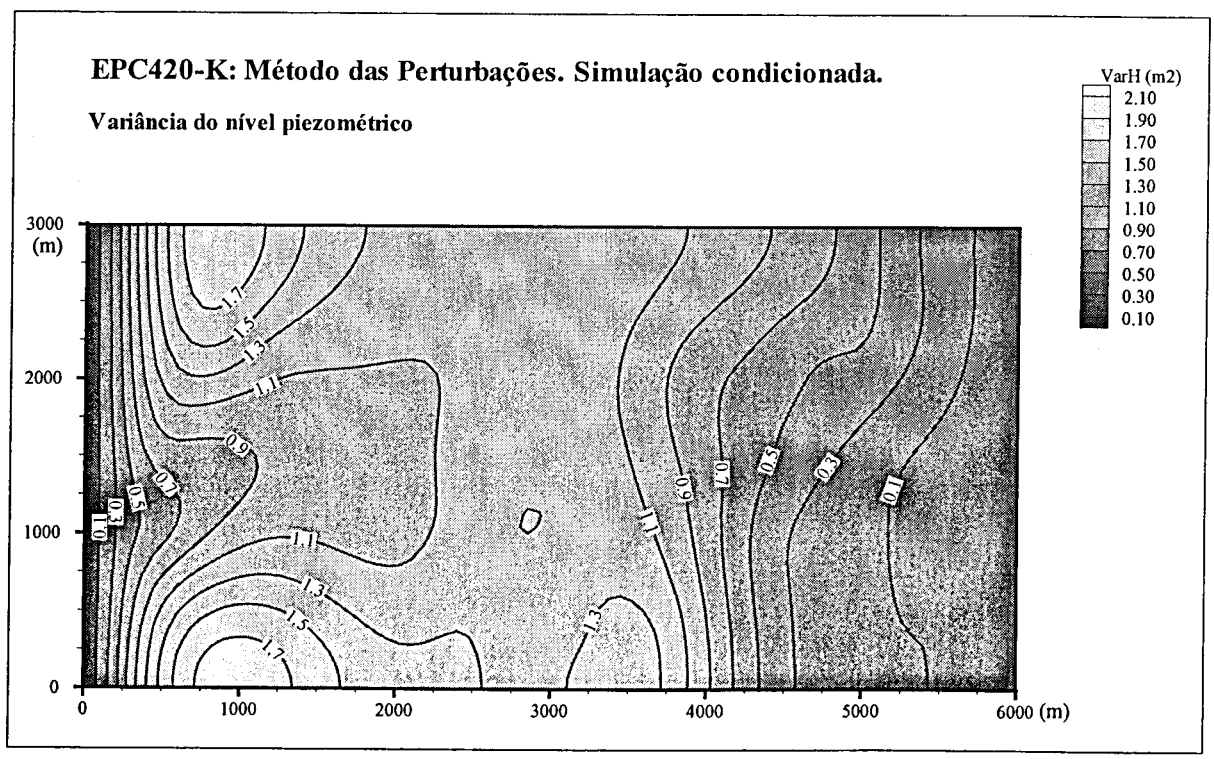



Figura 5.77 – EPC420_K: Variância do nível piezométrico (800 elementos).

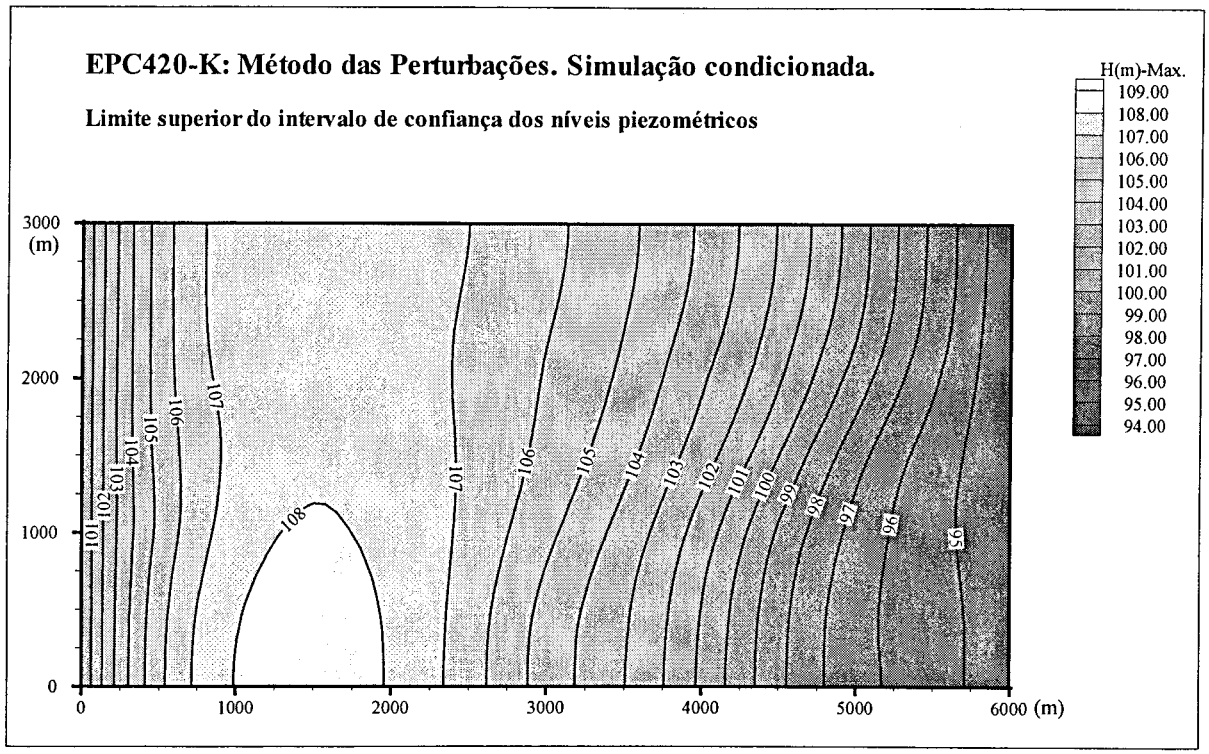



Figura 5.78 – EPC420_K: Limite superior do intervalo de confiança dos níveis piezométricos estimados pelo método das perturbações (800 elementos).

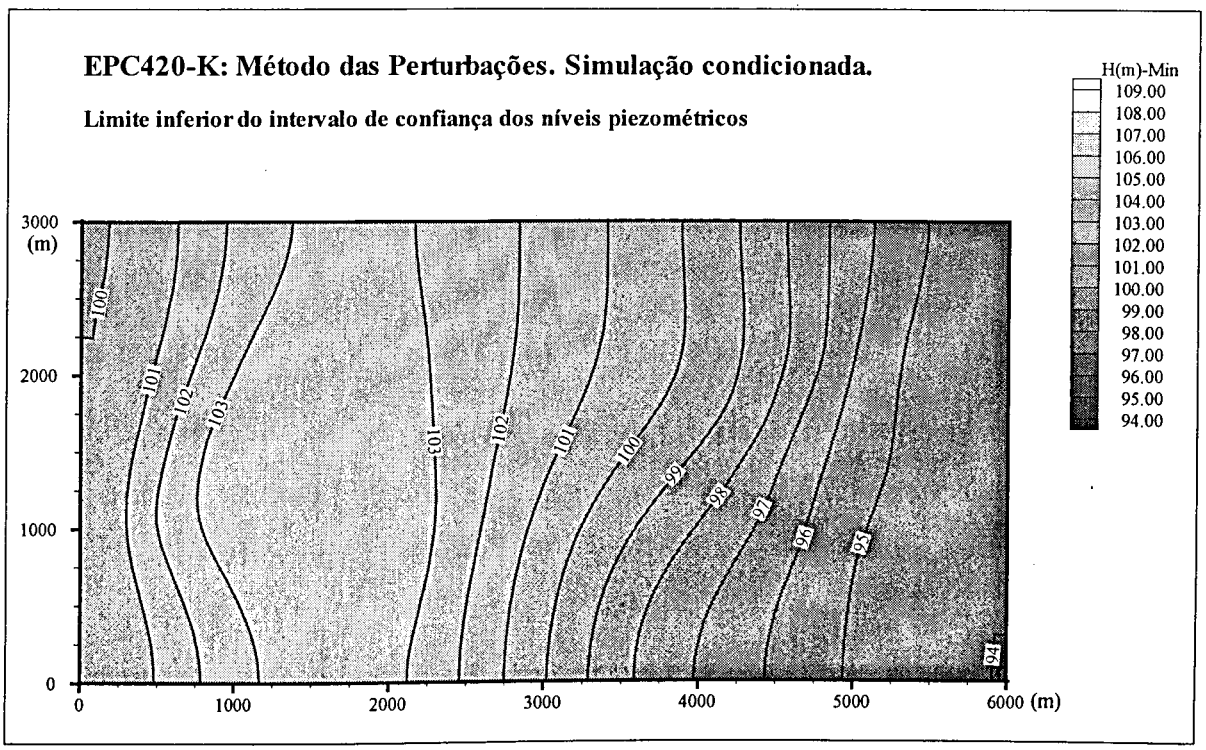



Figura 5.79 – EPC420_K: Limite inferior do intervalo de confiança dos níveis piezométricos estimados pelo método das perturbações (800 elementos).

| | $K_{real}$ | EPC42_K | desvio (%) | EPC420_K | desvio (%) |
|---|---|---|---|---|---|
| $\langle Q \rangle_{\Gamma_1}$ (m³/d) | + 8 831 | + 9 299 | + 5.3 | + 9 307 | + 5.4 |
| $\langle Q \rangle_{\Gamma_3}$ (m³/d) | + 27 169 | + 26 701 | − 1.7 | + 26 693 | − 1.8 |

Tabela 5.9 – EPC42_K e EPC420_K: Caudais totais nas fronteiras $\Gamma_1$ e $\Gamma_3$. Desvio relativamente à simulação efectuada com a conductividade "real", $K_{real}$.

A primeira observação que é suscitada por estas imagens e valores respeita à pequena discrepância entre resultados da simulação directa estocástica pelo método das perturbações para os dois graus de discretização do domínio. De facto, as imagens dos níveis piezométricos esperados (Figura 5.70 e Figura 5.76) e das variâncias de $H$ (Figura 5.71 e Figura 5.77) são muito semelhantes, tal como os valores esperados dos caudais totais nas fronteiras permeáveis (Tabela 5.9). O mesmo se pode afirmar para os limites superiores (Figura 5.72 e Figura 5.78) e inferiores (Figura 5.73 e Figura 5.79) dos níveis piezométricos. Assim, e uma vez mais[74], fica a ideia de que uma menor discretização do domínio, em benefício do esforço computacional, não afecta os resultados de um modo relevante. Esta constatação não será alheia ao facto de os pontos mais próximos da malha mais aberta (72 elementos) estarem afastados de 250m, uma distância que é 1/8 da distância integral arbitrada ($l_Y = 2000\,\mathrm{m}$, ver Tabela 5.5), ou seja, 1/24 do alcance. É de esperar, contudo, que para uma distância integral menor a discrepância de resultados aumente. Face a estas considerações, e para um determinado problema concreto, recomenda-se a adopção de uma estratégia prudente no que concerne à definição do grau de discretização do domínio, a qual deverá incluir o teste de diferentes níveis de refinamento da malha de elementos finitos a utilizar.

Uma outra observação, e a respectiva justificação, respeitam às imagens das variâncias dos erros de estimação[75] de $Y = \ln K$ (Figura 5.69 e Figura 5.75). Sendo a krigagem um estimador exacto, na medida em que respeita os dados de campo conhecidos, a respectiva variância é nula nos pontos de medição. Por este motivo, da simples observação da imagem da variância retira-se o posicionamento destes pontos. Contudo, no exemplo EPC42_K (72 elementos), a imagem da variância (Figura 5.69) não permite identificar a localização de alguns dos pontos de amostragem, ao contrário do que acontece no exemplo EPC420_K (800 elementos). Isto acontece porque os 16 pontos de amostragem foram seleccionados de modo

[74] Referência a idêntica consideração produzida num dos parágrafos finais da secção anterior.
[75] Saliente-se, uma vez mais, que correspondem às variâncias condicionadas de $Y$=ln$K$.

aleatório entre os nós da malha de elementos finitos de 800 elementos, pelo que ao resolver o problema com a malha de 72 elementos (EPC42_K) alguns destes pontos não coincidem com nós desta malha. Como o programa **COVCD** apenas determina a matriz de covariância (e a variância) para os nós da malha de elementos finitos, perde-se a informação relativa à variância nos pontos de amostragem não coincidentes com os nós. Por outro lado, o programa utilizado para a representação das diversas variáveis toma os valores dessas variáveis num conjunto discreto de pontos do domínio, os nós, e restitui a imagem por interpolação[76], pelo que só por mera casualidade poderá atribuir o valor correcto à variância (valor nulo) num ponto de medição não coincidente com os nós. Mas, descontando este pormenor, pode-se observar nas referidas figuras que a distribuição espacial da variância é semelhante para os dois graus de refinamento da malha.

A comparação dos resultados obtidos pelo método das perturbações (exercícios EPC42_K e EPC420_K) com os das simulações de Monte-Carlo condicionadas (exercício ESC42_K, secção 5.4.5) permite verificar o seguinte:

a) a imagem do nível piezométrico esperado obtida pelo *msM-C* condicionadas (Figura 5.38) está mais próxima da "real" (Figura 5.36) do que as imagens produzidas pelo método das perturbações (Figura 5.70 e Figura 5.76);

b) a variância de *H* produzida pelo *msM-C* condicionadas (Figura 5.39) apresenta significativas diferenças relativamente às obtidas pelo método das perturbações (Figura 5.71 e Figura 5.77), nomeadamente a localização das zonas de maior incerteza;

c) nas fronteiras permeáveis, os caudais totais esperados produzidos pelo *msM-C* condicionadas (Tabela 5.6) apresentam menores desvios relativamente aos "reais" do que os obtidos pelo método das perturbações (Tabela 5.9).

---

[76] O programa em causa (**TECPLOT**) restitui imagens para malhas de elementos finitos triangulares de 3 nós, ou quadriláteros de 4 nós, recorrendo às respectivas funções de forma. Uma vez que os programas relativos ao presente trabalho estão escritos para elementos de 8 nós, foi necessário elaborar um programa de transferência de informação (**GTEC**) que subdivide cada elemento de 8 nós em 16 triângulos ou 4 quadriláteros, conforme a opção do utilizador.

Estas constatações, em particular as das alíneas a) e c), parecem sugerir que o método das simulações de Monte-Carlo tem um melhor desempenho que o das perturbações. Alguns autores, como é o caso de Neuman e Guadagnini (1999), consideram mesmo o método das simulações de Monte-Carlo como o melhor de todos, tanto para a estimação de uma variável como para a quantificação da medida da respectiva incerteza, a variância. Contudo, e para o problema aqui analisado, afigura-se como algo precipitado fundamentar o aparente melhor desempenho das simulações de Monte-Carlo nessa eventual superioridade.

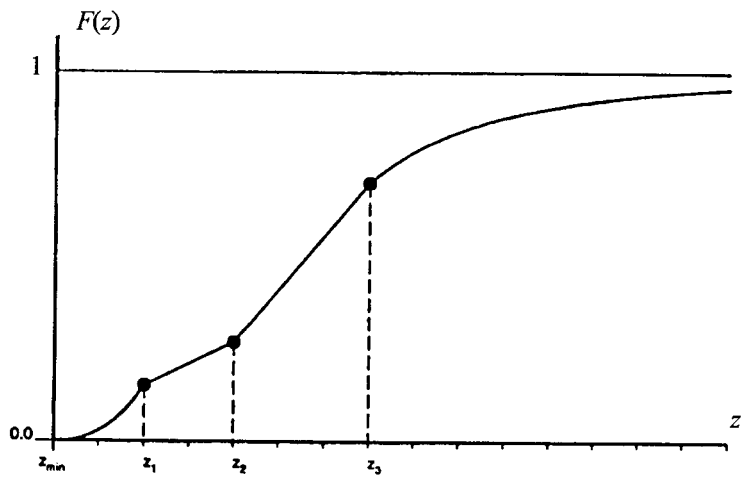



Figura 5.80 – Exemplo de uma *FDP* experimental. Interpolação entre os valores da amostra e extrapolação para os valores superiores e inferiores aos da amostra (extraído e adaptado de Deutsch e Journel, 1992).

Há questões relacionadas com a dimensão da amostra e o método de geração das realizações condicionadas do parâmetro hidrogeológico, neste caso a conductividade hidráulica, que podem influenciar a qualidade dos resultados finais. De facto, e tal como se explicou na secção 5.4.5, o algoritmo de geração sequencial gaussiana sobre o qual assenta o programa **SGSIM**[77], recorre a uma *FDP* experimental definida pelos valores de $K$ da amostra (Figura 5.80), com auxílio da qual se processa a transformação de $K$ numa *f.a.* normal padrão ($K \rightarrow X$ com $m_X = 1$ e $w_X + \sigma_X^2$). Uma vez produzidas as realizações condicionadas desta nova *f.a.*, é efectuada a transformação inversa ($X \rightarrow K$), novamente à custa da *FDP* experimental. Como se compreende facilmente, quanto menor for o número de elementos da amostra de medições de $K$, mais grosseiras serão as mudanças de variável, em particular as da transformação inversa ($X \rightarrow K$). Um valor de $K$ compreendido num dos intervalos dos dados

[77] Deutsch e Journel (1992).

da amostra é transformado por interpolação linear entre os limites desse intervalo. Trata-se de uma procedimento susceptível de reparo face à hipótese habitualmente admitida de a transformada logarítmica de $K$ ter uma distribuição normal. Mas o aspecto mais crítico reside na transformação dos valores extremos, isto é, dos superiores ao maior valor da amostra e dos inferiores ao menor valor da amostra. Para realizar estas extrapolações é necessário seleccionar um modelo e arbitrar o parâmetro que o define.

Um dos modelos propostos por Deutsch e Journel (1992) para a definição da *FDP* no intervalo de valores $]z_{k-1}, z_k]$ da variável aleatória é definido por

$$F^{\omega}_{z_{k-1},z_k}(z) = \begin{cases} 0 & \forall\, z \le z_{k-1} \\ \left(\dfrac{z - z_{k-1}}{z_k - z_{k-1}}\right)^{\omega} & \forall\, z \in ]z_{k-1}, z_k] \\ 1 & \forall\, z \ge z_k \end{cases} \tag{5.405}$$

sendo $\omega > 0$ o parâmetro (expoente) que o define. Escalando esta definição para os valores da *FDP* nos limites do intervalo obtém-se

$$F(z) = F(z_{k-1}) + \left(\frac{z - z_{k-1}}{z_k - z_{k-1}}\right)^{\omega} [F(z_k) - F(z_{k-1})] \tag{5.406}$$

para $z \in ]z_{k-1}, z_k]$ (Figura 5.81). A valores do expoente $\omega$ superiores à unidade corresponde uma *fdp* crescente no intervalo e a valores de $\omega$ inferiores à unidade uma *fdp* decrescente. O expoente $\omega = 1$ significa uma interpolação linear, a qual corresponde a uma *fdp* constante no intervalo. É este modelo polinomial que o programa **SGSIM**[78] utiliza, em opção à interpolação linear, para a transformação dos valores inferiores ao menor da amostra

$$F(z) = F(z_{\min}) + \left(\frac{z - z_{\min}}{z_1 - z_{\min}}\right)^{\omega} [F(z_1) - F(z_{\min})] \tag{5.407}$$

---

[78] Deutsch e Journel (1992).

sendo $z_1$ o menor valor da amostra e $z_{\min}$ o mínimo admissível para a variável ou função aleatória. Assumindo que $F(z_{\min}) = 0$ obtém-se, finalmente, a expressão para a transformação dos valores inferiores ao menor da amostra

$$F(z) = \left( \frac{z - z_{\min}}{z_1 - z_{\min}} \right)^{\omega} F(z_1) \tag{5.408}$$

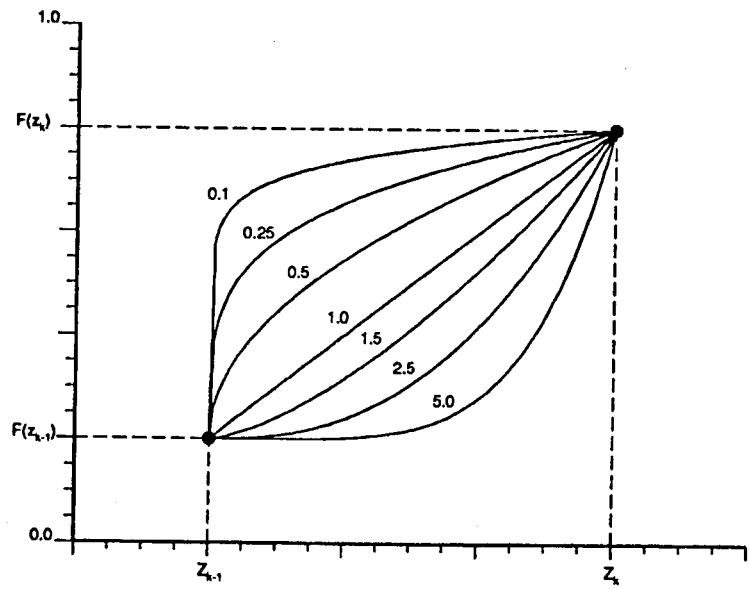



Figura 5.81 – Modelo polinomial. Diferentes traçados para distintos valores do expoente $\omega$ (extraído e adaptado de Deutsch e Journel, 1992).

Embora Deutsch e Journel (1992) tenham sugerido este modelo (5.405) para qualquer intervalo de valores da amostra, a verdade é que o programa que apresentam (**SGSIM**) somente aceita a interpolação linear, ficando a opção pelos modelos alternativos reservada aos valores "exteriores" aos da amostra.

O modelo sugerido por estes autores para a *FDP* acima do maior valor da amostra é o hiperbólico (Figura 5.82), expresso por

$$F_{\omega,\lambda}(z) = 1 - \frac{\lambda}{z^{\omega}} \quad , \quad \omega \geq 1 \text{ e } z^{\omega} > \lambda > 0 \tag{5.409}$$

para $z$ estritamente positivo. O parâmetro $\lambda$ identifica o $p$-quantilho $z_p$ de tal modo que $F_{\omega,\lambda}(z_p) = p$, sendo definido por

$$\lambda = z_p^{\omega}(1-p) \tag{5.410}$$

Em termos práticos, este parâmetro destina-se a compatibilizar o modelo de extrapolação com a *FDP*, no maior valor da amostra. O outro parâmetro do modelo, $\omega \geq 1$, controla a taxa de aproximação da *FDP* ao seu valor máximo, a unidade. Quanto menor for $\omega$ mais extensa se torna a curva de extrapolação (Figura 5.82).

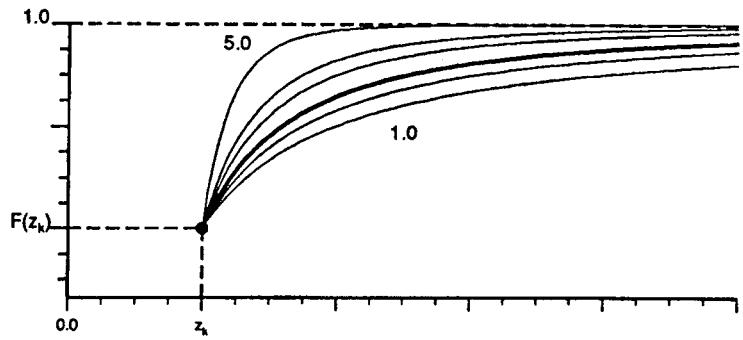



Figura 5.82 – Modelo hiperbólico. Diferentes traçados para distintos valores do parâmetro $\omega$ (extraído e adaptado de Deutsch e Journel, 1992).

Estas considerações servem para evidenciar que, tal como o método das perturbações, o método das simulações de Monte-Carlo também tem imperfeições, as quais poderão e deverão ser estudadas com vista à sua atenuação. Em particular, o problema da geração sequencial gaussiana de realizações condicionadas aqui exposto não parece ser de difícil resolução[79]. O ideal será, para cada problema, usar as duas metodologias e proceder a um confronto de resultados. De resto, a simulação directa estocástica permanece um tema em aberto, ao qual as recentes contribuições de S. P. Neuman, A. Guadagnini e outros trarão, certamente, novas perspectivas. Entretanto, e apesar das limitações que condicionam os métodos aqui apresentados, há algo que não oferece qualquer dúvida: quanto maior for a

[79] Neuman e Gaudagnini (1999) utilizaram o programa **SGSIM**, para a geração de 2000 realizações condicionadas e não condicionadas, e remetem para a referência Deutsch e Journel (1998). Tratando-se de uma reedição da publicação de 1992 é provável que apresente uma evolução dos diversos programas e em particular do que é aqui referido.

quantidade de informação incorporada na simulação, melhor será a estimação produzida e menor a respectiva incerteza, qualquer que seja o método utilizado.

Para uma melhor apreciação do desempenho do método das perturbações, e comparação com os resultados das simulações de Monte-Carlo, no próximo sub-capítulo são apresentados dois exercícios mais complexos, um para um aquífero confinado e outro para um aquífero não confinado. Nestes exercícios o escoamento é não permanente, tal como as respectivas condições fronteira. Deste modo pretende-se testar os dois métodos para a variabilidade conjunta dos dois parâmetros hidrogeológicos, a transmissividade (ou a conductividade hidráulica) e o coeficiente de armazenamento (ou a porosidade).

## 5.6 Simulação directa estocástica. Exercícios

Neste sub-capítulo são propostos dois exercícios de aplicação dos métodos de simulação directa estocástica apresentados neste trabalho, o método das simulações de Monte-Carlo e o método das perturbações, sendo cada um dos exercícios resolvido pelos dois métodos. Num dos exercícios é simulado o escoamento num aquífero confinado, estimulado por condições fronteira de Dirichlet e de Neumann e por extracções pontuais variáveis no tempo, e no outro, o escoamento num aquífero não confinado sujeito às mesmas condições e extracções e ainda a uma recarga superficial. Para cada um dos aquíferos admite-se o conhecimento do comportamento espacial dos respectivos parâmetros hidrogeológicos, logo da respectiva piezometria "real". Com base em amostras de "dados de campo" da transmissividade e do coeficiente de armazenamento, no caso do aquífero confinado, e da conductividade hidráulica e da porosidade drenável, no caso do aquífero não confinado, são realizadas, pelos dois métodos referidos, simulações directas estocásticas, condicionadas aos valores dessas amostras. Os resultados obtidos pelos dois métodos são comparados entre si e com os dos escoamentos "reais".

### 5.6.1 Aquífero confinado

Considere-se um aquífero regional confinado com a configuração e dimensões definidas na Figura 5.83. As fronteiras $\Gamma_2$, $\Gamma_4$ e $\Gamma_5$ são consideradas impermeáveis. Na fronteira $\Gamma_1$ é imposto o nível piezométrico, $H(t)$, e em $\Gamma_3$ o fluxo, $q_n(t)$. Estas condições fronteira estão definidas na Figura 5.84 e na Figura 5.85. Nos 6 pontos do aquífero assinalados com **M+B** localizam-se poços de bombagem, sendo extraído, em cada um deles, um caudal permanente de 3000 $m^3/d$. Com os programas **SASIM** e **SIMTOSIM** foram geradas as realizações "reais" das transformadas logarítmicas da transmissividade e do coeficiente de armazenamento para valores das médias geométricas de, aproximadamente, $T_G = 1000\ m^2/d$ e $S_G = 0.005$. Os parâmetros estatísticos utilizados na geração destas realizações "reais" estão na Tabela 5.10 e na Tabela 5.11 e as respectivas imagens são exibidas na Figura 5.86 e na Figura 5.87.

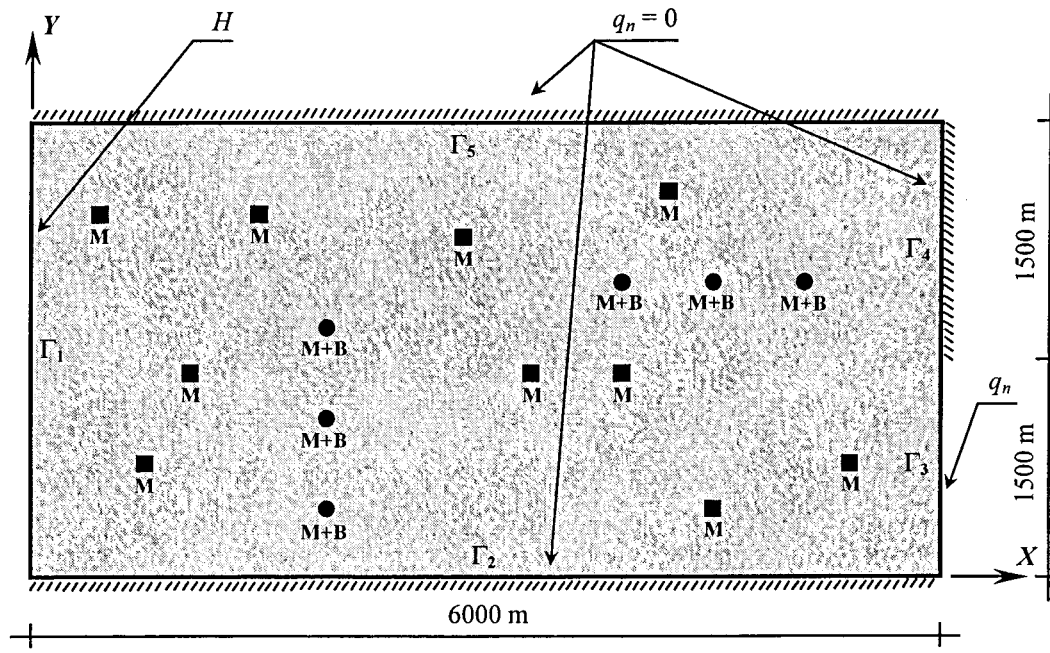



Figura 5.83 – Planta do aquífero confinado. Definição das fronteiras de Dirichlet e de Neumann. Localização dos pontos de bombagem (M+B) e de medição de parâmetros hidrogeológicos (M).

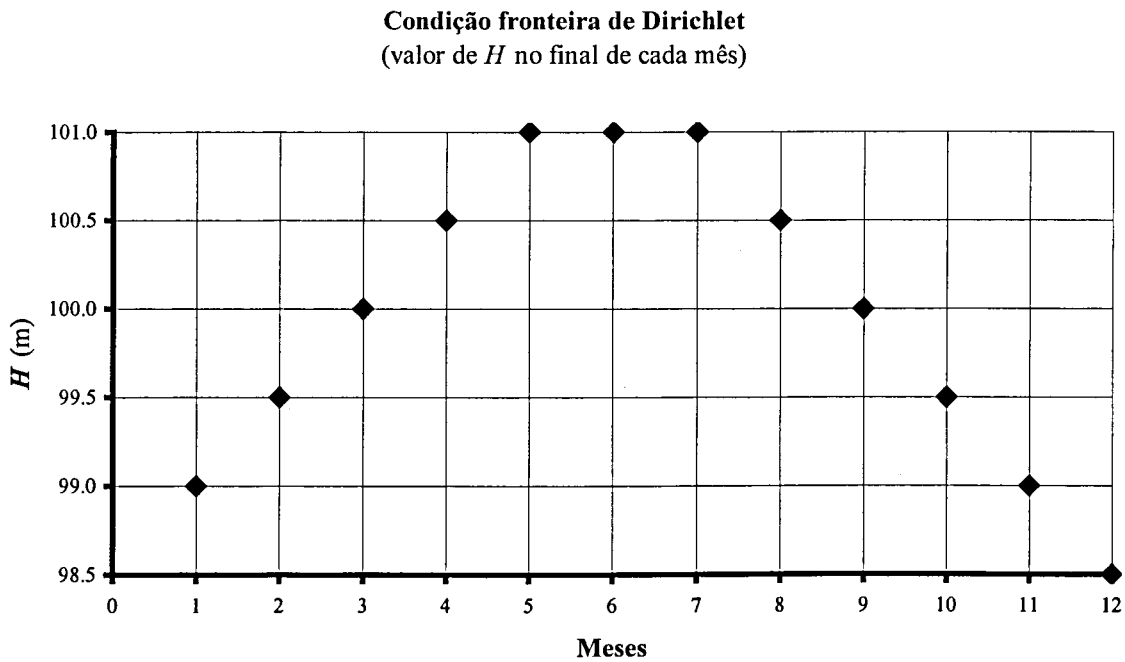



Figura 5.84 – Condição fronteira de Dirichlet em $\Gamma_1$.

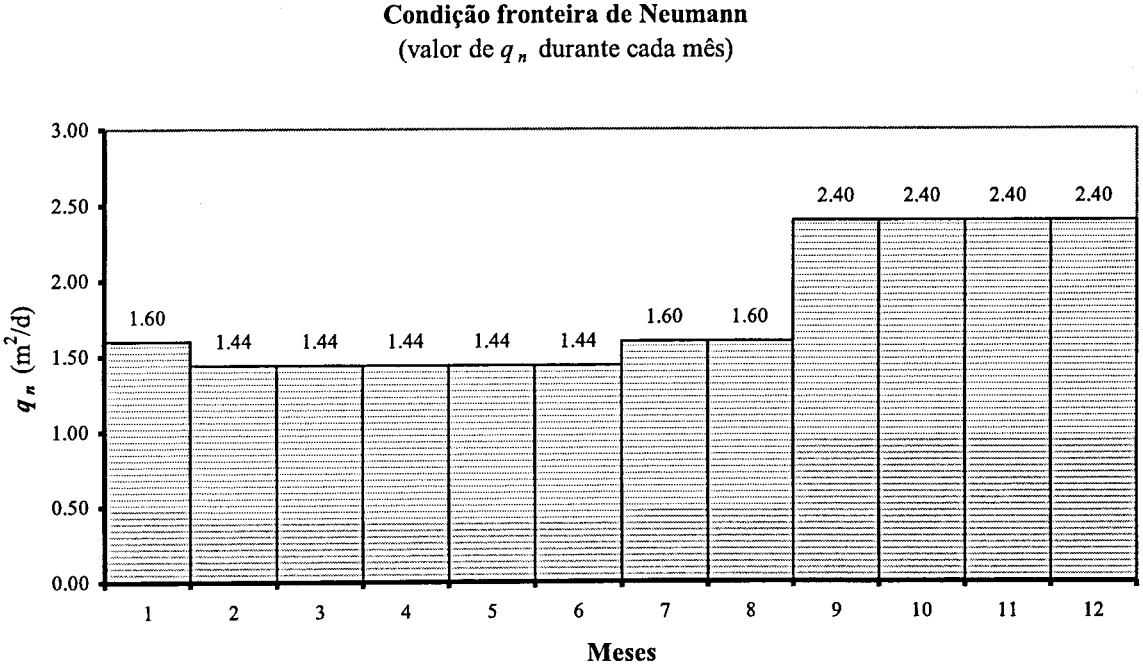



Figura 5.85 – Condição fronteira de Neumann em $\Gamma_3$.

| AQC10: $Y$=ln$T$ (semivariograma exponencial) | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $m_Y$ | $w_Y$ | $\sigma_Y^2$ | $w_Y + \sigma_Y^2$ | $l_Y$ (m) |
| 6.90776 | 0.27 | 0.63 | 0.90 | 1 000 |

Tabela 5.10 – Parâmetros estatísticos utilizados para gerar a realização "real" de $Y$=ln$T$.

| AQC10: $G$=ln$S$ (semivariograma exponencial) | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $m_G$ | $w_G$ | $\sigma_G^2$ | $w_G + \sigma_G^2$ | $l_G$ (m) |
| -5.29832 | 0.15 | 0.15 | 0.30 | 500 |

Tabela 5.11 – Parâmetros estatísticos utilizados para gerar a realização "real" de $G$=ln$S$.

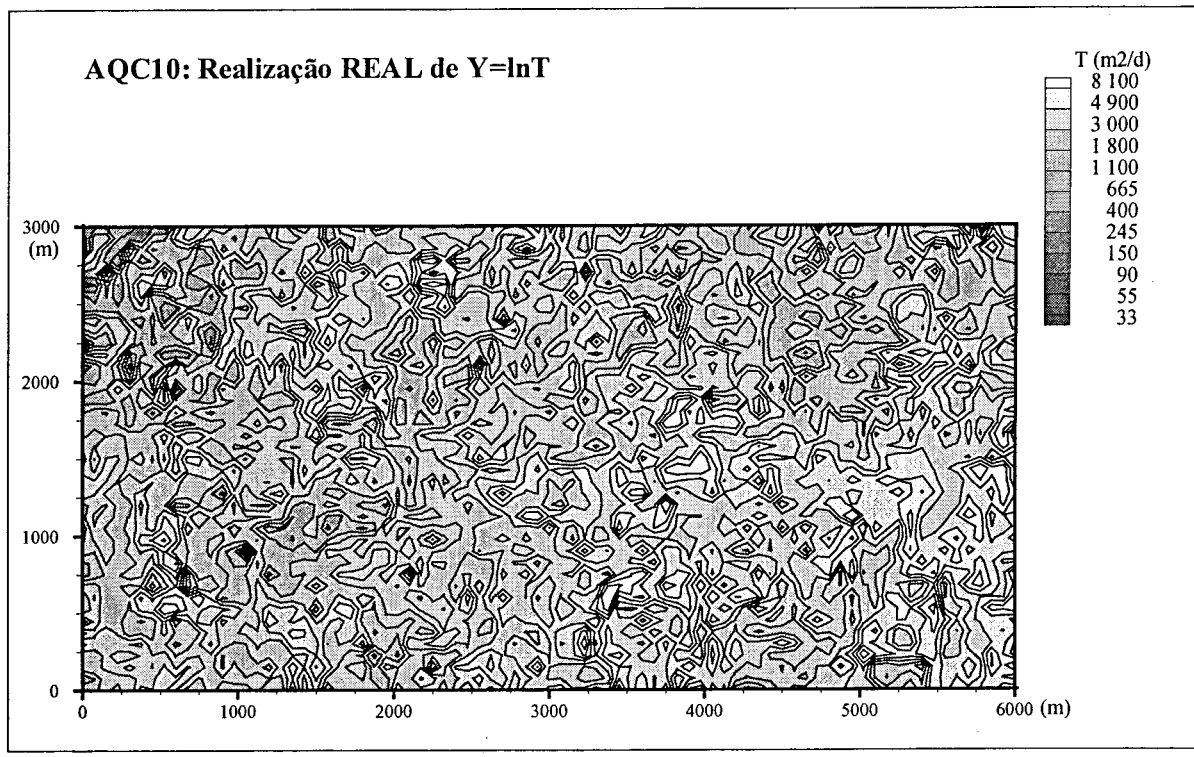



Figura 5.86 – Distribuição espacial da transmissividade "real".

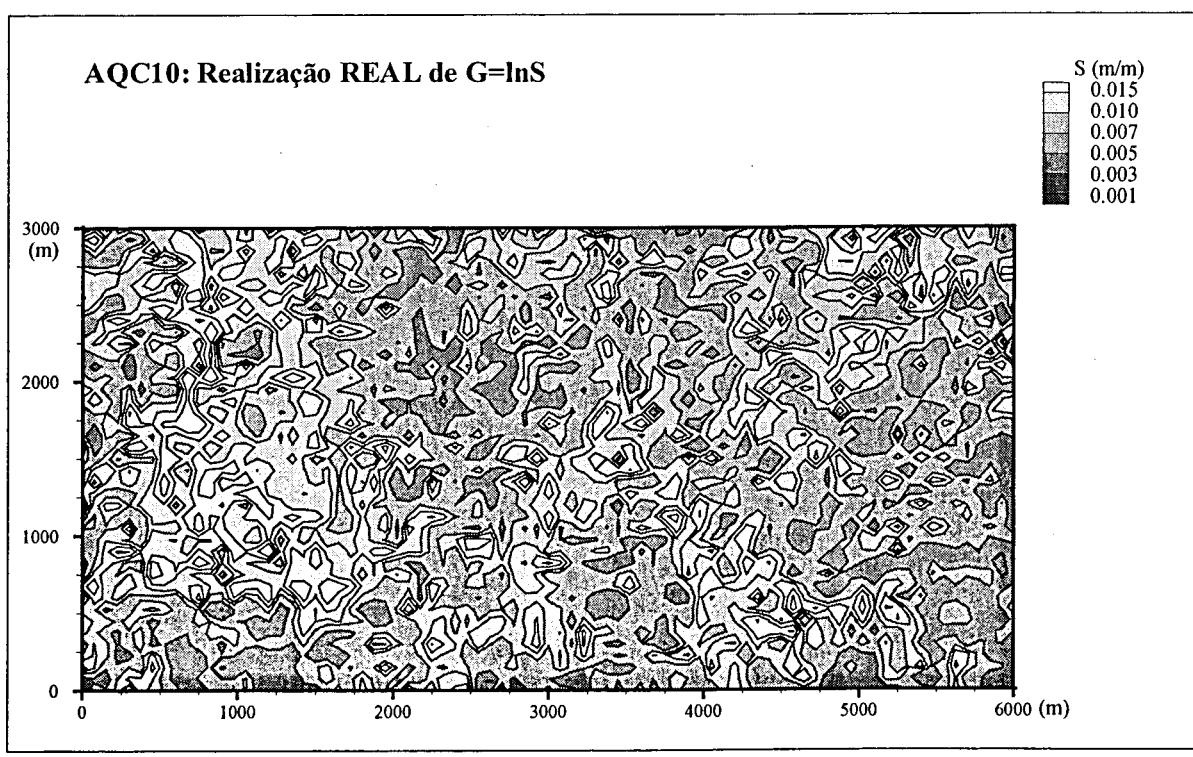



Figura 5.87 – Distribuição espacial do coeficiente de armazenamento "real".

Para verificar se o comportamento espacial das realizações geradas reproduzia a estrutura de correlação espacial correspondente aos parâmetros estatísticos arbitrados (Tabela 5.10 e Tabela 5.11) procedeu-se ao calculo dos histogramas e semivariogramas experimentais com os valores nos nós da malha de elementos finitos (800 elementos, 2521 nós), os quais são apresentados na Figura 5.88 e na Figura 5.89. É assim possível constatar que as realizações "reais" dos dois parâmetros hidrogeológicos apresentam um comportamento espacial muito próximo do pretendido.

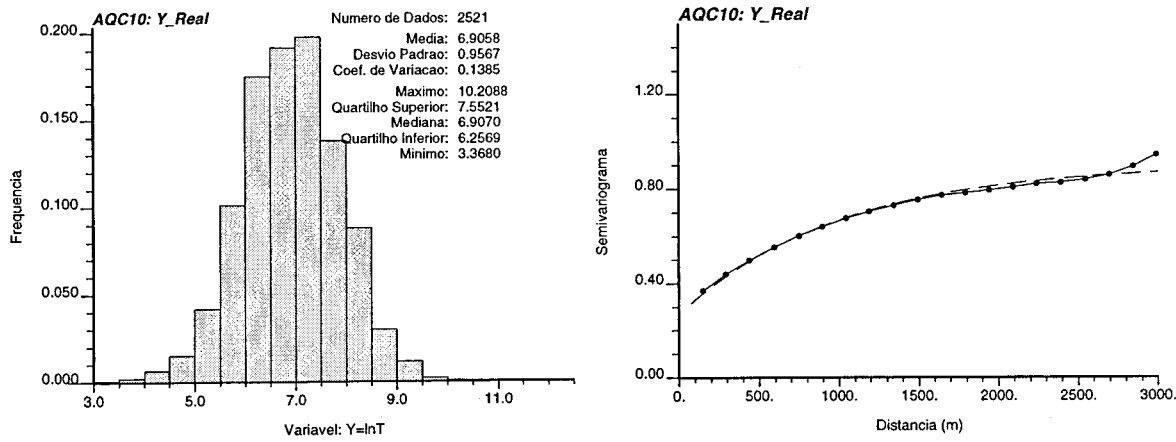



Figura 5.88 – AQC10: Histograma e semivariograma experimentais da realização "real" de $Y$=ln$T$. A tracejado o semivariograma teórico adoptado.

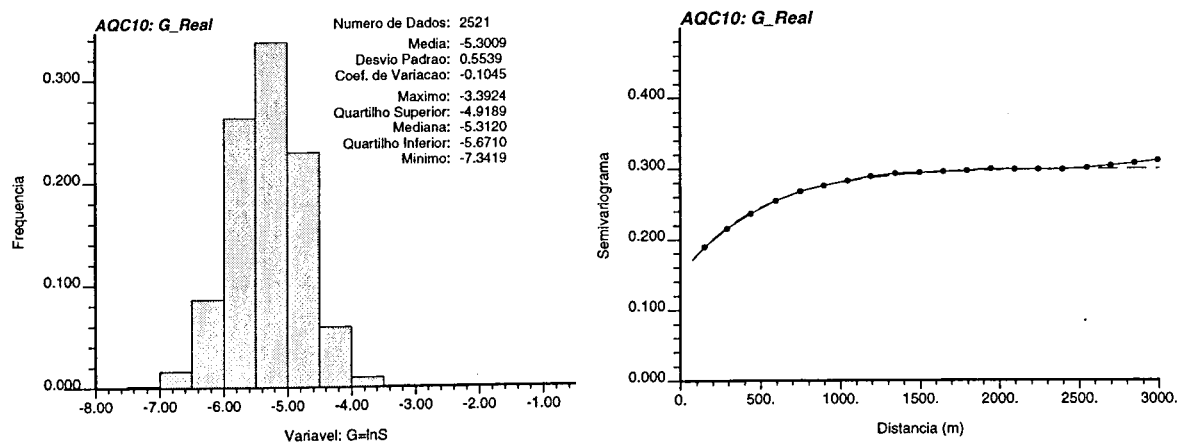



Figura 5.89 – AQC10: Histograma e semivariograma experimentais da realização "real" de $G$=ln$S$. A tracejado o semivariograma teórico adoptado.

O aquífero foi discretizado por uma malha de 800 elementos finitos de 150×150 m$^2$ que permite ter nós a uma distância de 75 metros, valor que é substancialmente inferior ao da

distância integral de $G = \ln S$. Em 16 nós do aquífero são lidos os valores "reais" de $T$ e $S$, os quais constituem as amostras que vão condicionar as simulações do escoamento. Seis valores de cada uma das amostras são "medidos" nos pontos de bombagem, assinalados na Figura 5.83 por **M+B**, e os restantes valores das amostras são "medidos" em 10 nós da malha escolhidos aleatoriamente[80] e assinalados na Figura 5.83 por **M**.

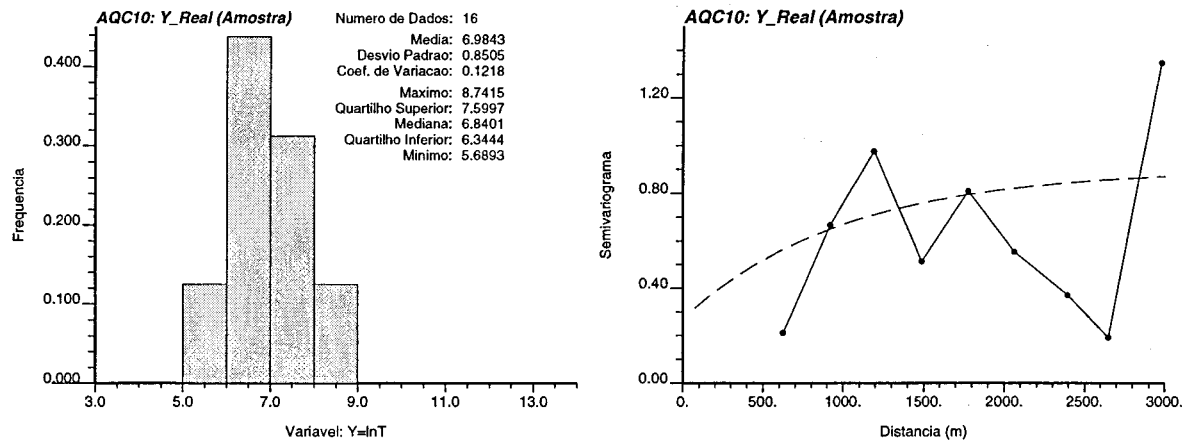



Figura 5.90 – AQC10: Histograma e semivariograma experimentais da amostra de $Y$=ln$T$. A tracejado é representado o semivariograma teórico da realização "real".

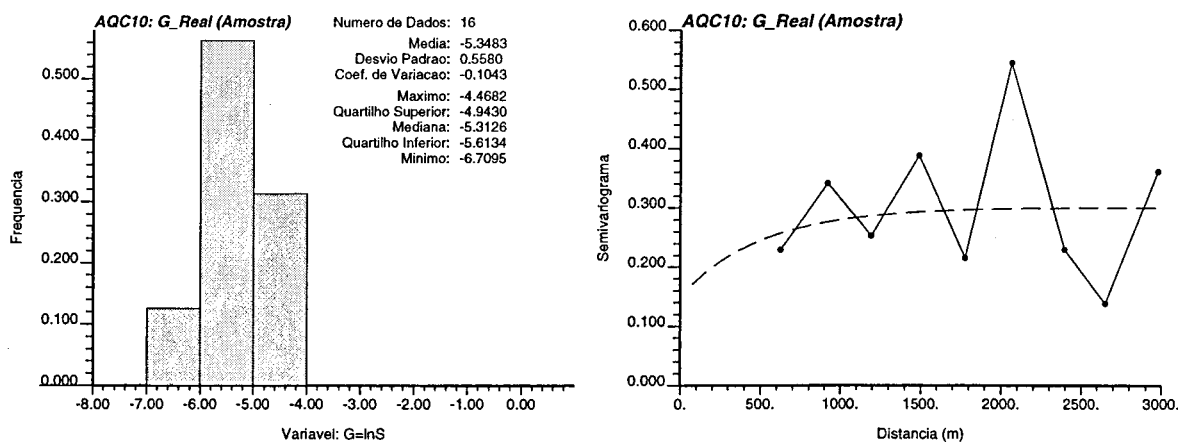



Figura 5.91 – AQC10: Histograma e semivariograma experimentais da amostra de $G$=ln$S$. A tracejado é representado o semivariograma teórico da realização "real".

A inferência estatística a partir das amostras não é tarefa fácil. A dificuldade em

[80] Em rigor, não se tratou de uma escolha verdadeiramente aleatória. Os pontos foram escolhidos a sentimento, com a preocupação de se garantir uma cobertura relativamente uniforme do aquífero.

estimar os parâmetros que configuram o semivariograma é particularmente evidente, atendendo às oscilações do semivariograma experimental. Não recorrendo, por agora, à modelação inversa estocástica, adoptou-se uma variância total, isto é, a soma do efeito pepita com a componente estruturada da variância, igual à encontrada na amostra. Para a quantificação das parcelas da variância total arbitrou-se um peso relativo idêntico ao utilizado na geração das realizações "reais", ou seja, um valor do efeito pepita que é cerca de um terço da variância total, no caso da *f.a.* $Y = \ln T$, e metade dessa grandeza, no caso da *f.a.* $G = \ln S$. Para as distâncias integrais de $Y$ e $G$ adoptaram-se os mesmos valores das realizações "reais". Como é evidente, estas referências estruturais não existem num caso prático, pelo que a quantificação dos referidos parâmetros estatísticos ficaria subordinada ao critério do hidrogeólogo. Um resumo dos valores estimados para os parâmetros estatísticos das duas *f.a.*'s é apresentado na Tabela 5.12 e na Tabela 5.13.

| **AQC20 e AQC30: $Y$=ln$T$** (semivariograma exponencial) | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $m_Y$ | $w_Y$ | $\sigma_Y^2$ | $w_Y + \sigma_Y^2$ | $l_Y$ (m) |
| 6.9843 | 0.24 | 0.4834 | 0.7234 | 1 000 |

Tabela 5.12 – Parâmetros estatísticos da *f.a.* $Y$=ln$T$, estimados a partir da amostra de $T$(m$^2$/d).

| **AQC20 e AQC30: $G$=ln$S$** (semivariograma exponencial) | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $m_G$ | $w_G$ | $\sigma_G^2$ | $w_G + \sigma_G^2$ | $l_G$ (m) |
| -5.3483 | 0.1557 | 0.1557 | 0.3114 | 500 |

Tabela 5.13 – Parâmetros estatísticos da *f.a.* $G$=ln$S$, estimados a partir da amostra de $S$.

Admitindo a condição inicial $H = 98.5$ m para todo o domínio, foram simulados dois períodos consecutivos de um ano. A análise comparativa entre a simulação "real" e as realizadas pelos métodos estocásticos é efectuada no segundo período de um ano, tomando como condição inicial, para todas as simulações, a piezometria no final do primeiro ano de simulação "real". À simulação "real", isto é, ao exercício que consiste na resolução numérica da equação diferencial que rege o escoamento em aquíferos confinados, para as distribuições "reais" da transmissividade e do coeficiente de armazenamento e para a recarga e condições fronteira definidas no início desta secção, foi atribuída a designação de AQC10. Esta

simulação, tal como as correspondentes às simulações de Monte-Carlo e ao método das perturbações, é efectuada com os programas **GCFH2**, **GCFS** e **FLWM2** anteriormente apresentados. Nas páginas seguintes são exibidas as distribuições piezométricas da simulação "real" correspondentes ao instante inicial e aos instantes finais de cada "mês"[81] do segundo ano. Estes níveis piezométricos, assim como o fluxo instantâneo na fronteira $\Gamma_1$ e o caudal de balanço global nos mesmos instantes, servem como valores de referência para a análise comparativa do desempenho das simulações estocásticas efectuadas pelo *msM-C* condicionadas (exercício AQC20) e pelo método das perturbações (exercício AQC30).

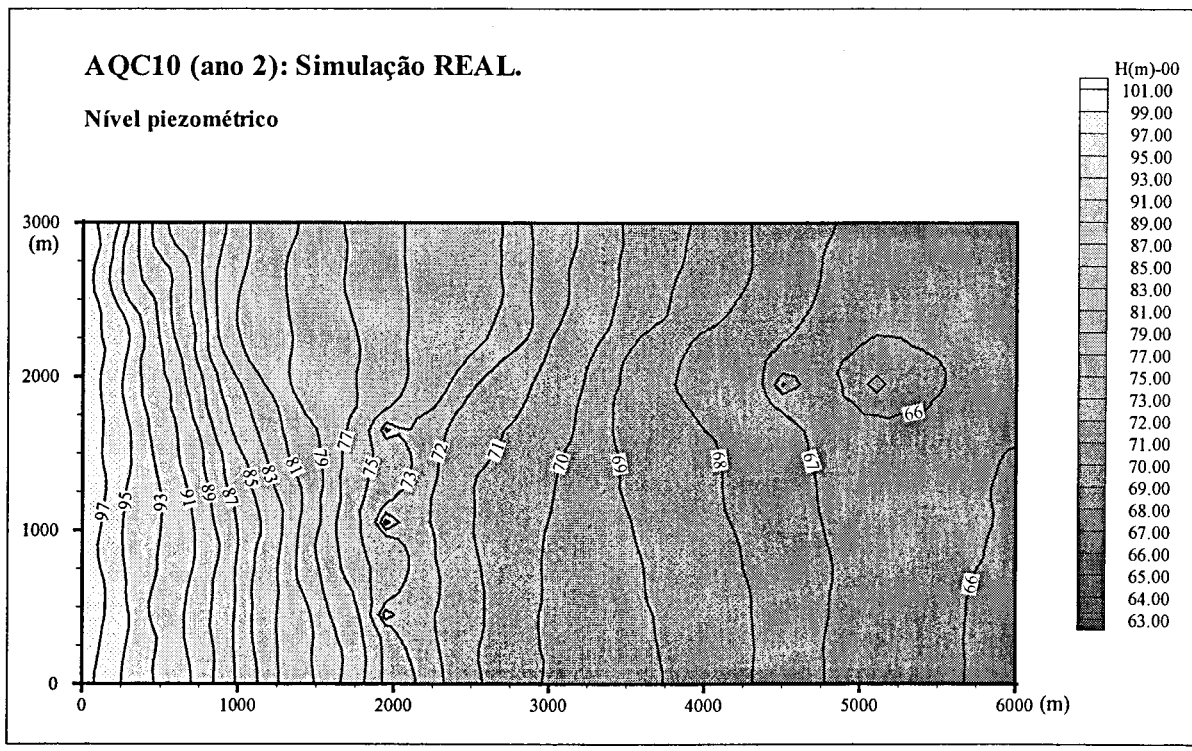



Figura 5.92 – AQC10: Simulação "real". Distribuição inicial do nível piezométrico.

Embora o assunto não caiba no âmbito do presente trabalho, importa salientar que a piezometria inicial (Figura 5.92) do segundo ano de simulação constitui, para os exercícios AQC10, AQC20 e AQC30 propostos, uma condição inicial determinística, mas que num problema concreto teria que ser estimada. E a integração no problema estocástico da incerteza desta estimação agravaria a incerteza associada aos resultados produzidos pela simulação directa estocástica.

[81] Admitiu-se para cada "mês" uma duração de 30.5 dias, a que corresponde um ano com 366 dias.

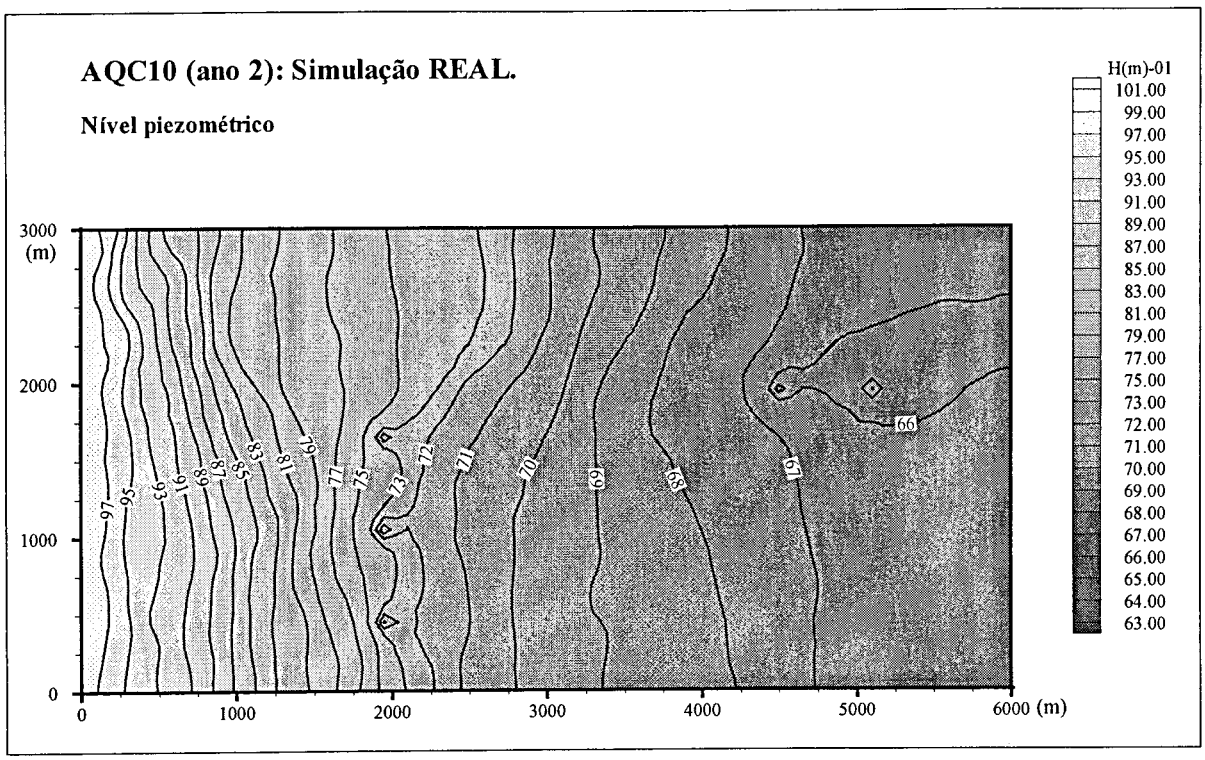



Figura 5.93 – AQC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 01.

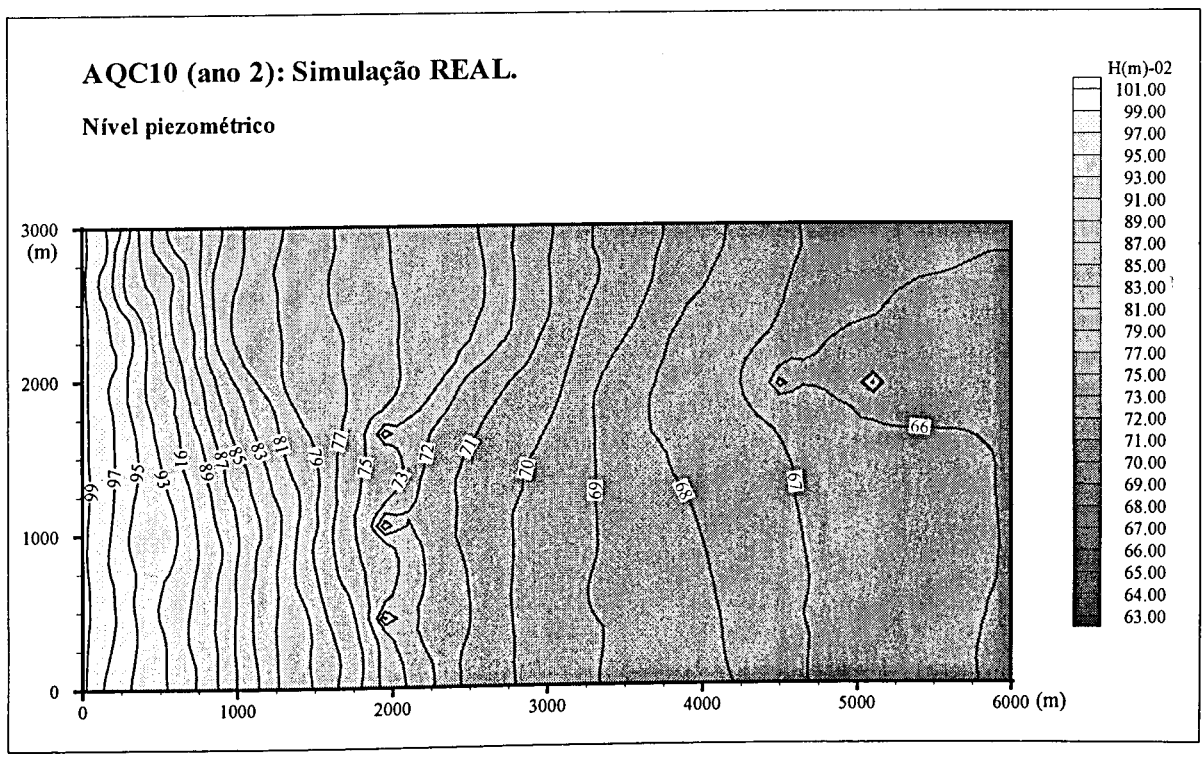



Figura 5.94 – AQC10: Simulação "real". Piezometria do final do mês 02.

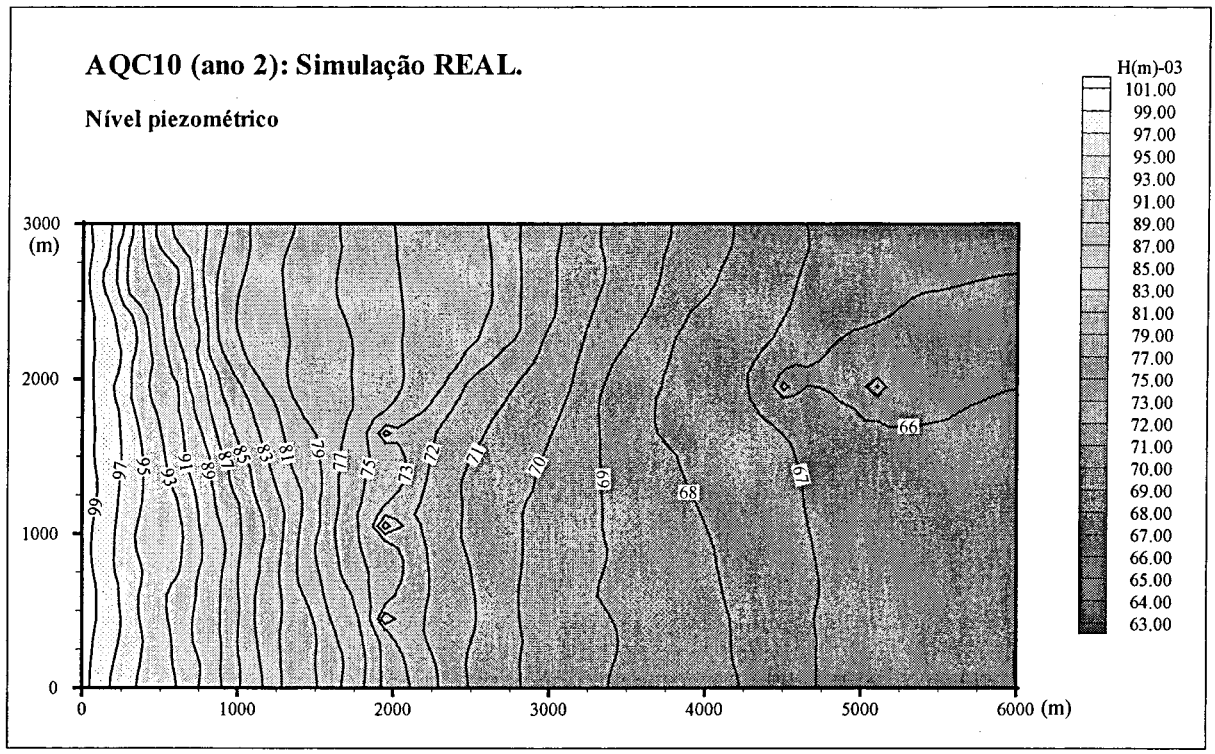



Figura 5.95 – AQC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 03.

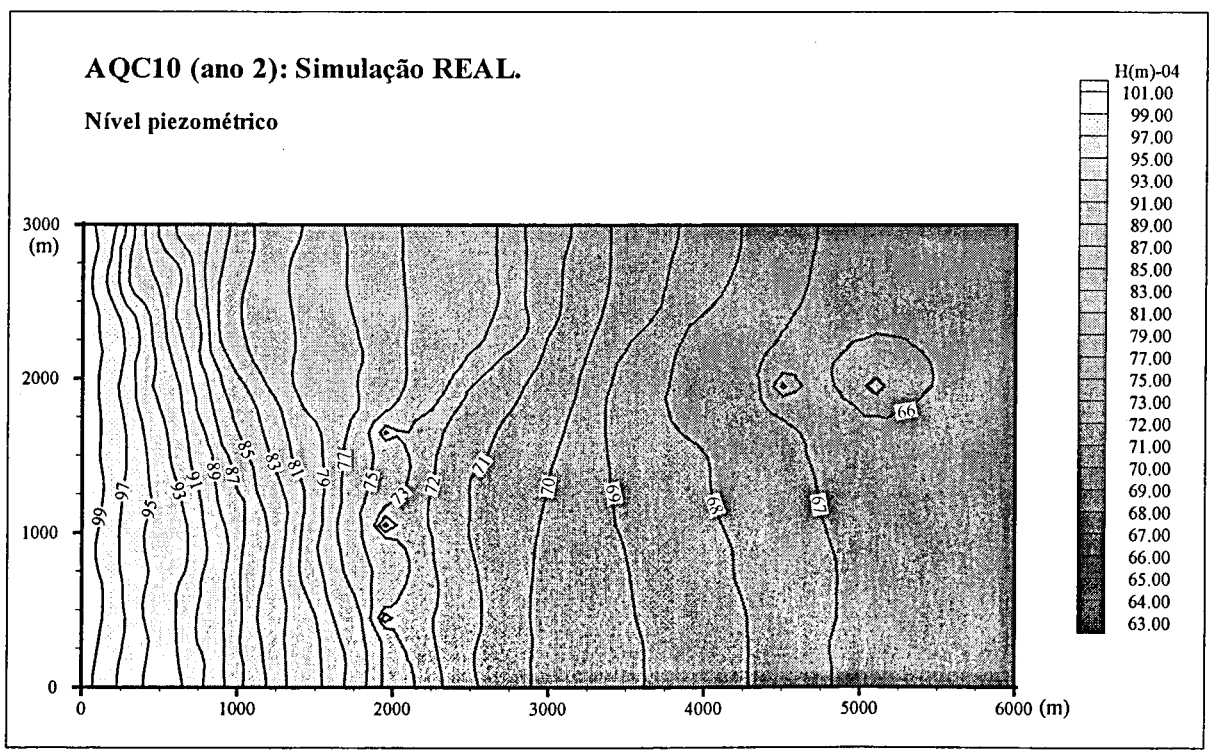



Figura 5.96 – AQC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 04.

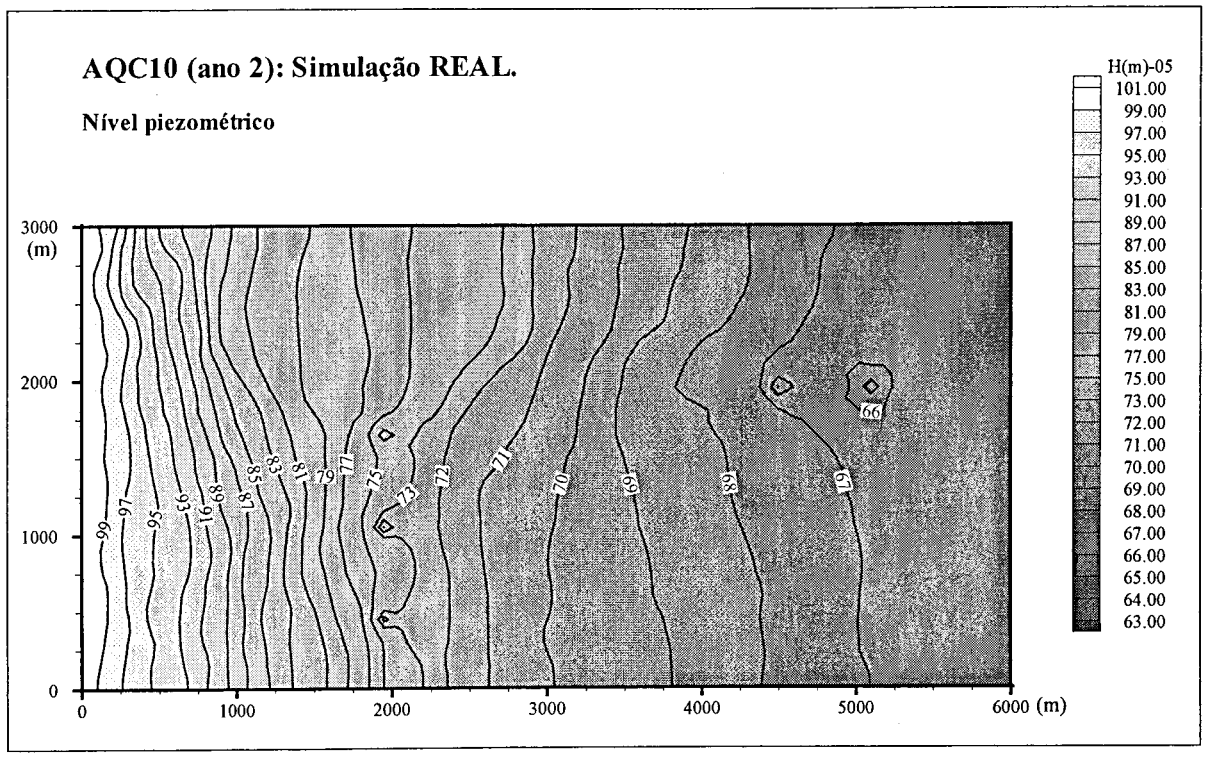



Figura 5.97 – AQC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 05.

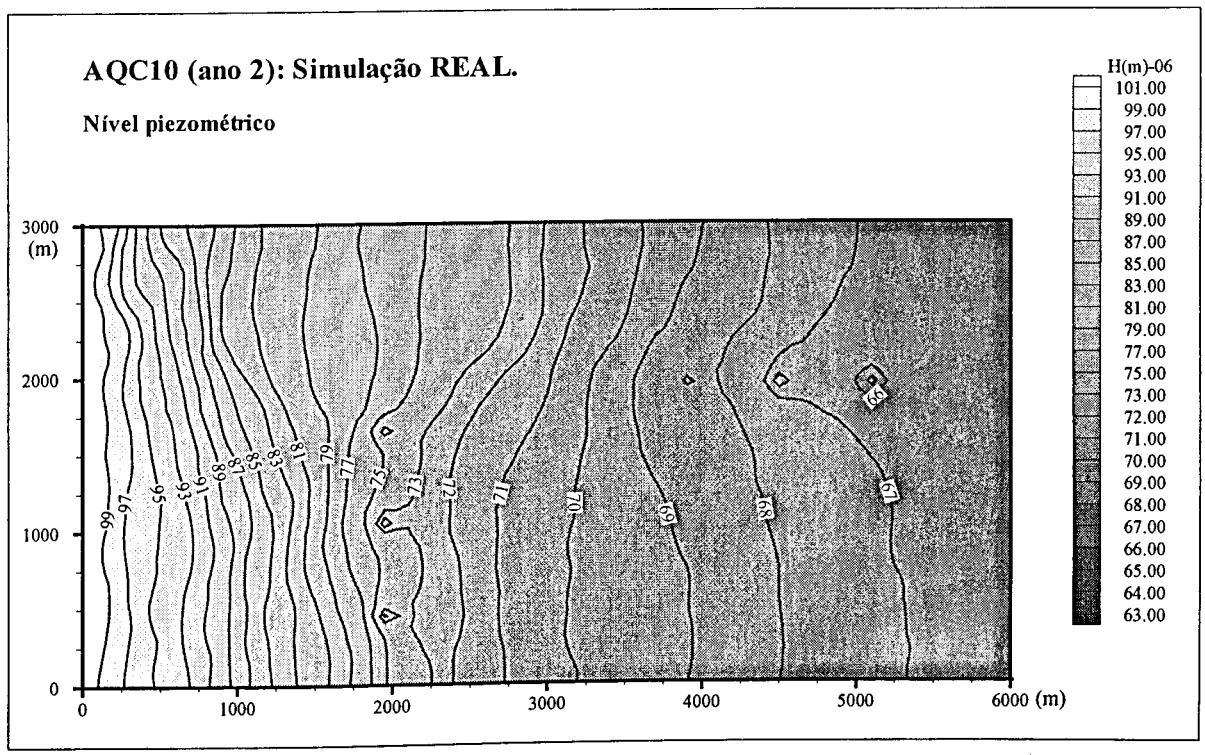



Figura 5.98 – AQC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 06.

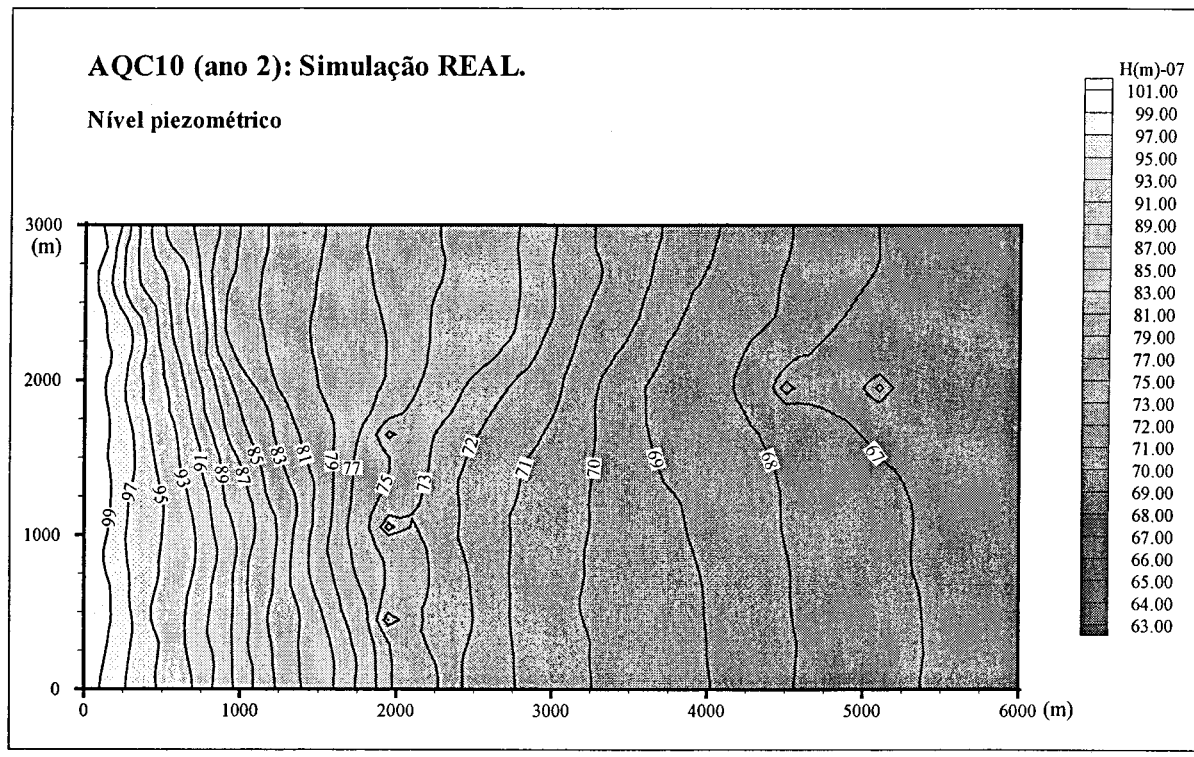



Figura 5.99 – AQC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 07.

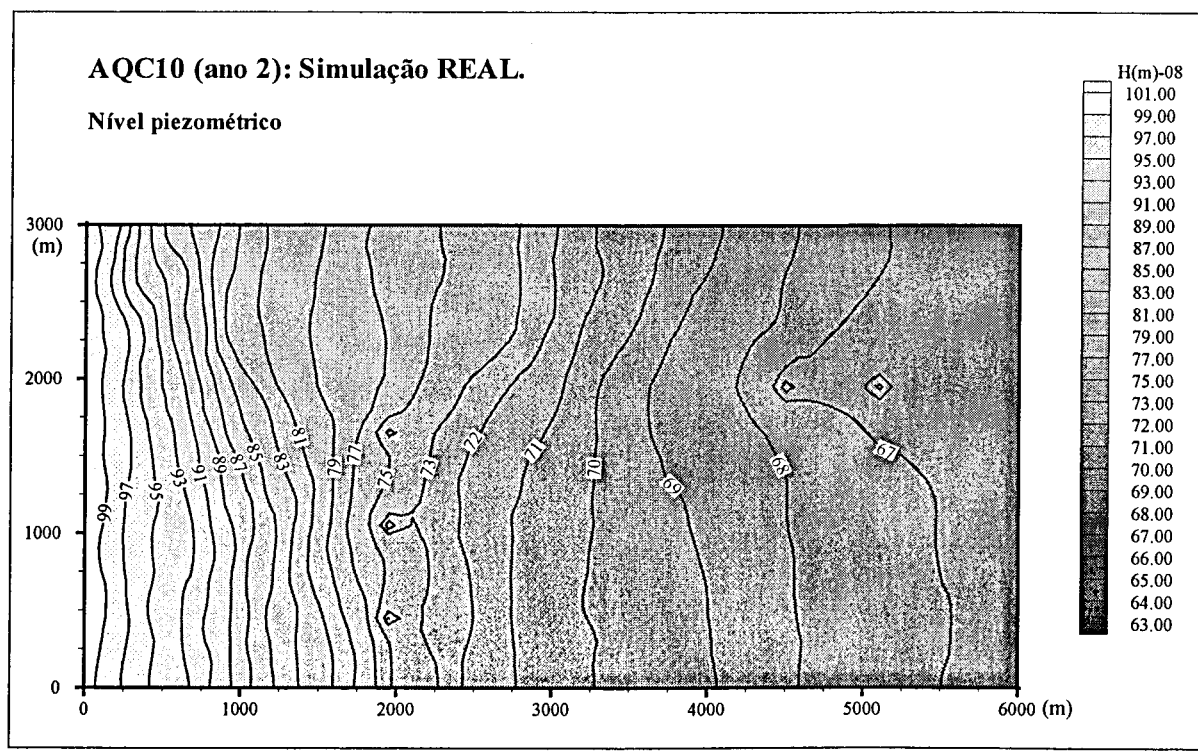



Figura 5.100 – AQC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 08.

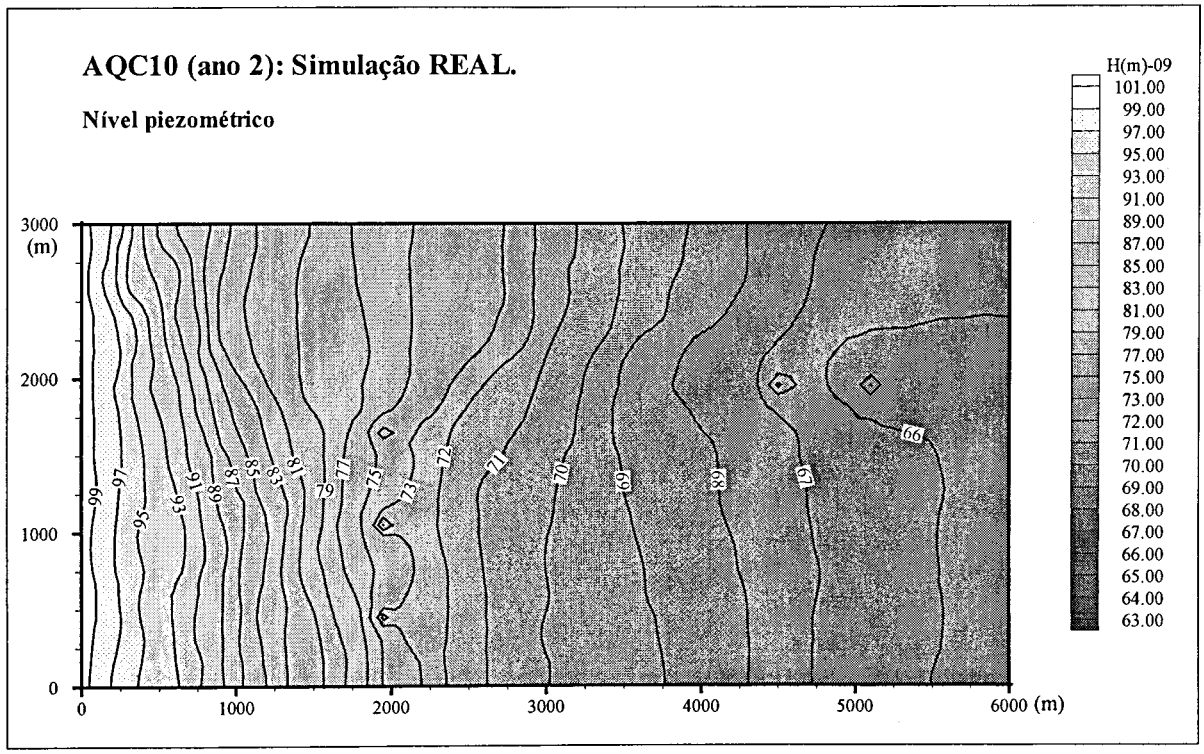



Figura 5.101 – AQC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 09.

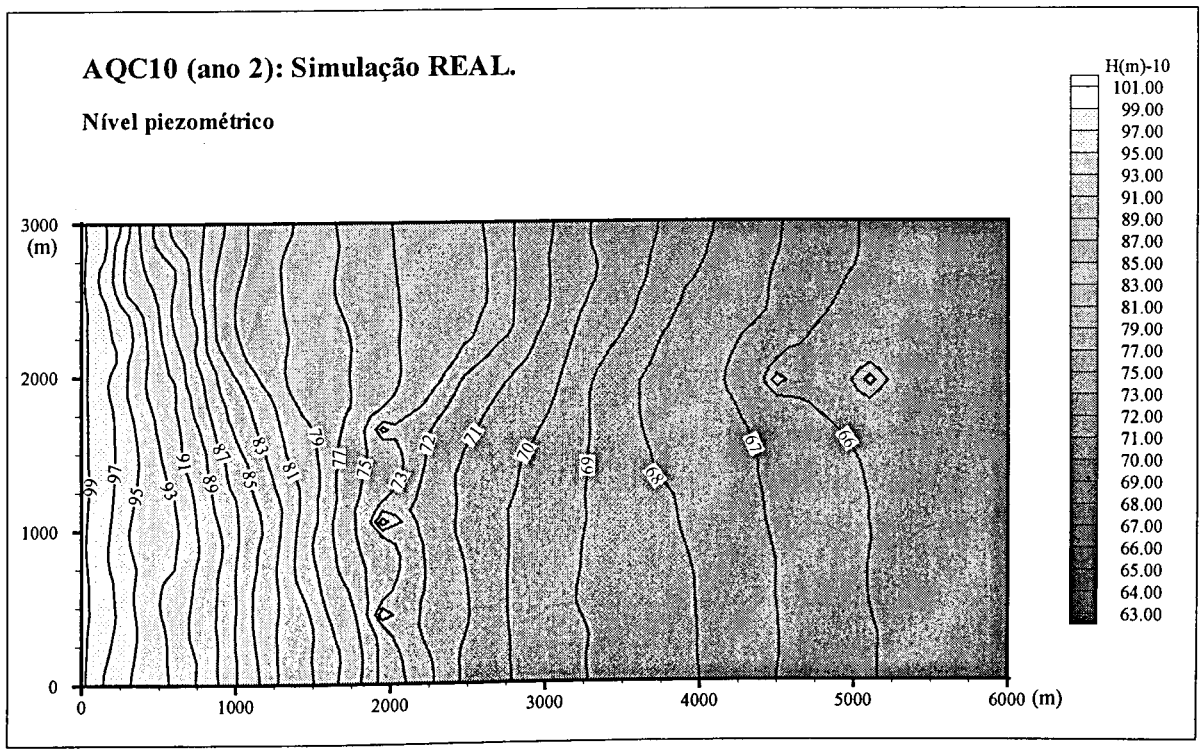



Figura 5.102 – AQC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 10.

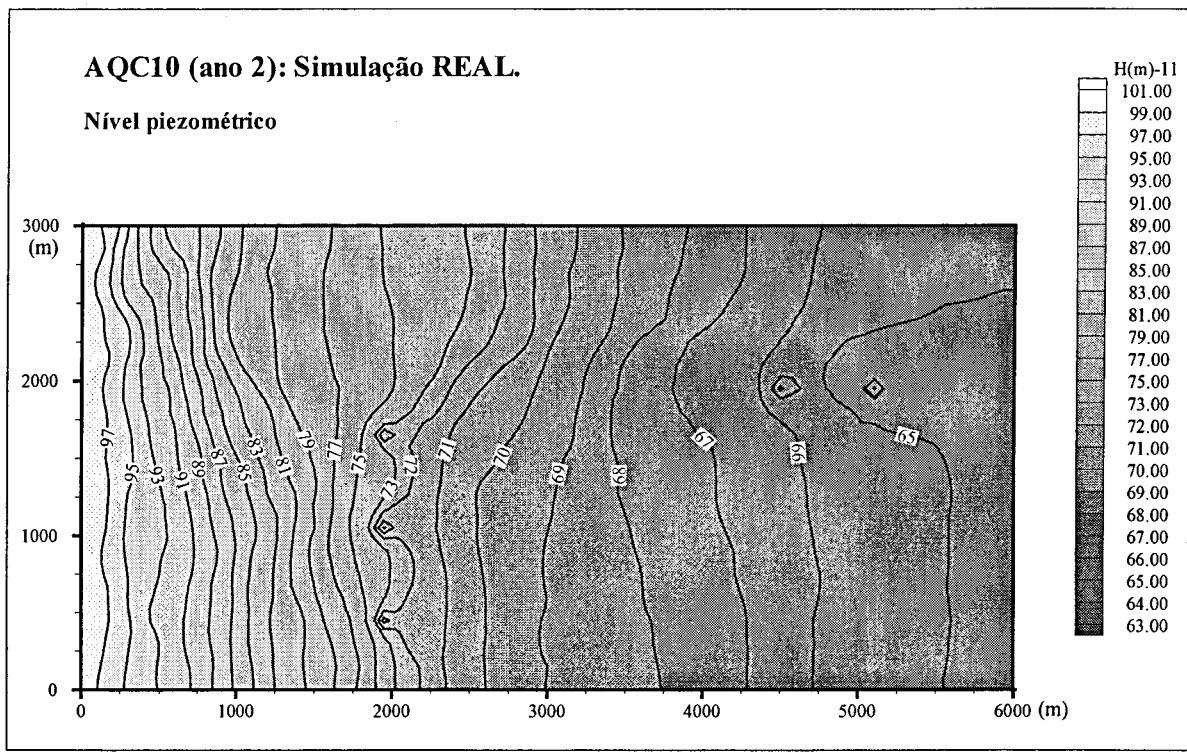



Figura 5.103 – AQC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 11.

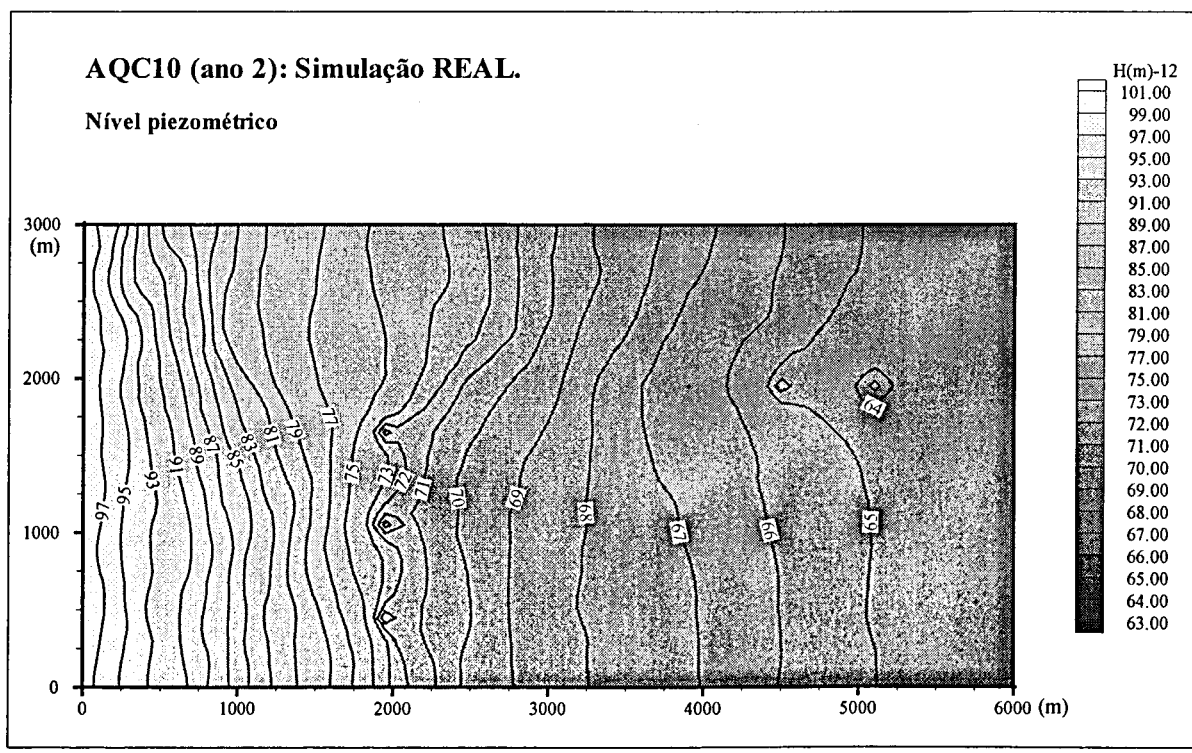



Figura 5.104 – AQC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 12.

Com base nas amostras de valores de $T$ (Figura 5.105) e $S$ (Figura 5.106) e com o programa **SGSIM** foram geradas 1000 realizações de cada um destes parâmetros hidrogeológicos nos nós da malha elementos finitos (800 elementos, 2521 nós). Para a simulação estocástica do escoamento pelo *msM-C* condicionadas (exercício AQC20), o programa **FLWM2** executa 1000 simulações, uma por cada par de realizações de $T$ e $S$. Deste modo, a variância associada aos níveis piezométricos estimados reflecte a variabilidade conjunta dos dois parâmetros hidrogeológicos.

```
AQC10 - Real T(m2/d) Amostra (16 valores)
5
Número do nó
X(m)
Y(m)
Y=lnT
Valor da variável: T(m2/d)
 219          450          2400     5.689258172        295.6742
 321          750           750     6.304573475        547.0682
 453         1050          1350     6.069898577        432.6368
 653         1500          2400     7.550836149       1902.3327
 813         1950           450     6.456754271        636.9902
 821         1950          1050     6.870637042        963.5622
 829         1950          1650     6.809519875        906.4355
1209         2850          2250     6.384148152        592.3799
1383         3300          1350     7.786641047       2408.2149
1631         3900          1350     8.354117189       4247.6331
1639         3900          1950     7.317950582       1507.1121
1771         4200          2550     7.648585964       2097.6773
1867         4500           450     6.724577356         832.62
1887         4500          1950     7.203720799       1344.4238
2135         5100          1950     5.835882969        342.3669
2243         5400           750     8.741537845       6257.5114
```

Figura 5.105 – AQC10: Ficheiro com a amostra de valores da transmissividade, $T$(m$^2$/d), lidos em 16 pontos do aquífero.

```
AQC10 - Real S(m/m) Amostra (16 valores)
5
Número do nó
X(m)
Y(m)
G=lnS
Valor da variável: S(m/m)
 219          450          2400    -5.554190742       0.0038712
 321          750           750    -5.176701685       0.0056466
 453         1050          1350    -4.926602097       0.0072511
 653         1500          2400    -4.468203451       0.0114679
 813         1950           450     -6.11412948       0.0022114
 821         1950          1050    -4.756912103       0.0085921
 829         1950          1650     -5.44181829       0.0043316
1209         2850          2250     -5.99342647       0.0024951
1383         3300          1350    -4.959391001       0.0070172
1631         3900          1350    -5.351654854       0.0047403
1639         3900          1950    -5.672603626       0.0034389
1771         4200          2550    -4.684657215       0.0092359
1867         4500           450    -5.325832459       0.0048643
1887         4500          1950    -5.138156214       0.0058685
2135         5100          1950    -5.299357908       0.0049948
2243         5400           750    -6.709478355       0.0012193
```

Figura 5.106 – AQC10: Ficheiro com a amostra de valores do coeficiente de armazenamento, $S$ (m/m), lidos em 16 pontos do aquífero.

Nas páginas seguintes, da Figura 5.107 à Figura 5.118, são apresentados os níveis piezométricos do exercício AQC20, estimados pelo *msM-C* condicionadas. Para uma melhor percepção da aproximação, ou afastamento, dos valores estimados aos "reais" subtraíram-se aos campos piezométricos estimados (AQC20) os correspondentes campos "reais" (AQC10) e as respectivas imagens são exibidas da Figura 5.119 à Figura 5.130. A variância do nível piezométrico, calculada pelo *msM-C* condicionadas (AQC20), é representada da Figura 5.131 à Figura 5.142. A título exemplificativo são apresentadas as imagens de 3 realizações das transformadas logarítmicas de cada uma das propriedades hidrogeológicas e os respectivos histogramas e semivariogramas experimentais. A estes últimos são sobrepostos os semivariogramas exponenciais teóricos usados na geração das realizações "reais" das transformadas logarítmicas de $T$ e $S$.

Da Figura 5.155 à Figura 5.166 são apresentados os níveis piezométricos do exercício AQC30, estimados pelo método das perturbações. As imagens das diferenças entre os valores estimados (AQC30) e os "reais" (AQC10) são exibidas da Figura 5.167 à Figura 5.178. A variância do nível piezométrico, calculada pelo método das perturbações (AQC30), é representada da Figura 5.179 à Figura 5.190. A seguir, da Figura 5.191 à Figura 5.194, são apresentadas as distribuições estimadas, com o programa **SKSIM**, de $T$ e de $S$ e ainda as respectivas variâncias dos erros de estimação, equivalentes às variâncias condicionadas, quantificadas com o auxílio do programa **COVCD** que também calcula as matrizes de covariância condicionada de $Y$ e $G$.

Com a finalidade de comparar o valor "real" com os valores estimados do caudal total que atravessa a fronteira permeável $\Gamma_1$, onde o valor de $H$ é imposto, organizou-se a Tabela 5.14 com o caudal calculado no instante final de cada mês. Para avaliar o comportamento global do aquífero, em termos de ganho ou perda de água armazenada, calcularam-se os caudais de balanço global[82] para os exercícios AQC10, AQC20 e AQC30, os quais são registados e comparados na Tabela 5.15.

Após a apresentação das imagens e resultados acima referidos é feita a correspondente análise crítica.

---

[82] O caudal de balanço global é a diferença, num dado instante, entre o caudal extraído e o que recarrega o aquífero. É calculado pelo programa **BALFLW** e serve também para verificar se os resultados do programa **FLWM2** respeitam a equação de continuidade.

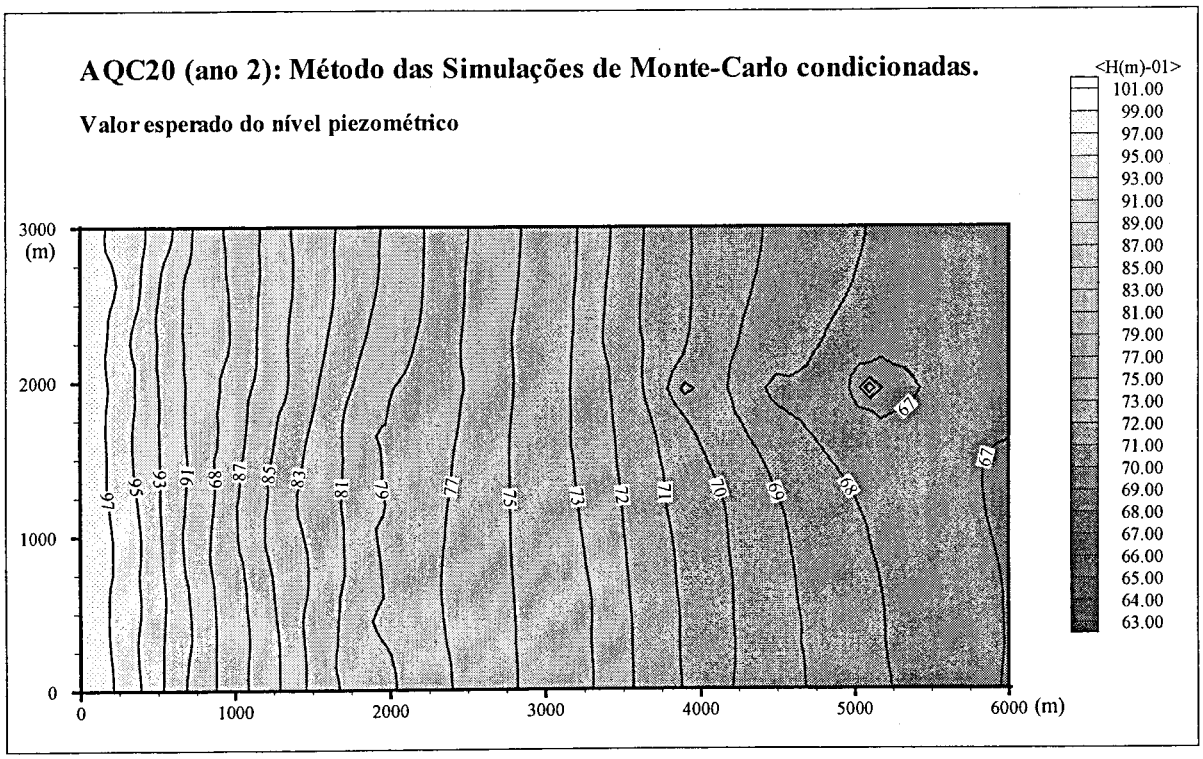



Figura 5.107 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 01.

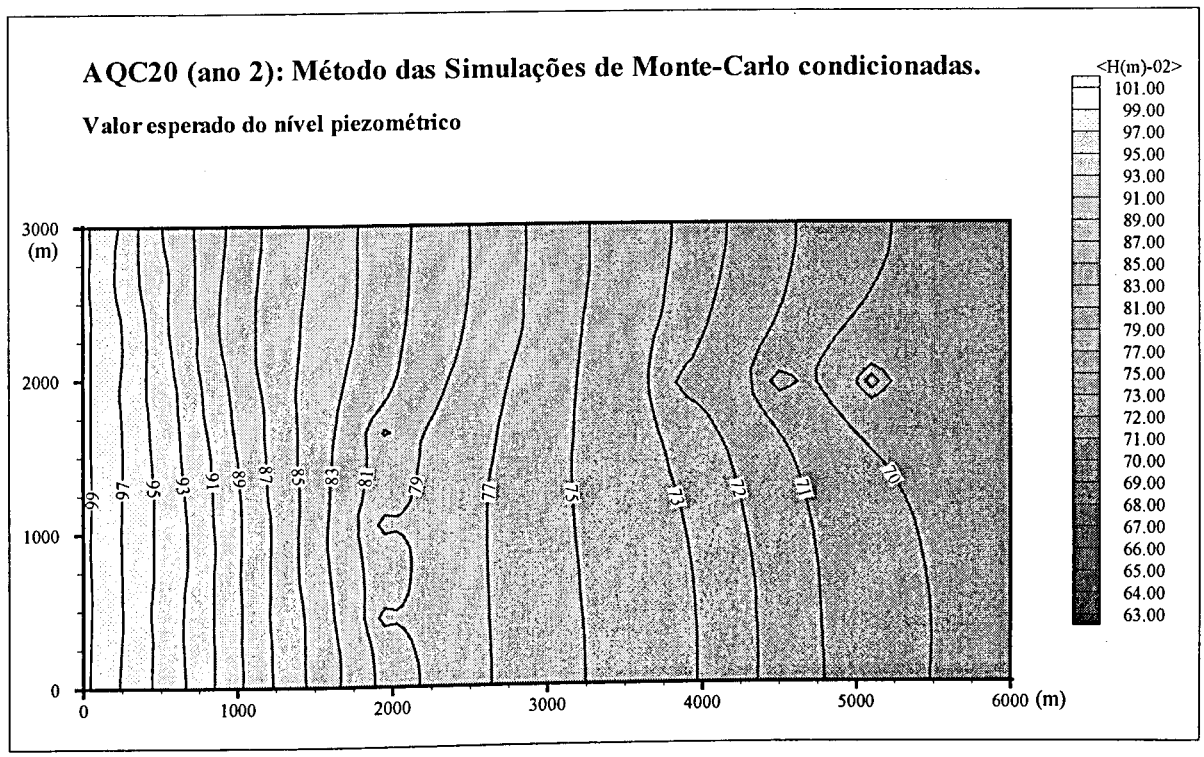



Figura 5.108 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 02.

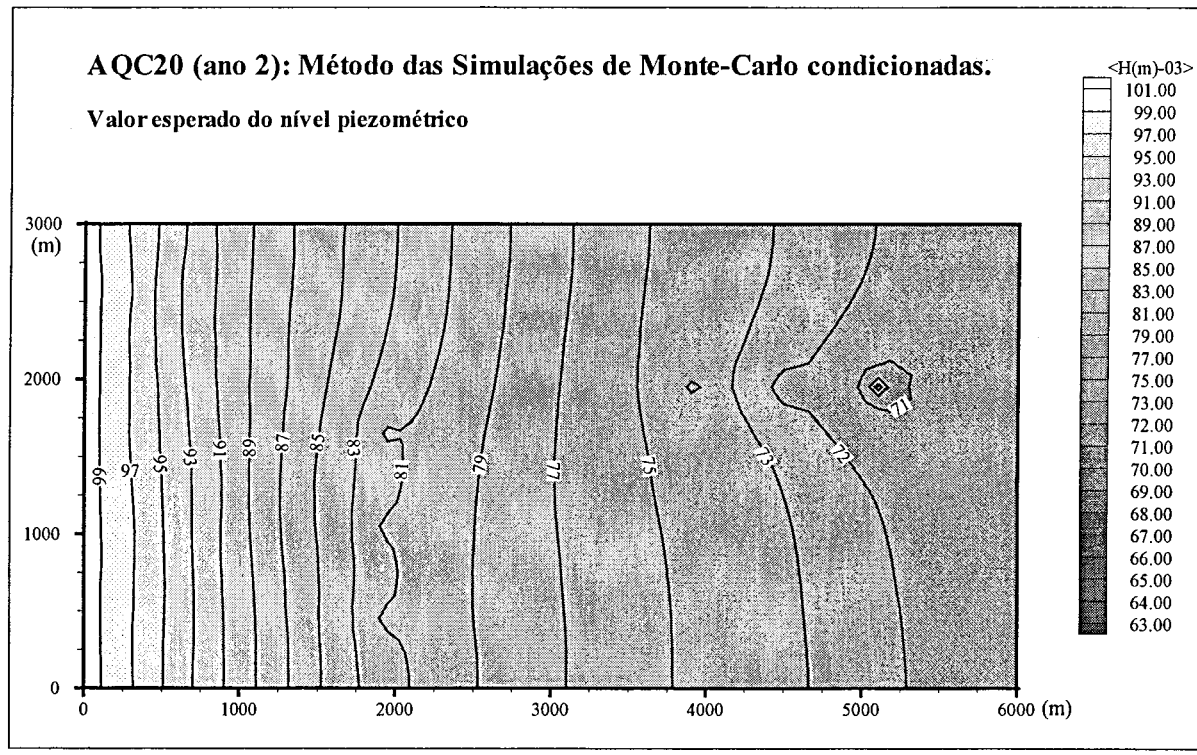



Figura 5.109 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 03.

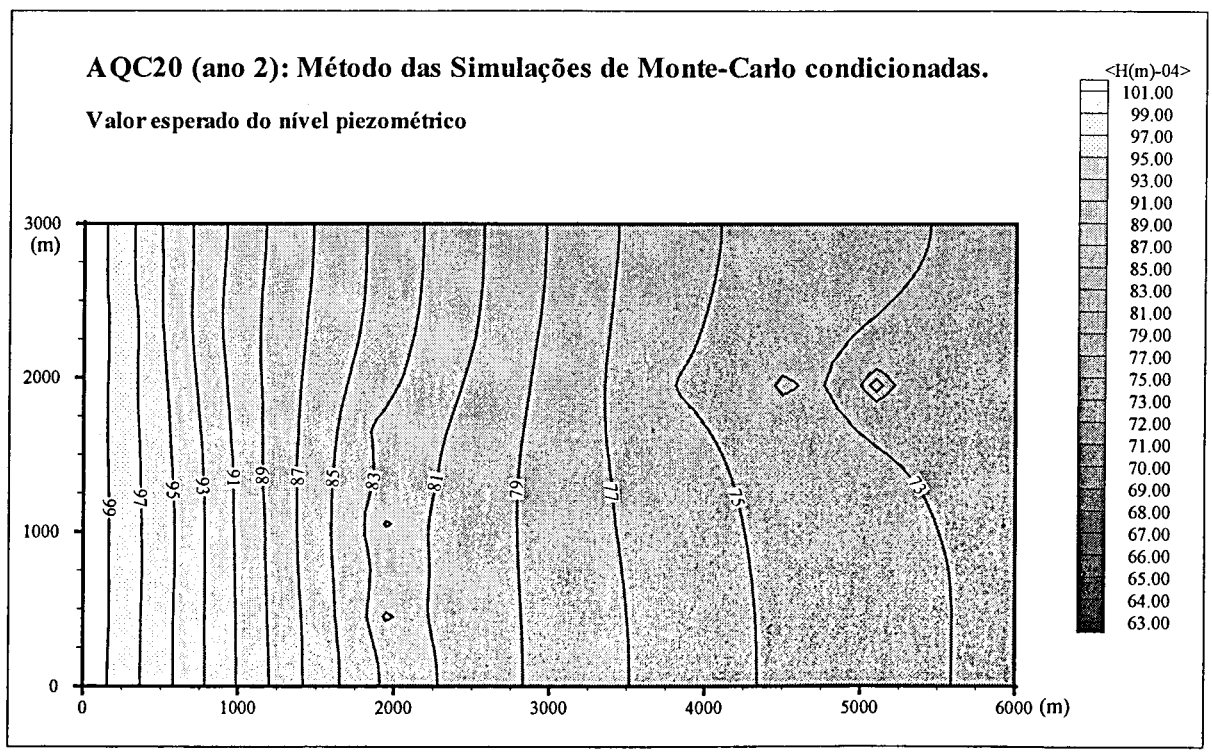



Figura 5.110 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 04.

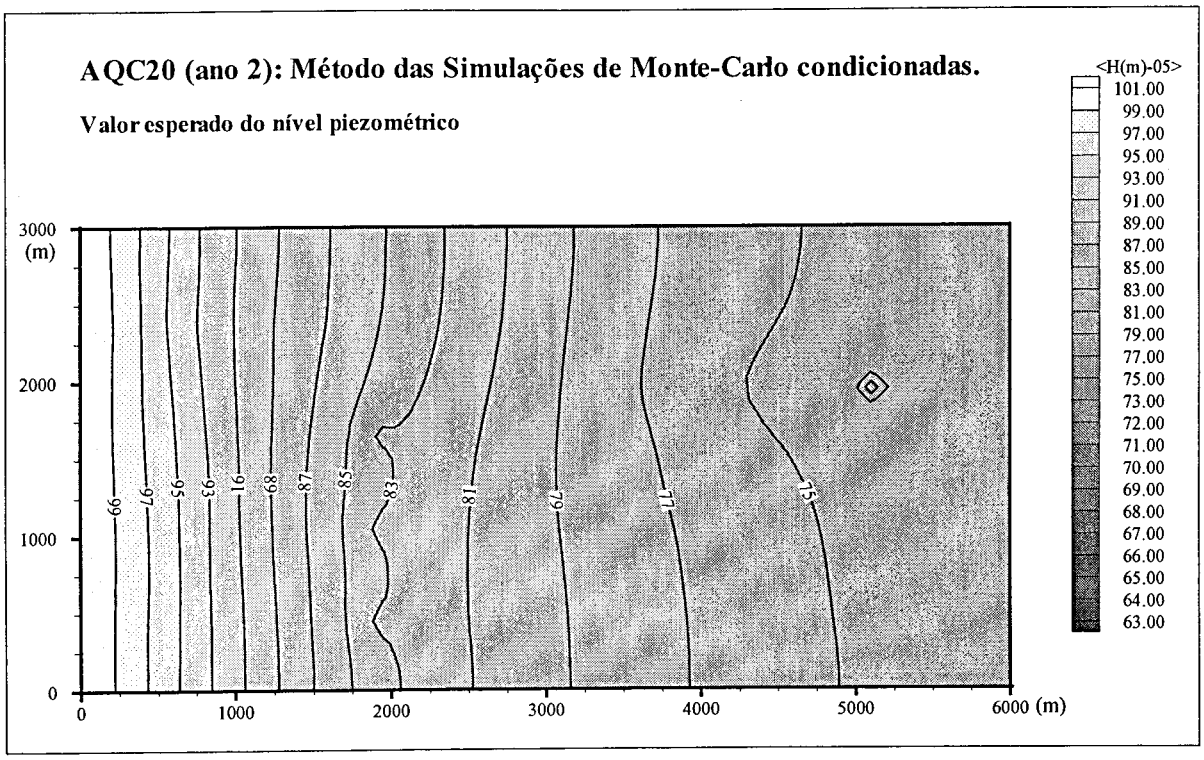



Figura 5.111 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 05.

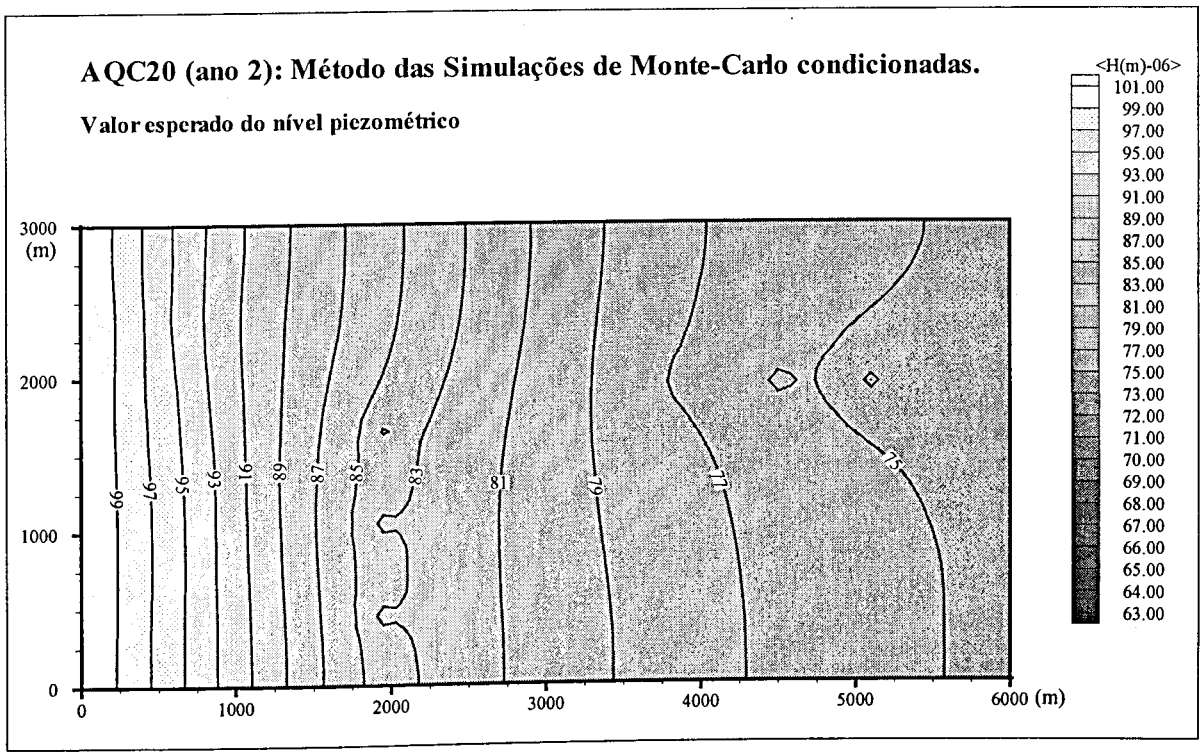



Figura 5.112 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 06.

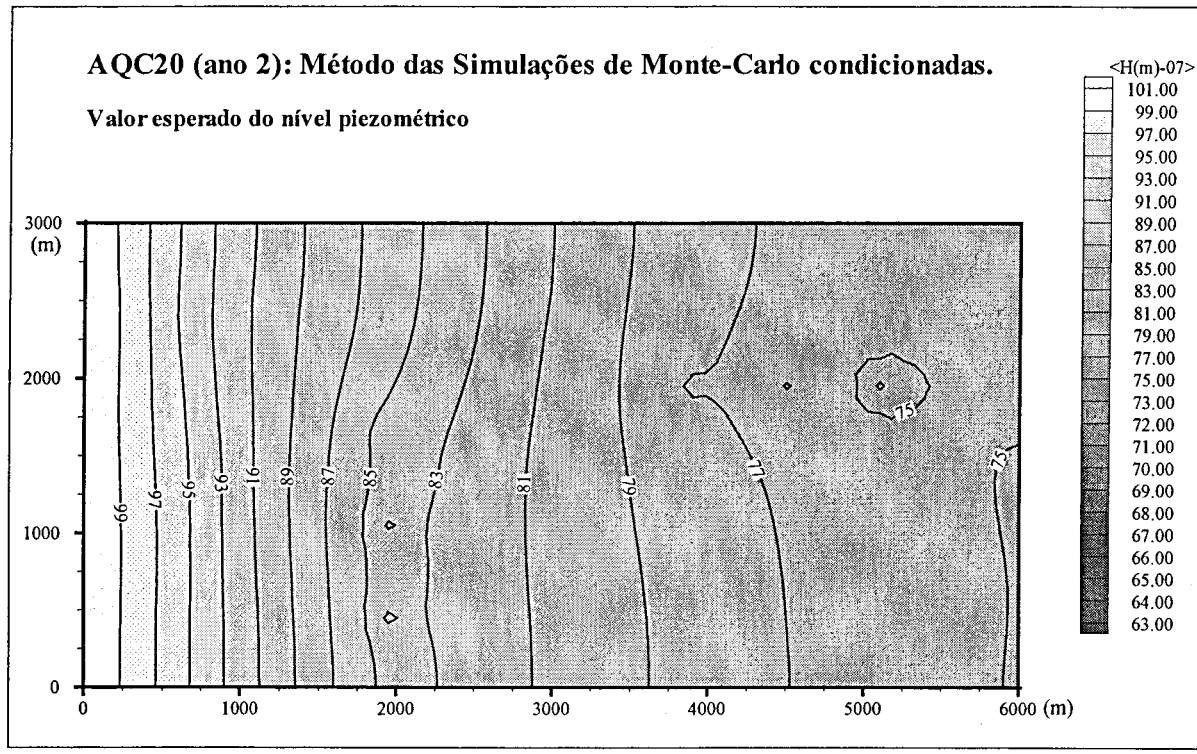



Figura 5.113 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 07.

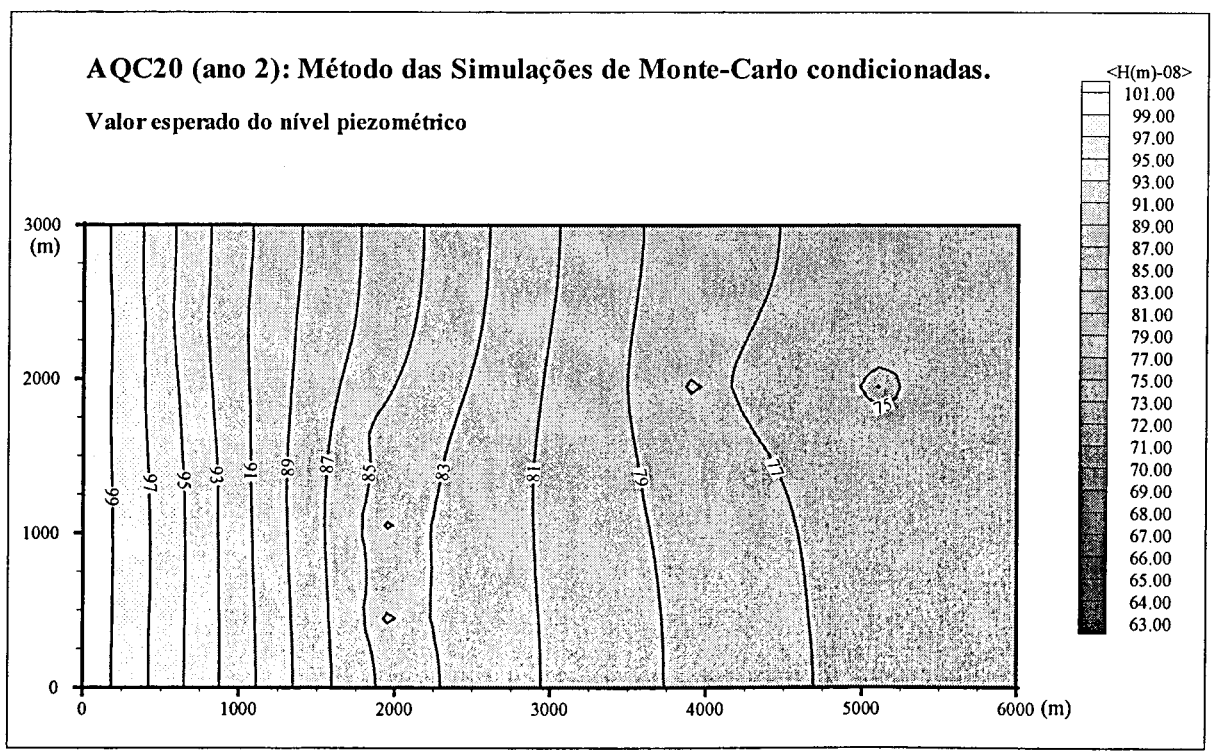



Figura 5.114 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no fim do mês 08.

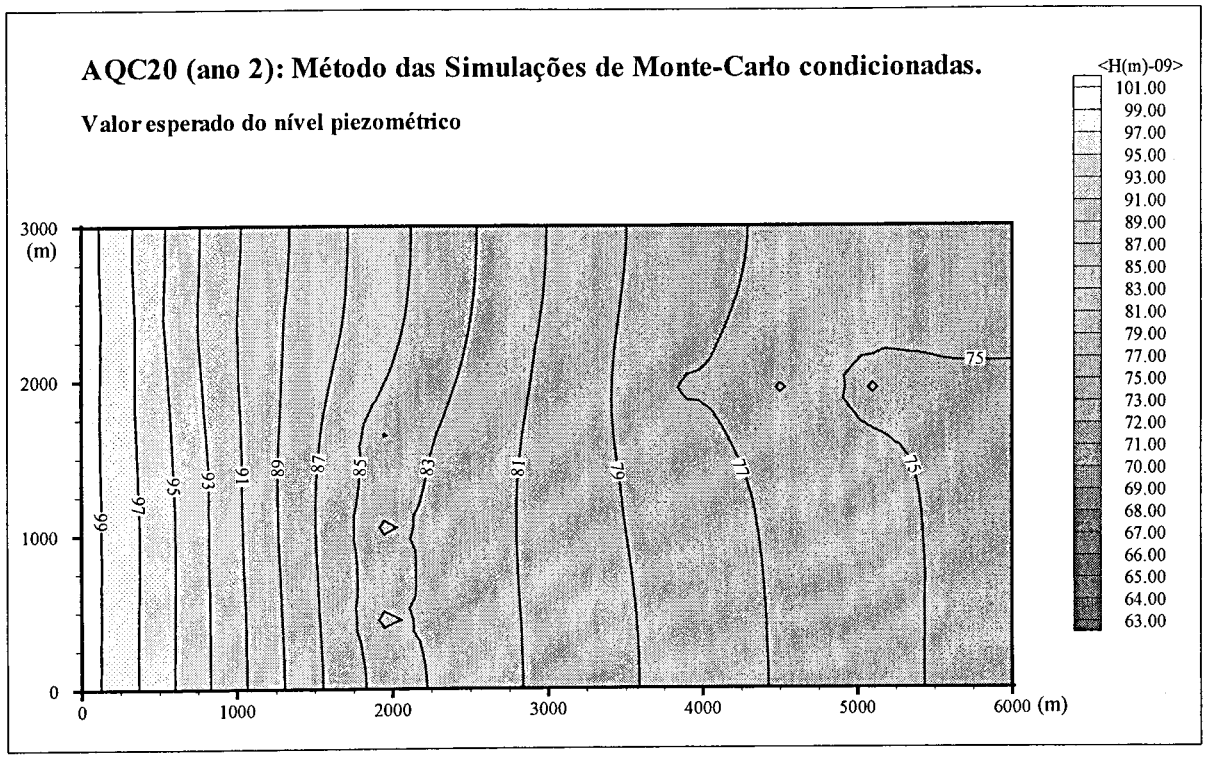



Figura 5.115 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no fim do mês 09.

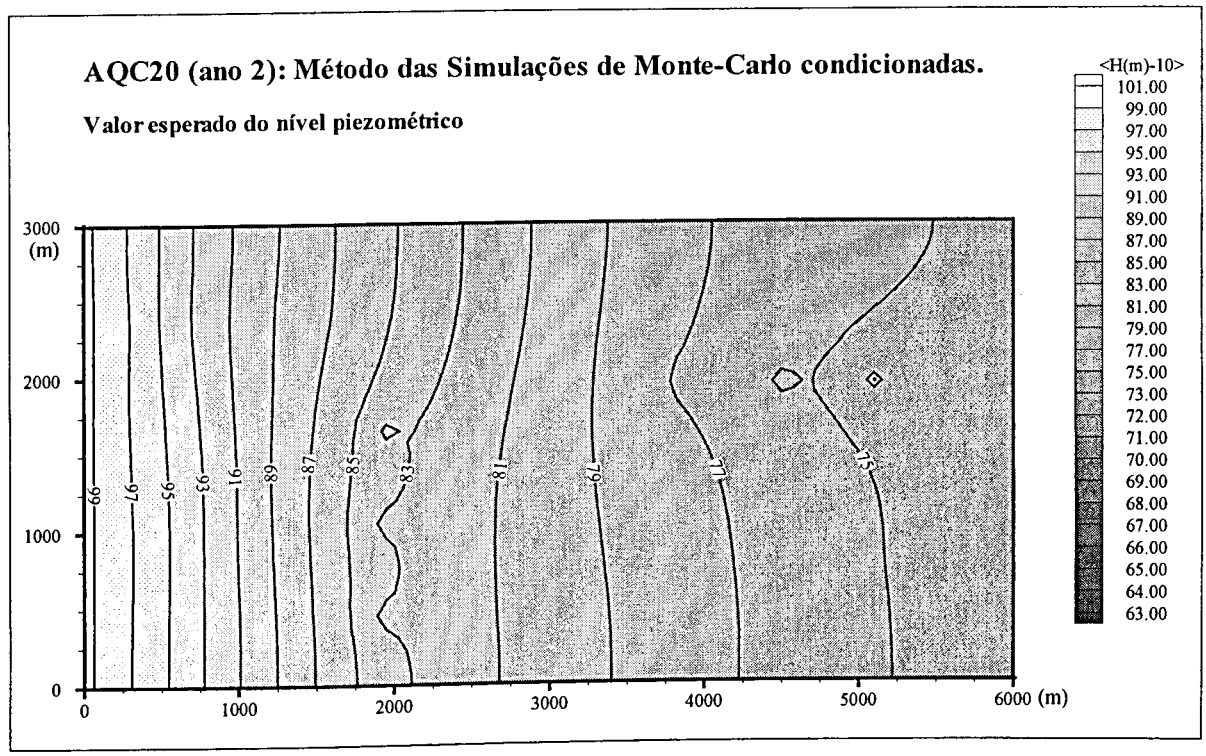



Figura 5.116 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no fim do mês 10.

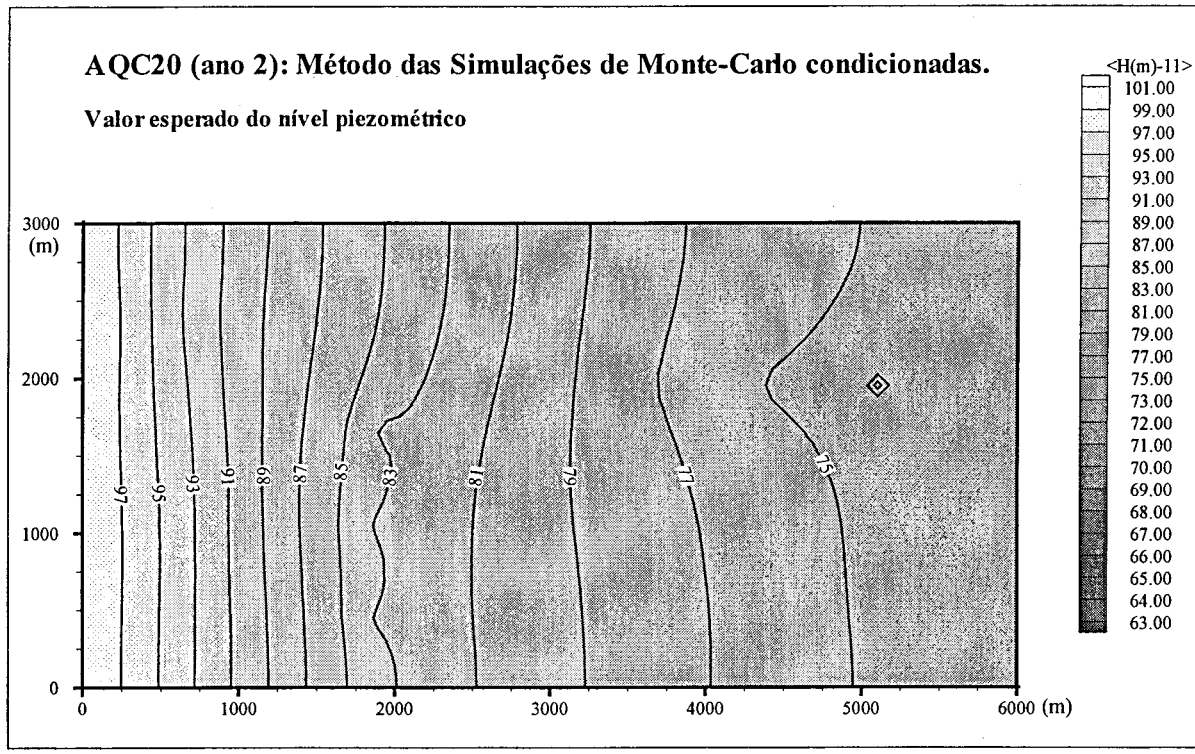



Figura 5.117 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no fim do mês 11.

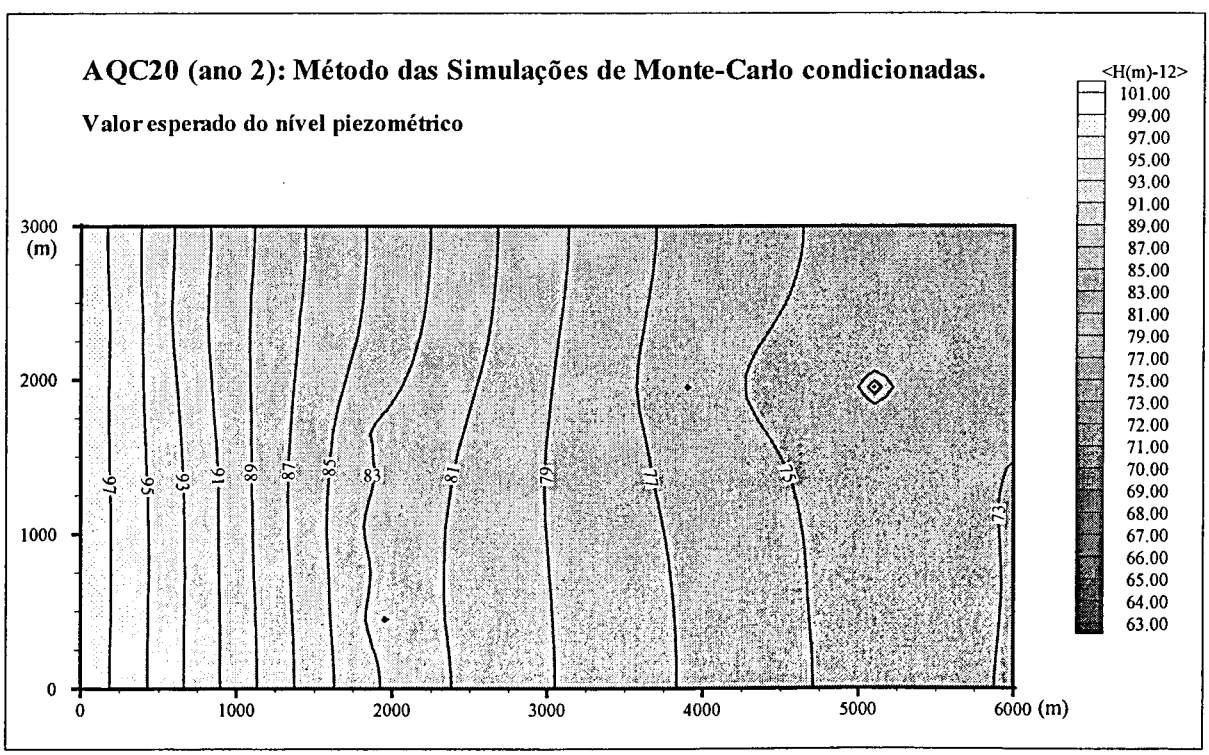



Figura 5.118 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no fim do mês 12.

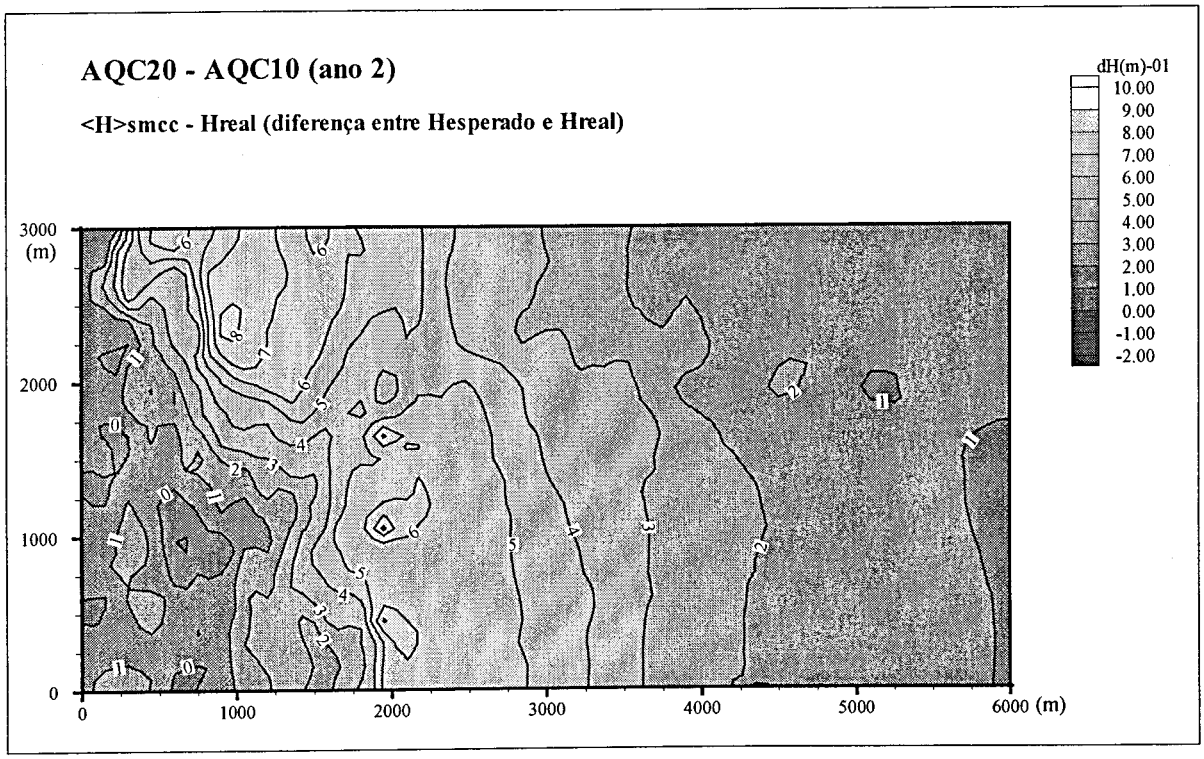



Figura 5.119 – AQC20-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 01.

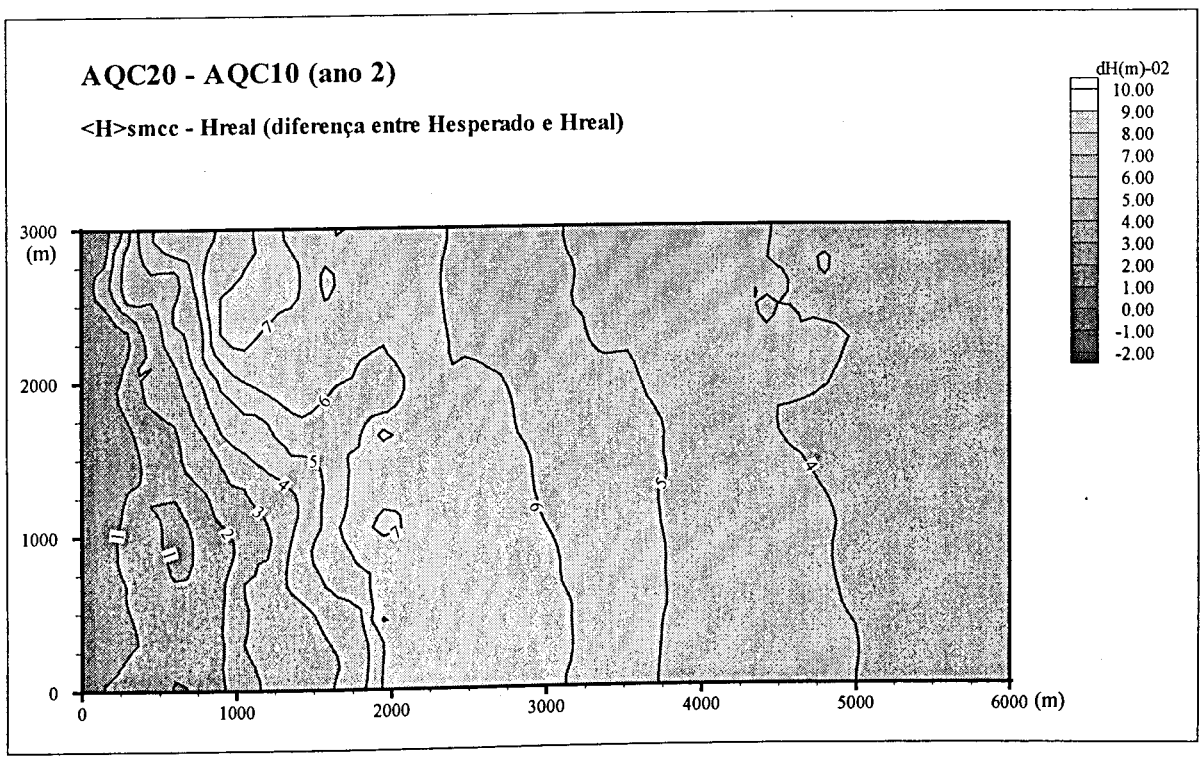



Figura 5.120 – AQC20-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 02.

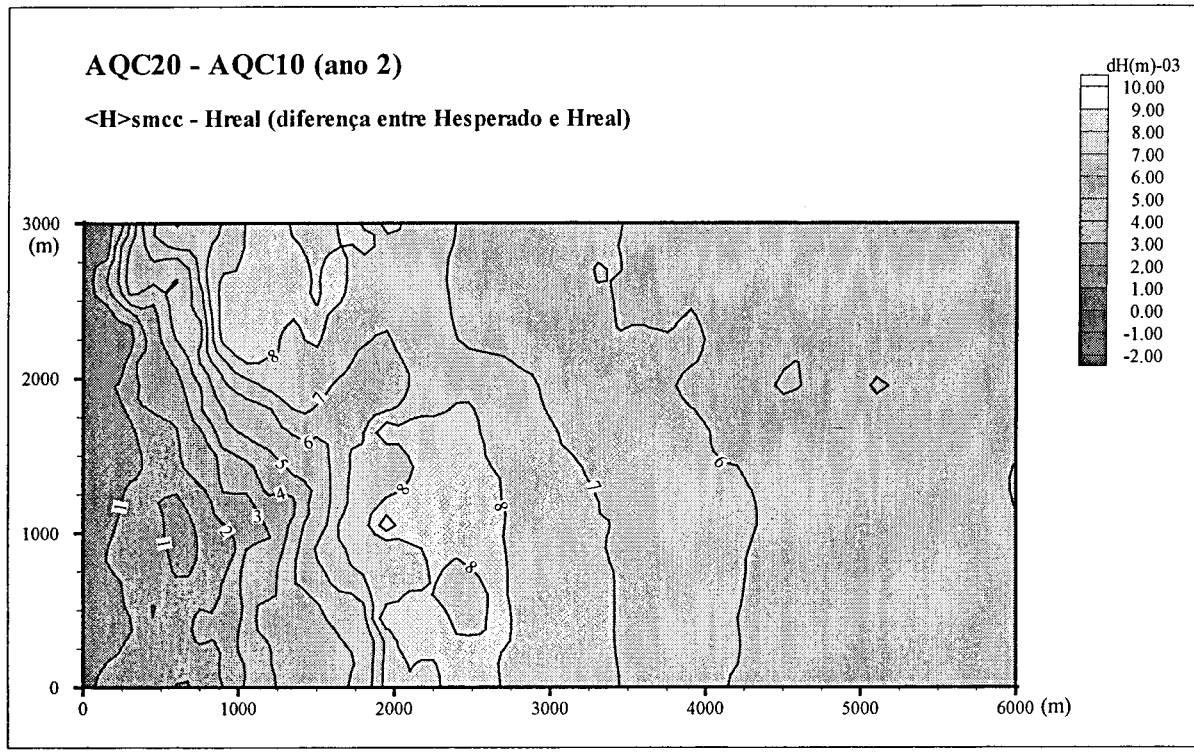



Figura 5.121 – AQC20-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 03.

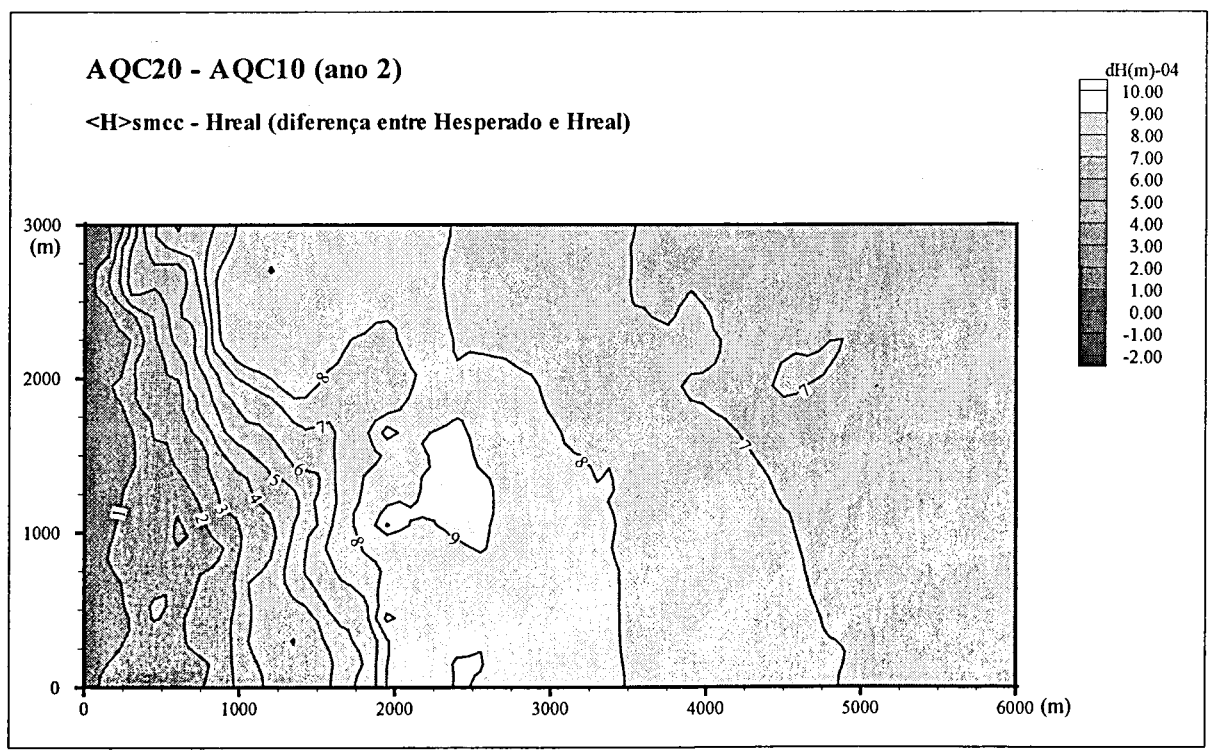



Figura 5.122 – AQC20-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 04.

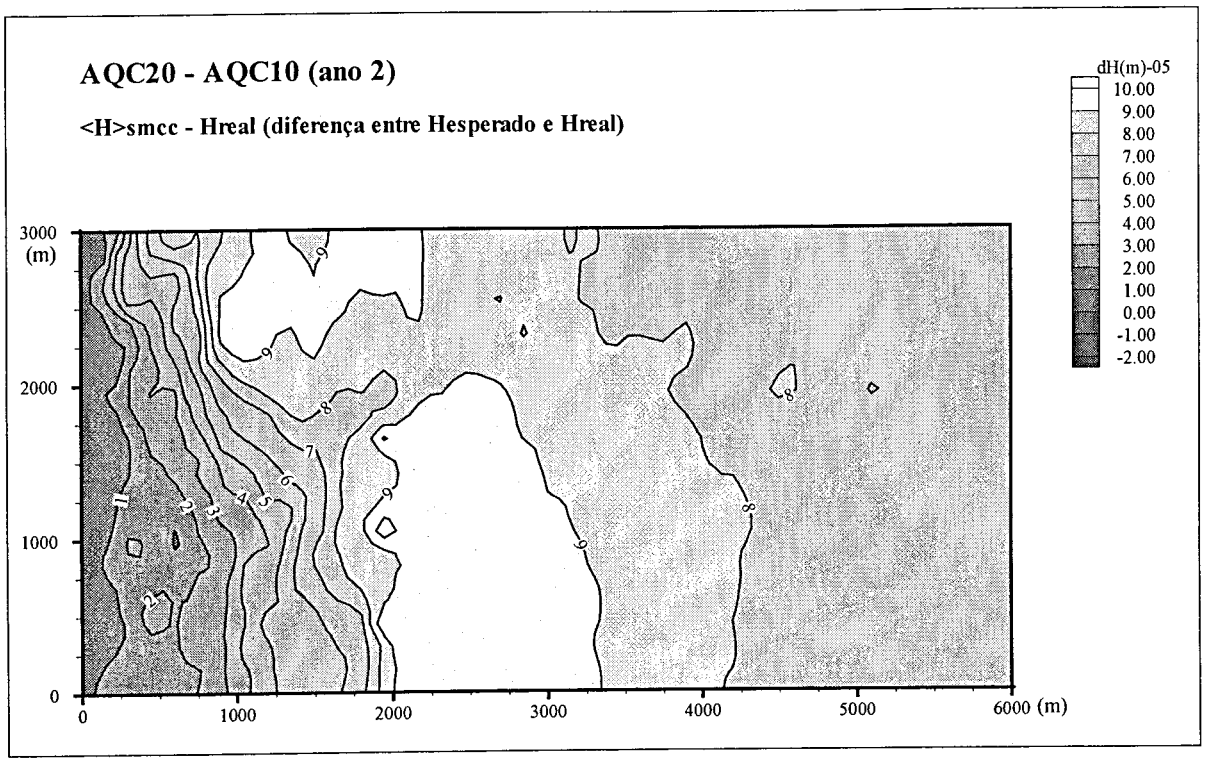



Figura 5.123 – AQC20-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 05.

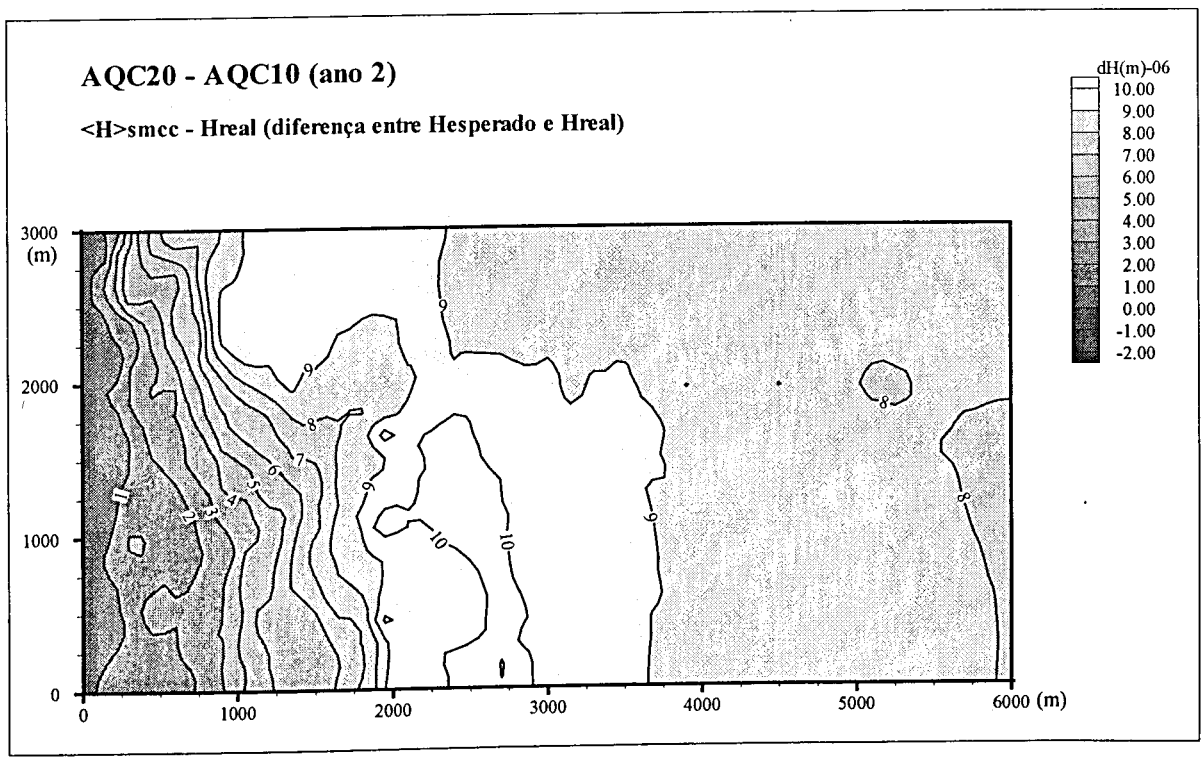



Figura 5.124 – AQC20-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 06.

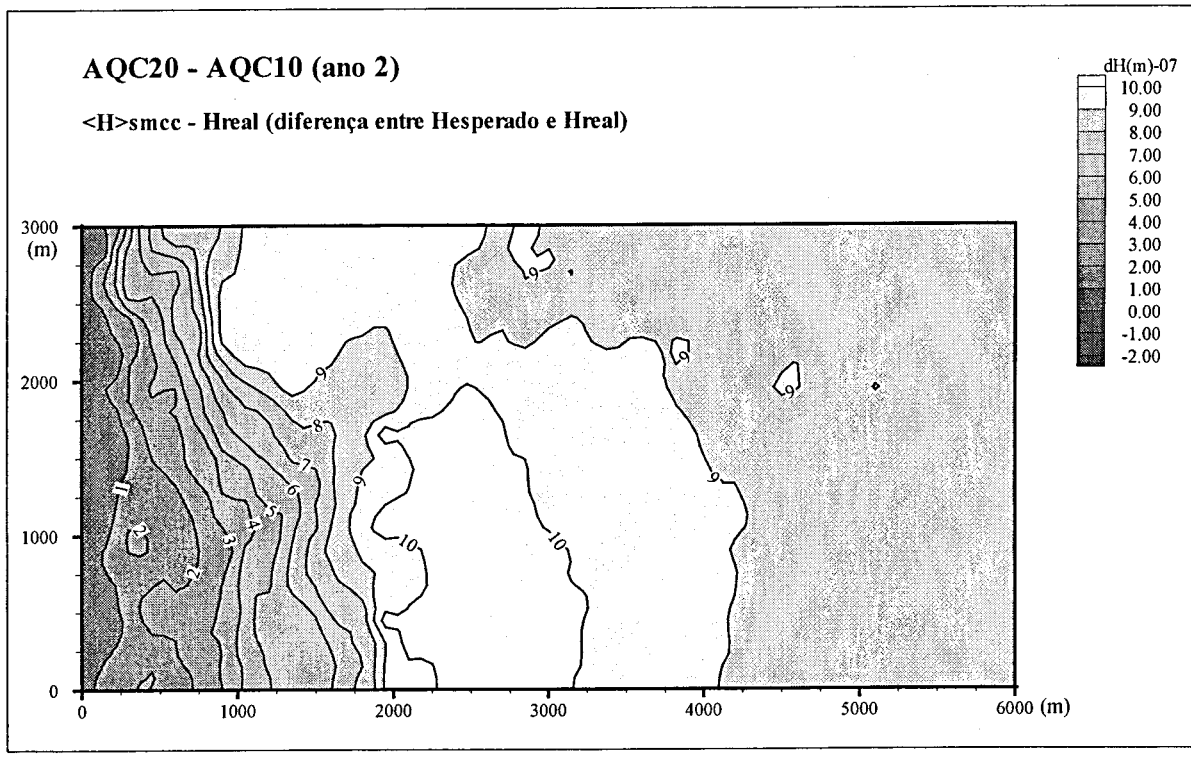



Figura 5.125 – AQC20-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 07.

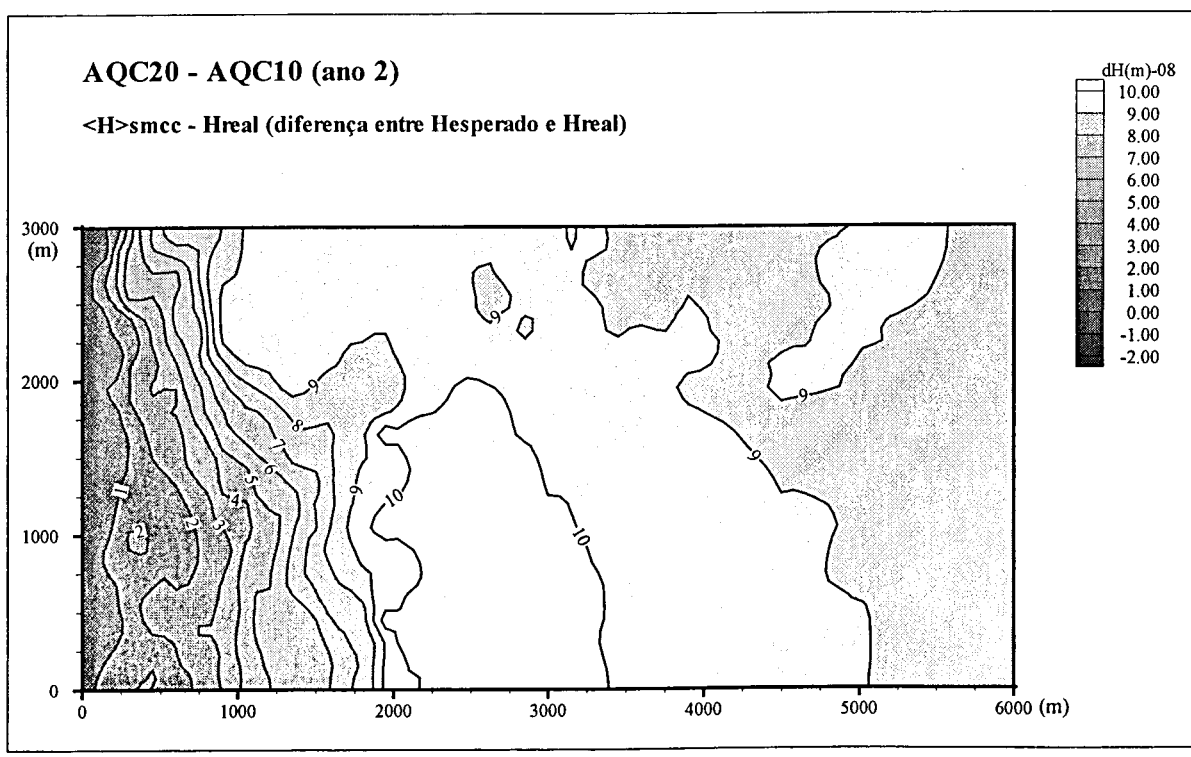



Figura 5.126 – AQC20-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 08.

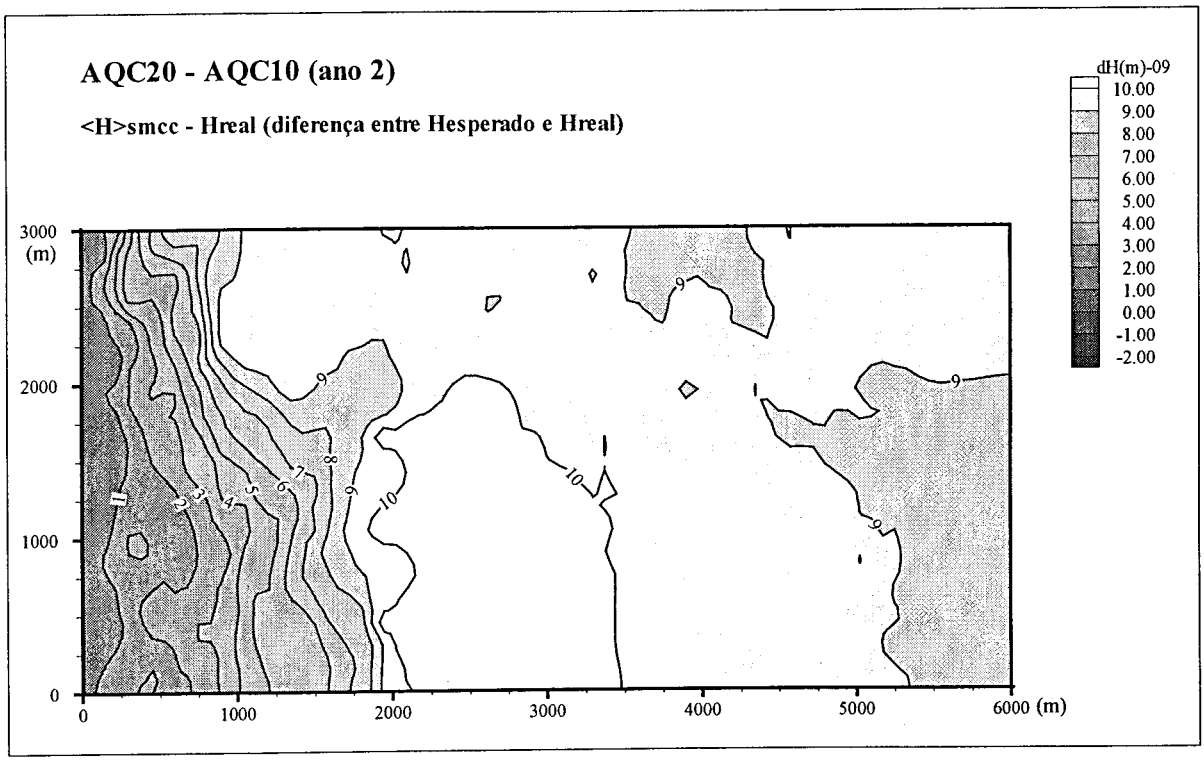



Figura 5.127 – AQC20-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 09.

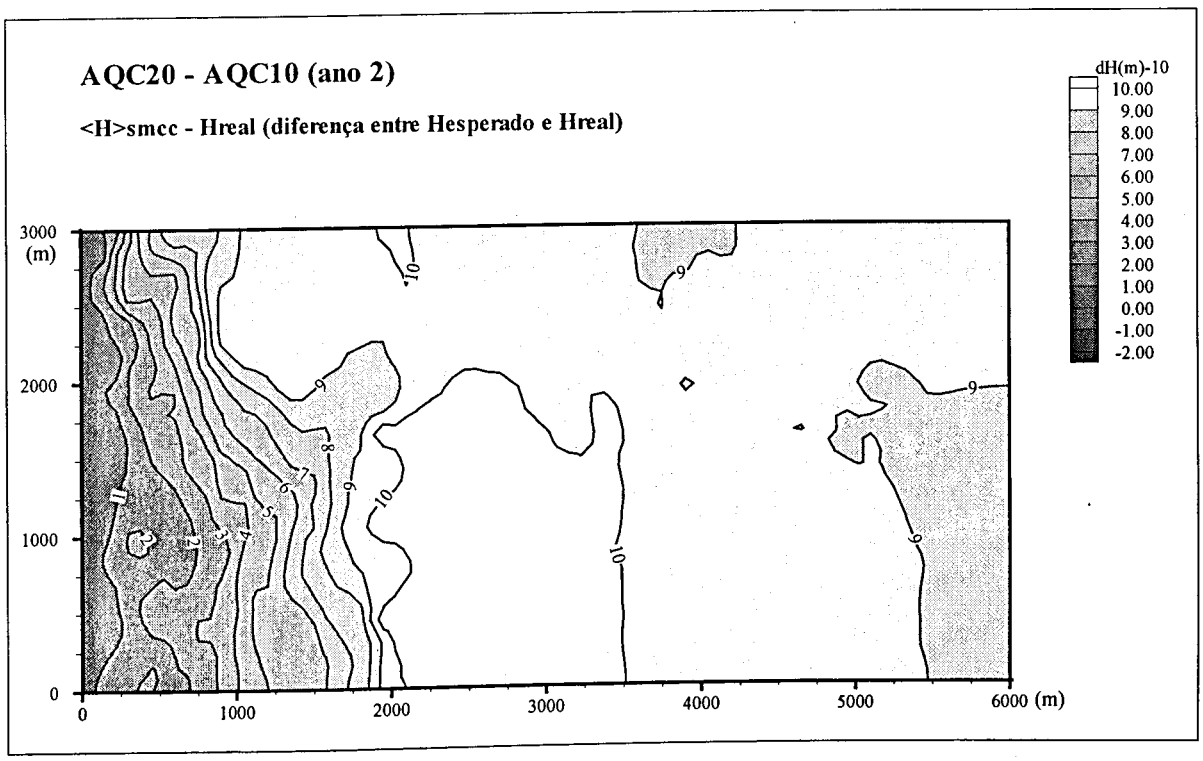



Figura 5.128 – AQC20-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 10.

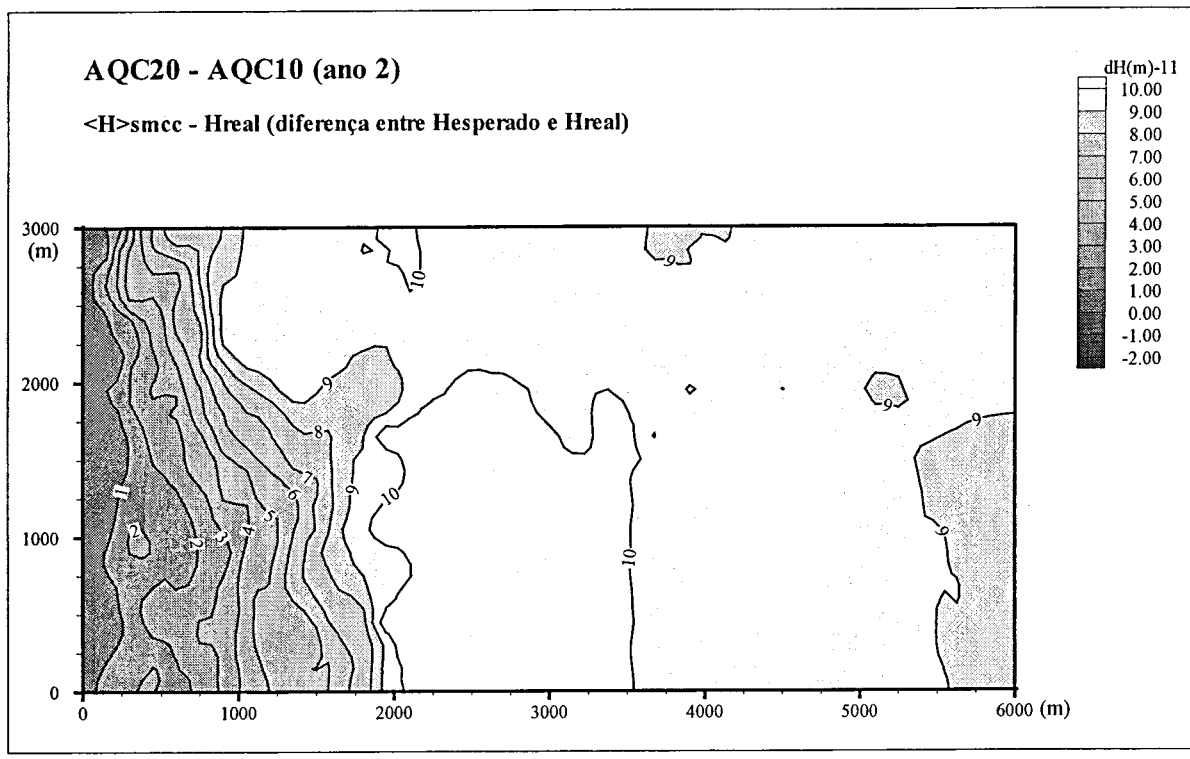



Figura 5.129 – AQC20-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 11.

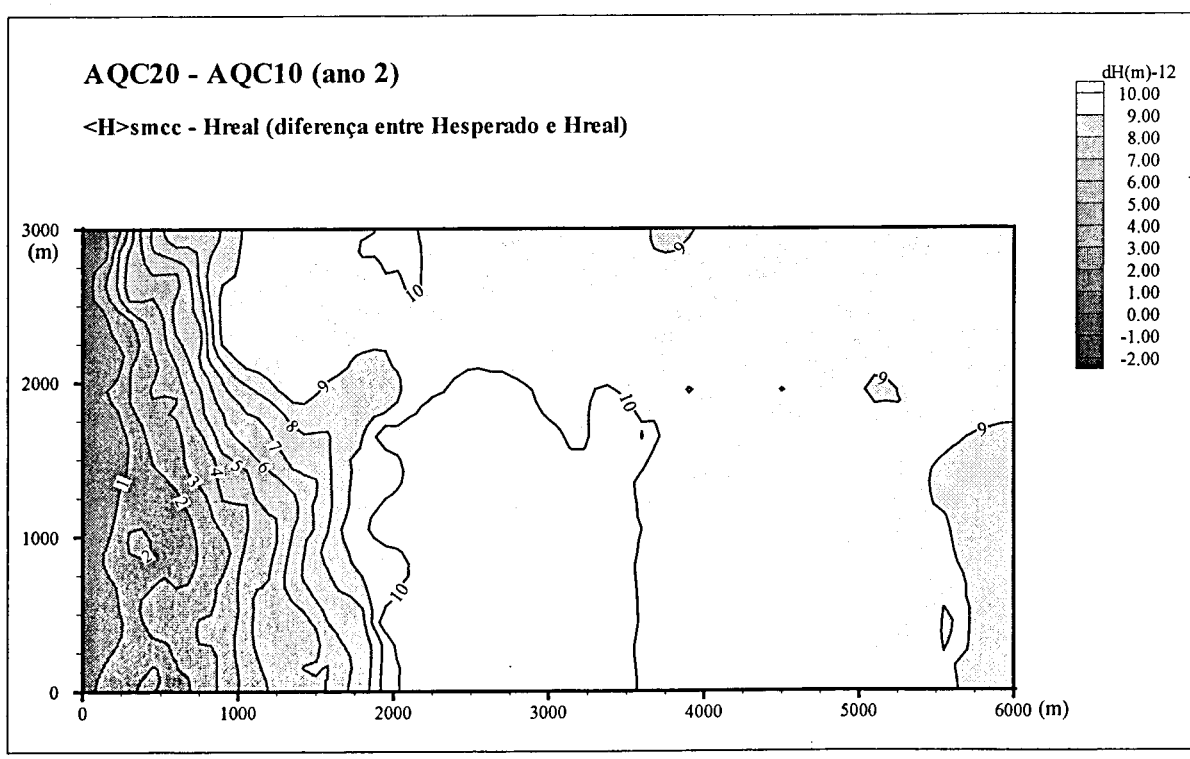



Figura 5.130 – AQC20-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 12.

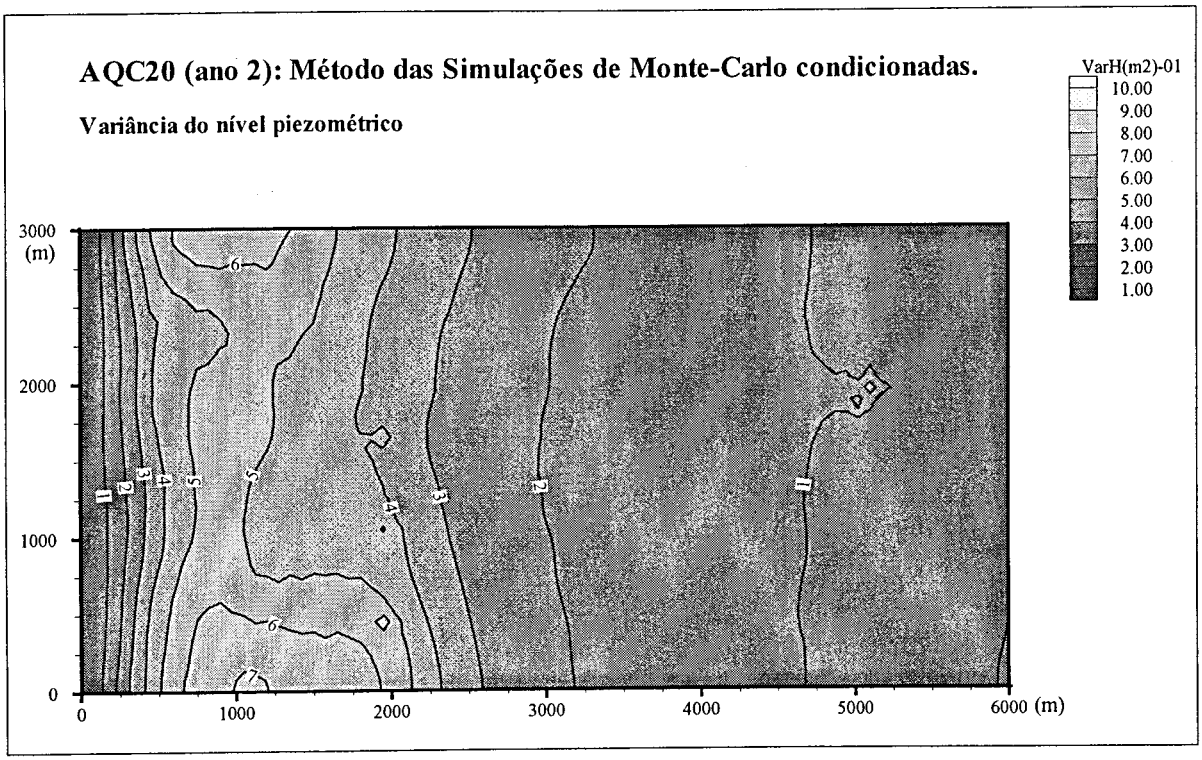



Figura 5.131 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 01.

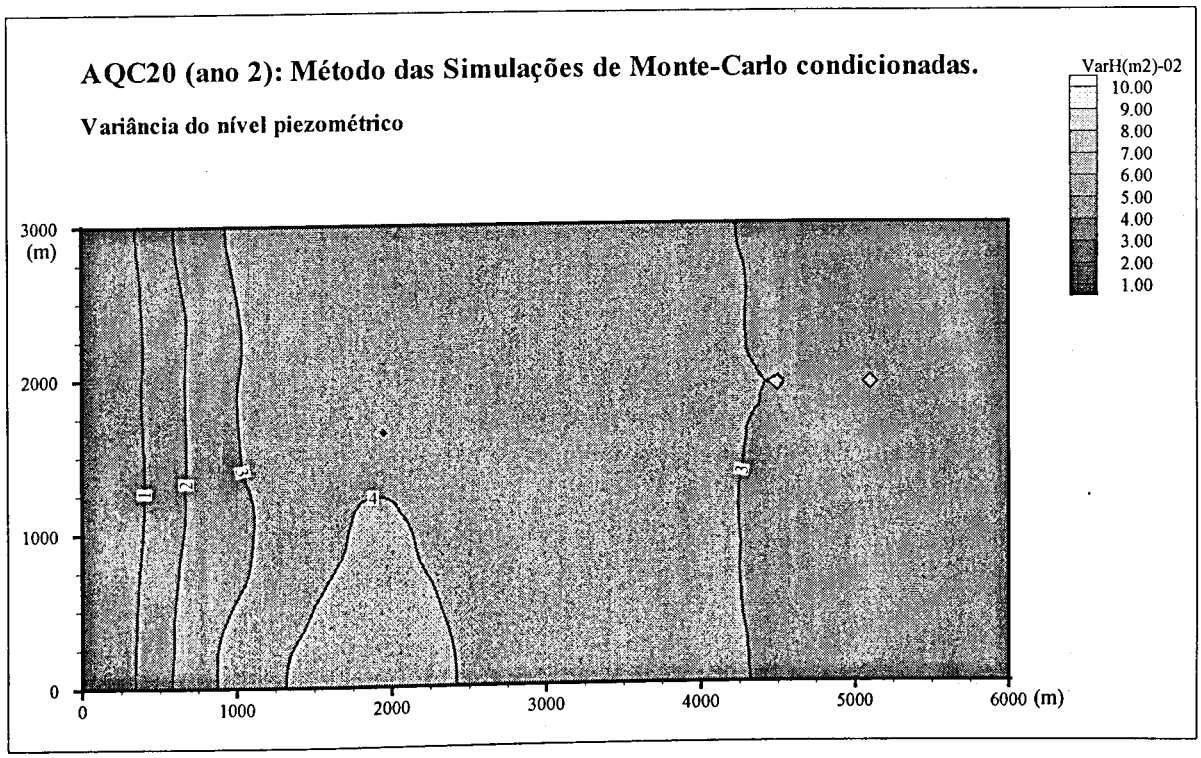



Figura 5.132 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 02.

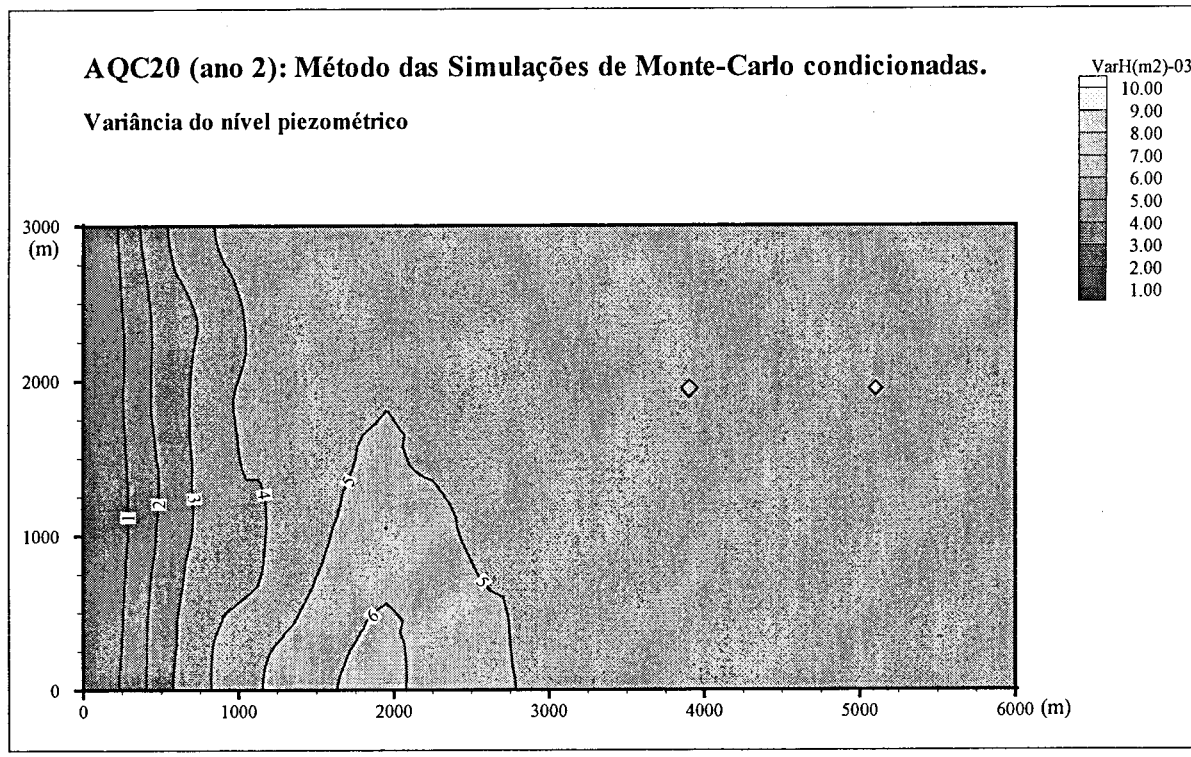



Figura 5.133 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 03.

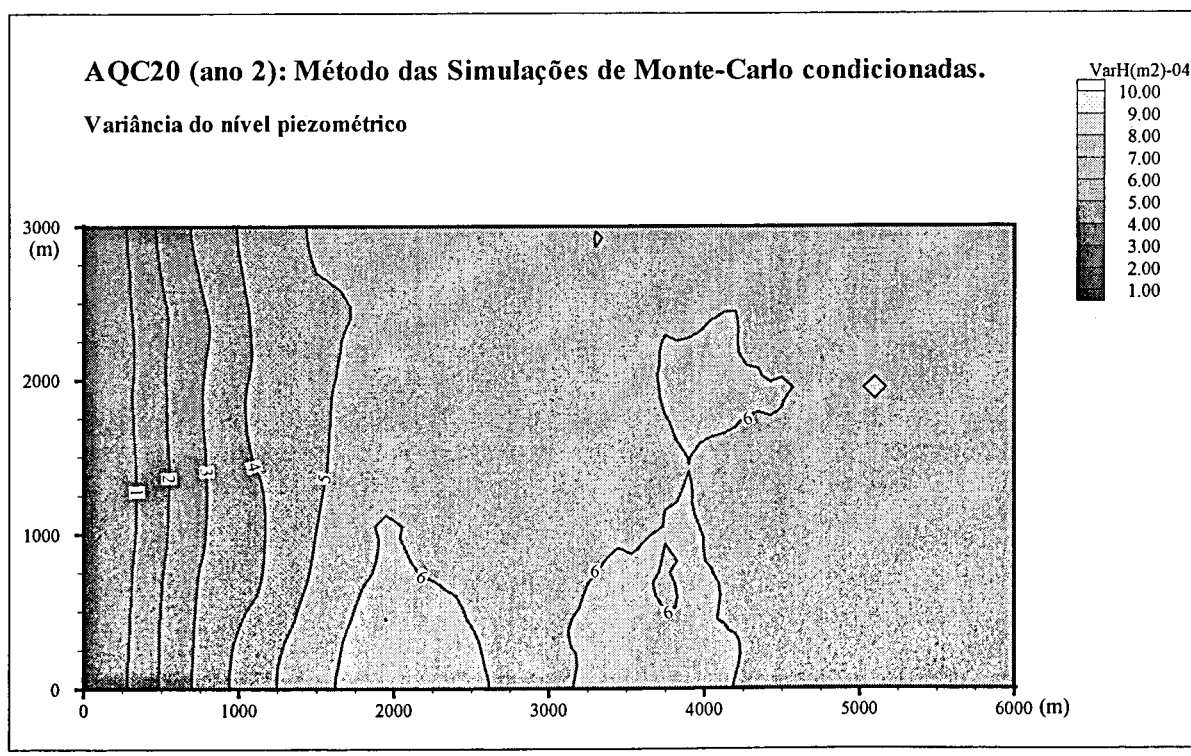



Figura 5.134 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 04.

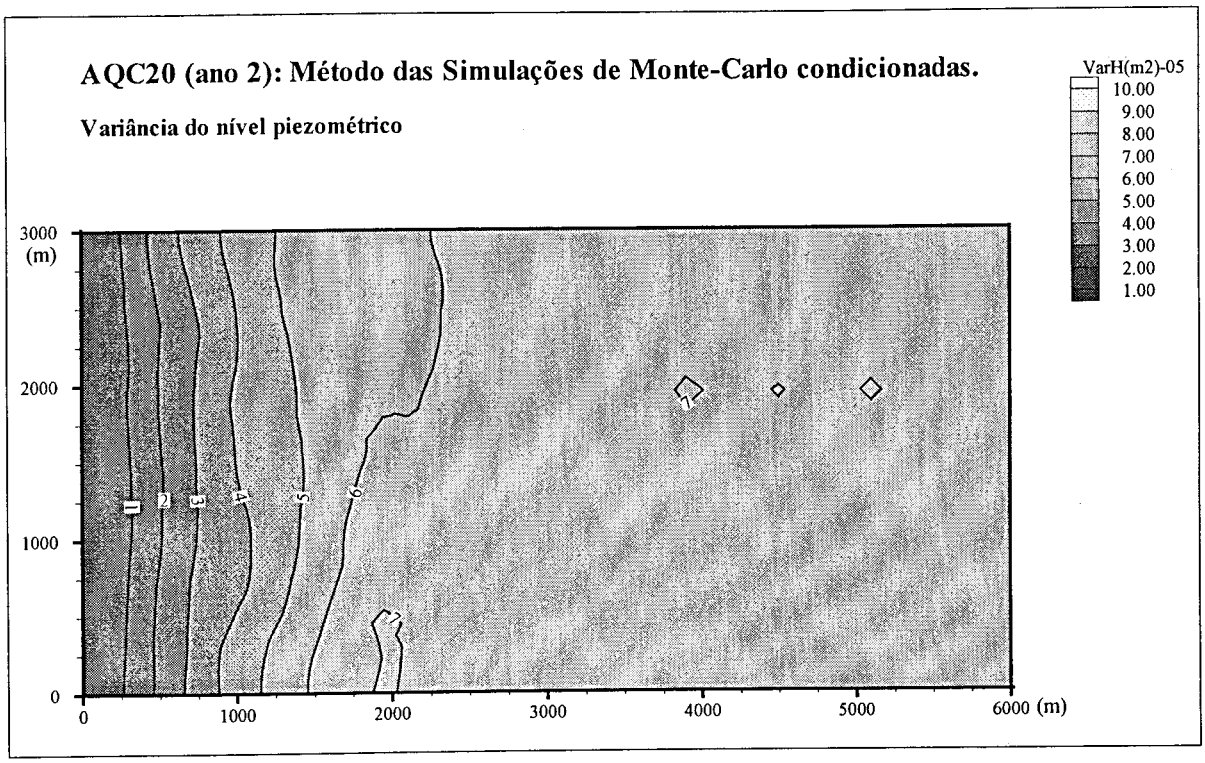



Figura 5.135 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 05.

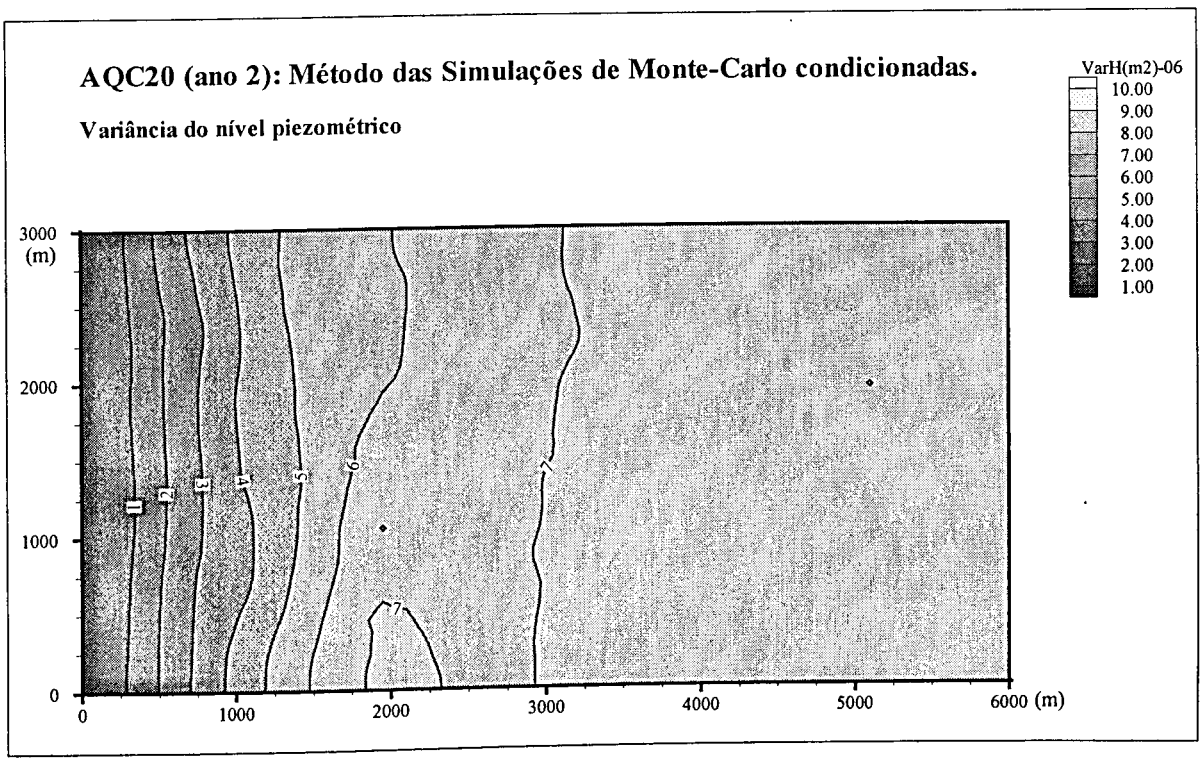



Figura 5.136 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 06.

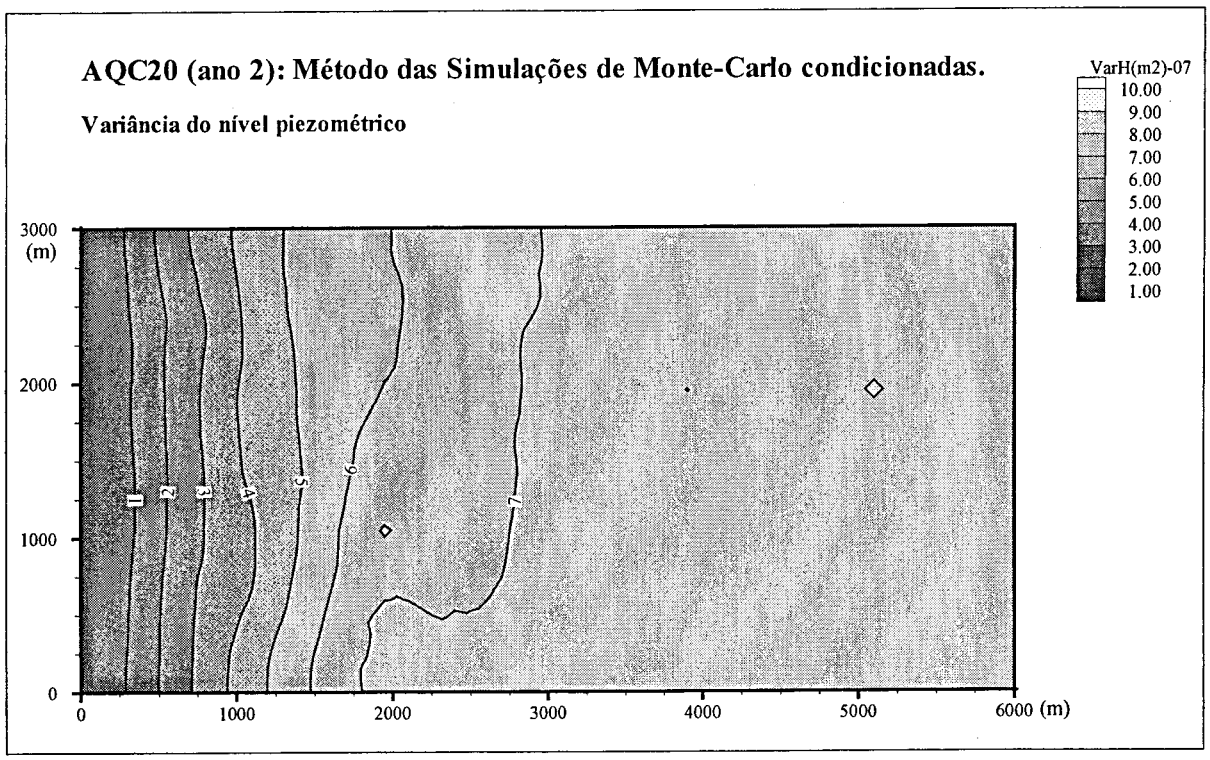



Figura 5.137 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 07.

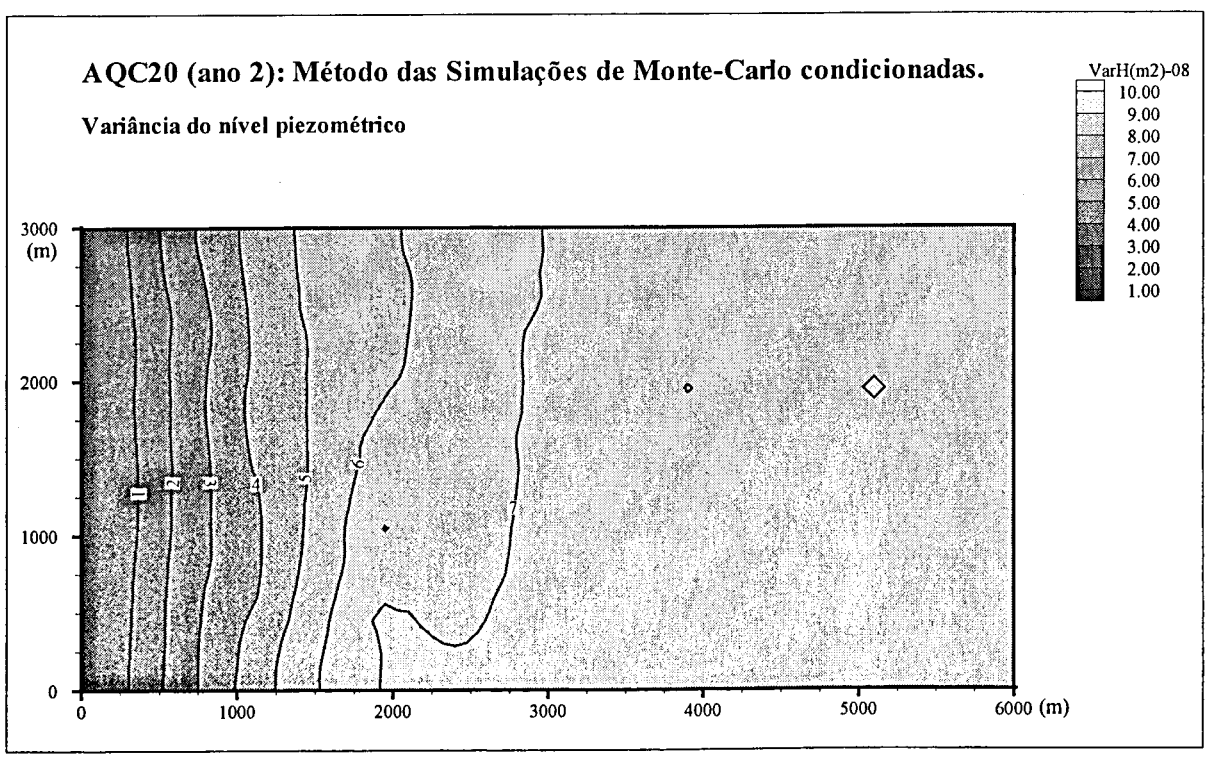



Figura 5.138 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 08.

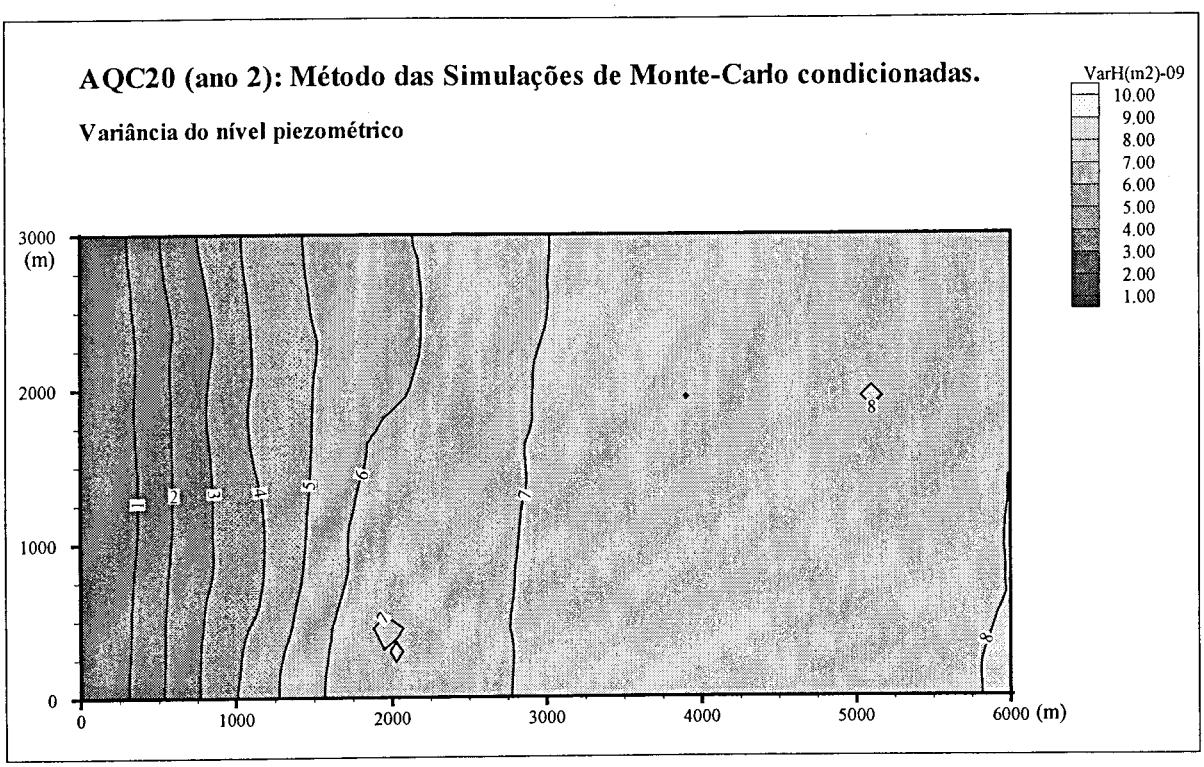



Figura 5.139 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 09.

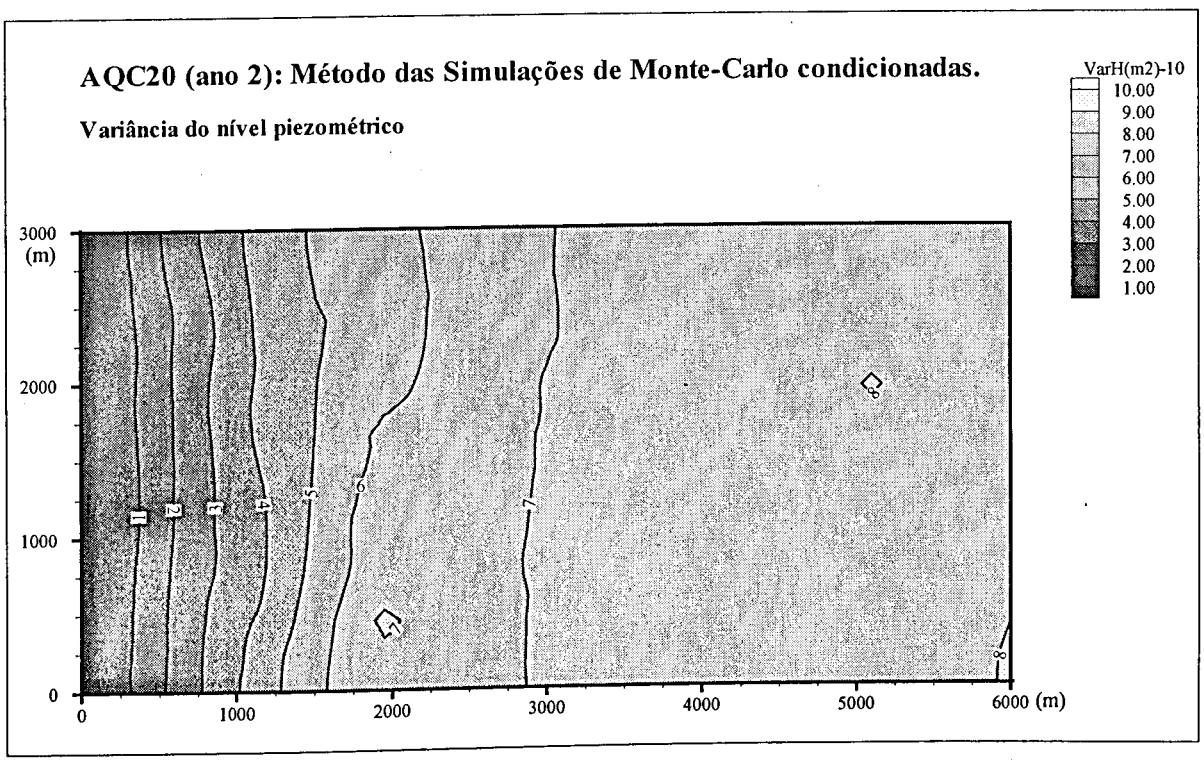



Figura 5.140 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 10.

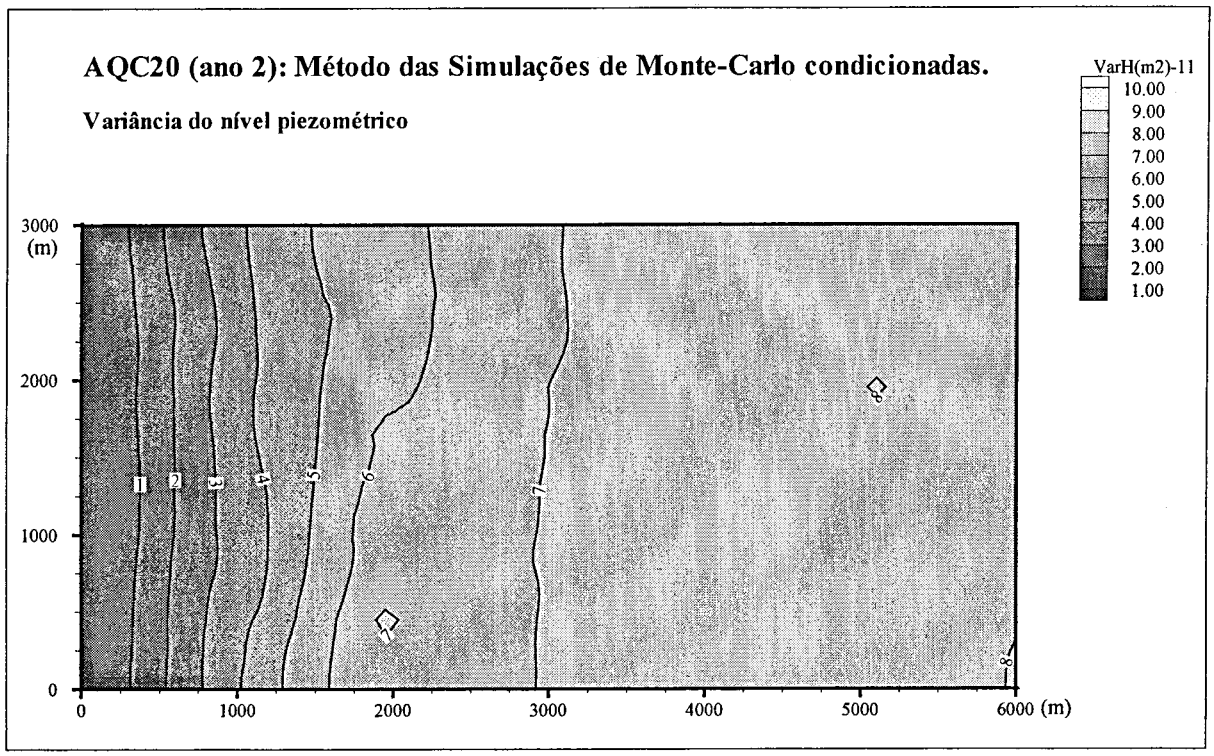



Figura 5.141 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 11.

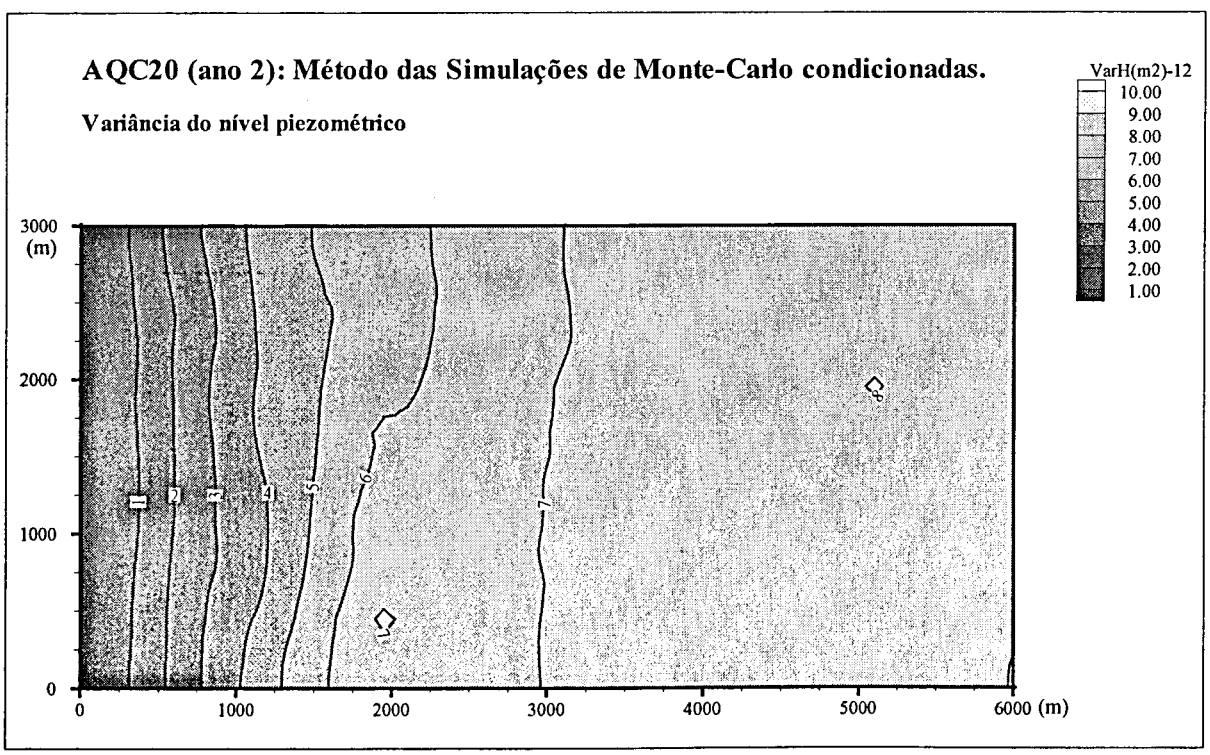



Figura 5.142 – AQC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 12.

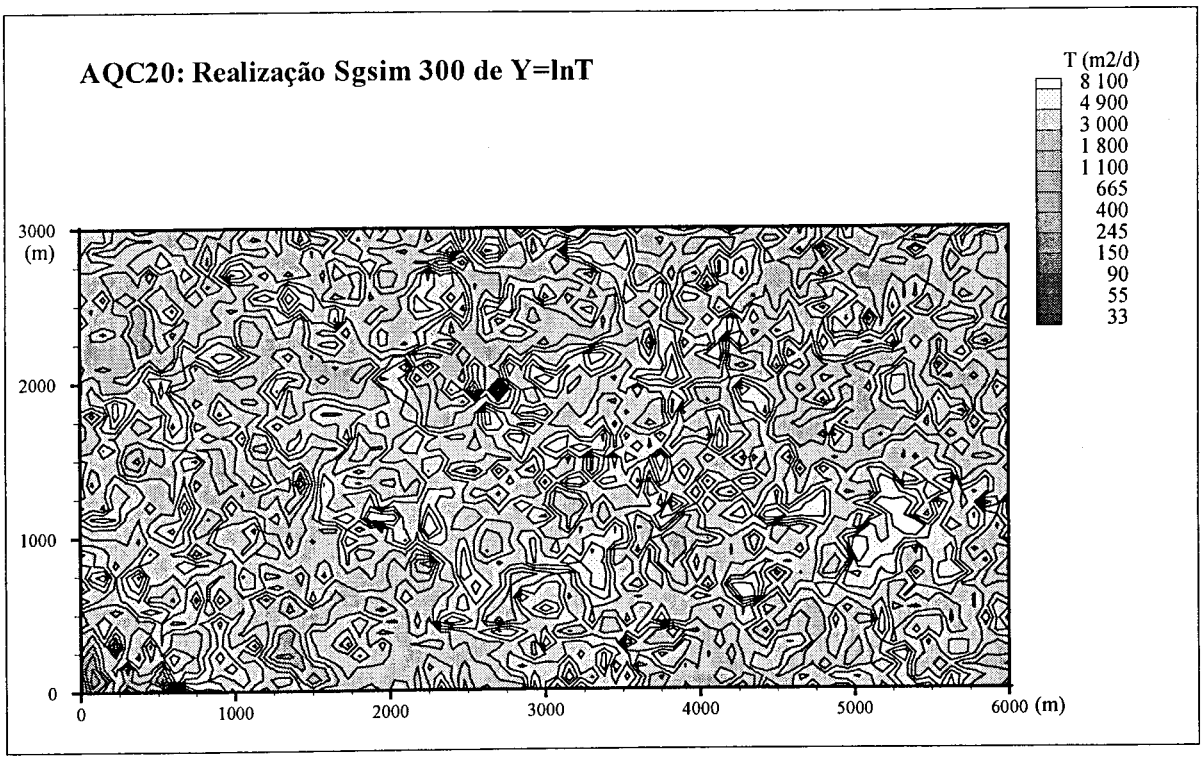



Figura 5.143 – AQC20: Realização condicionada nº 300 de $Y$=ln$T$.

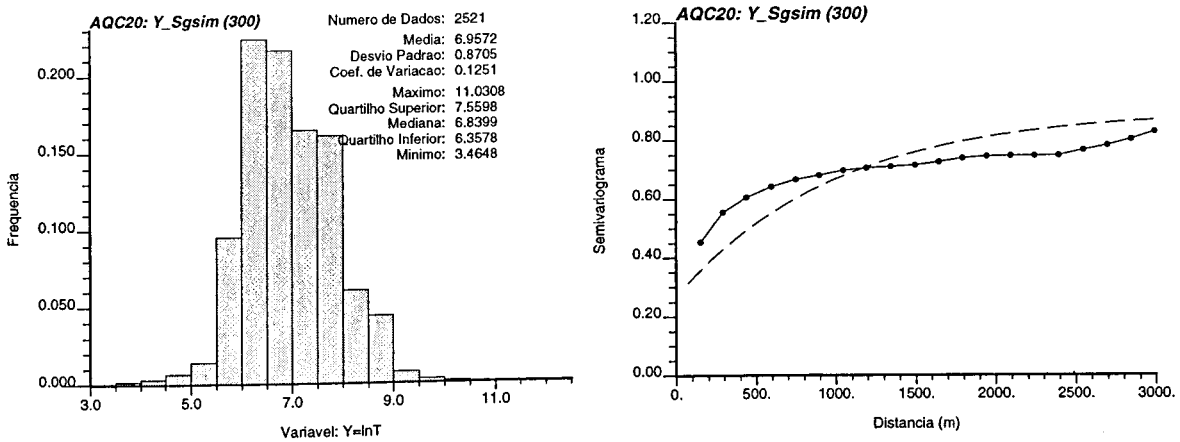



Figura 5.144 – AQC20: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 300 de $Y$=ln$T$.

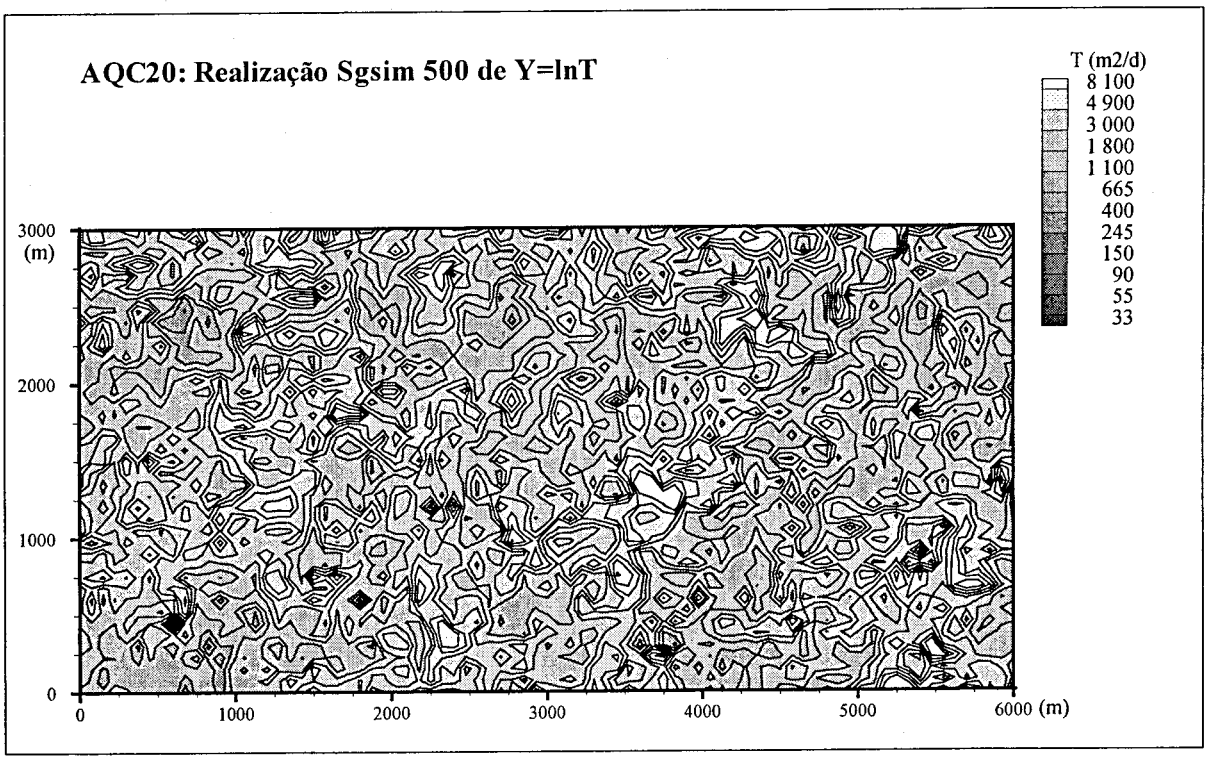



Figura 5.145 – AQC20: Realização condicionada nº 500 de $Y$=ln$T$.

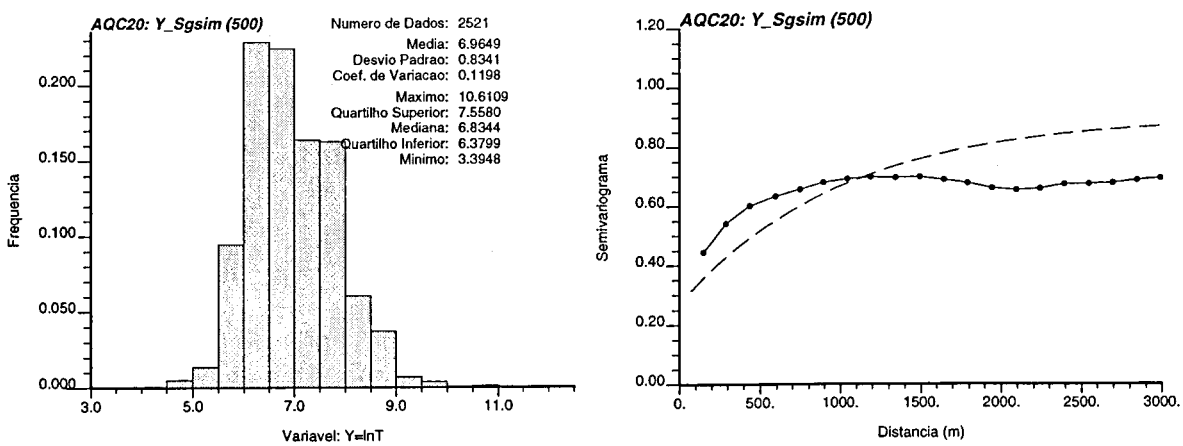



Figura 5.146 – AQC20: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 500 de $Y$=ln$T$.

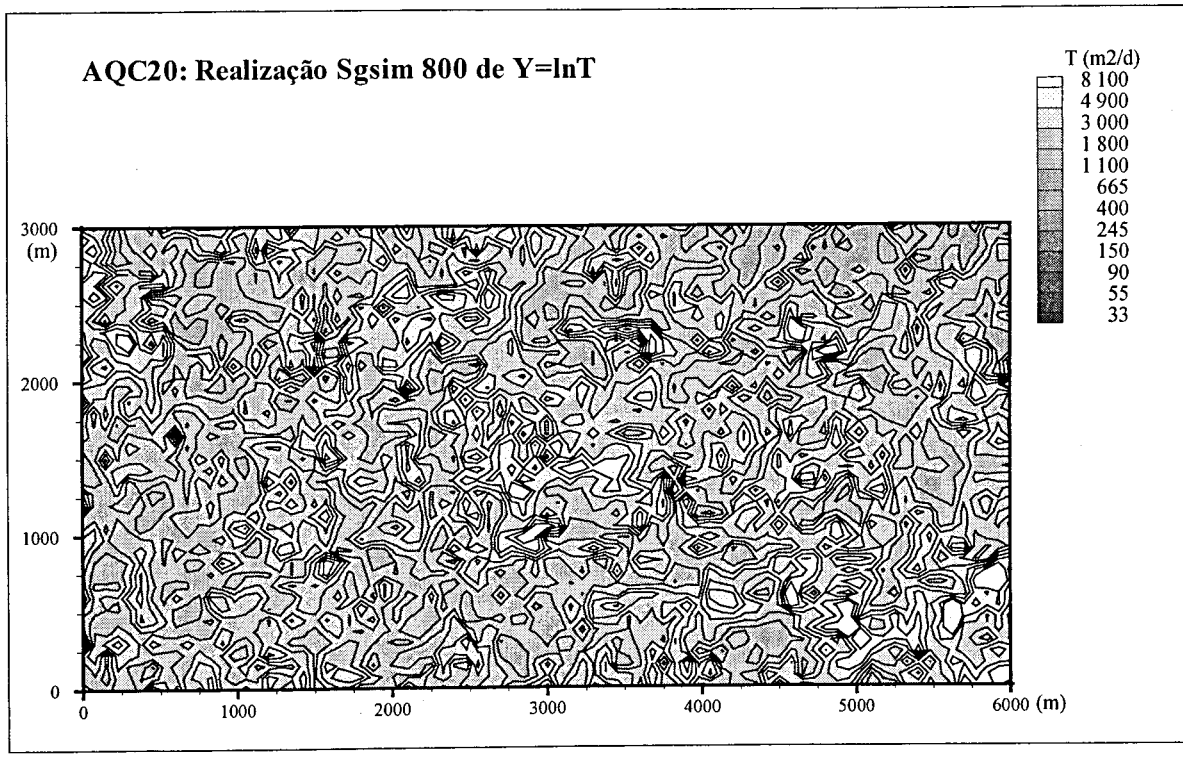



Figura 5.147 – AQC20: Realização condicionada nº 800 de $Y=\ln T$.

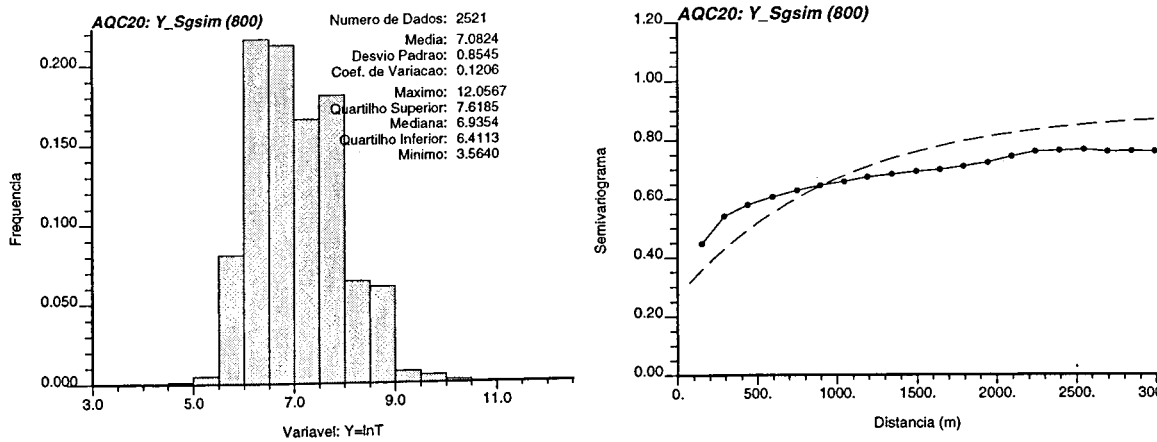



Figura 5.148 – AQC20: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 800 de $Y=\ln T$.

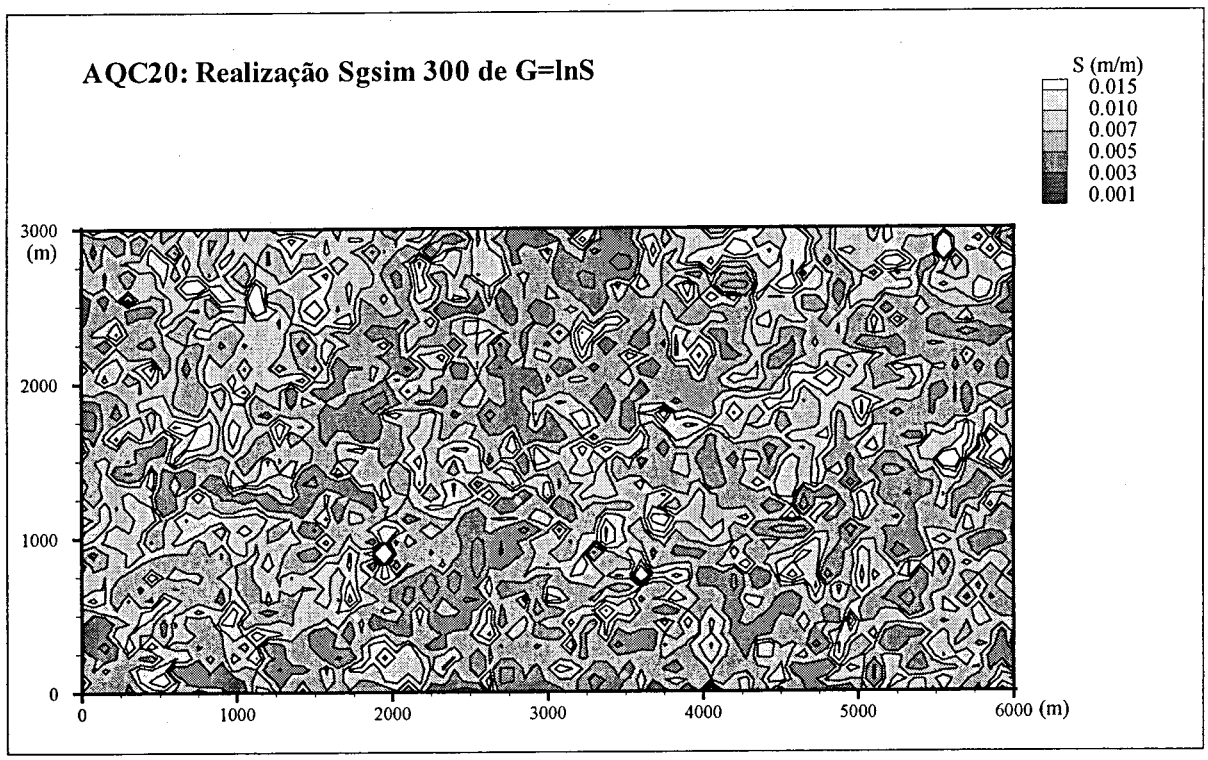



Figura 5.149 – AQC20: Realização condicionada nº 300 de $G$=ln$S$.

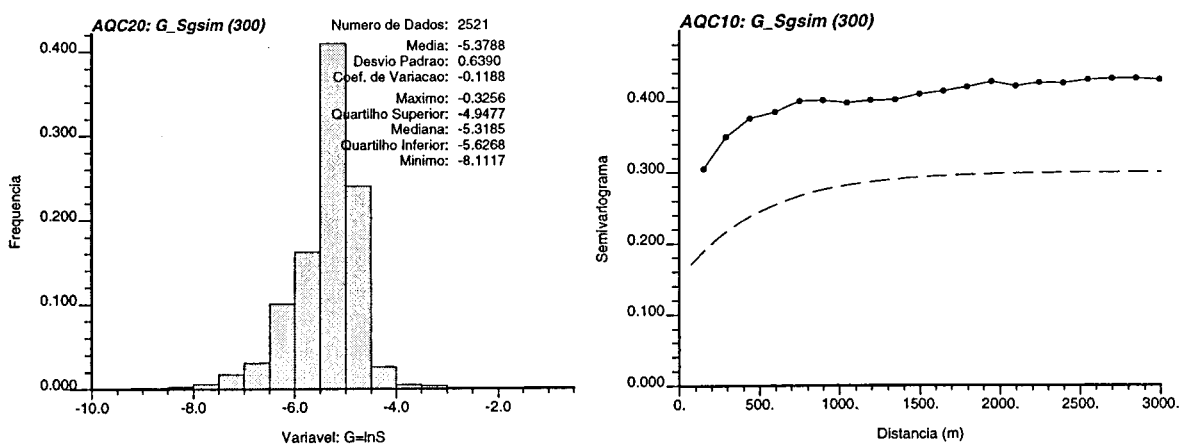



Figura 5.150 – AQC20: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 300 de $G$=ln$S$.

Figura 5.151 – AQC20: Realização condicionada nº 500 de $G$=ln$S$.

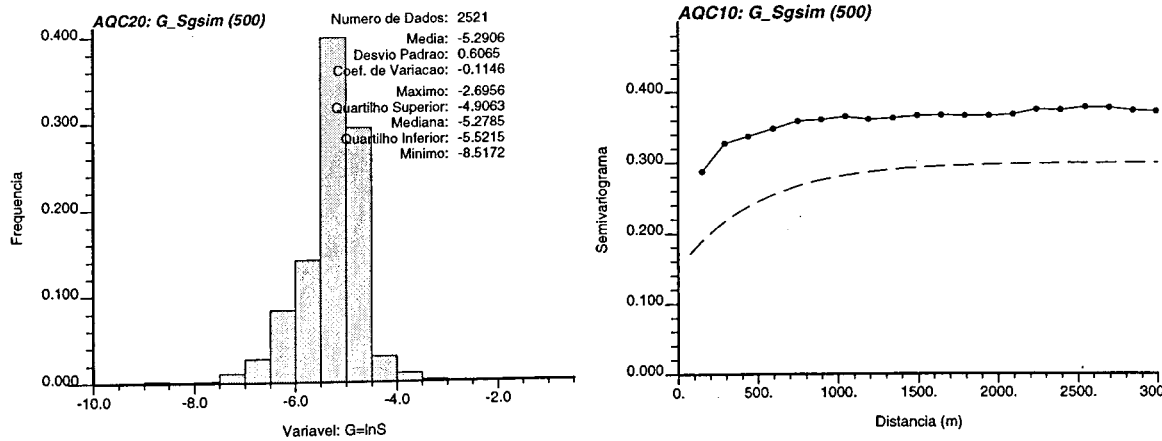



Figura 5.152 – AQC20: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 500 de $G$=ln$S$.

Figura 5.153 – AQC20: Realização condicionada nº 800 de $G$=ln$S$.

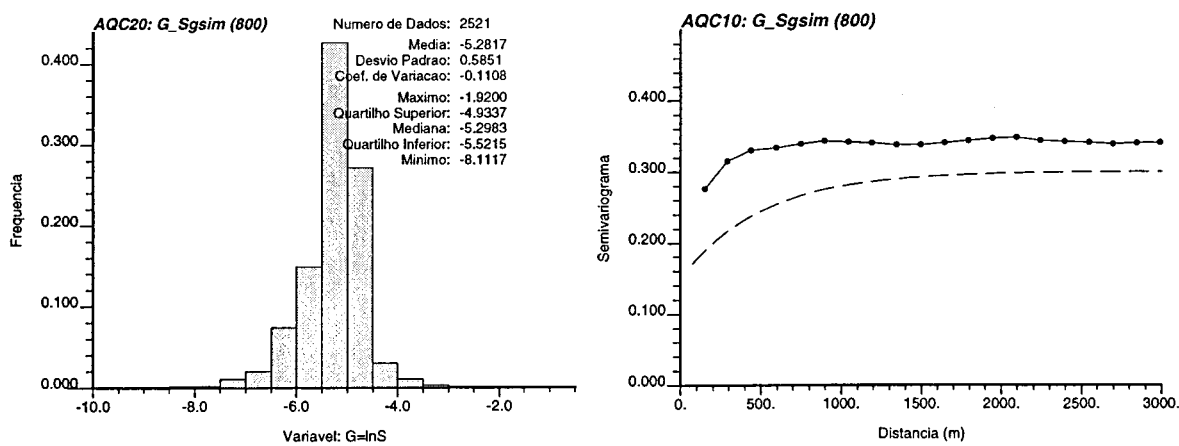



Figura 5.154 – AQC20: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 800 de $G$=ln$S$.

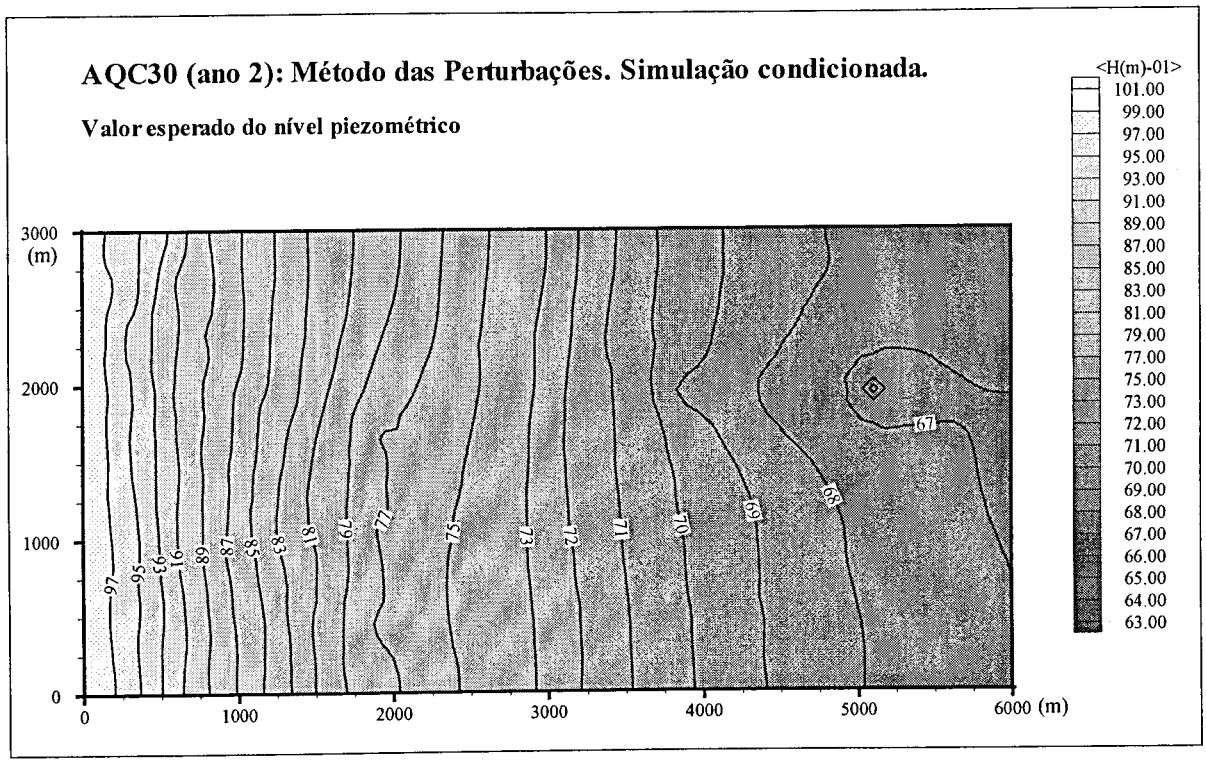



Figura 5.155 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 01.

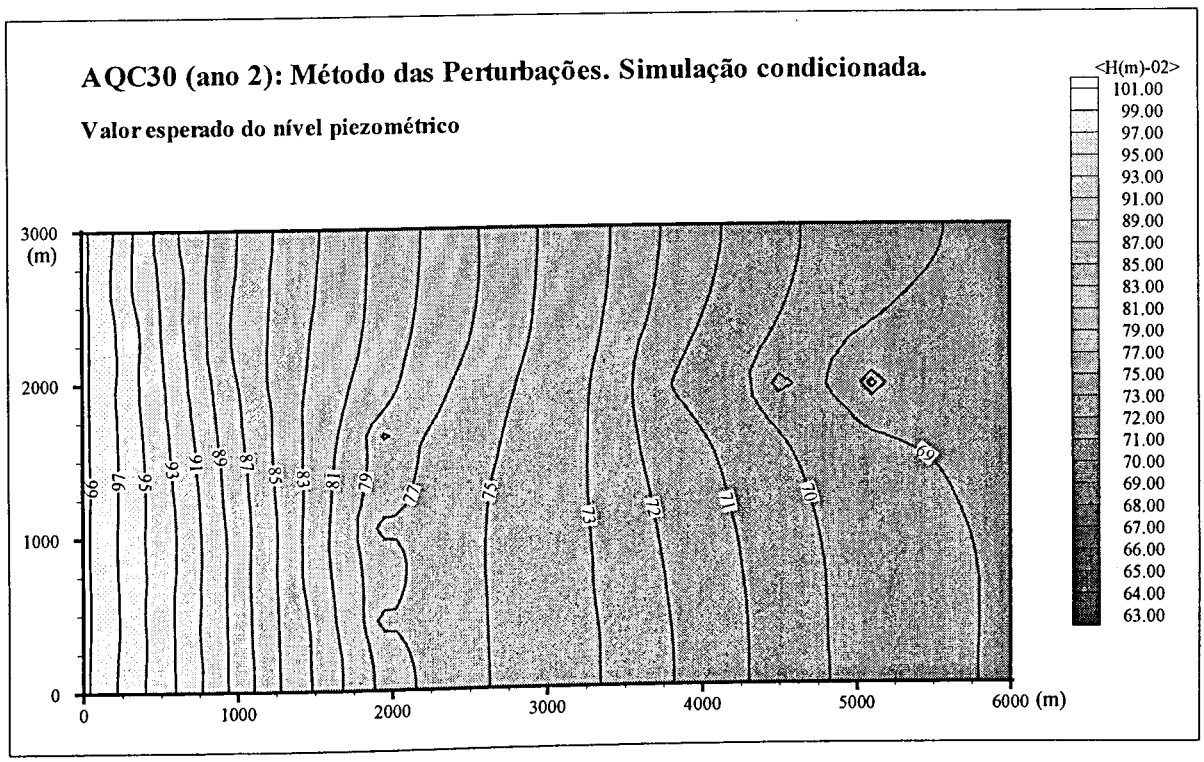



Figura 5.156 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 02.

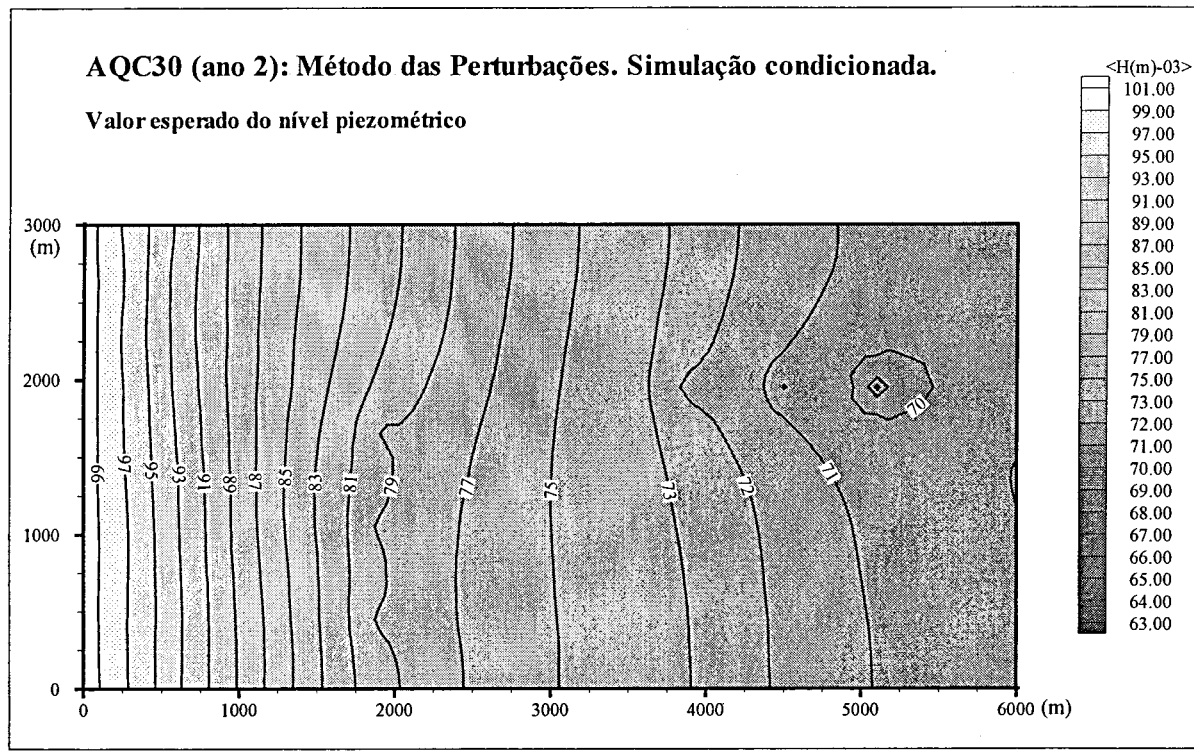



Figura 5.157 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 03.

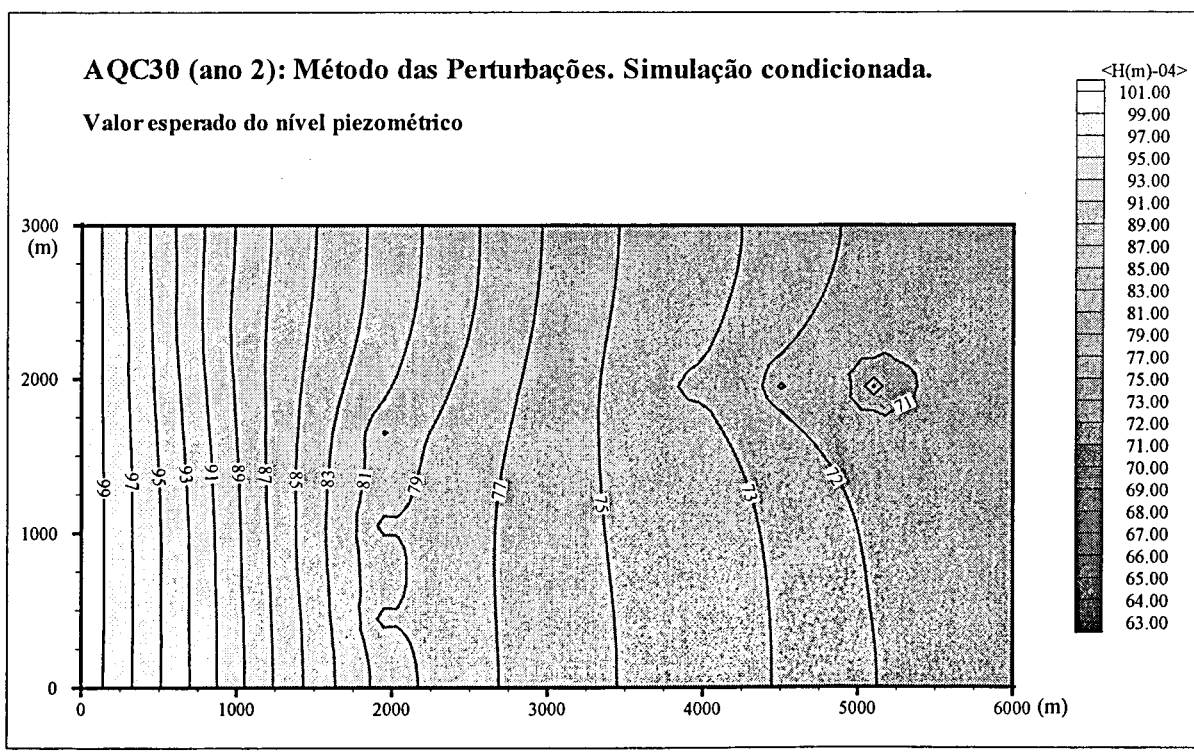



Figura 5.158 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 04.

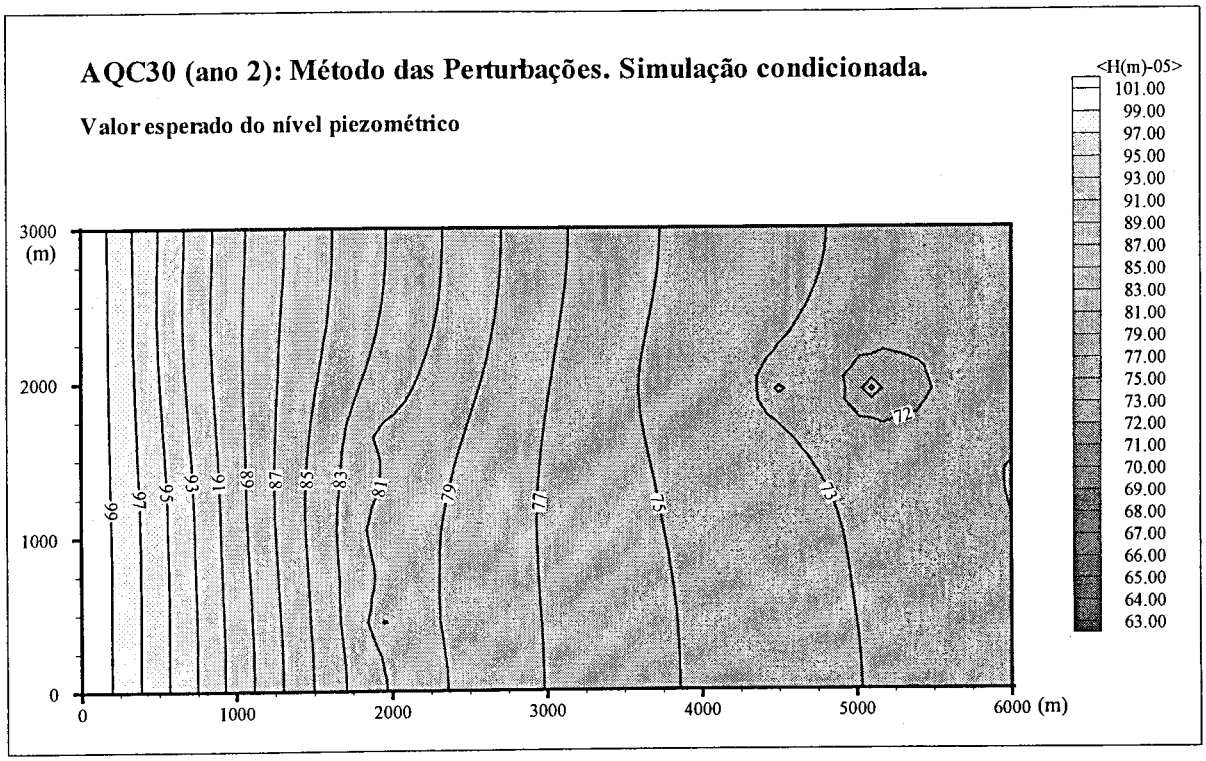



Figura 5.159 – ACC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 05.

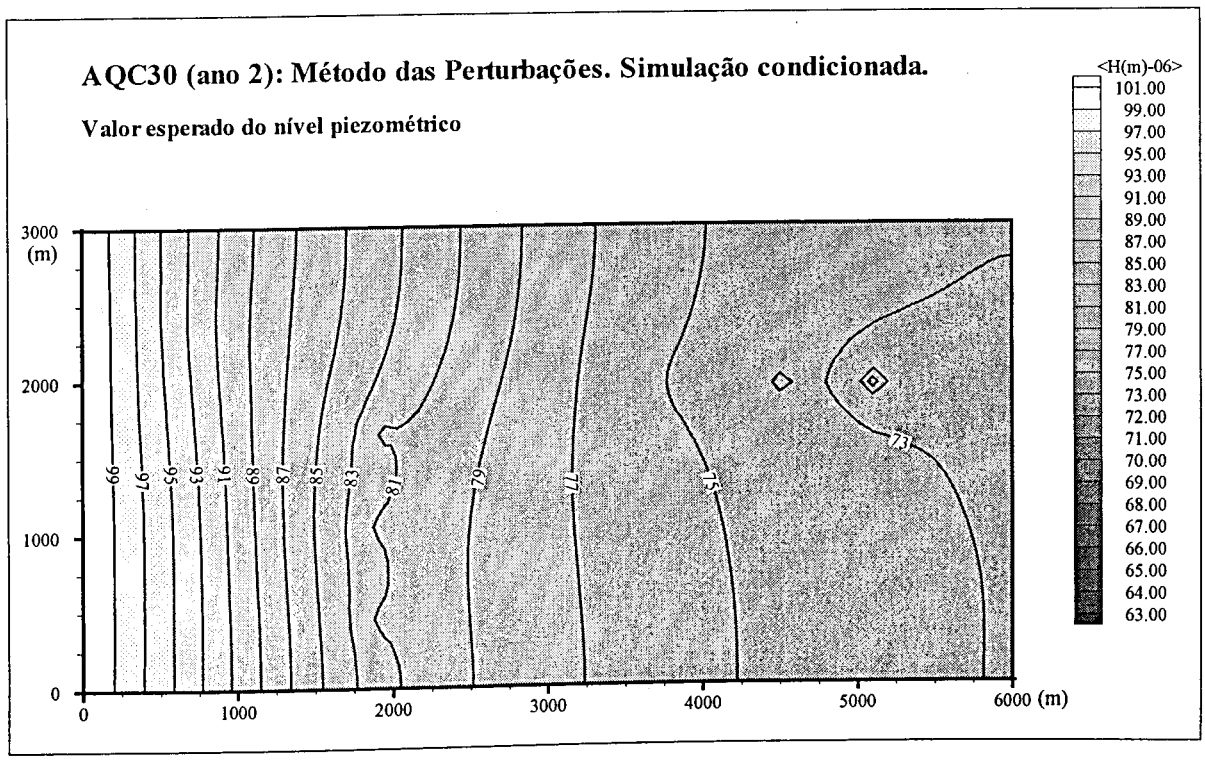



Figura 5.160 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 06.

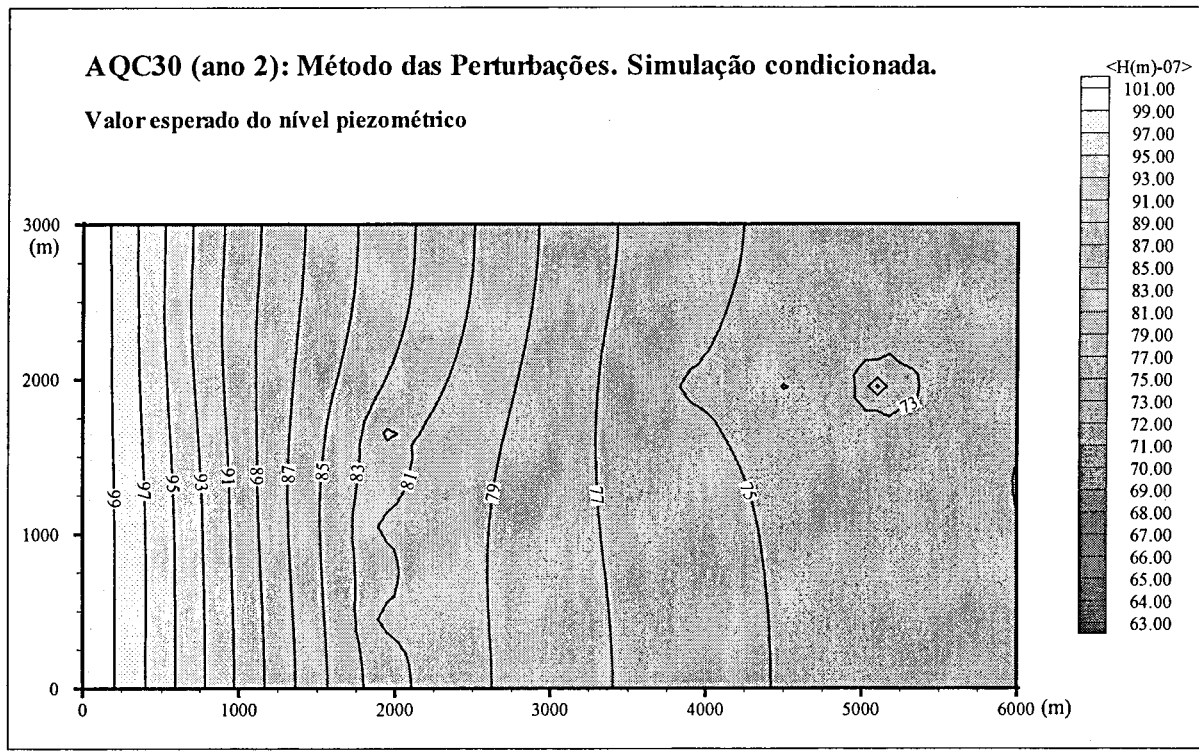



Figura 5.161 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 07.

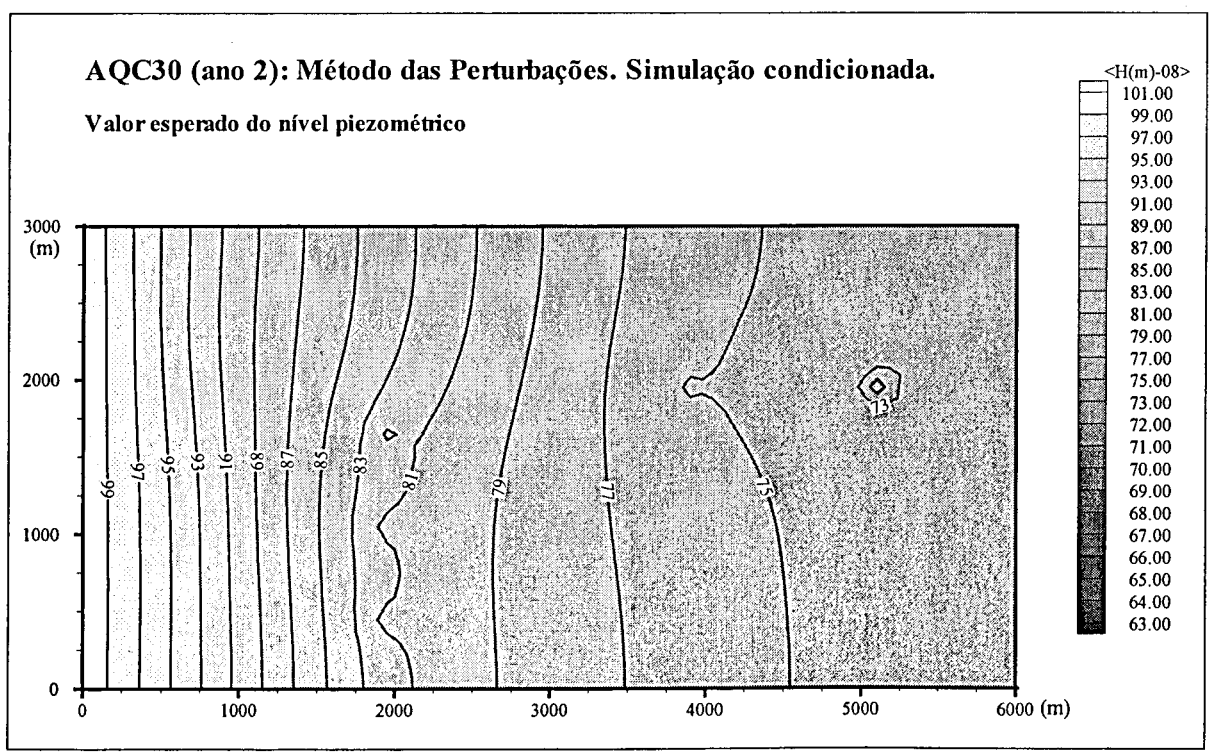



Figura 5.162 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 08.

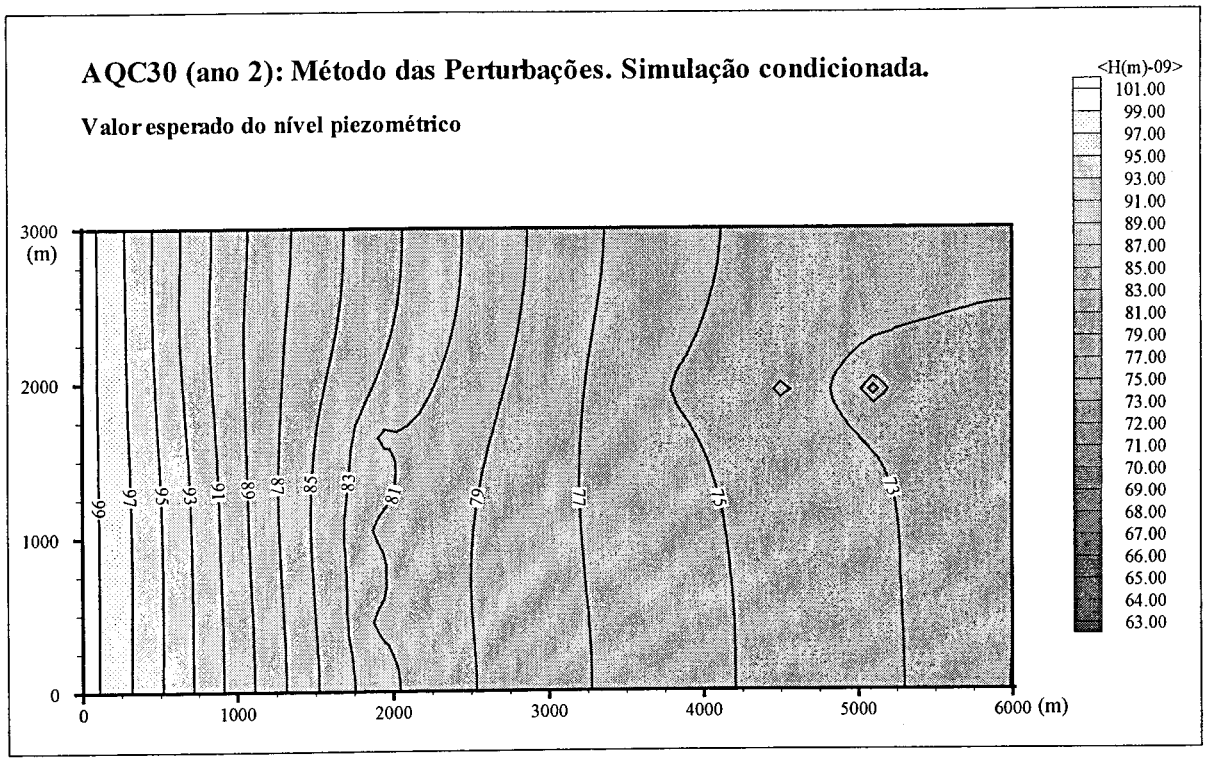



Figura 5.163 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 09.

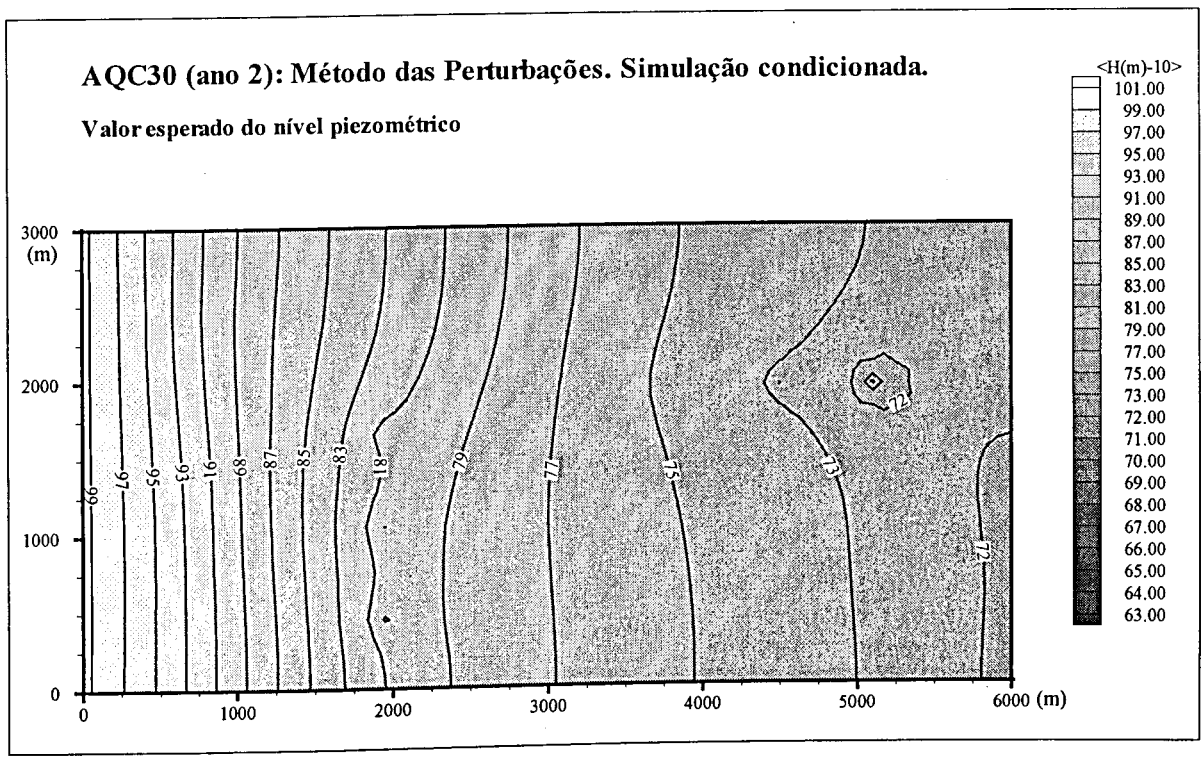



Figura 5.164 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 10.

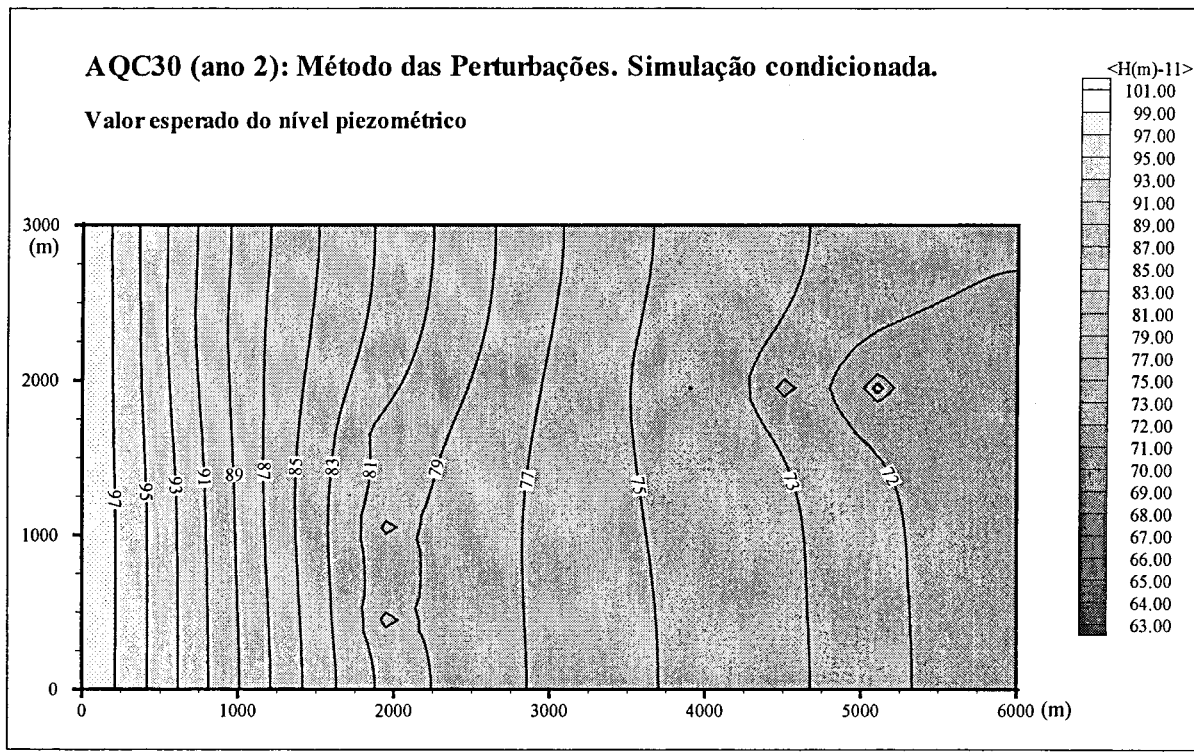



Figura 5.165 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 11.

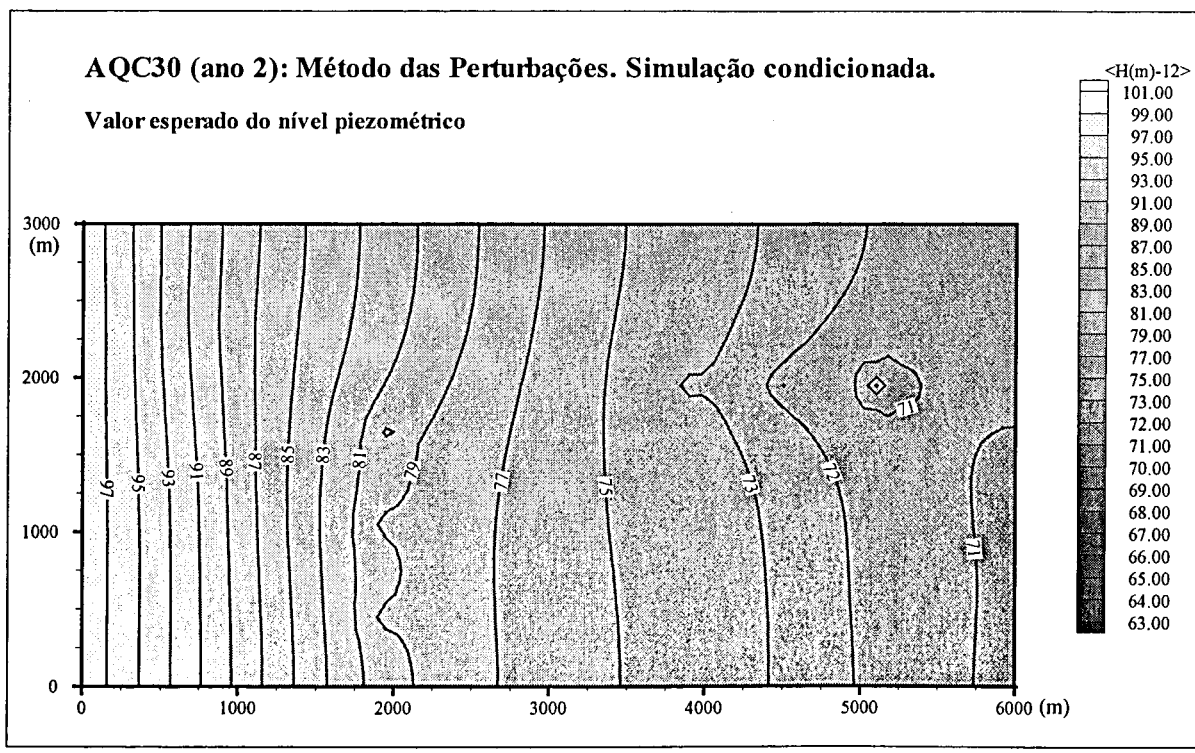



Figura 5.166 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 12.

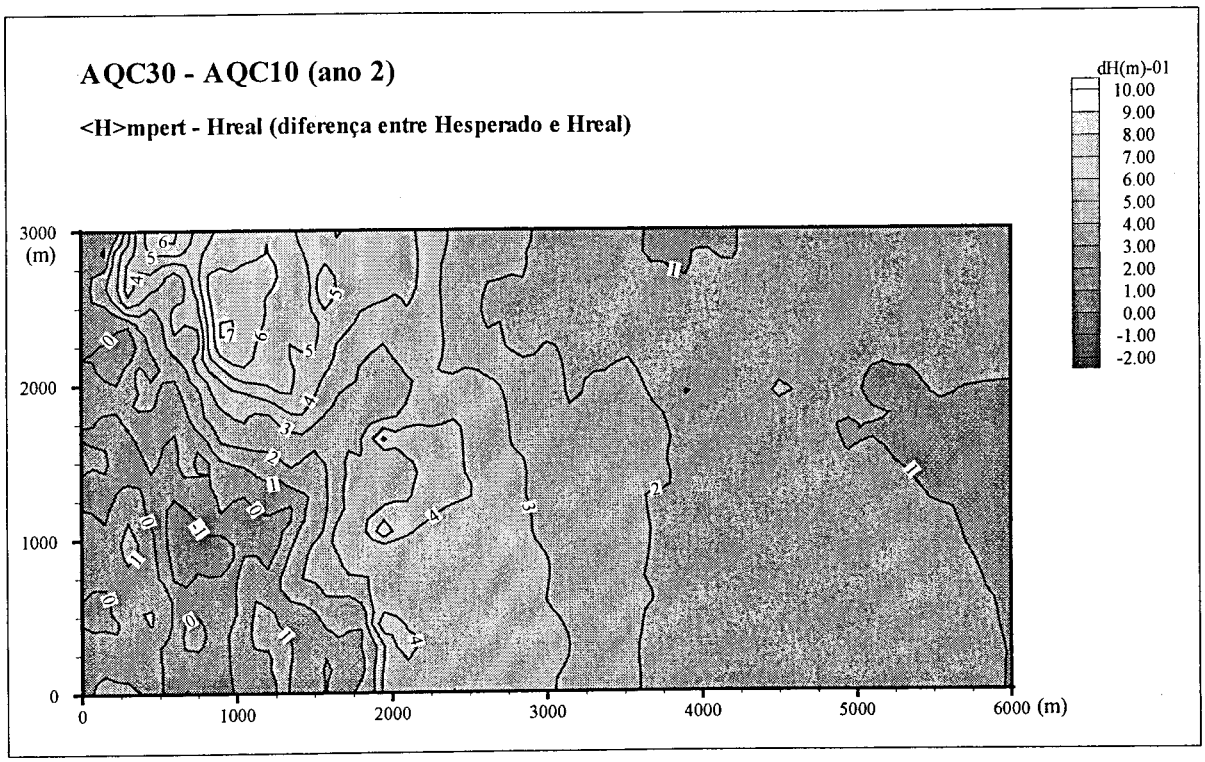



Figura 5.167 – AQC30-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 01.

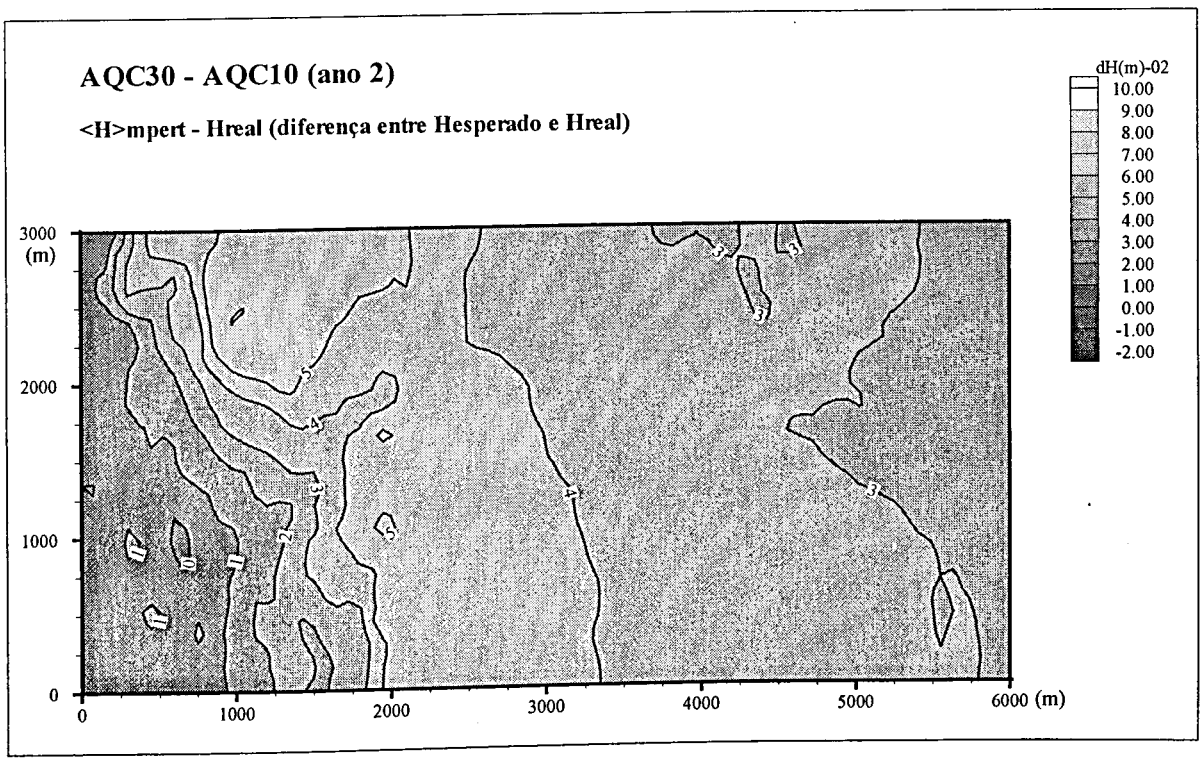



Figura 5.168 – AQC30-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 02.

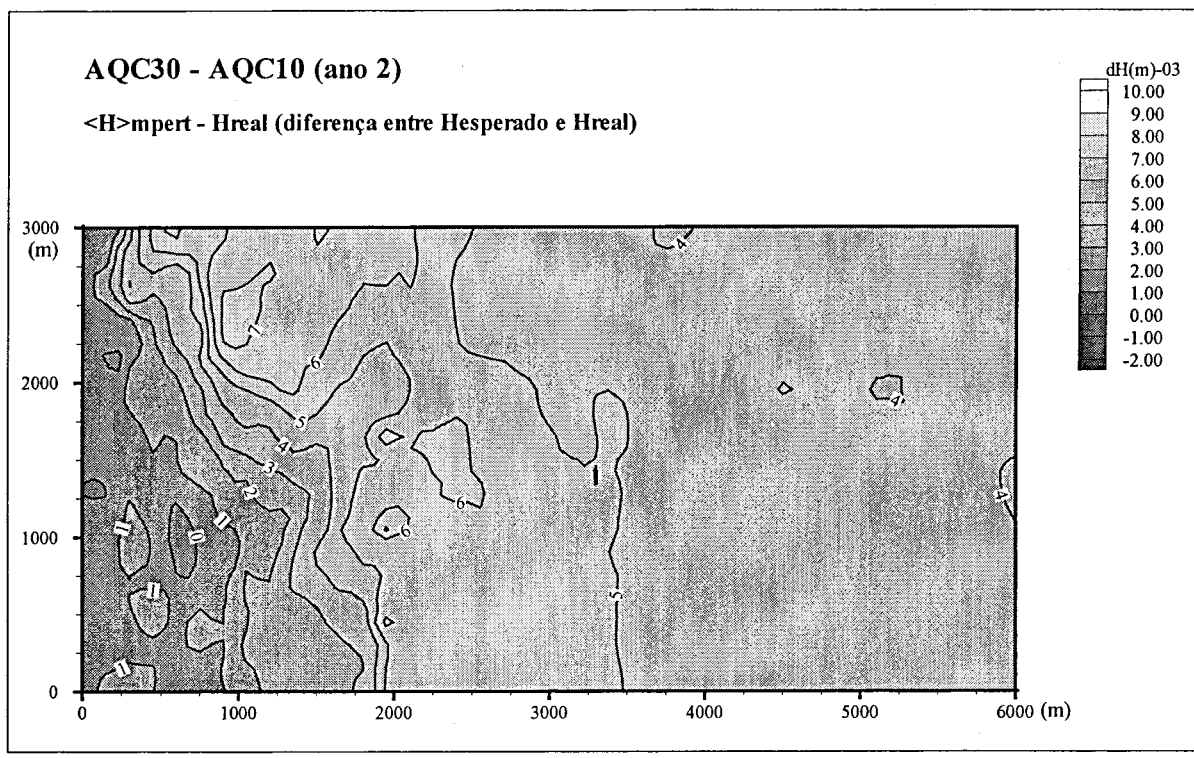



Figura 5.169 – AQC30-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 03.

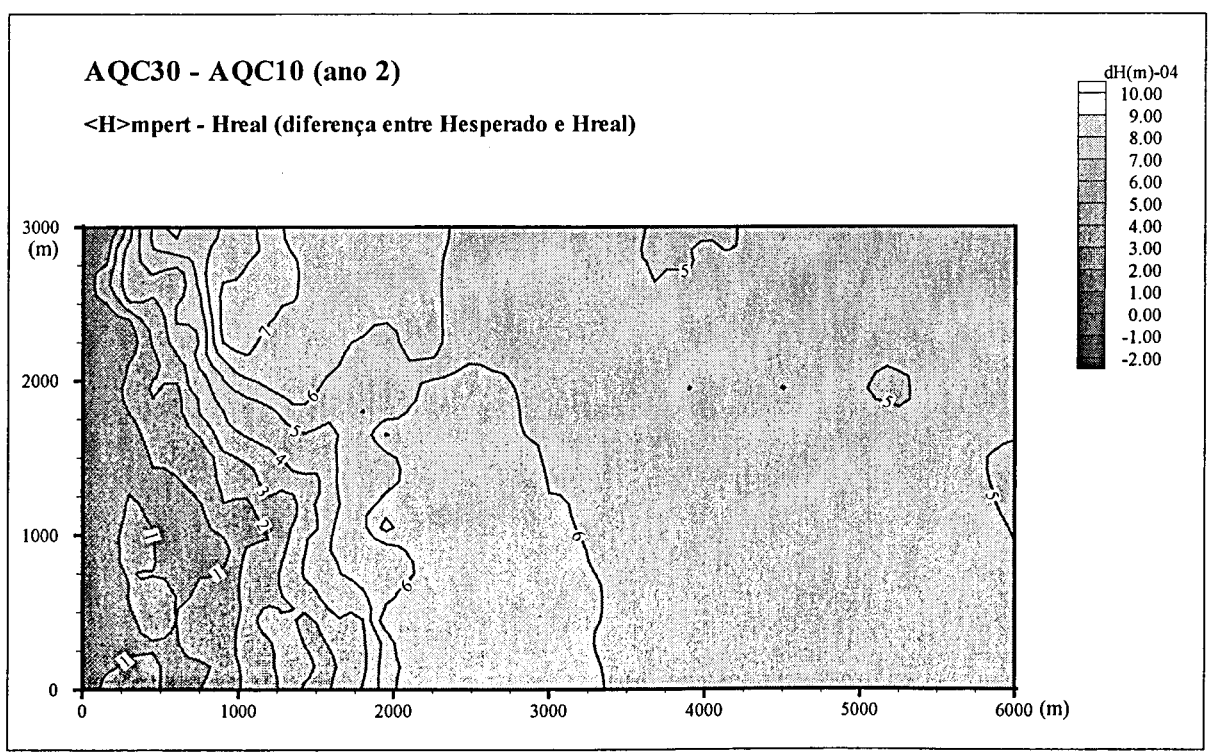



Figura 5.170 – AQC30-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 04.

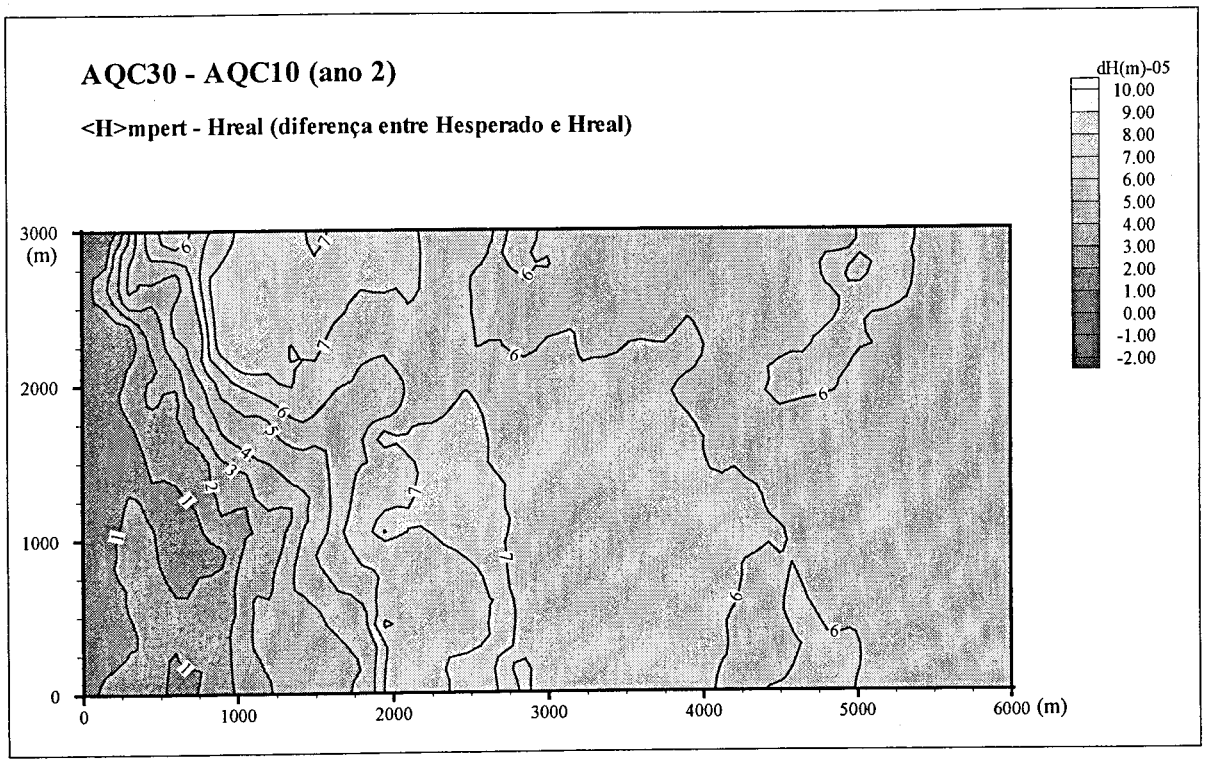



Figura 5.171 – AQC30-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 05.

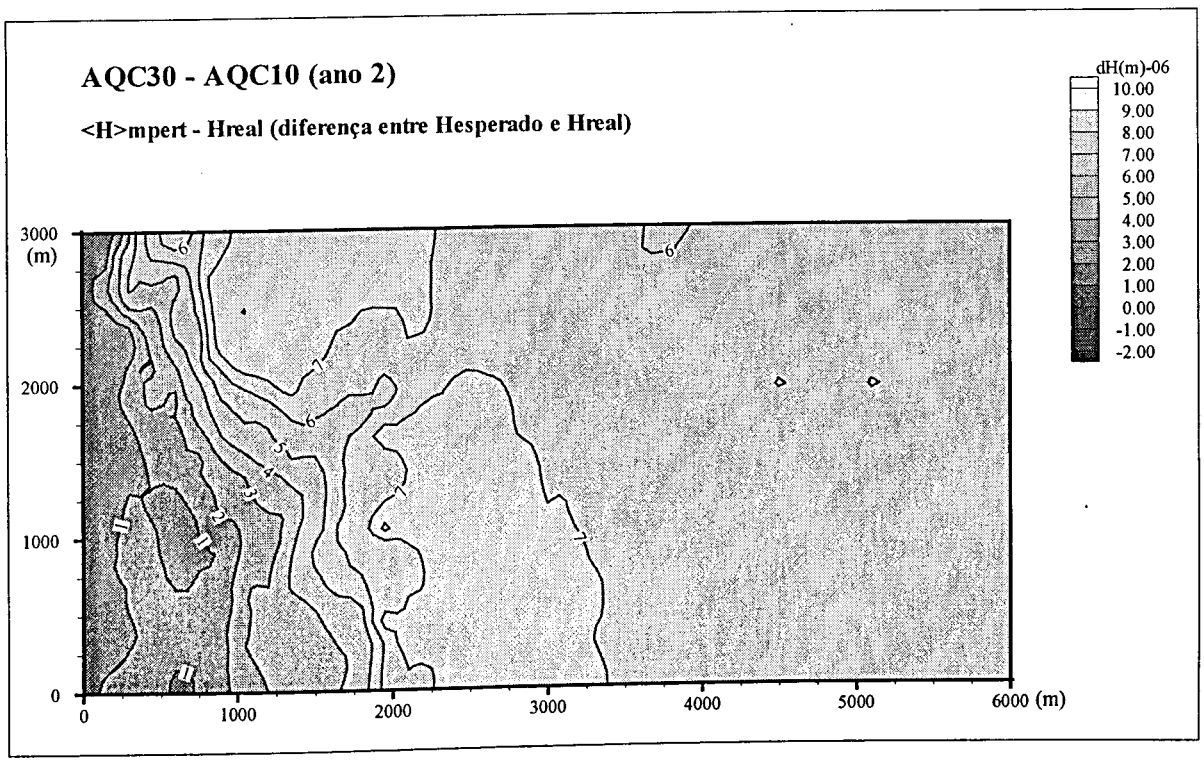



Figura 5.172 – AQC30-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 06.

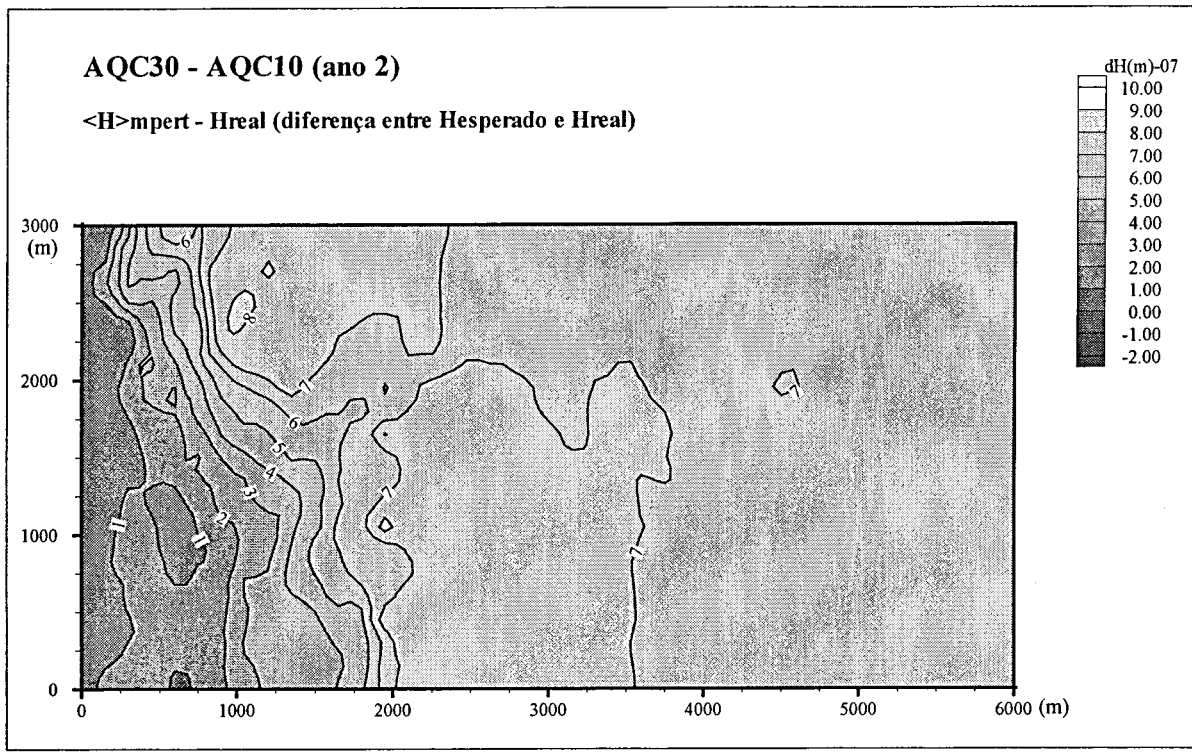



Figura 5.173 – AQC30-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 07.

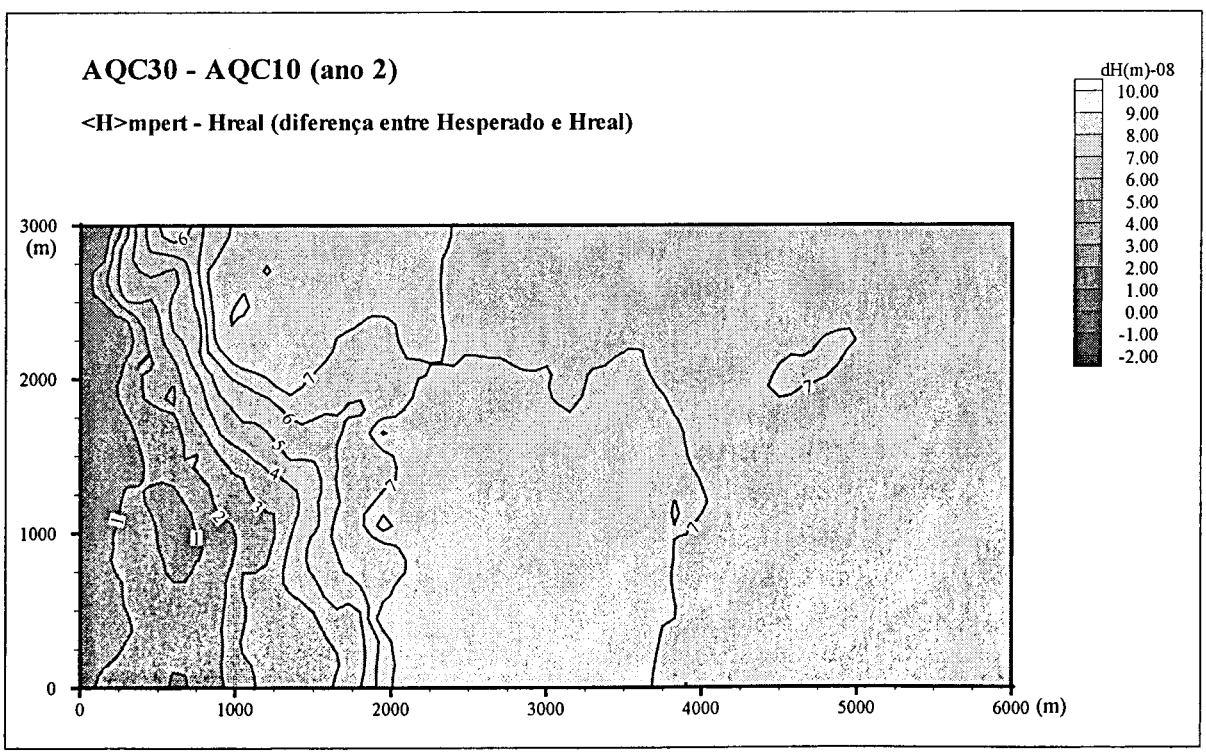



Figura 5.174 – AQC30-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 08.

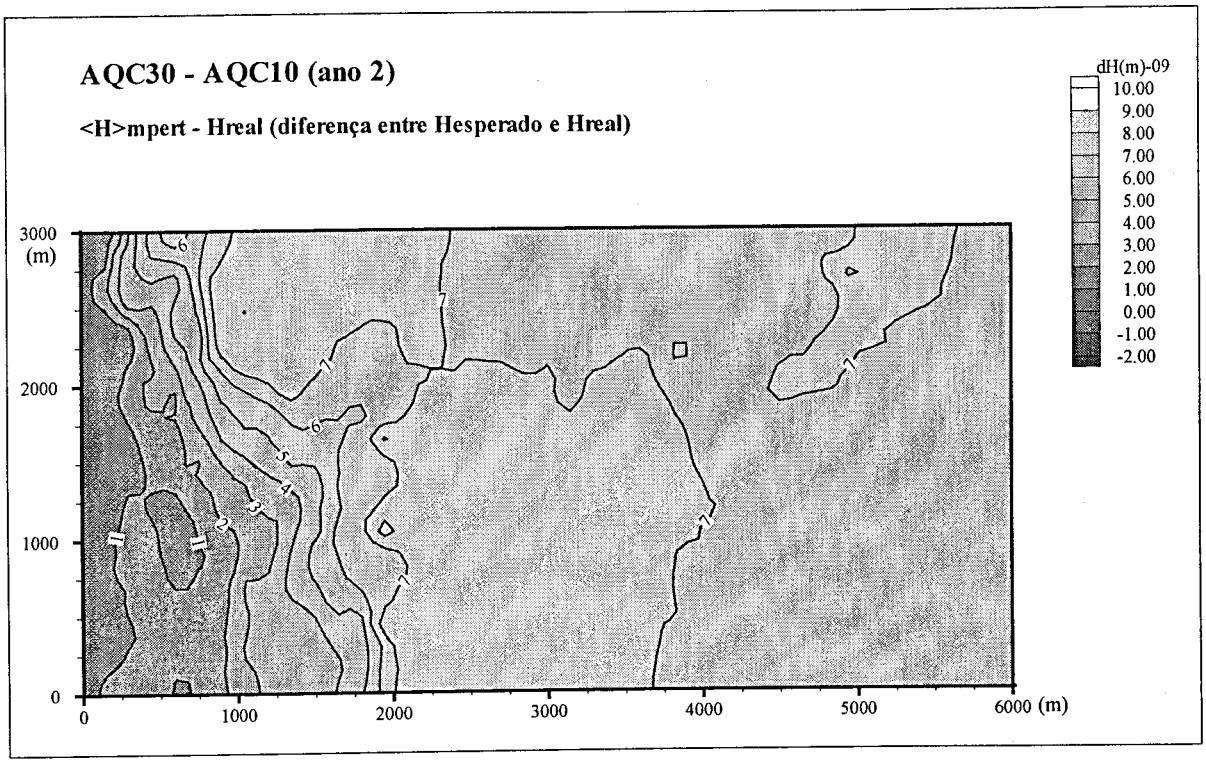



Figura 5.175 – AQC30-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 09.

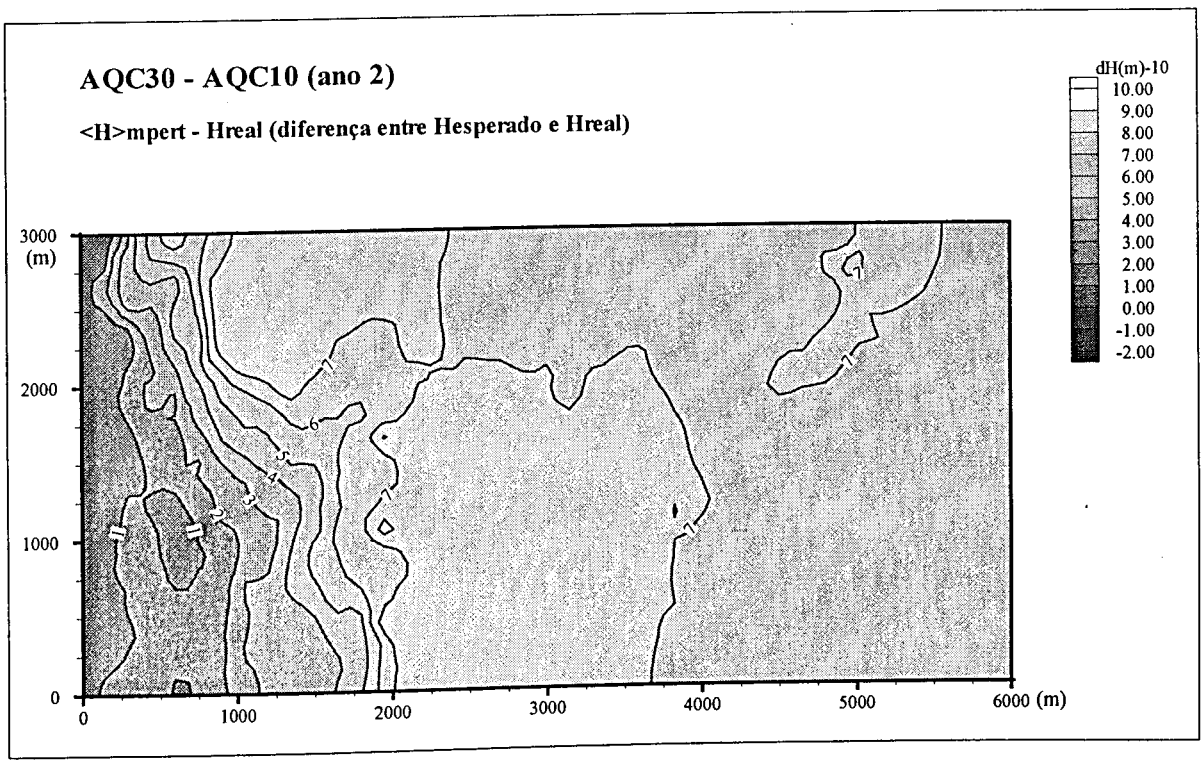



Figura 5.176 – AQC30-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 10.

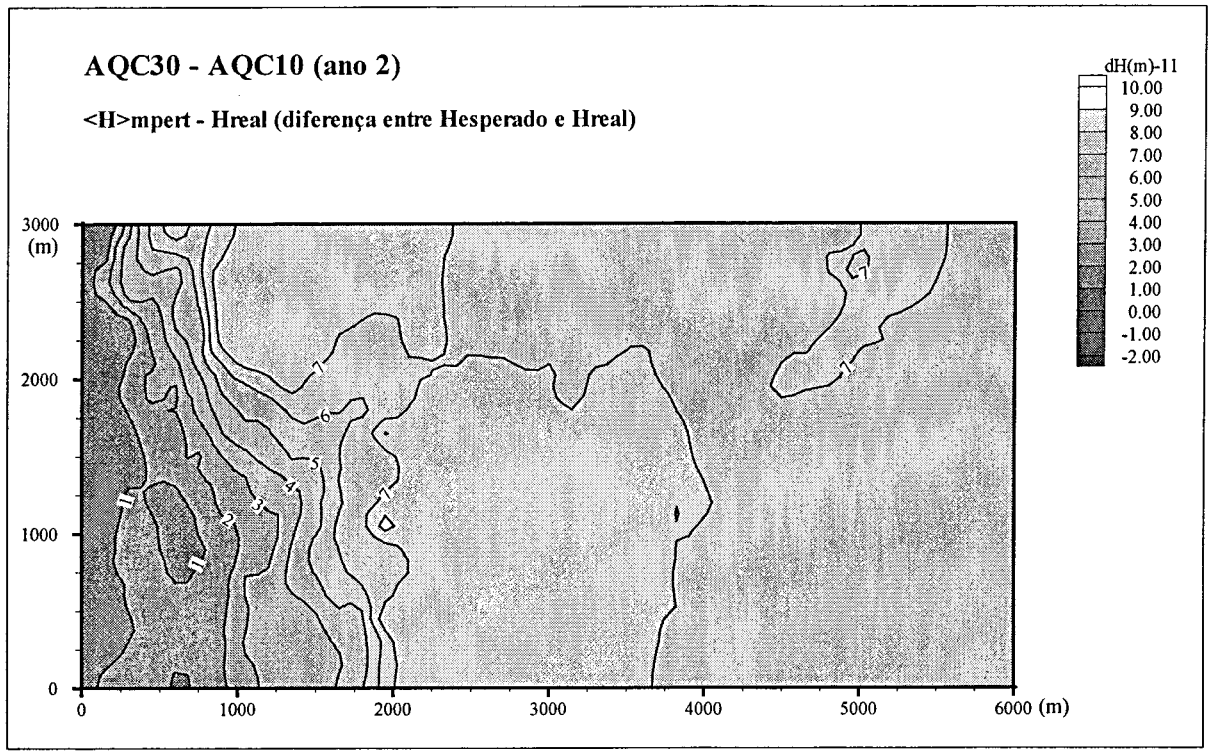



Figura 5.177 – AQC30-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 11.

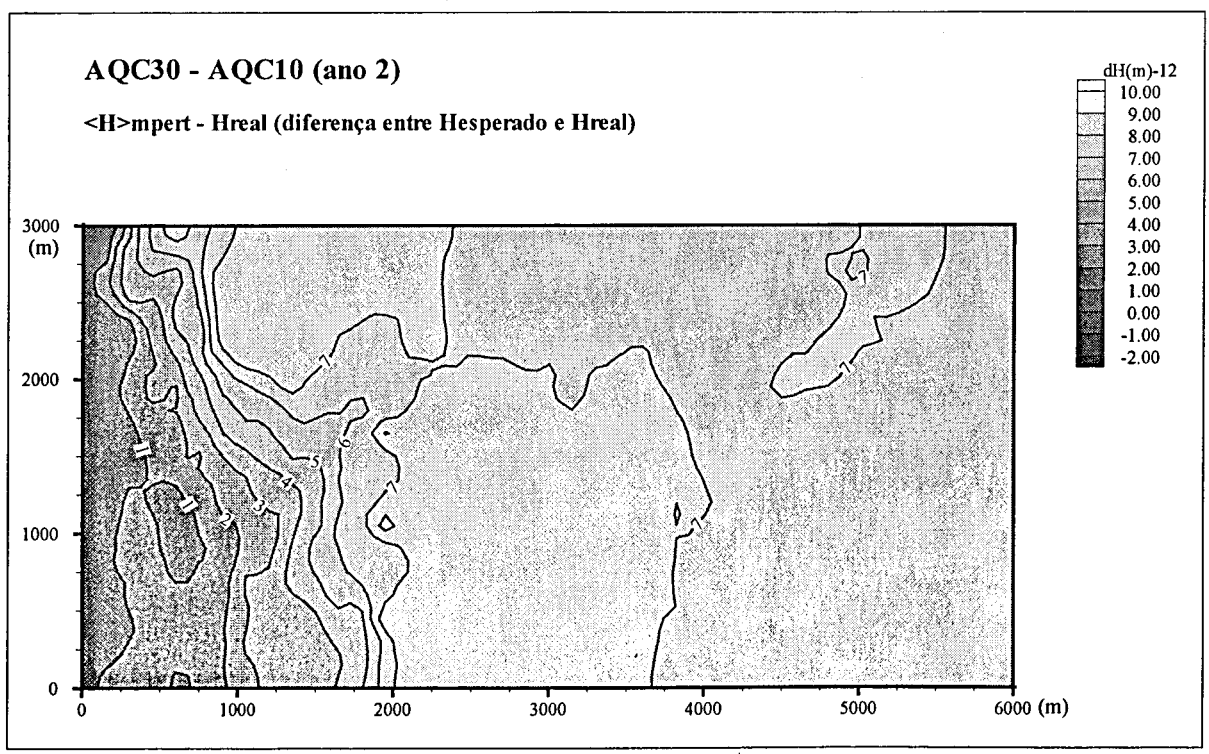



Figura 5.178 – AQC30-AQC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), do fim do mês 12.

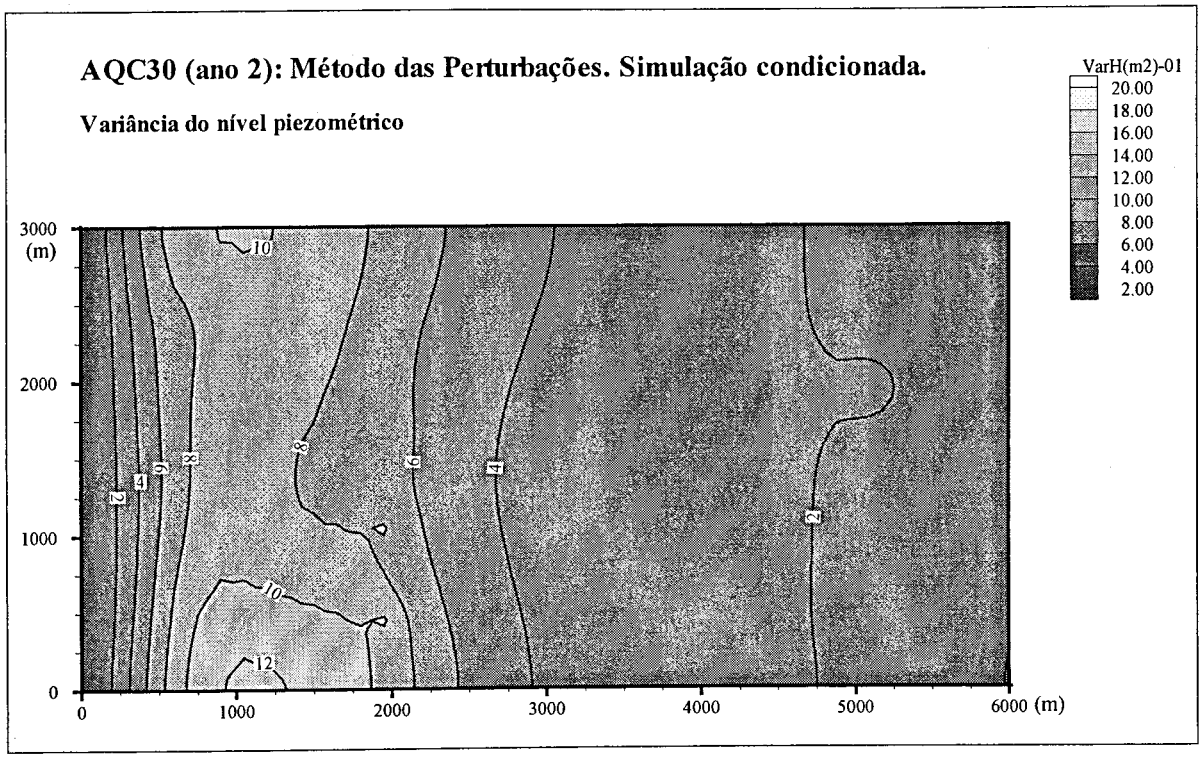



Figura 5.179 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 01.

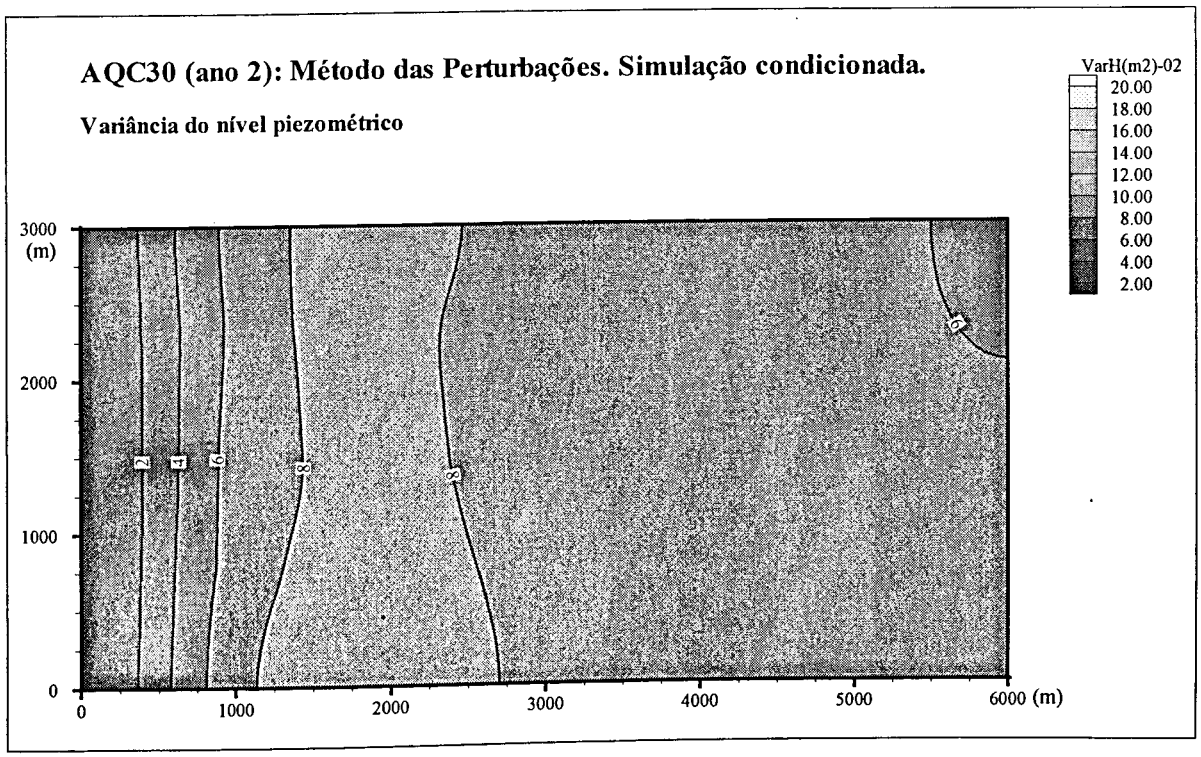



Figura 5.180 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 02.

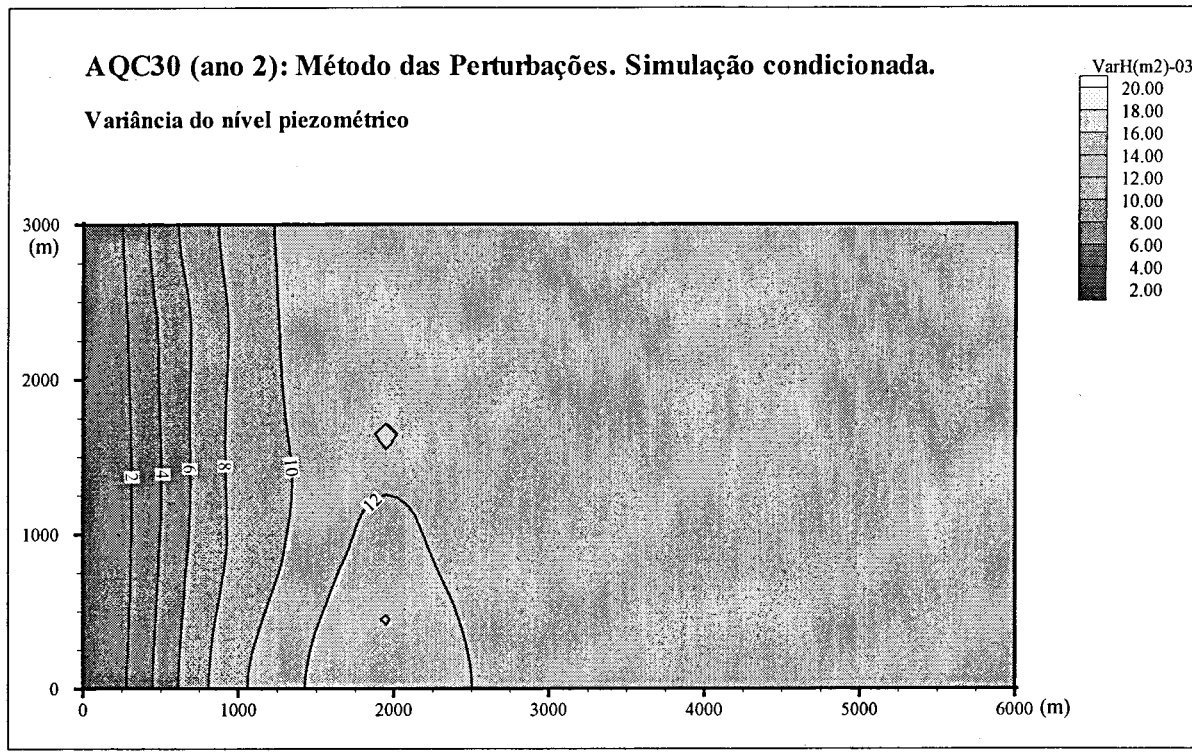



Figura 5.181 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 03.

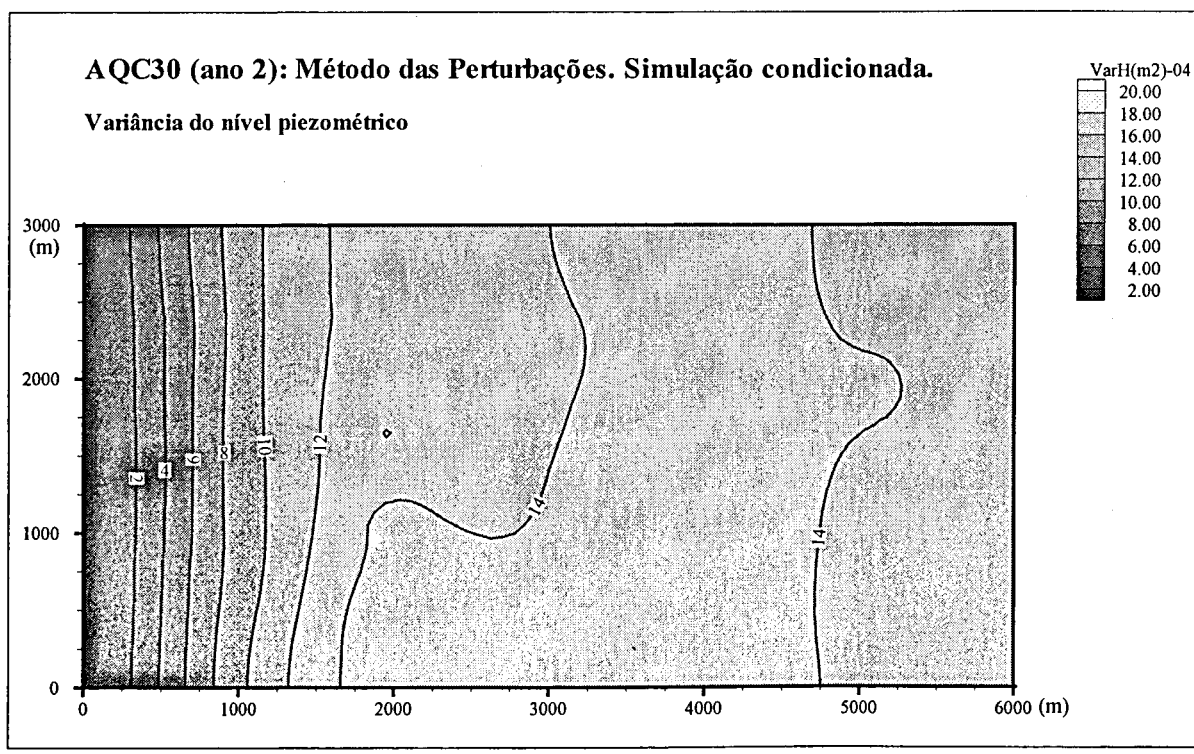



Figura 5.182 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 04.

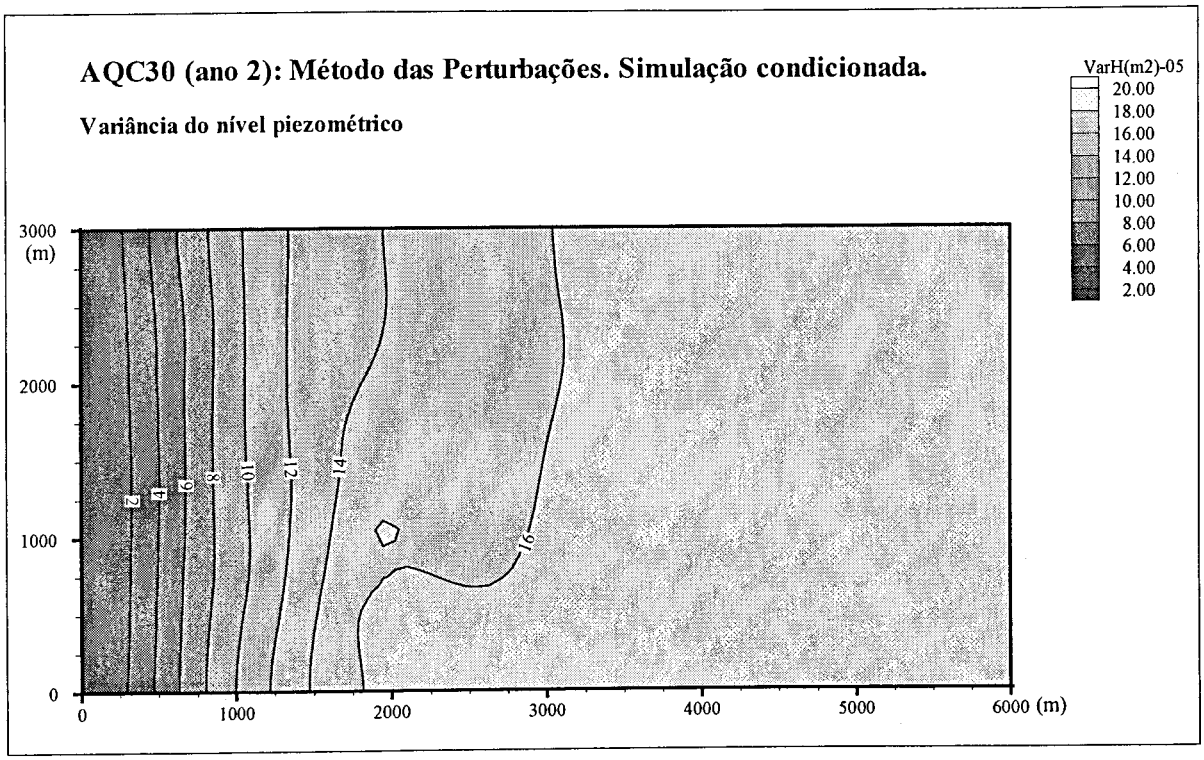



Figura 5.183 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 05.

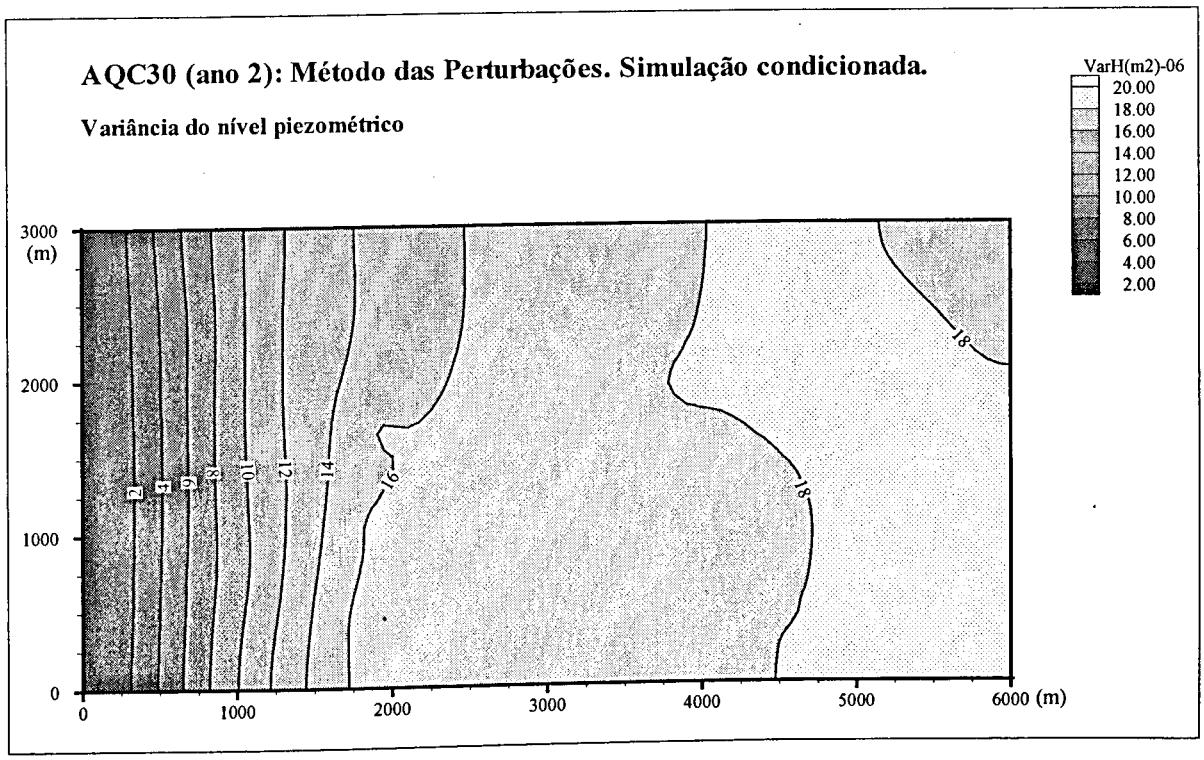



Figura 5.184 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 06.

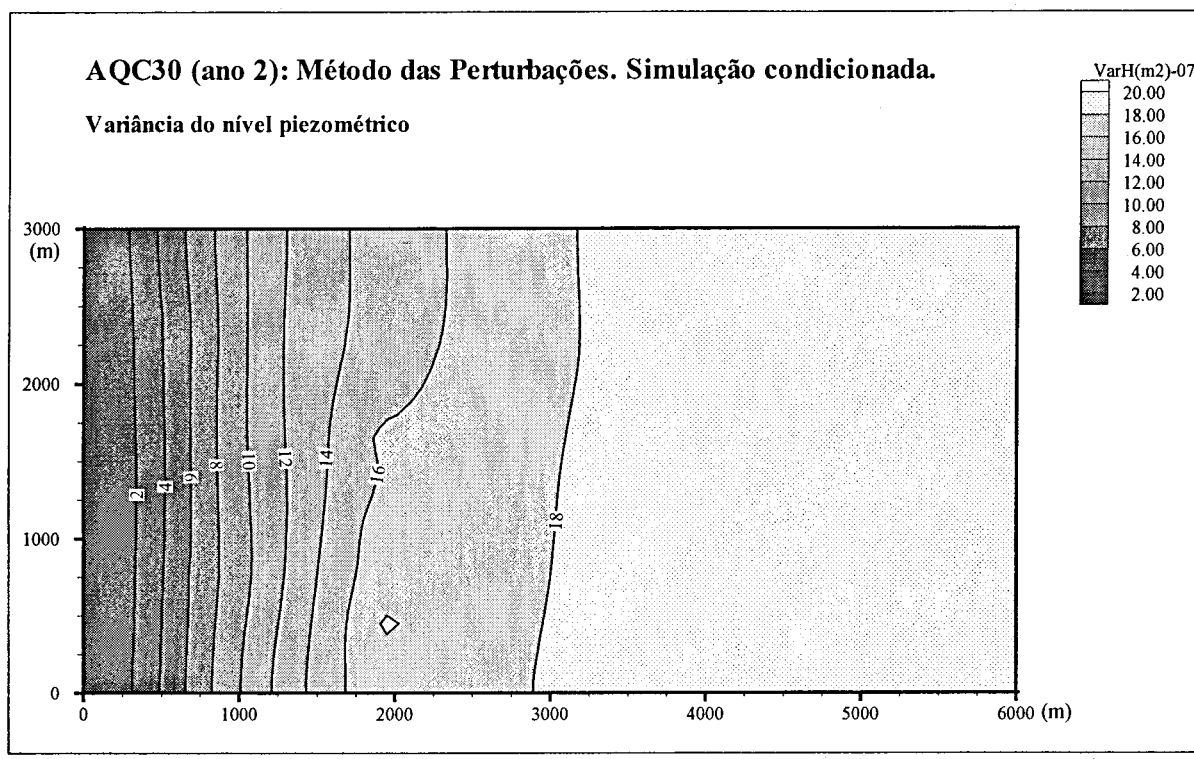



Figura 5.185 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 07.

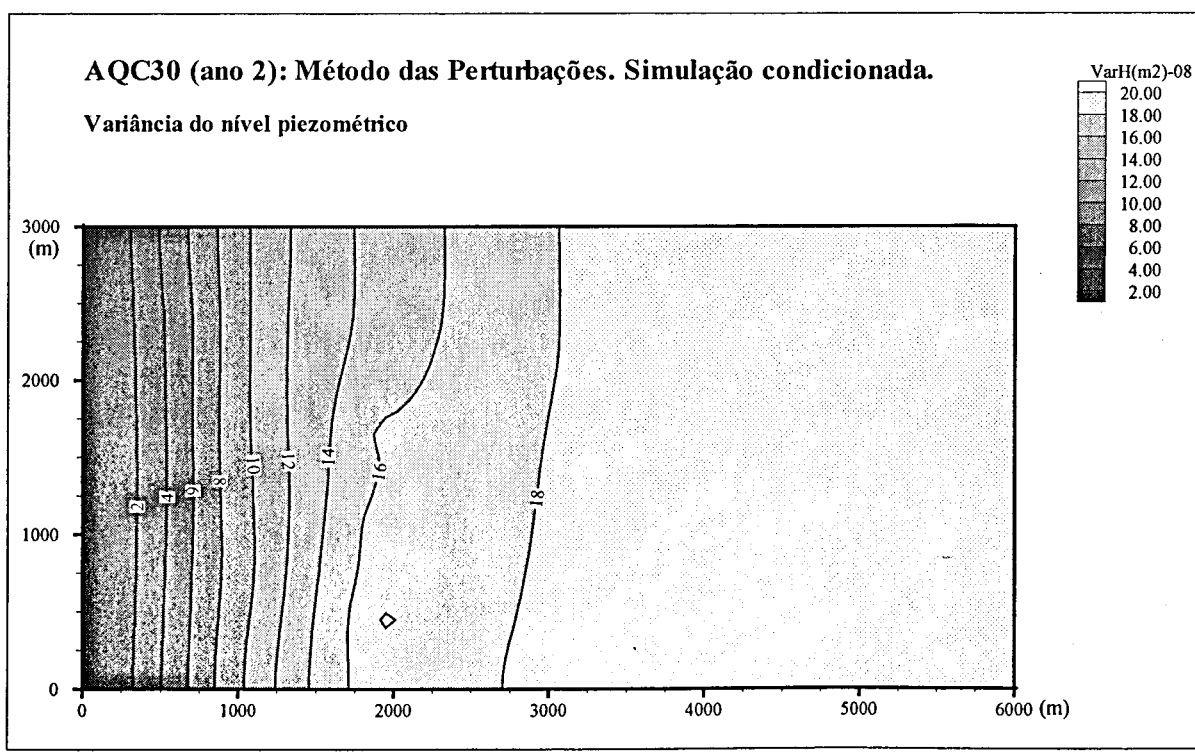



Figura 5.186 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 08.

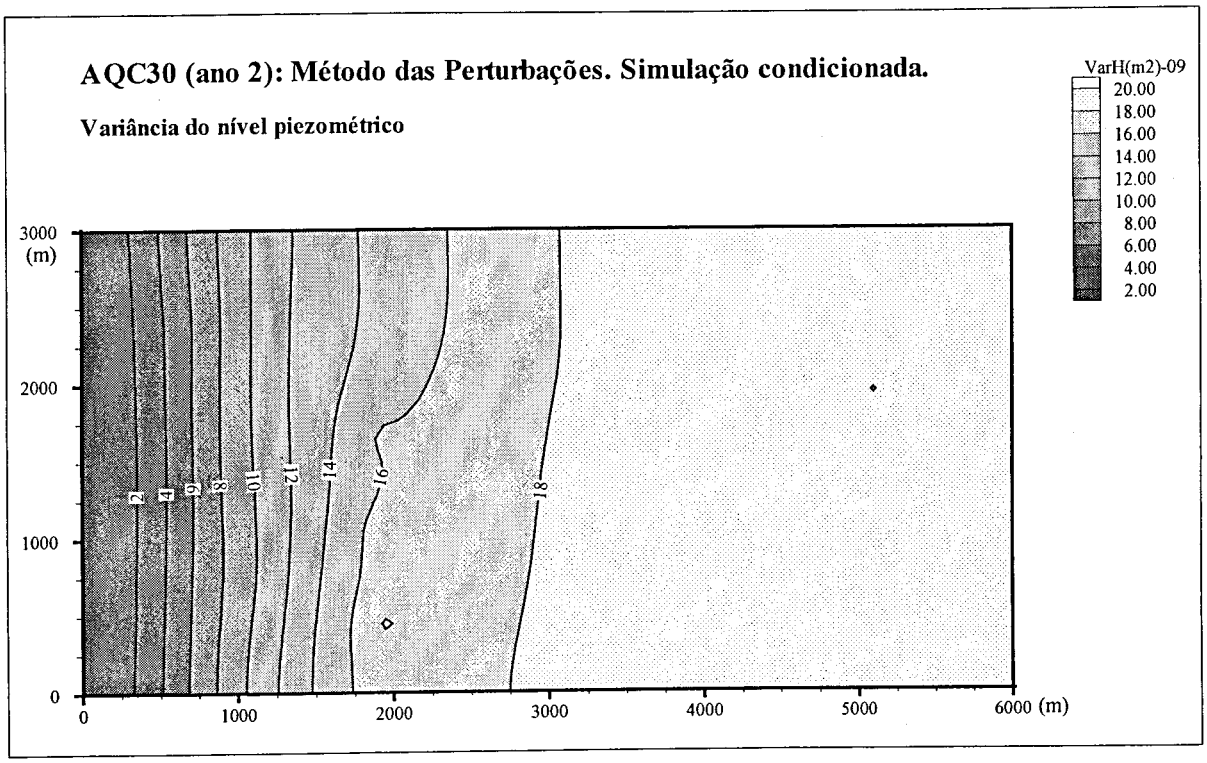



Figura 5.187 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 09.

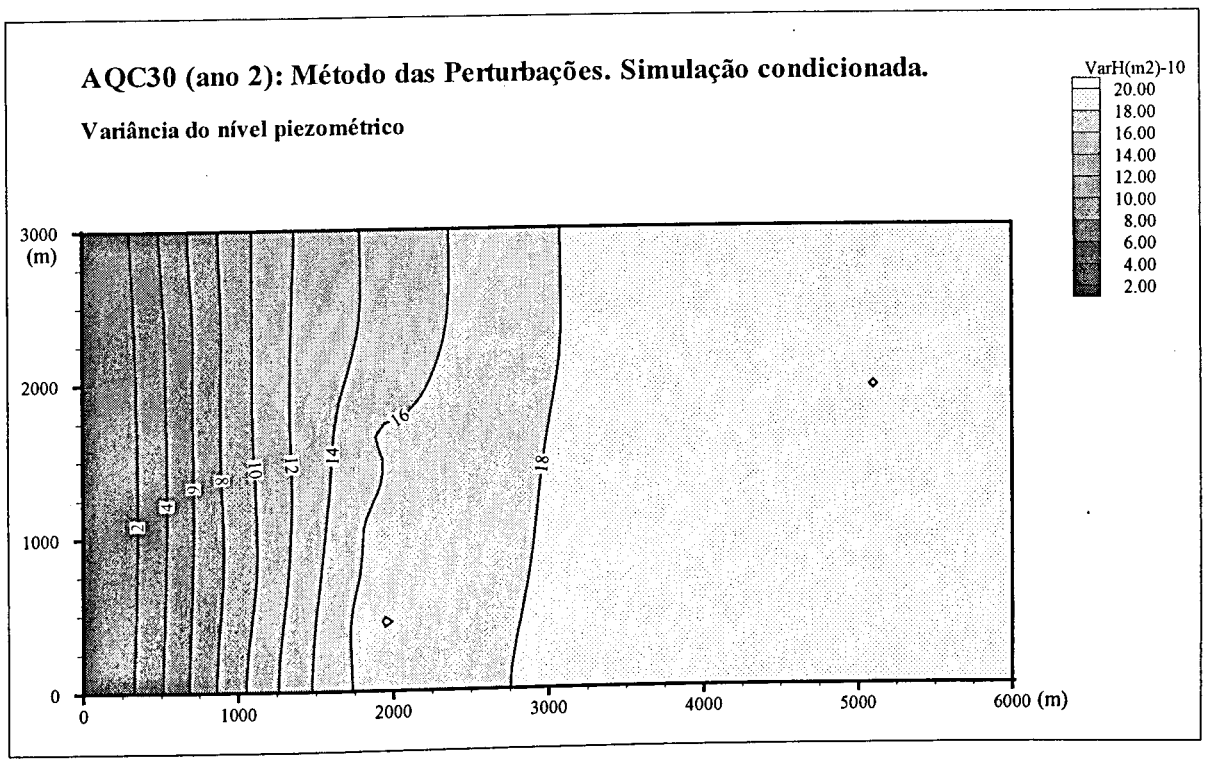



Figura 5.188 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 10.

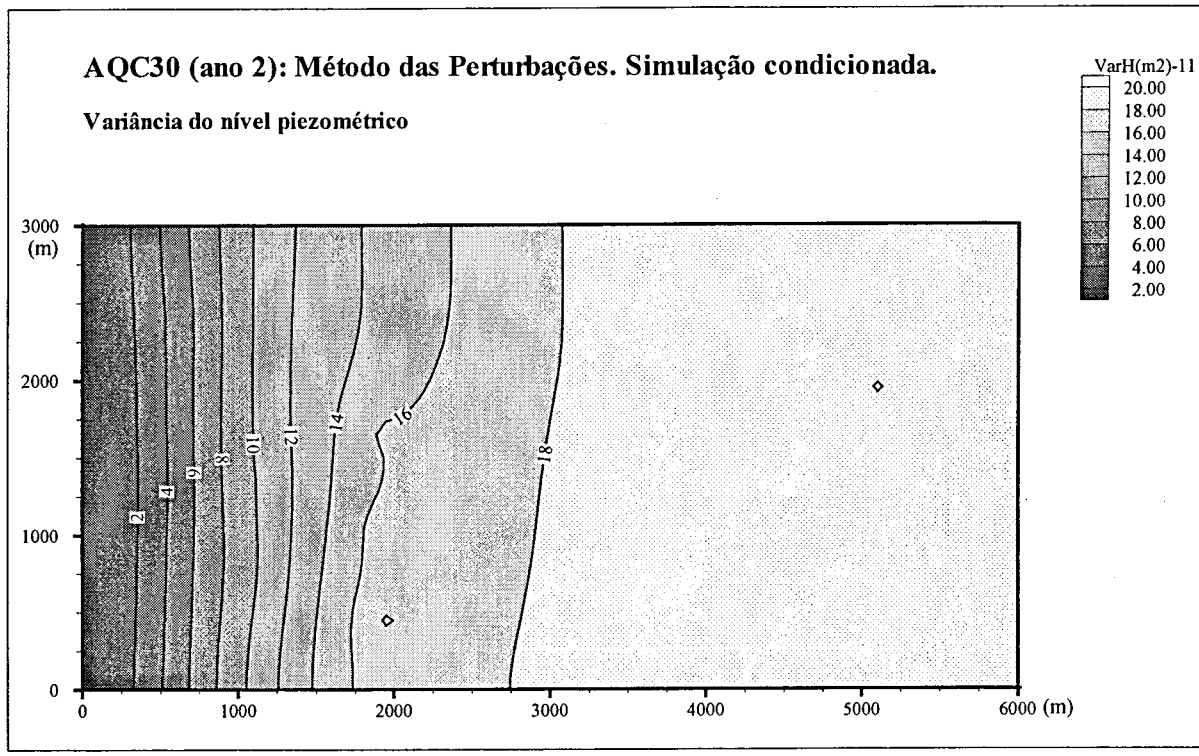



Figura 5.189 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 11.

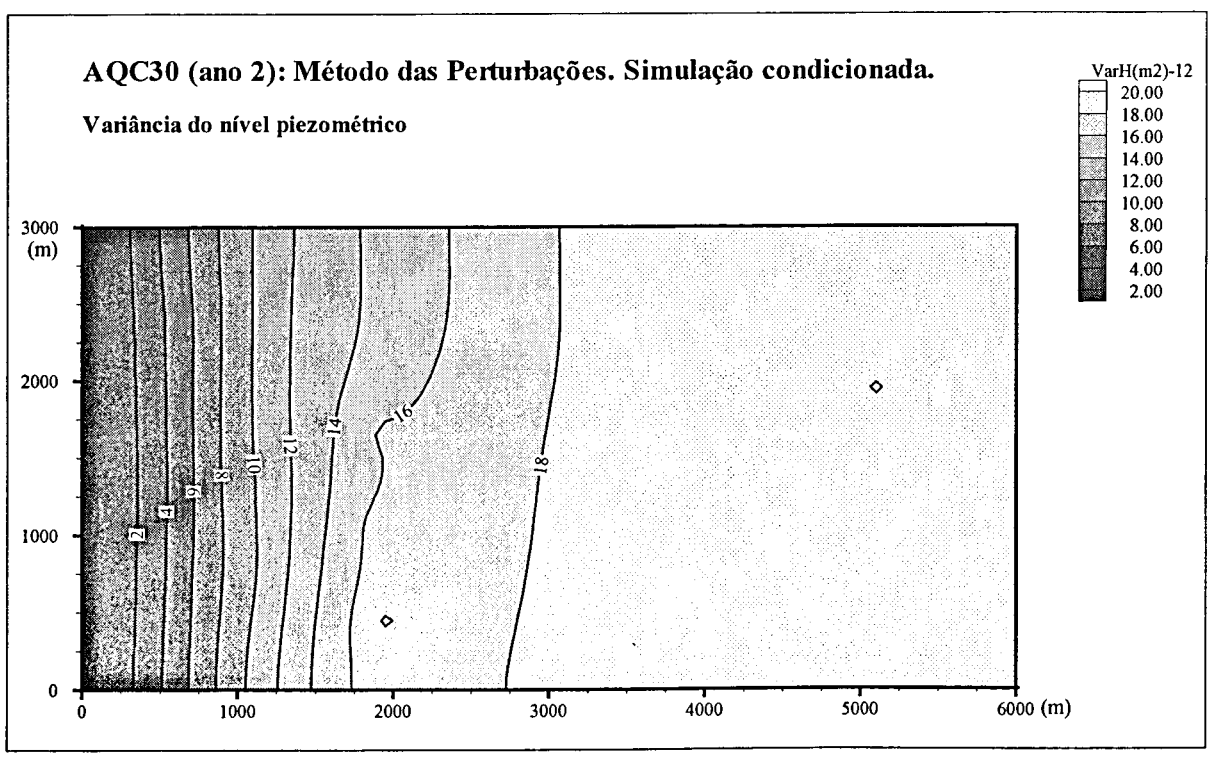



Figura 5.190 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 12.

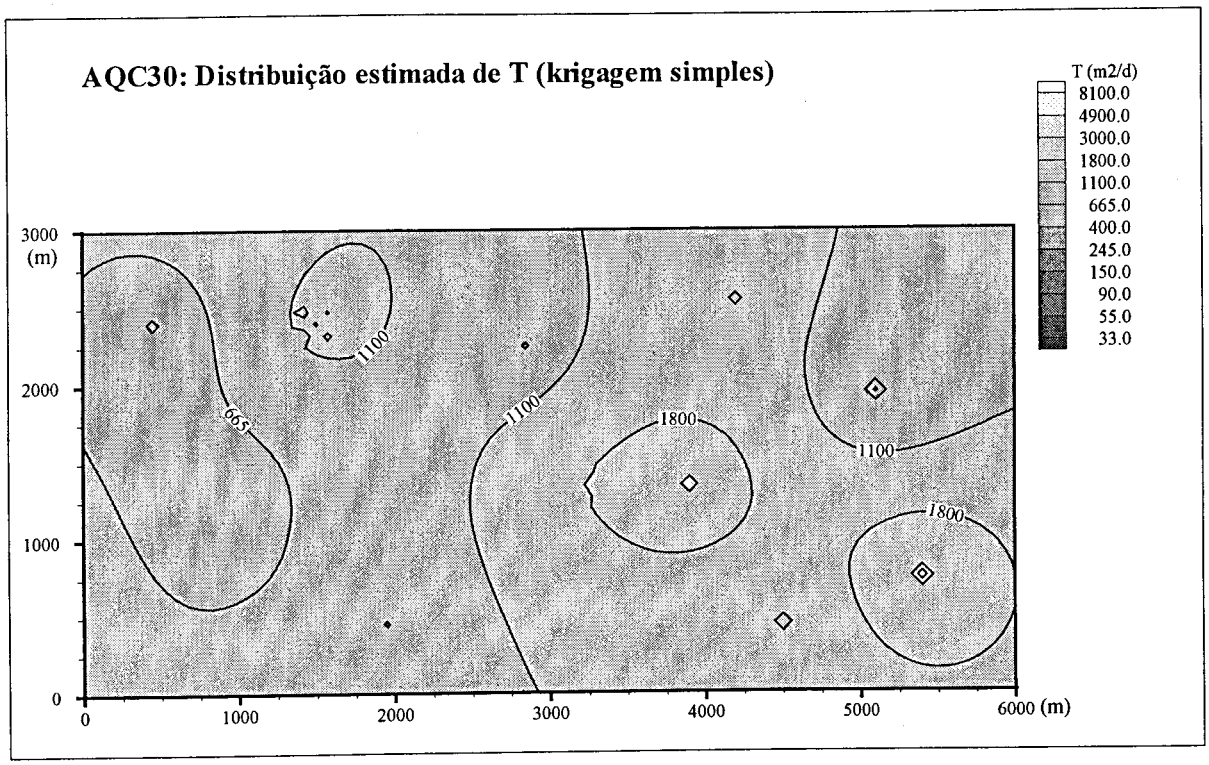



Figura 5.191 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Imagem da transmissividade, *T* (m2/d), estimada por krigagem simples.

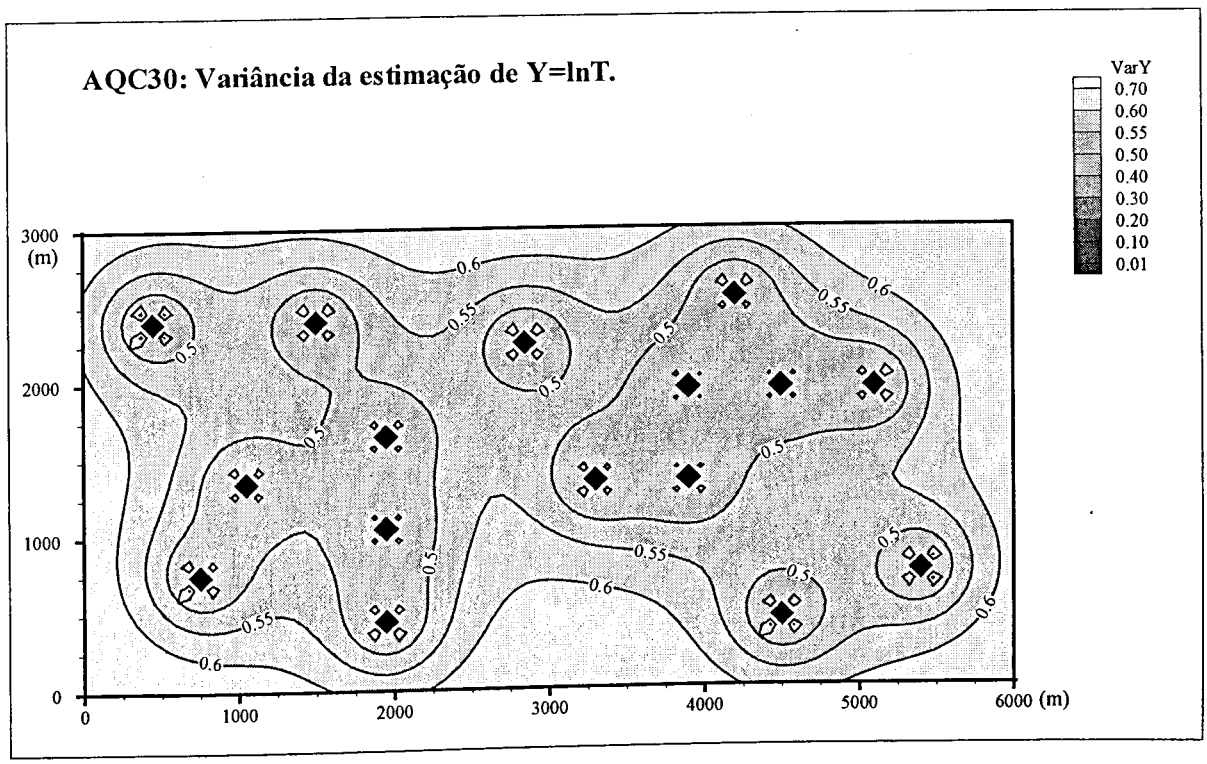



Figura 5.192 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Imagem da variância condicionada da transformada logarítmica da transmissividade, *Y*=ln*T*.

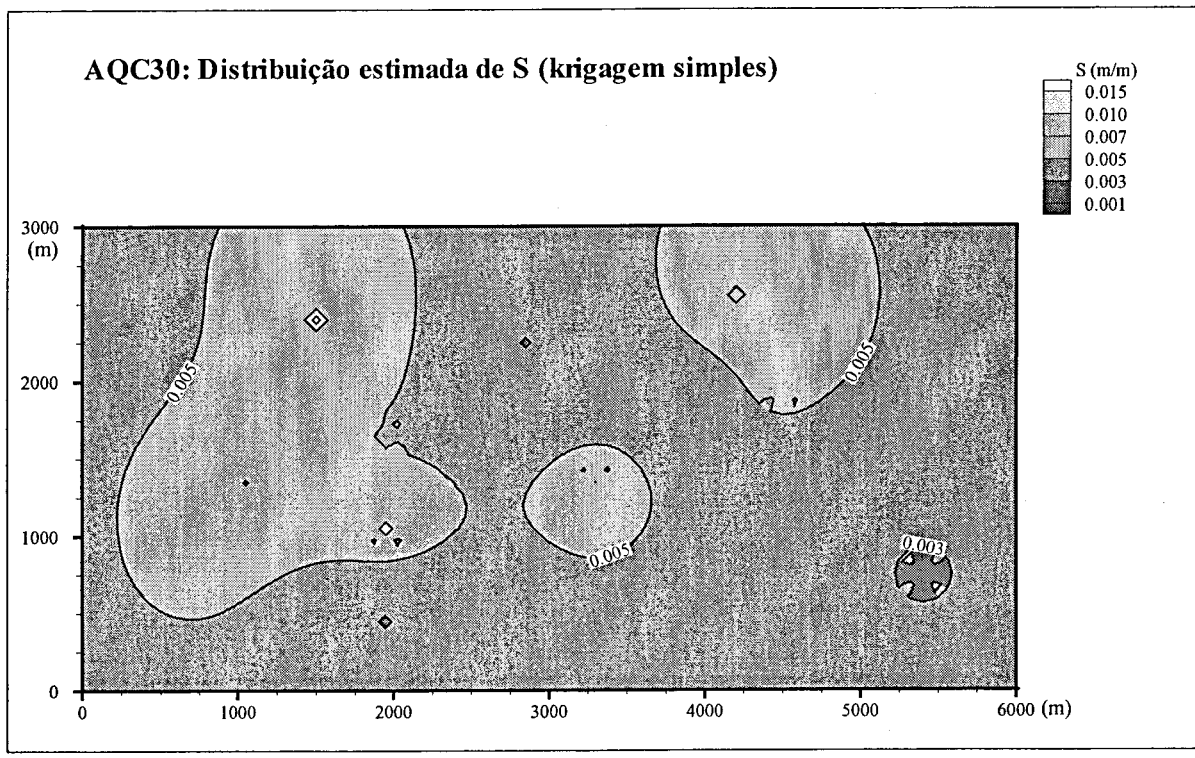



Figura 5.193 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Imagem do coeficiente de armazenamento, *S* (m/m), estimado por krigagem simples.

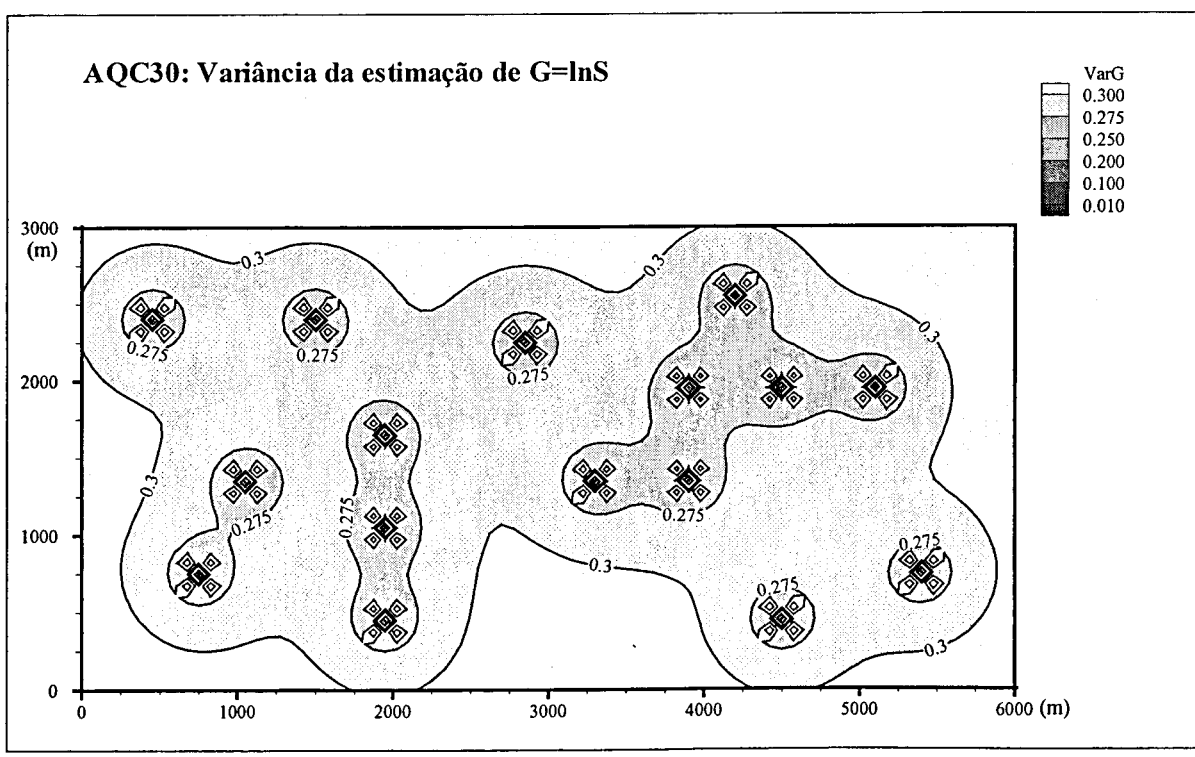



Figura 5.194 – AQC30: Simulação pelo método das perturbações. Imagem da variância condicionada da transformada logarítmica do coeficiente de armazenamento, *G*=ln*S*.

| | AQC10 | AQC20 | | | AQC30 | | Caudal total extraído ($m^3/d$) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Mês | $Q_{\Gamma\text{-}1}$ ($m^3/d$) | $Q_{\Gamma\text{-}1}$ ($m^3/d$) | desvio (%) | $\sigma_Q$ ($m^3/d$) | $Q_{\Gamma\text{-}1}$ ($m^3/d$) | desvio (%) | |
| 01 | – 20 166.3 | – 19 407.5 | – 3.8 | 8 485 | – 23 319.3 | + 15.6 | 20 400 |
| 02 | – 20 491.3 | – 28 733.4 | + 40.2 | 4 472 | – 24 148.8 | + 17.8 | 20 160 |
| 03 | – 20 827.3 | – 22 553.6 | + 8.3 | 2 024 | – 22 731.0 | + 9.1 | 20 160 |
| 04 | – 21 033.0 | – 24 305.2 | + 15.6 | 1 183 | – 22 706.3 | + 8.0 | 20 160 |
| 05 | – 21 217.3 | – 22 580.3 | + 6.4 | 567 | – 22 192.3 | + 4.6 | 20 160 |
| 06 | – 20 761.9 | – 22 103.3 | + 6.5 | 346 | – 21 472.7 | + 3.4 | 20 160 |
| 07 | – 20 701.6 | – 21 397.6 | + 3.4 | 182 | – 21 123.8 | + 2.0 | 20 400 |
| 08 | – 20 021.5 | – 20 476.2 | + 2.3 | 122 | – 20 288.1 | + 1.3 | 20 400 |
| 09 | – 19 904.8 | – 20 168.2 | + 1.3 | 87 | – 20 136.8 | + 1.2 | 21 600 |
| 10 | – 19 860.5 | – 20 093.0 | + 1.2 | 57 | – 20 128.8 | + 1.4 | 21 600 |
| 11 | – 19 887.4 | – 20 064.3 | + 0.9 | 46 | – 20 162.6 | + 1.4 | 21 600 |
| 12 | – 19 889.6 | – 20 036.5 | + 0.7 | 46 | – 20 166.2 | + 1.4 | 21 600 |

Tabela 5.14 – AQC10, AQC20 e AQC30: Caudais totais ("reais" e estimados) na fronteira $\Gamma_1$, no final de cada mês. Desvio dos valores estimados relativamente aos de AQC10. Desvio padrão obtido pelo *msM-C*. Caudal total extraído (na fronteira $\Gamma_3$ e nos pontos de bombagem) nos mesmos instantes.

| | AQC10 | AQC20 | | AQC30 | | Caudal total extraído ($m^3/d$) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Mês | $Q_{BG}$ ($m^3/d$) | $Q_{BG}$ ($m^3/d$) | Desvio (%) | $Q_{BG}$ ($m^3/d$) | desvio (%) | |
| 01 | + 233.7 | + 992.5 | + 324.7 | – 2 919.3 | – 1 349 | 20 400 |
| 02 | – 331.3 | – 8 573.4 | + 2 487.8 | – 3 988.8 | + 1 104 | 20 160 |
| 03 | – 667.3 | – 2 393.6 | + 258.7 | – 2 571.0 | + 285 | 20 160 |
| 04 | – 873.0 | – 4 145.2 | + 374.8 | – 2 546.3 | + 192 | 20 160 |
| 05 | – 1 057.3 | – 2 420.3 | + 128.9 | – 2 032.3 | + 92 | 20 160 |
| 06 | – 601.9 | – 1 943.3 | + 222.9 | – 1 312.7 | + 118 | 20 160 |
| 07 | – 301.6 | – 997.6 | + 230.8 | – 723.8 | + 140 | 20 400 |
| 08 | + 378.5 | – 76.2 | – 120.1 | + 111.9 | – 70 | 20 400 |
| 09 | + 1 695.2 | + 1 431.8 | – 15.5 | + 1 463.2 | – 14 | 21 600 |
| 10 | + 1 739.5 | + 1 507.0 | – 13.4 | + 1 471.2 | – 15 | 21 600 |
| 11 | + 1 712.6 | + 1 535.7 | – 10.3 | + 1 437.4 | – 16 | 21 600 |
| 12 | + 1 710.6 | + 1 563.5 | – 8.6 | + 1 433.8 | – 16 | 21 600 |

Tabela 5.15 – AQC10, AQC20 e AQC30: Caudais de balanço global ("reais" e estimados) do aquífero, no final de cada mês. Desvios dos valores estimados relativamente aos de AQC10. Caudal total extraído (na fronteira $\Gamma_3$ e nos pontos de bombagem) nos mesmos instantes.

Tendo presentes os resultados (imagens e valores) da simulação "real" (AQC10) e das simulações estocásticas (AQC20 e AQC30) importa analisar o comportamento destas últimas relativamente à aproximação dos valores estimados à solução "real" e à incerteza da estimação produzida (variância), saber se a piezometria "real" se encaixa no intervalo de confiança de 95% $[\langle H\rangle - 2\sigma_H, \langle H\rangle + 2\sigma_H]$ e finalmente, se os resultados não forem satisfatórios, encontrar uma explicação para os desvios detectados. Ainda neste contexto, interessa comparar o desempenho dos dois métodos de simulação directa estocástica.

A primeira, e imediata, constatação respeita às grandes diferenças encontradas entre a piezometria "real" e as estimadas, independentemente do método com que estas foram obtidas. É evidente um acentuado viés dos valores estimados, os quais se revelam sistematicamente superiores aos "reais". Observa-se, também, que os níveis piezométricos estimados pelo *msM-C* condicionadas se afastam mais dos "reais" do que os estimados pelo método das perturbações. Enquanto que este último apresenta desvios máximos da ordem de 7 metros, nas simulações de Monte-Carlo chega a ser ultrapassado o valor de 10 metros. Contudo, e apesar desta diferença, detecta-se um padrão comum aos desvios dos níveis piezométricos estimados pelos dois métodos: crescem da fronteira $\Gamma_1$ até à primeira linha de 3 pontos de bombagem, estabilizam na zona imediatamente a jusante destes pontos e sofrem uma pequena redução até ao alinhamento das fronteiras $\Gamma_3$ e $\Gamma_4$.

A segunda constatação respeita à medida da incerteza, a variância do nível piezométrico. Verifica-se que no *msM-C* condicionadas esta grandeza apresenta, de um modo geral, valores inferiores aos obtidos pelo método das perturbações. Com este método a variância de $H$ chega a atingir valores à volta de 20 $m^2$, enquanto que nas simulações de Monte-Carlo os valores máximos são substancialmente inferiores, não alcançando 9 $m^2$. Mas, e apesar da distinta ordem de grandeza de $\sigma_H^2$, observa-se novamente um padrão comum no comportamento temporal e espacial desta grandeza, nomeadamente a propagação de montante para jusante, isto é, da fronteira $\Gamma_1$ para o alinhamento de $\Gamma_3$ e $\Gamma_4$, uma estabilização desta propagação a partir do mês 07 e uma arrumação espacial semelhante, descontada a distinta ordem de grandeza das variâncias produzidas pelos dois métodos. É de assinalar que estas observações são igualmente aplicáveis aos desvios das estimações produzidas, tratados no parágrafo anterior, embora com uma diferença fundamental: o método das perturbações estima melhor o nível piezométrico "real" mas apresenta uma variância maior, o que é o

mesmo que afirmar que o *msM-C* condicionadas estima pior mas tem mais "confiança" nos resultados obtidos. As imagens[83] que representam, para os dois métodos de simulação directa estocástica, a posição relativa do campo piezométrico "real" face aos limites superior e inferior do intervalo de confiança de 95% revelam que $H_{real}$ situa-se abaixo do limite inferior em praticamente toda a extensão do aquífero, para o *msM-C*, enquanto que no método das perturbações isto só acontece numa pequena zona junto à fronteira $\Gamma_5$, próxima da intersecção com $\Gamma_1$. É uma consequência natural do facto de o *msM-C* estimar pior e apresentar uma variância menor[84].

Neste exercício verifica-se que, em oposição ao entendimento de alguns autores, o método das perturbações estima melhor a piezometria e não subavalia a incerteza, pelo menos quando comparado com as simulações de Monte-Carlo condicionadas. Trata-se de uma observação que é válida para este problema mas que não deverá dar lugar a qualquer tipo de generalização[85].

Neste ponto da análise dos resultados é natural que se coloquem duas interrogações, uma relativamente às causas dos desvios das estimações produzidas e outra para as diferenças de resultados (valores esperados e variâncias) entre os dois métodos.

Para a primeira questão, a resposta mais tentadora poderá estar na atribuição da responsabilidade pelos maus resultados às amostras dos parâmetros hidrogeológicos. É uma explicação aparentemente lógica, visto que é através dessas amostras que a informação sobre estes parâmetros é introduzida no problema. Importa, pois, perceber o que há de errado com as amostras, se é que algo de errado existe. De facto, o tratamento estatístico das amostras não revela um desvio significativo relativamente aos valores dos parâmetros estatísticos utilizados para gerar as realizações "reais" de $T$ e $S$. Acresce ainda, que na inferência dos modelos teóricos dos semivariogramas de $Y = \ln T$ e $G = \ln S$ se utilizou alguma informação sobre os semivariogramas das realizações "reais" destas duas *f.a.*'s, nomeadamente as distâncias integrais e o peso relativo dos efeitos pepita nas variâncias totais. Então, qual a razão para os resultados pouco satisfatórios? Provavelmente o erro estará no excesso de expectativa, isto é,

---

[83] Estas imagens foram omitidas para não sobrecarregar o texto com quase cinco dezenas de figuras.

[84] $\langle H \rangle_{smcc}$ está mais afastado (para cima) de $H_{real}$ e tem um intervalo de confiança mais apertado do que $\langle H \rangle_{mpert}$.

[85] Recorde-se que para o exercício tratado na secção 5.5.9 o método das perturbações apresentava um desempenho pior do que as simulações de Monte-Carlo condicionadas.

no imaginar que estas amostras poderiam conter uma quantidade suficiente de informação para se obter uma boa simulação do escoamento.

Analisando as imagens da diferença entre o campo piezométrico esperado e o "real" percebe-se que os desvios crescem muito rapidamente entre a fronteira $\Gamma_1$ e o alinhamento de 3 pontos de extracção mais próximo desta fronteira. A jusante deste alinhamento os desvios já não crescem, pelo contrário, sofrem uma pequena redução. No exercício proposto, o escoamento é determinado pelas extracções impostas nos pontos de bombagem e na fronteira $\Gamma_3$ localizada na extremidade oposta àquela que recarrega o aquífero ($\Gamma_1$). Nestas condições estabelece-se um caudal de varrimento cujo valor total numa qualquer secção paralela às fronteiras referidas e localizada entre $\Gamma_1$ e o primeiro alinhamento de pontos de extracção é praticamente independente das características hidrogeológicas do aquífero. Assim sendo, o gradiente hidráulico nesta zona do aquífero é fortemente condicionado pela transmissividade. Se esta aumentar o gradiente diminui, e vice-versa. Aparentemente, nesta zona, os valores estimados para a transmissividade são superiores aos "reais" pelo que o correspondente gradiente é inferior ao "real", ou seja, o nível piezométrico esperado não desce, no sentido do escoamento, tanto como na simulação "real". Inspeccionando o ficheiro da amostra de $T$ (Figura 5.105) verifica-se que os valores medidos nos três pontos mais próximos de $\Gamma_1$ são bastante inferiores à média geométrica da transmissividade. Independentemente de serem, ou não, os mais representativos do comportamento de $T$ nesta zona, a estimação de $Y = \ln T$, condicionada por estes valores, é influenciada pelo efeito pepita que gera uma descontinuidade na estimação, com a esta a aproximar-se rapidamente do valor médio[86] de $Y$ no aquífero, o qual, por sua vez, aparenta ser substancialmente superior ao valor médio desta zona que é crítica para a definição dos níveis piezométricos face às características do escoamento acima descritas. Esta explicação, elaborada sobre o método das perturbações, também é válida para as realizações geradas pelo algoritmo sequencial uma vez que o efeito pepita significa sempre uma perda de estrutura de correlação espacial, a qual, por sua vez, implica uma tendência para a uniformização dos pesos atribuídos aos dados conhecidos, o que é o mesmo que dizer uma redução do efeito de condicionamento produzido por estes dados, acentuando a tendência para os valores médios.

[86] Numa situação limite em que só houvesse efeito pepita, os pesos dos diversos dados seriam todos iguais pelo que o valor estimado seria igual à média, com excepção dos pontos de medição.

A segunda interrogação respeita às diferenças de resultados (valores esperados e variâncias) entre os dois métodos. É uma questão de resposta mais difícil que a anterior. A explicação poderá estar em alguma particularidade do algoritmo de geração sequencial gaussiana. Numa tentativa de procurar evidências que permitam elaborar uma hipótese, estudaram-se 3 realizações das transformadas logarítmicas de cada um dos parâmetros hidrogeológicos[87]. Focando, por agora, a análise em $Y = \ln T$, os histogramas das 3 realizações estudadas aparentam uma menor dispersão em torno do valor médio do que o histograma da realização "real", o que é compatível com o facto de a variância da amostra (0.7234) ser inferior à da realização "real" (0.90). Mas a diferença entre os dois métodos não deverá residir neste aspecto porque a krigagem de $Y$ foi efectuada com os mesmos parâmetros estatísticos da amostra, nomeadamente com $w_Y + \sigma_Y^2 = 0.7234$. Certamente pelo mesmo motivo, os semivariogramas experimentais das 3 realizações tendem para um patamar inferior ao do semivariograma da realização "real". Mas, sem justificação aparente, apresentam uma distância integral inferior à arbitrada a partir da amostra e que é igual à da realização "real" ($l_Y = 1000\,\mathrm{m}$). Ora, uma diminuição da distância de correlação implica uma redução do raio de influência dos dados conhecidos, logo um aumento da área de aquífero com tendência para os valores médios. É aqui que deverá residir a causa da diferença de resultados entre valores estimados, tendo em conta as considerações acima produzidas sobre as características do escoamento e a percepção de os níveis piezométricos serem fortemente condicionados pela transmissividade na zona adjacente à fronteira $\Gamma_1$ e, em particular, o facto de a estimação de $Y$ por krigagem simples ter sido realizada com a distância integral correcta. Por outras palavras, nesta zona crítica do aquífero o *msM-C* deverá ter sobreavaliado a transmissividade, em termos médios, quando comparado com o método das perturbações, pelo que este último produz um gradiente hidráulico maior e mais próximo do obtido na simulação "real". E a justificação para o facto de a variância do nível piezométrico determinada pelo *msM-C* apresentar valores inferiores aos obtidos pelo método das perturbações poderá estar também na redução da distância integral, tendo em conta que, segundo as expressões teóricas deduzidas para escoamentos uniformes em média e em domínios infinitos[88], $\sigma^2$ tende a aumentar com o quadrado da distância integral, ou de outra grandeza com ela relacionada. Finalmente, uma observação relativamente ao valor da variância total $w_Y + \sigma_Y^2 = 0.7234$

---

[87] Realizações 300, 500 e 800.
[88] Ver expressões (5.60) e (5.61).

utilizada nos dois métodos. Se tivesse sido adoptado um valor superior, próximo do imposto à realização "real" de $Y = \ln T$, $\sigma^2$ viria a tomar valores superiores, sendo previsível que, nestas condições, o intervalo de confiança do método das perturbações encaixaria $H_{\text{real}}$ em todo o domínio.

As realizações geradas pelo programa **SGSIM** revelam uma distância integral inferior à arbitrada, facto que não deverá ser justificado pelo já explicitado problema da *FDP* experimental obtida a partir da amostra[89] porque este algoritmo de geração sequencial não retira essa informação da amostra. Pelo contrário, trata-se de um dado fornecido pelo utilizador do programa. Conforme se explica na secção 5.4.2, este algoritmo gera o valor da *f.a.*, num qualquer ponto do domínio, a partir da *FDP* univariada normal nesse ponto, condicionada aos dados iniciais e aos valores previamente extraídos que se encontram na vizinhança do ponto em causa. Esta vizinhança é definida por um raio que deverá ser aproximadamente igual ao alcance, pelo que no ficheiro de dados do programa **SGSIM** foi introduzido o valor de $3000\,\text{m}$, triplo da distância integral pretendida ($l_Y = 1000\,\text{m}$)[90]. Mas este programa utiliza somente alguns valores localizados nesta vizinhança, seleccionados de acordo com um critério seleccionado e quantificado pelo utilizador. Um dos critérios possíveis consiste na escolha dos $n$ dados geograficamente mais próximos, com $n$ condicionado a um limite mínimo e a um máximo. Como critério alternativo, a vizinhança é dividida em octantes e são escolhidos os $m$ dados geograficamente mais próximos, em cada octante. Qualquer um destes critérios é complementado pela quantificação do número de valores previamente extraídos, em redor do ponto em causa, a ser também utilizado na definição da *FDP* univariada normal. Face ao número de dados disponíveis (16), ao valor do alcance ($3000\,\text{m}$) e com a preocupação de não privilegiar dados de determinadas zonas, optou-se pelo segundo critério na geração das realizações condicionadas de $Y = \ln T$ e $G = \ln S$, com 1 dado por octante e 8 valores previamente gerados. Este último número é igual ao máximo de dados (1 por octante) e foi definido com intenção de evitar que, na formação da *FDP* univariada normal, os valores previamente extraídos tomem um peso excessivo face aos dados disponíveis. São critérios discutíveis e, talvez, um pouco restritivos tendo em vista o estabelecimento da estrutura de correlação espacial pretendida. Este

---

[89] Problemática abordada no final da secção 5.5.9.

[90] Recorde-se que para os semivariogramas exponenciais, o alcance, ou distância de correlação, é igual ao triplo da distância integral.

problema podia, e devia, ser melhor esclarecido, modificando os critérios e analisando o impacto nos resultados. Contudo, não constituindo as simulações de Monte-Carlo a metodologia central do presente trabalho, tomou-se a liberdade de ficar pelas considerações de carácter eventualmente especulativo aqui produzidas.

Na equação diferencial do escoamento, o factor que multiplica $\partial H/\partial t$, o coeficiente de armazenamento nos aquíferos confinados e a porosidade drenável nos não confinados, controla a rapidez com que a variável de estado, $H$, reage e se adapta às variações das condições de fronteira e de outras acções exercidas sobre o aquífero (extracções, recargas, etc.). Algo semelhante acontece na equação diferencial das perturbações relativamente à respectiva variável de estado, a perturbação de $H$. Quanto menor é o valor desse factor mais rápida é a resposta da variável de estado. No limite, se o referido factor tomar um valor nulo, a reacção da variável de estado é instantânea. Nos aquíferos confinados, o coeficiente de armazenamento toma valores relativamente pequenos, geralmente compreendidos entre $5\times10^{-2}$ e $1\times10^{-5}$ (Marsily, 1986). Por este motivo, a adaptação do nível piezométrico a novas condições é relativamente rápida. O mesmo acontece com a respectiva perturbação e, por conseguinte, com a variância de $H$. Como consequência do exposto, os valores que estas variáveis de estado assumem ao longo do tempo não são substancialmente afectados por pequenas variações do coeficiente de armazenamento. Neste aspecto, os métodos revelam comportamentos semelhantes na medida em que $\sigma^2$ tende a estabilizar a partir do mês 07 apesar de as 3 realizações de $G = \ln S$ analisadas apresentarem variâncias algo acima da realização "real".

Na Tabela 5.14 comparam-se os valores dos caudais totais que atravessam a fronteira $\Gamma_1$, no instante final de cada mês, determinados pela simulação "real" (AQC10) e estimados pelas simulações estocásticas (AQC20 e AQC30). Nos primeiros meses os valores estimados apresentam desvios significativos relativamente aos "reais". A partir do final do mês 07 os desvios já não significativos. Esta boa concordância, em claro contraste com a piezometria estimada, não surpreende. De facto, sendo o escoamento fortemente condicionado pelas extracções e tendo um aquífero confinado uma reduzida capacidade de armazenamento é natural que os valores estimados dos fluxos que recarregam o aquífero através de $\Gamma_1$ não difiram muito dos "reais". Por outro lado, as condições iniciais do escoamento (piezometria inicial) são, simultaneamente, as finais do período anterior de simulação, logo coerentes com

as propriedades hidrogeológicas "reais". Assim, nos primeiros meses de simulação verifica-se um reajustamento da piezometria às realizações destas propriedades, quer sejam as geradas pelo algoritmo sequencial gaussiano para o *msM-C* ou as estimadas por krigagem simples para o método das perturbações. Por este motivo, é de esperar, durante a fase inicial, uma adaptação do fluxo que atravessa $\Gamma_1$ às novas condições hidrogeológicas.

Designou-se por caudal de balanço global a diferença entre o caudal que sai e o que entra no aquífero, num dado instante. Esta grandeza permite saber se, num dado instante, o aquífero está a ceder ou a receber água. Analisando a Tabela 5.15 verifica-se que nos primeiros meses o caudal de balanço estimado pelos dois métodos é negativo, toma valores elevados e muito diferentes dos "reais". Significa que nas simulações estocásticos o aquífero está a ser recarregado a um ritmo muito superior ao "real". Trata-se do acima referido reajustamento dos níveis piezométricos estimados que, tal como já foi largamente analisado, assumem valores muito superiores aos "reais. A partir do mês 07 esta fase de reajustamento é ultrapassada e os caudais de balanço são relativamente próximos dos "reais". Os desvios passam, então, a ser uma consequência do grau de aproximação da representação estocástica dos parâmetros hidrogeológicos, nomeadamente do coeficiente de armazenamento.

Para finalizar esta análise aos resultados deste exercício de simulação directa estocástica num aquífero confinado retome-se a dúvida sobre as amostras. Serão representativas dos parâmetros hidrogeológicos? Ou estar-se-á a procurar uma informação que não contêm nem podem conter? Uma resposta afirmativa às duas interrogações deverá ser a perspectiva mais adequada. Afirmativa à primeira questão porque o tratamento estatístico das amostras não apresenta médias e variâncias substancialmente diferentes às das correspondentes realizações "reais". Acresce, ainda, que apesar de os semivariogramas experimentais não serem suficientemente esclarecedores, a inferência estatística realizou-se com o "auxilio" de parâmetros utilizados na geração das realizações "reais" de $T$ e $S$. Se este facto apoia a resposta à primeira questão, também ajuda a sustentar a resposta afirmativa à segunda. Na realidade, com este número de dados é praticamente impossível obter um semivariograma experimental sem grandes oscilações e que permita uma boa inferência da estrutura de correlação espacial. Mas esta inferência, sendo necessária, não se revelou suficiente para gerar, ou estimar, realizações que fossem razoavelmente representativas da realidade natural. Só estabelecendo uma correlação cruzada com o nível piezométrico será possível melhorar a estimação das grandezas hidrogeológicas de modo a que o nível

piezométrico esperado apresente um comportamento espacial e temporal mais próximo da realidade. O conhecimento do valor de $H$ em alguns pontos e a incorporação dessa informação no modelo de simulação permite atenuar desvios tão significativos como os que foram observados neste exercício. É neste ponto que entra a modelação inversa, tema para o próximo capítulo.

### 5.6.2 Aquífero não confinado

Considere-se agora um aquífero não confinado com a configuração e as dimensões definidas na Figura 5.195. Tal como no exercício da secção anterior, as fronteiras $\Gamma_2$, $\Gamma_4$ e $\Gamma_5$ são consideradas impermeáveis[91].

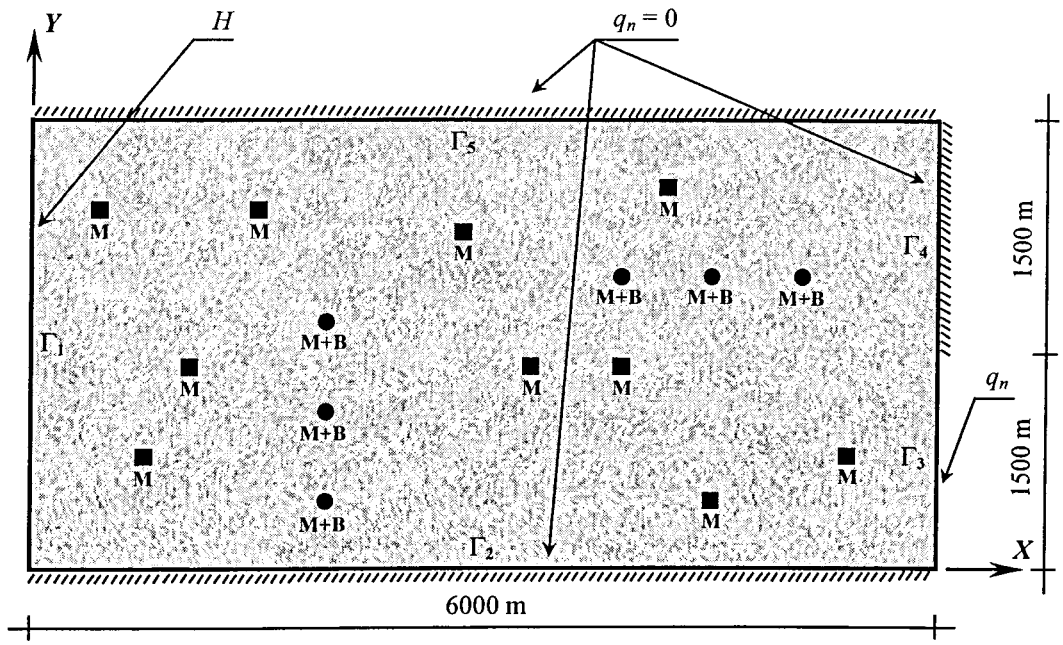



Figura 5.195 – Planta do aquífero não confinado. Definição das fronteiras de Dirichlet e de Neumann. Localização dos pontos de bombagem (M+B) e de medição de parâmetros hidrogeológicos (M).

Na fronteira $\Gamma_1$ é imposto o nível piezométrico, $H(t)$, e em $\Gamma_3$ o fluxo, $q_n(t)$. Estas condições fronteira estão definidas na Figura 5.196 e na Figura 5.197. As precipitações

[91] Configuração e dimensões iguais às do exercício da secção anterior.

mensais totais estão representadas na Figura 5.198.

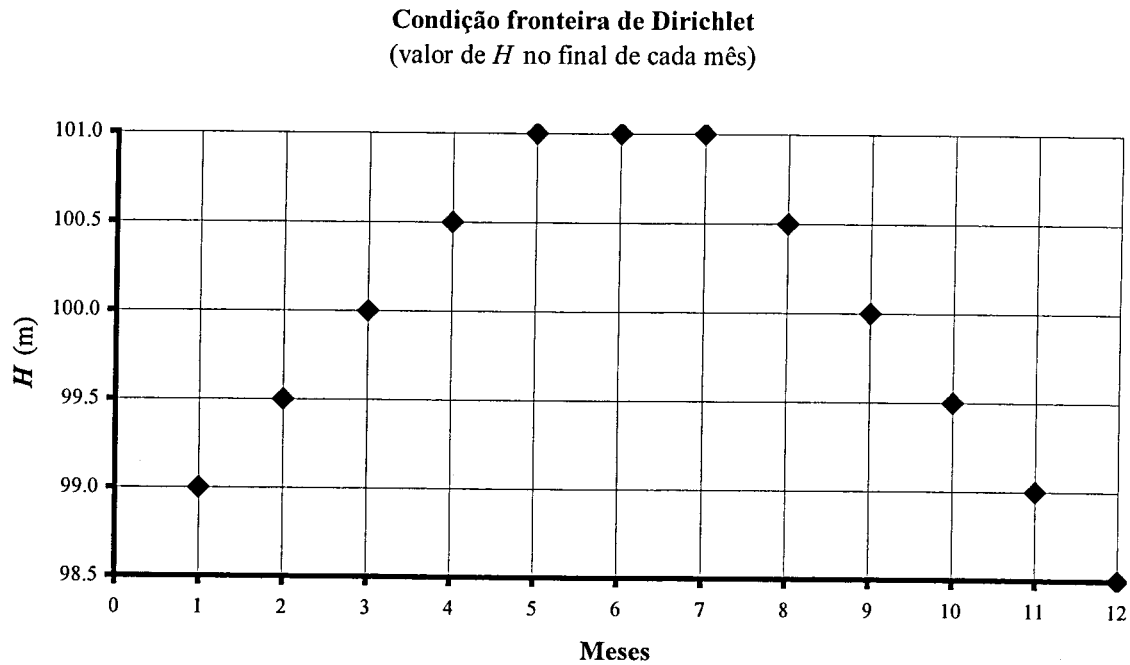



Figura 5.196 – Condição fronteira de Dirichlet em $\Gamma_1$.

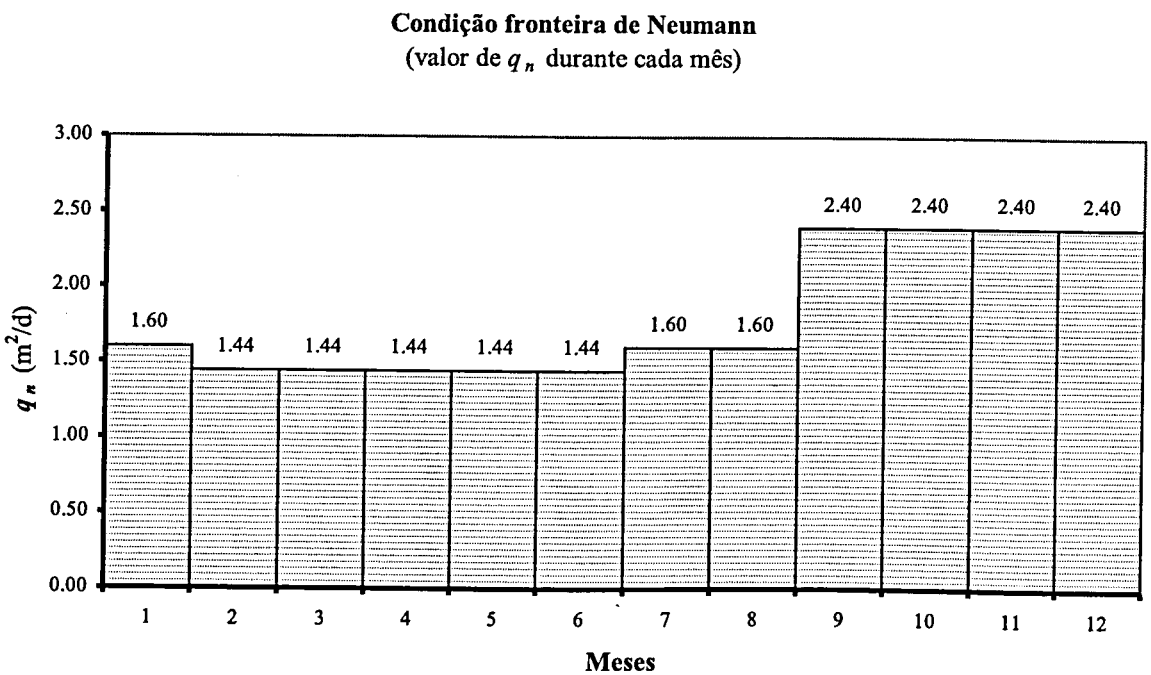



Figura 5.197 – Condição fronteira de Neumann em $\Gamma_3$.

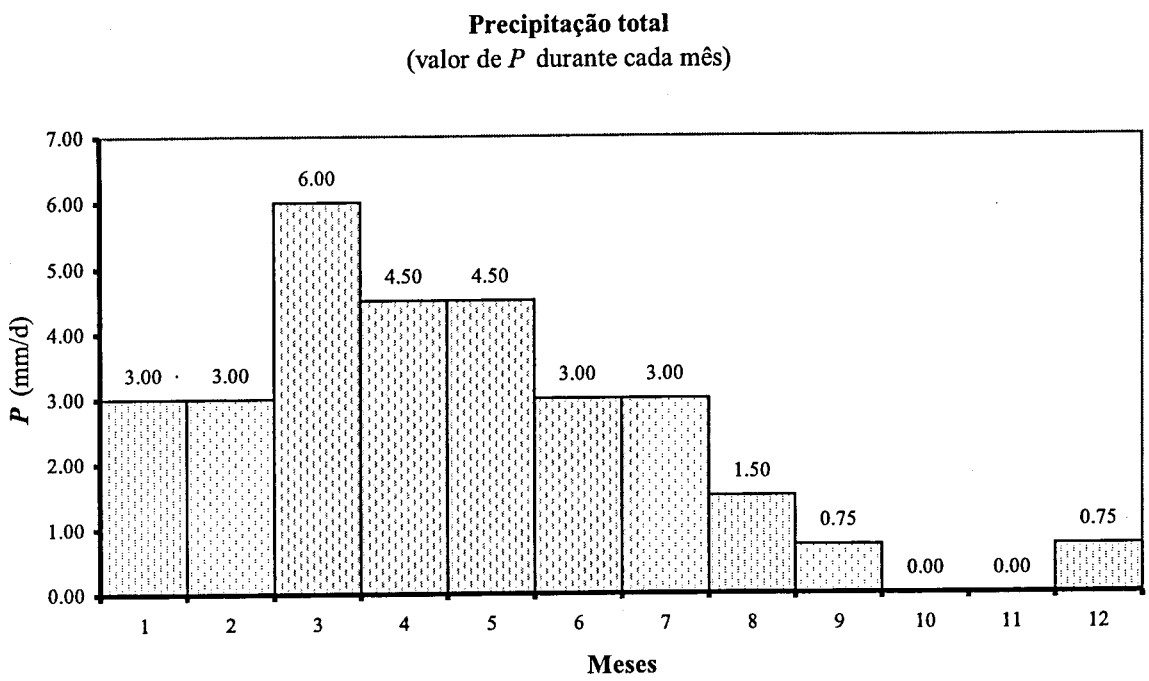



Figura 5.198 – Precipitação total.

Nos 6 pontos do aquífero assinalados com **M+B** localizam-se poços de bombagem, sendo extraído, em cada um deles, um caudal permanente de 3000 $m^3/d$. Com os programas **SASIM** e **SIMTOSIM** foram geradas as realizações "reais" das transformadas logarítmicas da conductividade hidráulica e da porosidade drenável para valores das médias geométricas de, aproximadamente, $K_G = 20\,\text{m/d}$ e $\omega_{d,G} = 0.25$. Os parâmetros estatísticos utilizados na geração destas realizações "reais" estão na Tabela 5.16 e na Tabela 5.17 e as respectivas imagens são exibidas na Figura 5.199 e na Figura 5.200.

| **AQNC10: $Y$=ln$K$** (semivariograma exponencial) | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $m_Y$ | $w_Y$ | $\sigma_Y^2$ | $w_Y + \sigma_Y^2$ | $l_Y$ (m) |
| 2.99573 | 0.27 | 0.63 | 0.90 | 1 000 |

Tabela 5.16 – Parâmetros estatísticos utilizados para gerar a realização "real" de $Y$=ln$K$.

| **AQNC10: $G$=ln($\omega_d$)** (semivariograma exponencial) | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $m_G$ | $w_G$ | $\sigma_G^2$ | $w_G + \sigma_G^2$ | $l_G$ (m) |
| -1.38629 | 0.15 | 0.15 | 0.30 | 500 |

Tabela 5.17 – Parâmetros estatísticos utilizados para gerar a realização "real" de $G$=ln($\omega_d$).

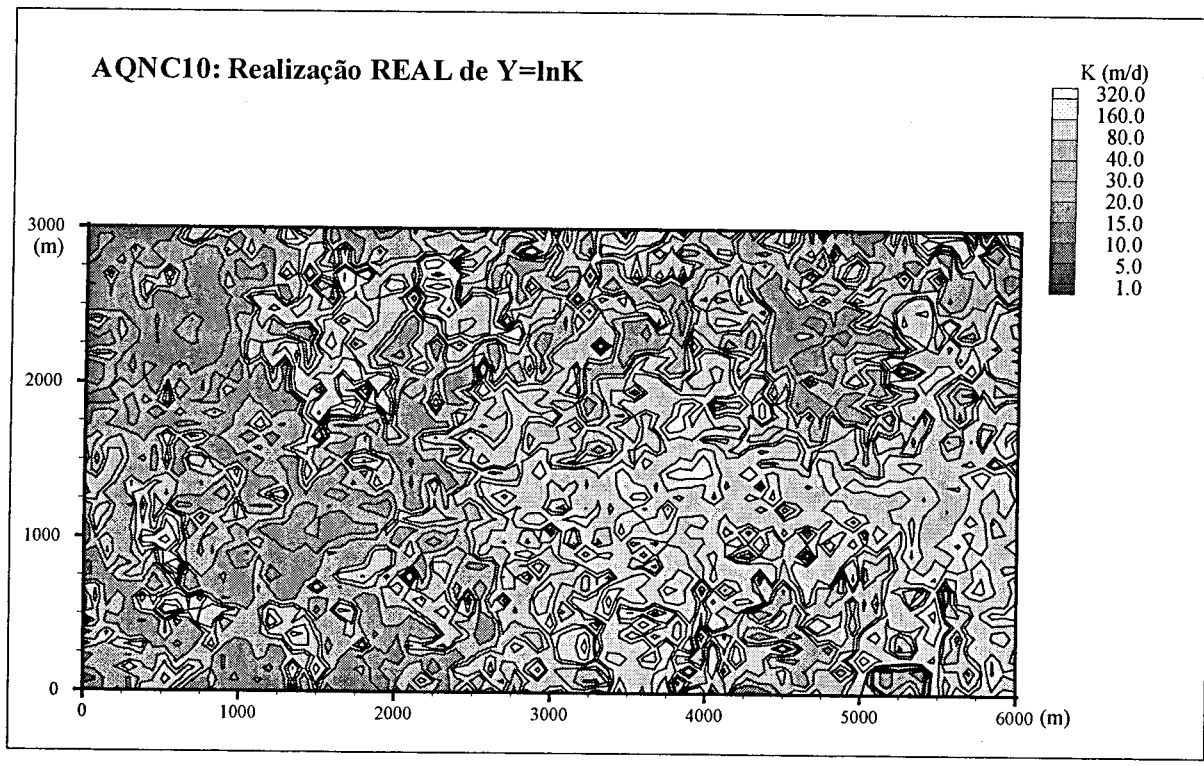



Figura 5.199 – Distribuição espacial da conductividade hidráulica "real".

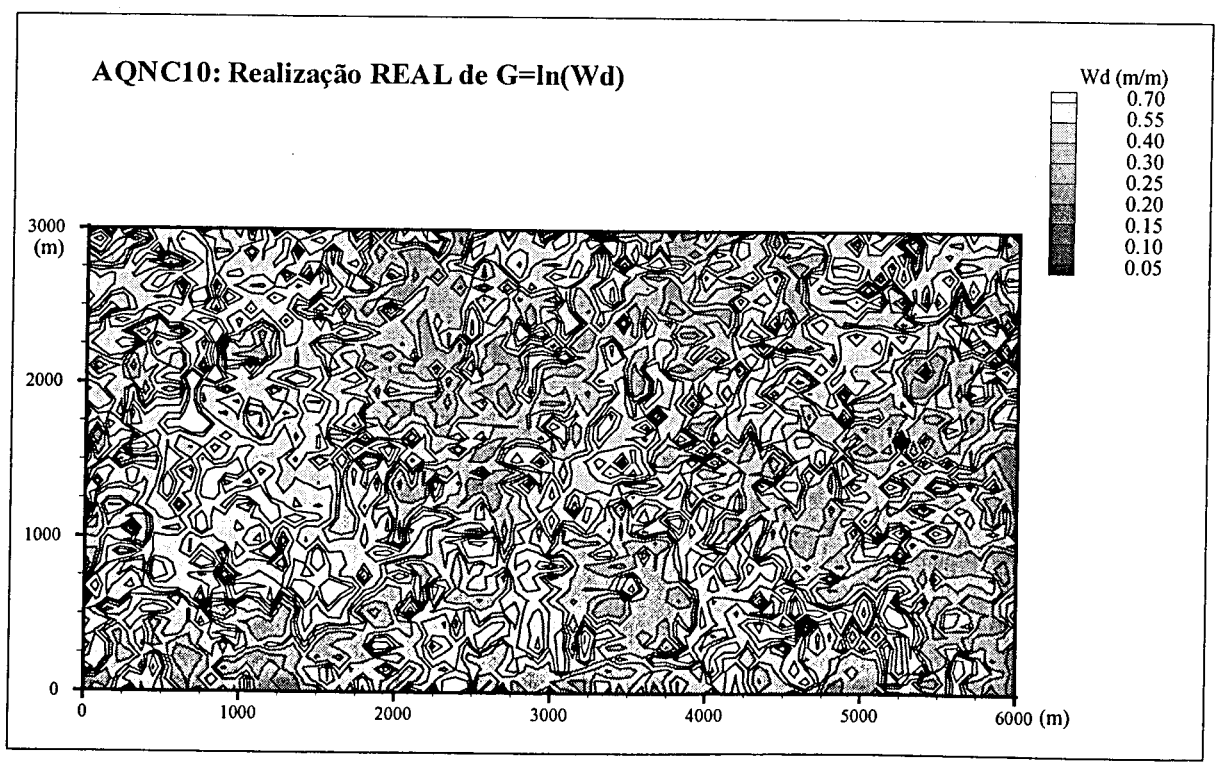



Figura 5.200 – Distribuição espacial da porosidade drenável "real".

Para verificar se o comportamento espacial das realizações geradas reproduzia a estrutura de correlação espacial correspondentes aos parâmetros estatísticos arbitrados (Tabela 5.16 e Tabela 5.17) procedeu-se ao cálculo dos histogramas e semivariogramas experimentais com os valores nos nós da malha de elementos finitos (800 elementos, 2521 nós), os quais são apresentados na Figura 5.201 e na Figura 5.202. É assim possível observar que as realizações "reais" das transformadas logarítmicas dos dois parâmetros hidrogeológicos apresentam o comportamento espacial pretendido.

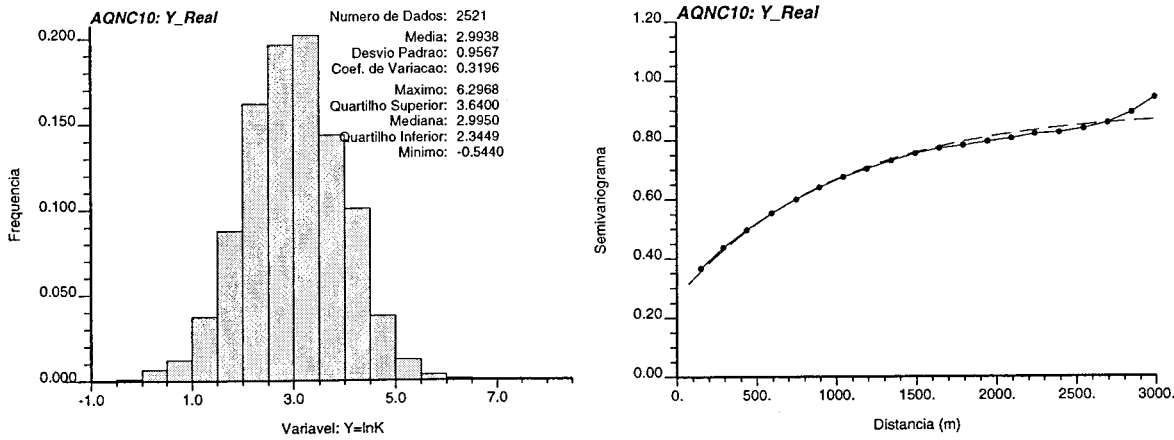



Figura 5.201 – AQNC10: Histograma e semivariograma experimentais da realização "real" de $Y=\ln K$. A tracejado o semivariograma teórico adoptado.

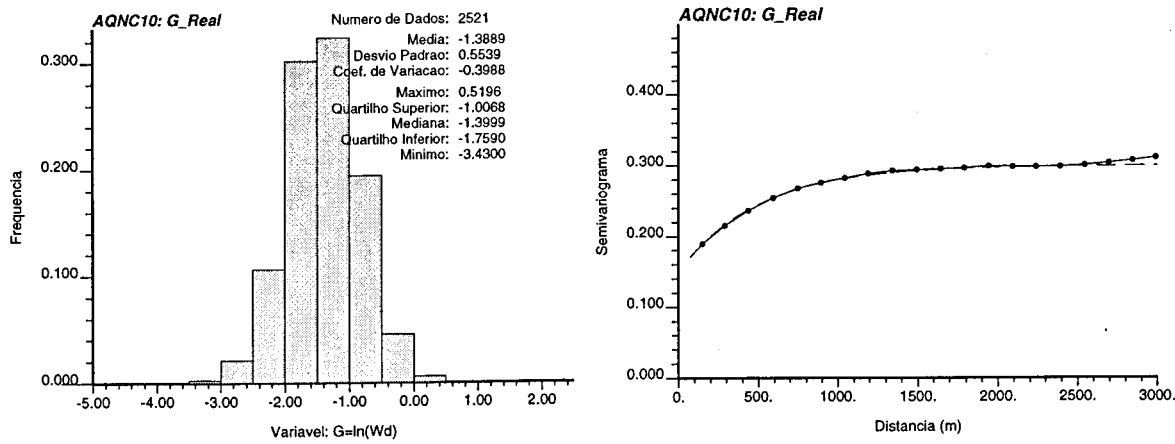



Figura 5.202 – AQNC10: Histograma e semivariograma experimentais da realização "real" de $G=\ln(\omega_{ij})$. A tracejado o semivariograma teórico adoptado.

Tal como no exercício da secção anterior, o aquífero foi discretizado por uma malha de 800 elementos finitos de 150×150 $m^2$ que permite ter nós a uma distância de 75 metros,

valor que é substancialmente inferior ao da distância integral de $G = \ln \omega_d$. Em 16 nós do aquífero são lidos os valores "reais" de $K$ e $\omega_d$, os quais constituem as amostras que vão condicionar as simulações do escoamento. Seis valores de cada uma das amostras são "medidos" nos pontos de bombagem, assinalados na Figura 5.195 por **M+B**, e os restantes valores das amostras são "medidos" nos mesmos 10 nós da malha escolhidos para o exercício da secção anterior e assinalados na Figura 5.195 por **M**.

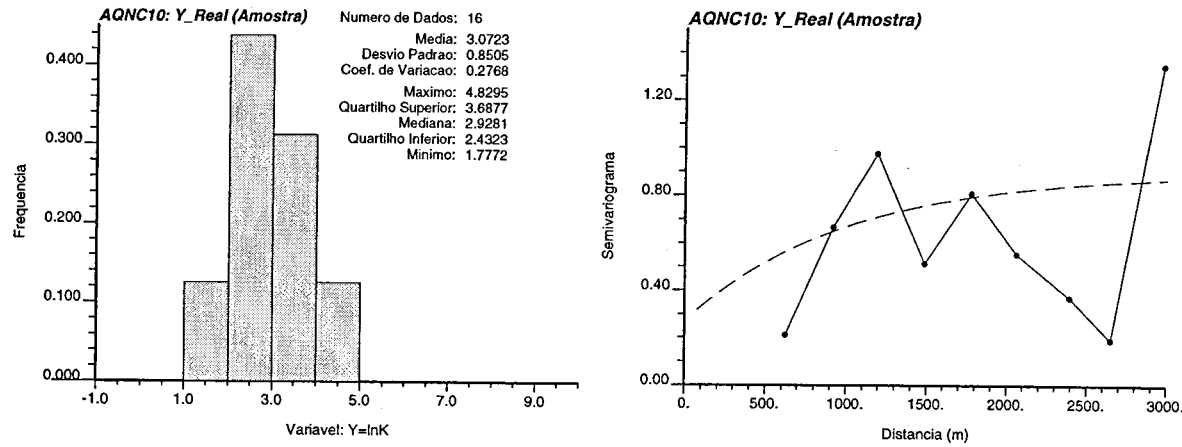



Figura 5.203 – AQNC10: Histograma e semivariograma experimentais da amostra de $Y$=ln$K$. A tracejado é representado o semivariograma teórico da realização "real".

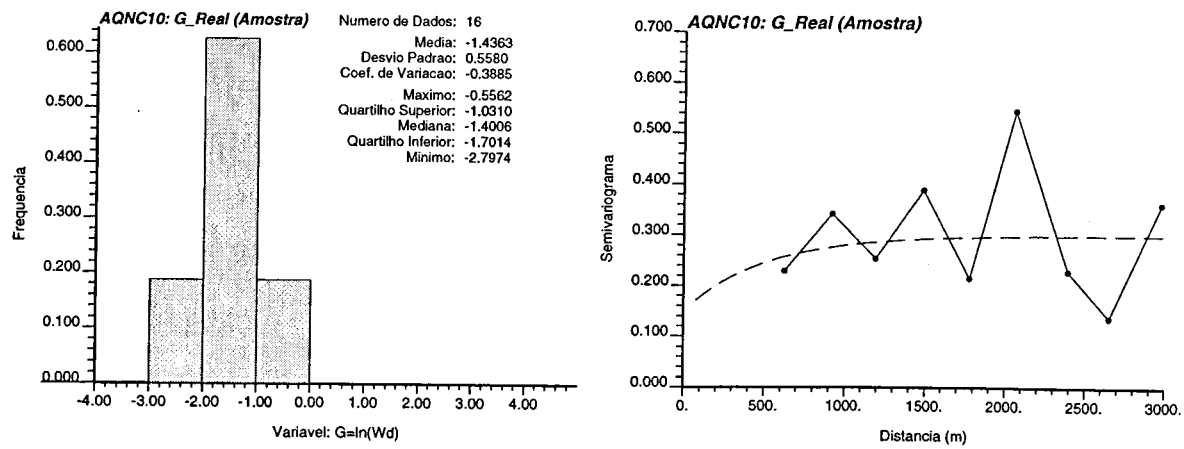



Figura 5.204 – AQNC10: Histograma e semivariograma experimentais da amostra de $G$=ln($\omega_d$). A tracejado é representado o semivariograma teórico da realização "real".

Tal como já se referiu no exercício anterior, inferir os semivariogramas a partir das amostras é praticamente impossível devido às oscilações apresentadas pelos semivariogramas experimentais. Repetindo os procedimentos da secção anterior, adoptou-se uma variância total igual à encontrada na amostra e um efeito pepita que é cerca de um terço da variância total, no

caso da *f.a.* $Y = \ln K$, e metade, no caso da *f.a.* $G = \ln \omega_d$. Para as distâncias integrais de $Y$ e $G$ também se adoptaram os valores usados na geração das respectivas realizações "reais". Um resumo dos valores estimados para os parâmetros estatísticos das duas *f.a.*'s é apresentado na Tabela 5.18 e na Tabela 5.19.

| **AQNC20 e AQNC30: $Y$=ln$K$** (semivariograma exponencial) | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $m_Y$ | $w_Y$ | $\sigma_Y^2$ | $w_Y + \sigma_Y^2$ | $l_Y$ (m) |
| 3.0723 | 0.24 | 0.4834 | 0.7234 | 1 000 |

Tabela 5.18 – Parâmetros estatísticos da *f.a.* $Y$=ln$K$, estimados a partir da amostra de $K$(m/d).

| **AQNC20 e AQNC30: $G$=ln($\omega_d$)** (semivariograma exponencial) | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $m_G$ | $w_G$ | $\sigma_G^2$ | $w_G + \sigma_G^2$ | $l_G$ (m) |
| -1.4363 | 0.1557 | 0.1557 | 0.3114 | 500 |

Tabela 5.19 – Parâmetros estatísticos da *f.a.* $G$=ln($\omega_d$), estimados a partir da amostra de $\omega_d$.

Neste exercício, o aquífero é recarregado superficialmente pela precipitação infiltrada. Esta é definida como uma percentagem (40%) da precipitação total (Figura 5.198). Num problema concreto teria que ser estimada tendo em conta vários fenómenos de difícil avaliação (evapotranspiração, escorrência superficial, etc.)[92].

Admitindo a condição inicial $H = 98.5$ m para todo o domínio, foram simulados dois períodos consecutivos de um ano. A análise comparativa entre a simulação "real" e as realizadas pelos métodos estocásticos é efectuada no segundo período de um ano, tomando como condição inicial, para todas as simulações, a piezometria no final do primeiro ano de simulação "real". À simulação "real" foi atribuída a designação de AQNC10. Esta simulação, tal como as correspondentes às simulações de Monte-Carlo e ao método das perturbações, é efectuada com os programas **GCFH2, GCFS** e **FLWM2**. Nas páginas seguintes são exibidas as distribuições piezométricas da simulação "real" correspondentes ao instante inicial e aos instantes finais de cada "mês"[93] do segundo ano. Estes níveis piezométricos, assim como o

---

[92] Assinale-se, em antecipação, que a estimação desta percentagem é um dos objectivos da modelação inversa a apresentar no próximo capítulo.

[93] Admitiu-se para cada "mês" uma duração de 30.5 dias, a que corresponde um ano com 366 dias.

fluxo instantâneo na fronteira $\Gamma_1$ e o caudal de balanço global nos mesmos instantes, servem como valores de referência para a análise comparativa do desempenho das simulações estocásticas efectuadas pelo *msM-C* condicionadas (exercício AQNC20) e pelo método das perturbações (exercício AQNC30).

Este problema, concebido para um aquífero não confinado, é semelhante ao da secção anterior. Distingue-se deste pela recarga superficial e, naturalmente, pela definição das propriedades hidrogeológicas. Mas os semivariogramas das respectivas transformadas logarítmicas foram caracterizados pelos mesmos parâmetros (efeito pepita, variância e distância integral).

A cota de fundo do aquífero foi fixada em $Z_{\text{fundo}} = 50.0\,\text{m}$. Num problema concreto teria que ser estimada a partir dos dados geológicos recolhidos, por exemplo, durante o processo de execução dos furos destinados à medição dos parâmetros hidrogeológicos.

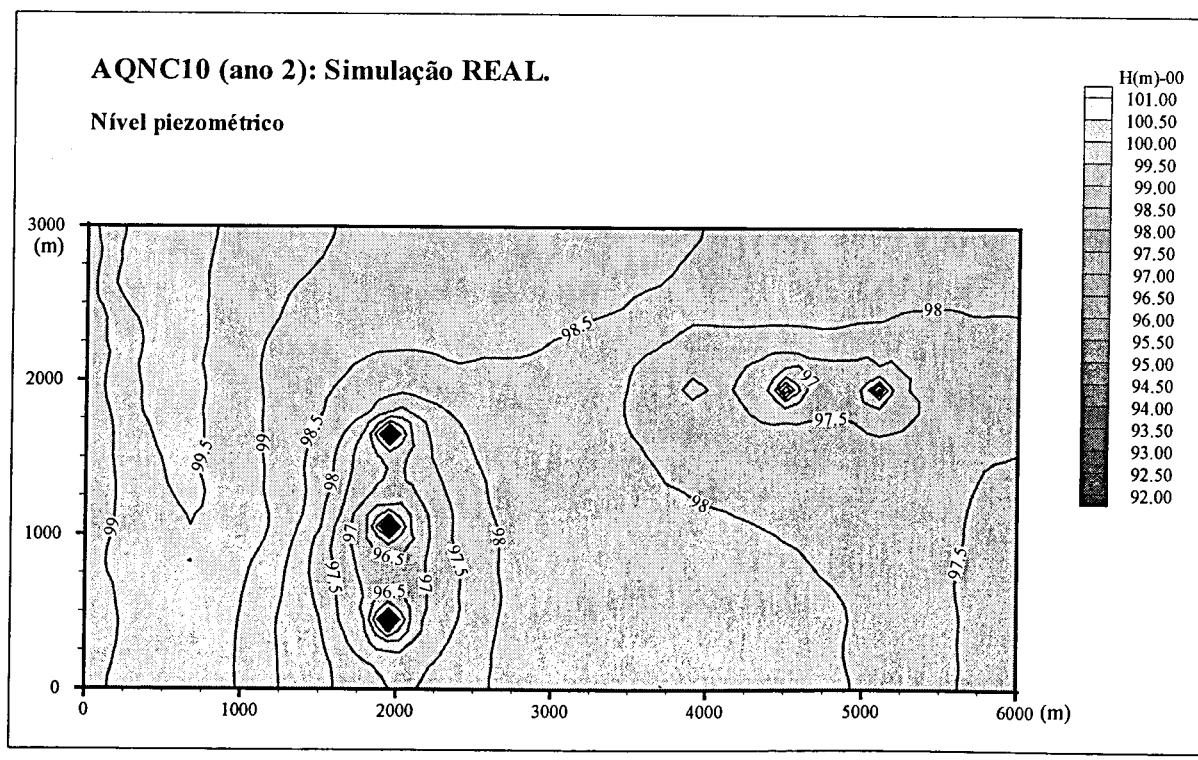



Figura 5.205 – AQNC10: Simulação "real". Distribuição inicial do nível piezométrico.

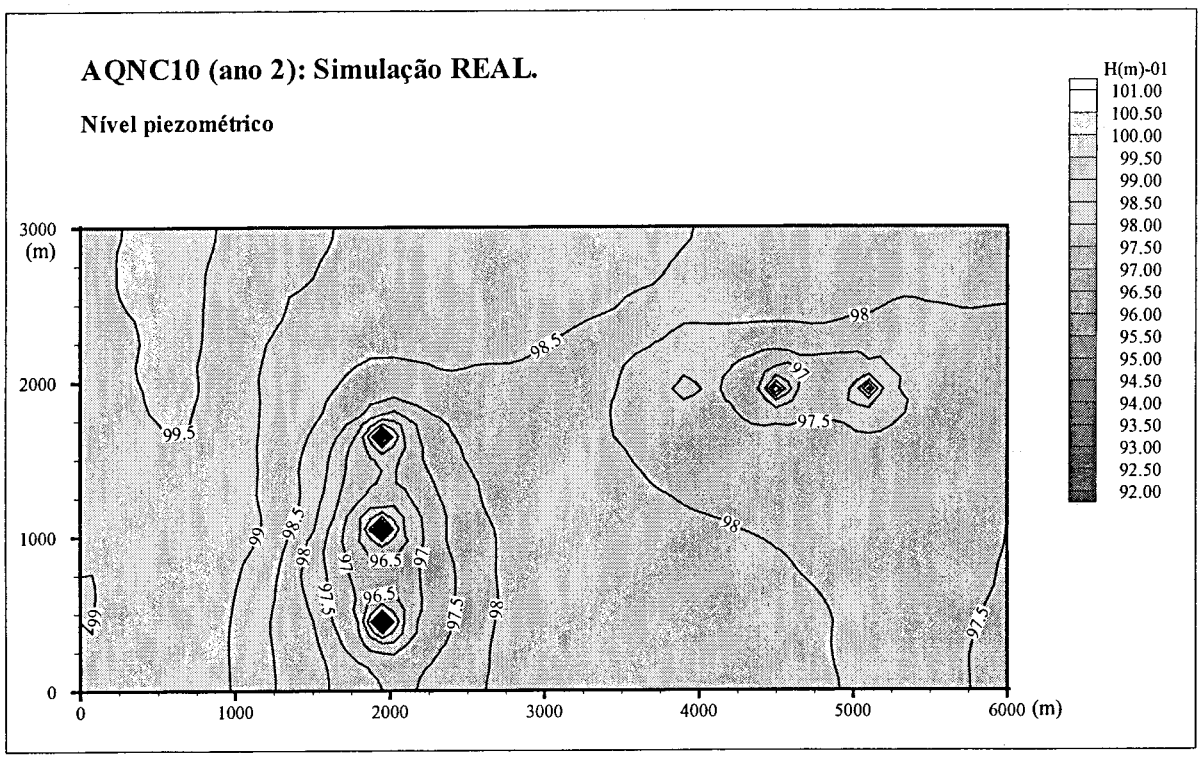



Figura 5.206 – AQNC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 01.

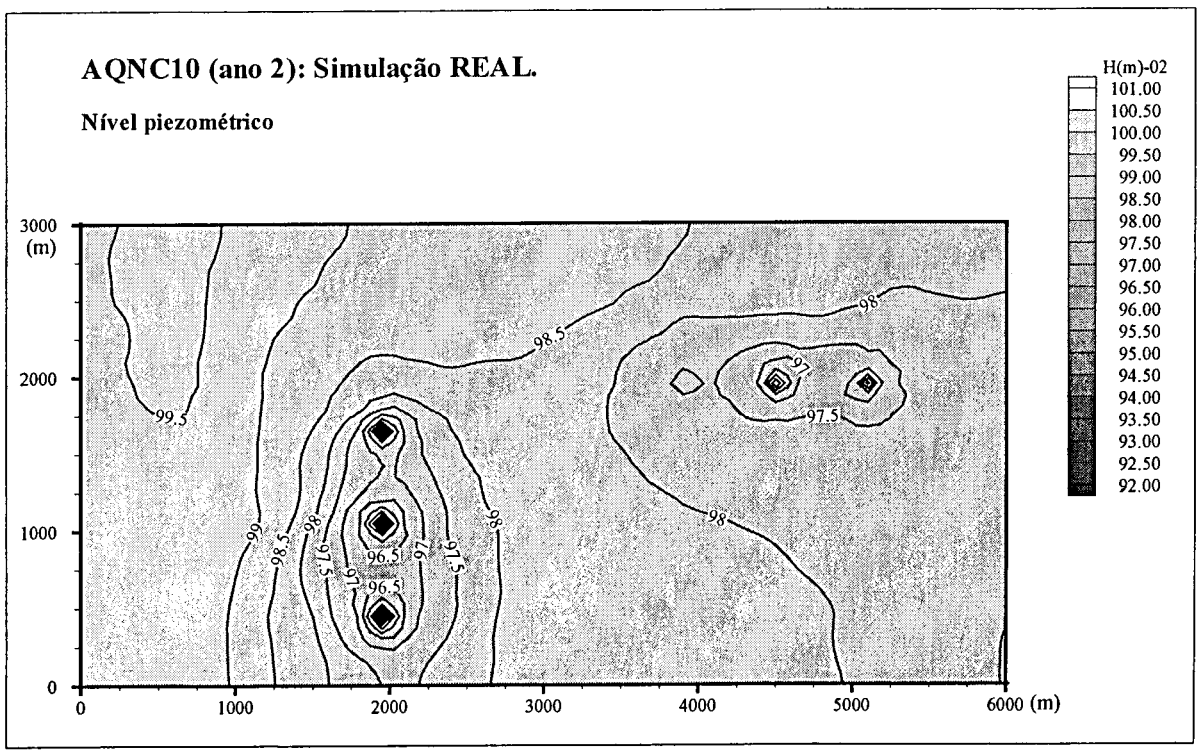



Figura 5.207 – AQNC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 02.

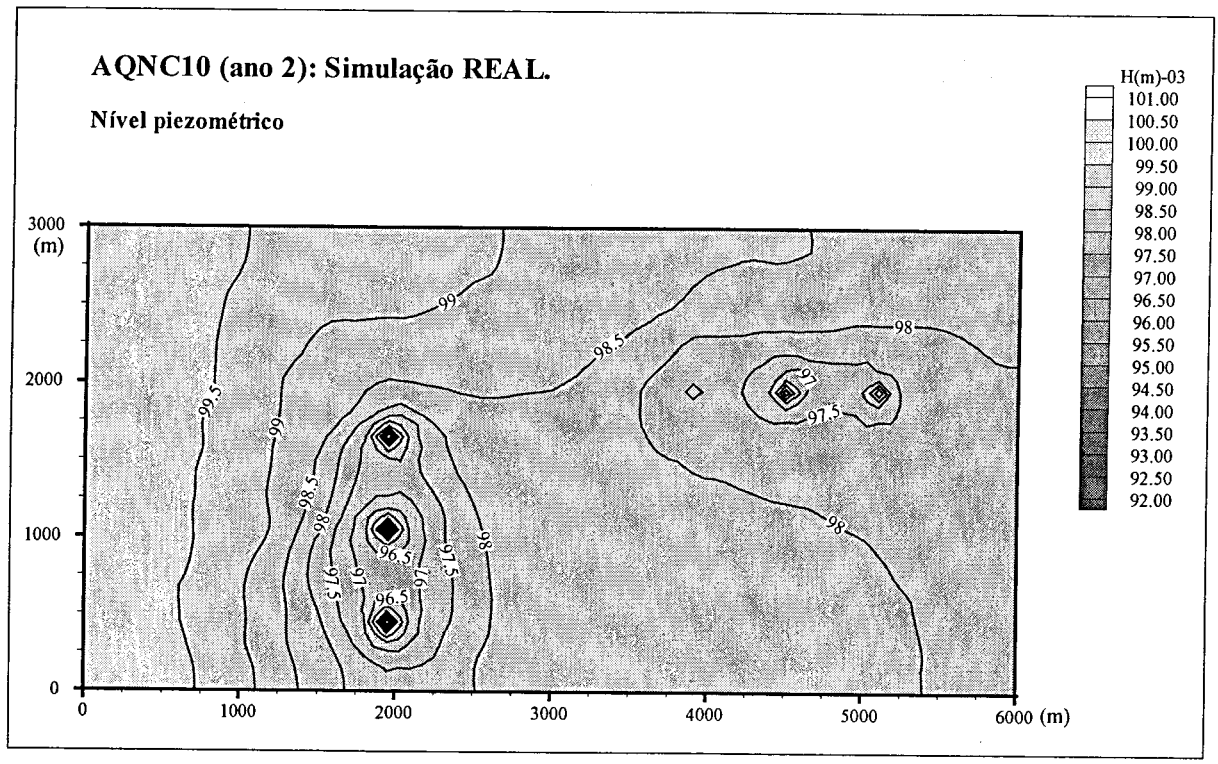



Figura 5.208 – AQNC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 03.

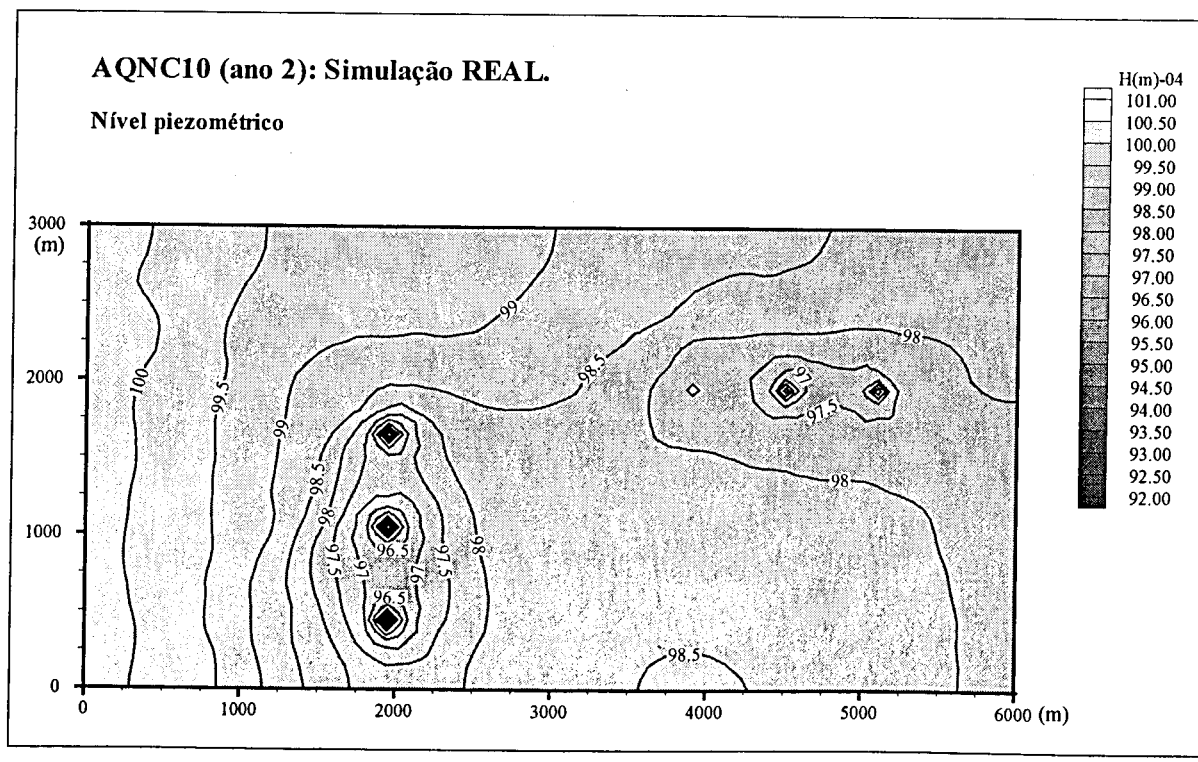



Figura 5.209 – AQNC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 04.

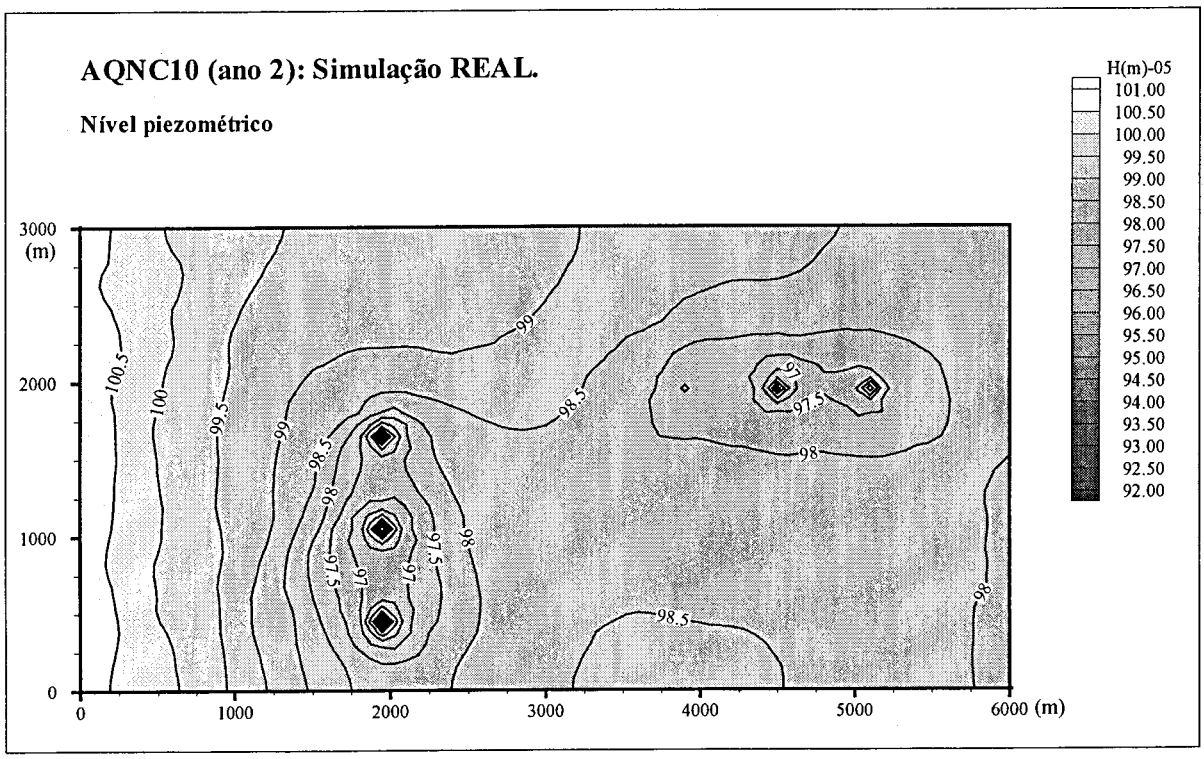



Figura 5.210 – AQNC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 05.

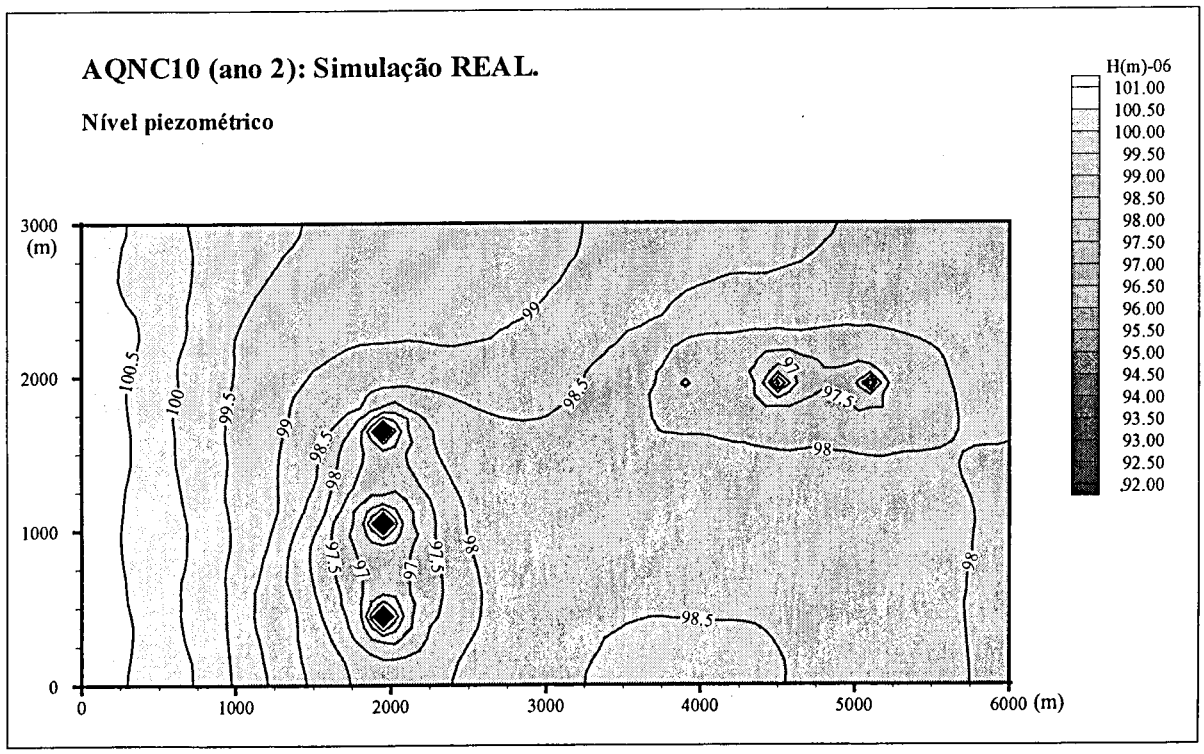



Figura 5.211 – AQNC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 06.

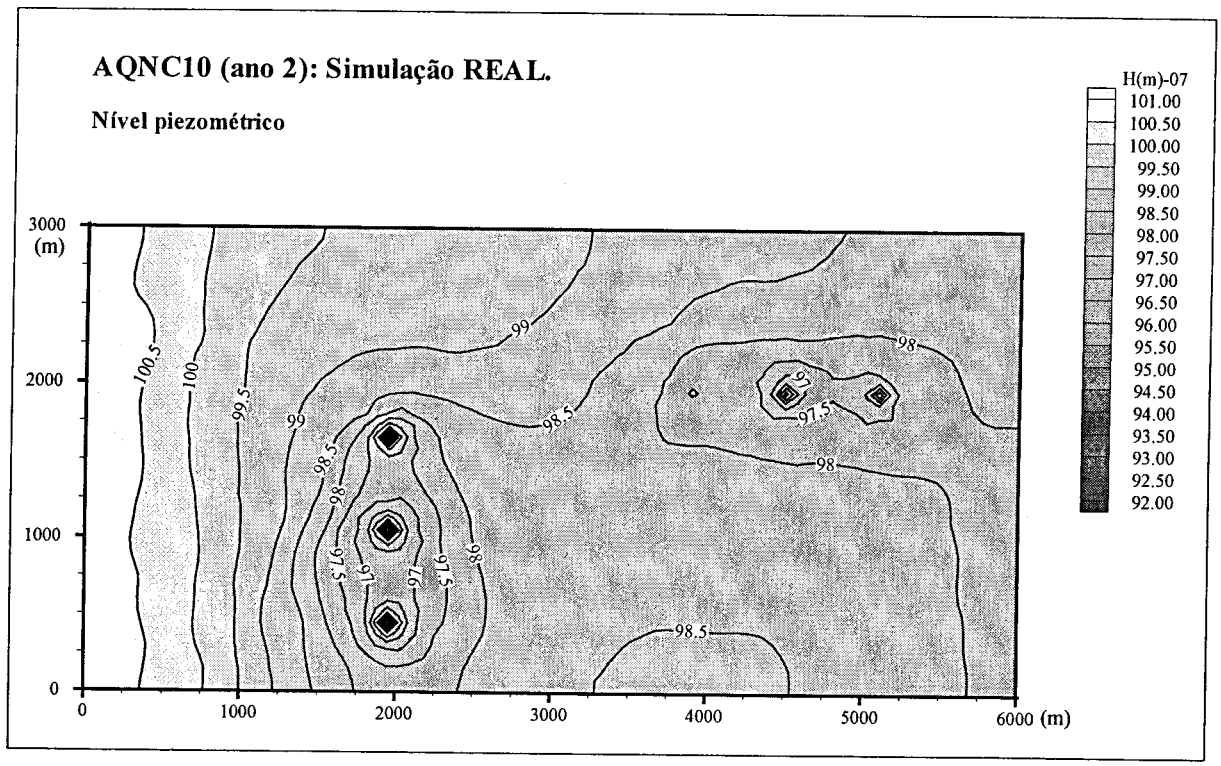



Figura 5.212 –AQNC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 07.

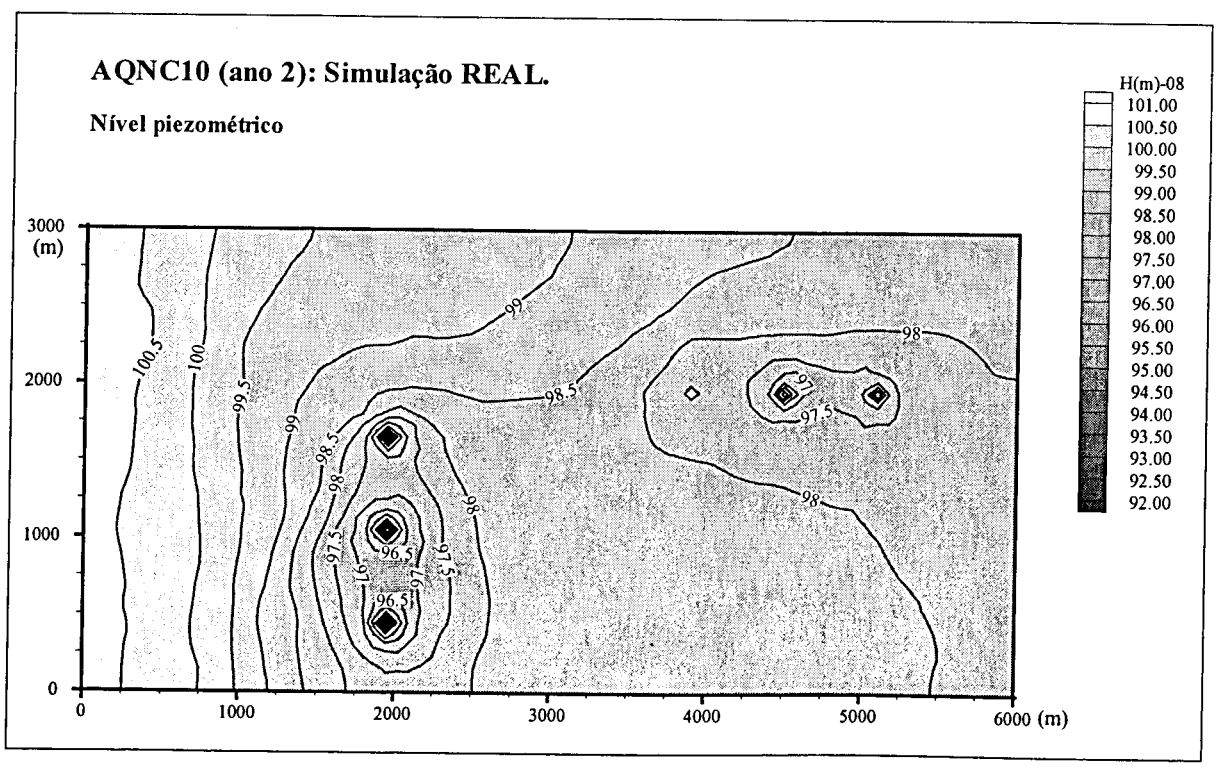



Figura 5.213 – AQNC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 08.

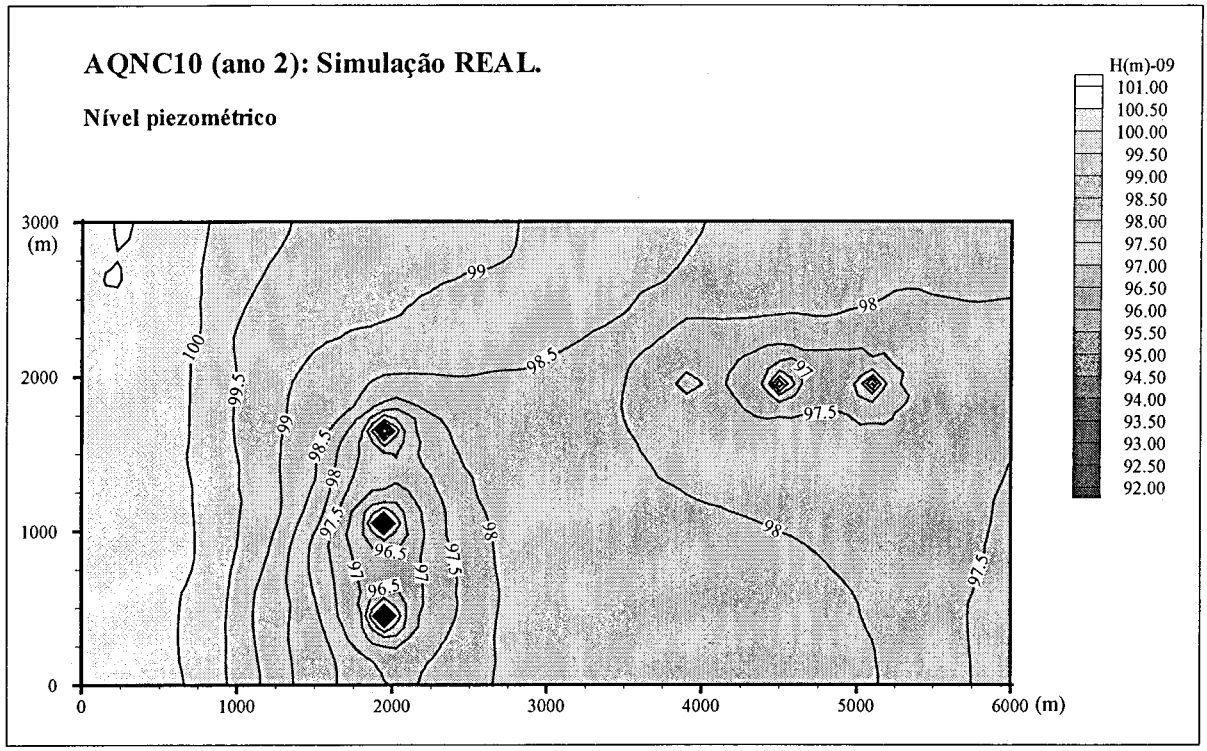



Figura 5.214 – AQNC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 09.

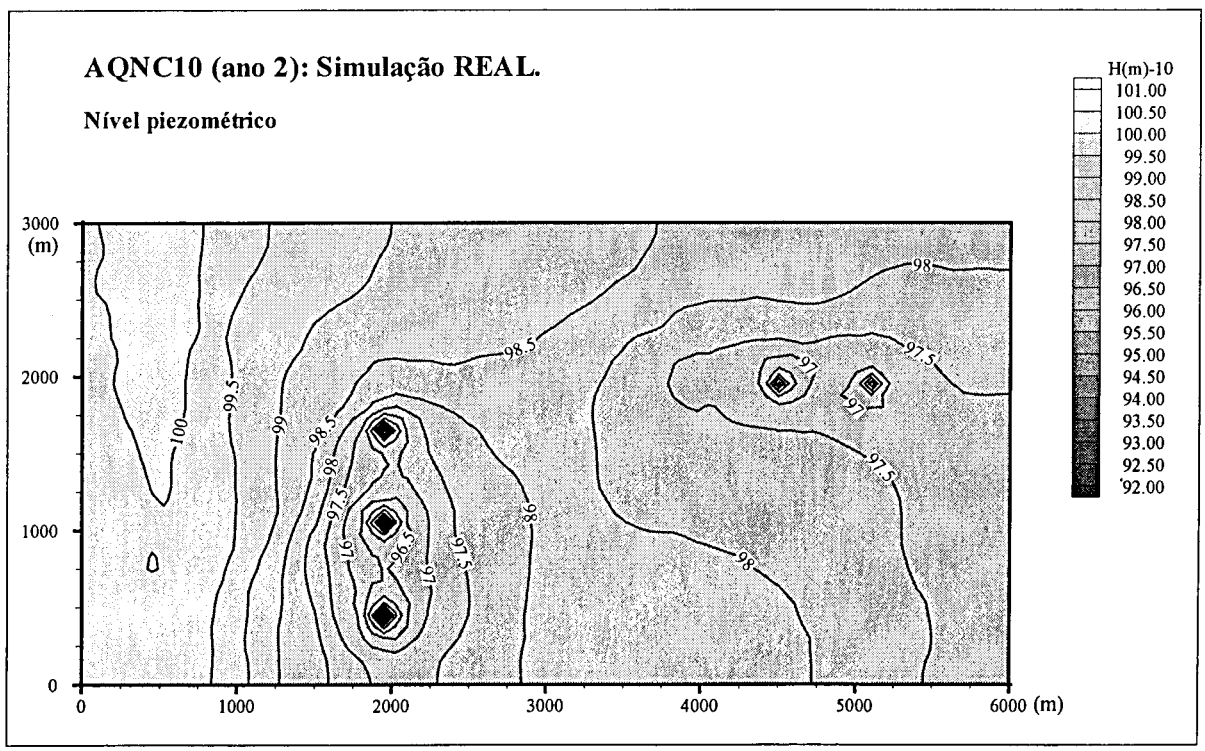



Figura 5.215 – AQNC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 10.

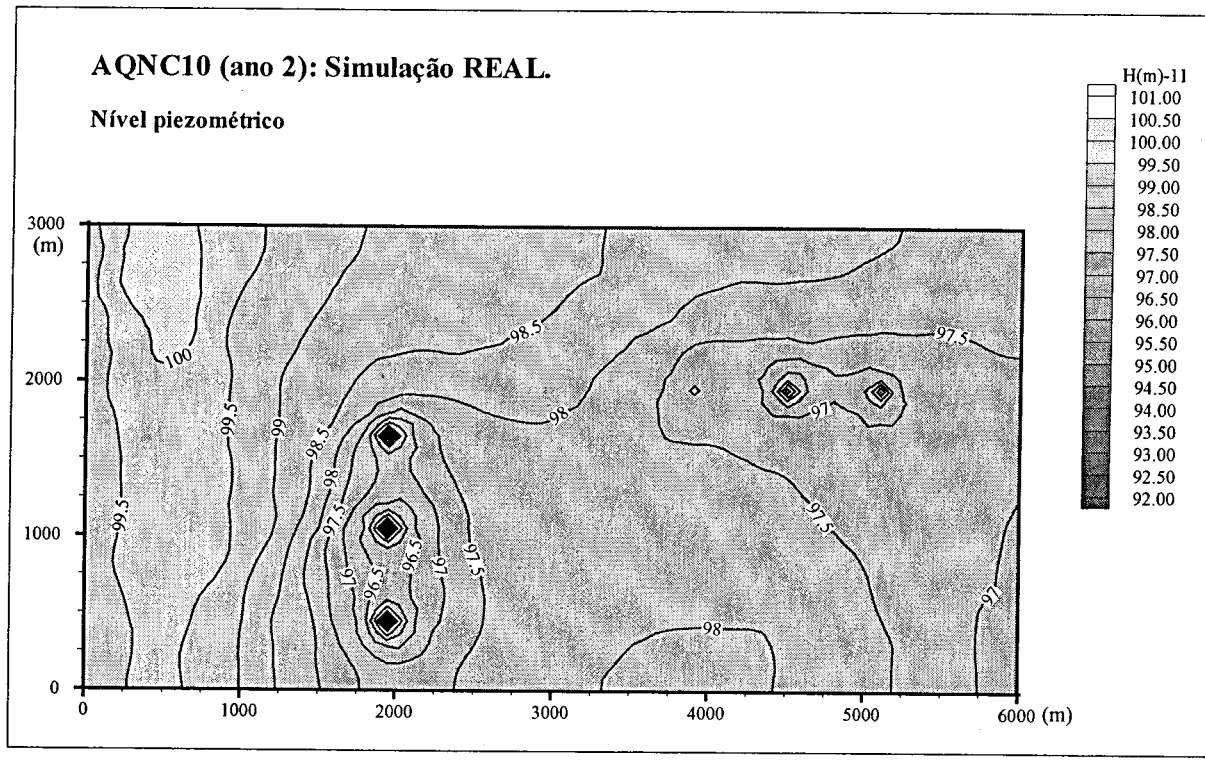



Figura 5.216 – AQNC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 11.

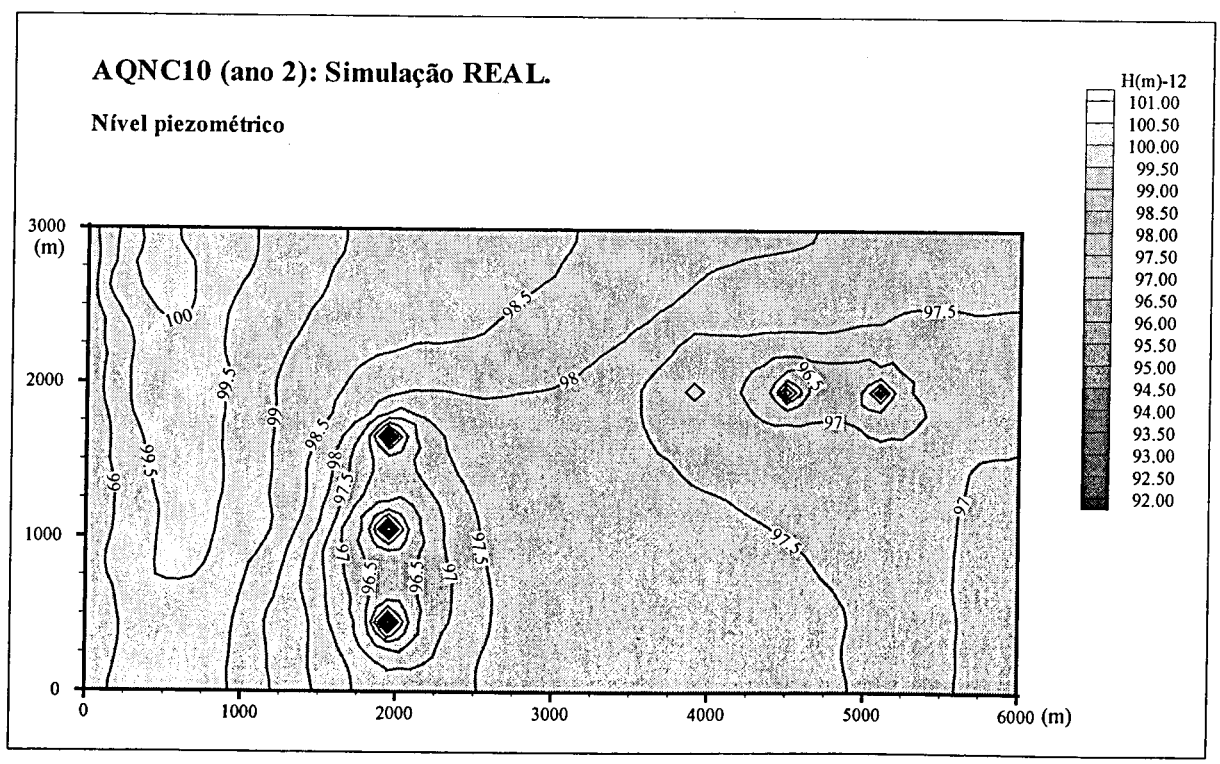



Figura 5.217 – AQNC10: Simulação "real". Piezometria no final do mês 12.

Com base nas amostras de valores de $K$ (fig) e $\omega_d$ (fig) e com o programa **SGSIM** foram geradas 1000 realizações de cada um destes parâmetros hidrogeológicos nos nós da malha de elementos finitos (800 elementos, 2521 nós). Para a simulação estocástica do escoamento pelo *msM-C* condicionadas (exercício AQNC20), o programa **FLWM2** executa 1000 simulações, uma por cada par de realizações de $K$ e $\omega_d$. Deste modo, a variância associada aos níveis piezométricos estimados reflecte a variabilidade conjunta dos dois parâmetros hidrogeológicos.

```
AQNC10 - Real K(m/d) Amostra (16 valores)
5
Número do nó
X(m)
Y(m)
Y=lnK
Valor da variável: K(m/d)
 219       450      2400     1.777235252      5.9134845
 321       750       750     2.392550414     10.9413634
 453      1050      1350     2.157875583      8.6527361
 653      1500      2400     3.638813154     38.0466544
 813      1950       450     2.544731203     12.7398032
 821      1950      1050     2.958613985     19.271243
 829      1950      1650     2.897496825     18.1287092
1209      2850      2250     2.472125147      11.847598
1383      3300      1350     3.874618043     48.1642981
1631      3900      1350     4.442094188     84.9526624
1639      3900      1950     3.405927577      30.142242
1771      4200      2550     3.736562944     41.9535454
1867      4500       450     2.812554326     16.6523996
1887      4500      1950     3.291697812     26.8884765
2135      5100      1950     1.923859949      6.8473379
2243      5400       750      4.82951484    125.1502281
```

Figura 5.218 – AQNC10: Ficheiro com a amostra de valores da conductividade hidráulica, $K$ (m/d), lidos em 16 pontos do aquífero.

```
AQNC10 - Real Wd(m/m) Amostra (16 valores)
5
Número do nó
X(m)
Y(m)
G=ln(Wd)
Valor da variável: Wd(m/m)
 219       450      2400    -1.64216722      0.1935601
 321       750       750    -1.264677617     0.2823303
 453      1050      1350     -1.01457661     0.3625559
 653      1500      2400    -0.556184631     0.5733926
 813      1950       450    -2.202121849     0.1105683
 821      1950      1050    -0.844888399     0.4296053
 829      1950      1650    -1.529784665     0.2165823
1209      2850      2250      -2.0814211     0.1247528
1383      3300      1350     -1.04736144     0.3508623
1631      3900      1350    -1.439639865     0.2370131
1639      3900      1950    -1.760584692     0.1719443
1771      4200      2550    -0.772630745     0.4617966
1867      4500       450    -1.413813976     0.2432139
1887      4500      1950     -1.22612946     0.2934261
2135      5100      1950    -1.387336104     0.2497397
2243      5400       750    -2.797417624     0.0609673
```

Figura 5.219 – AQNC10: Ficheiro com a amostra de valores da porosidade drenável, $\omega_d$, lidos em 16 pontos do aquífero.

Nas páginas seguintes, da Figura 5.220 à Figura 5.231, são apresentados os níveis piezométricos do exercício AQNC20, estimados pelo *msM-C* condicionadas. Para uma melhor percepção da aproximação, ou afastamento, dos valores estimados aos "reais" subtraíram-se aos campos piezométricos estimados (AQNC20) os correspondentes campos "reais" (AQNC10) e as respectivas imagens são exibidas da Figura 5.232 à Figura 5.243. A variância do nível piezométrico, calculada pelo *msM-C* condicionadas (AQNC20), é representada da Figura 5.244 à Figura 5.255. A título exemplificativo são apresentadas as imagens de 3 realizações das transformadas logarítmicas de cada uma das propriedades hidrogeológicas e os respectivos histogramas e semivariogramas experimentais. A estes últimos são sobrepostos os semivariogramas teóricos usados na geração das realizações "reais" das transformadas logarítmicas de $K$ e $\omega_d$.

Da Figura 5.268 à Figura 5.279 são apresentados os níveis piezométricos do exercício AQNC30, estimados pelo método das perturbações. As imagens das diferenças entre os valores estimados (AQNC30) e os "reais" (AQNC10) são exibidas da Figura 5.280 à Figura 5.291. A variância do nível piezométrico, calculada pelo método das perturbações (AQNC30), é representada da Figura 5.292 à Figura 5.303. A seguir, da Figura 5.304 à Figura 5.307, são apresentadas as distribuições estimadas, com o programa **SKSIM**, de $K$ e de $\omega_d$ e ainda as respectivas variâncias dos erros de estimação, equivalentes às variâncias condicionadas, quantificadas com o auxílio do programa **COVCD** que também calcula as matrizes de covariância condicionada de $Y$ e $G$.

Com a finalidade de comparar o valor "real" com os valores estimados do caudal total que atravessa a fronteira permeável $\Gamma_1$, onde o valor de $H$ é imposto, organizou-se a Tabela 5.20 com o caudal calculado no instante final de cada mês. Para avaliar o comportamento global do aquífero, em termos de ganho e perda de água armazenada, calcularam-se os caudais de balanço global para os exercícios AQNC10, AQNC20 e AQNC30, os quais são registados e comparados na Tabela 5.21.

Após a apresentação das imagens e resultados acima referidos é feita a correspondente análise crítica.

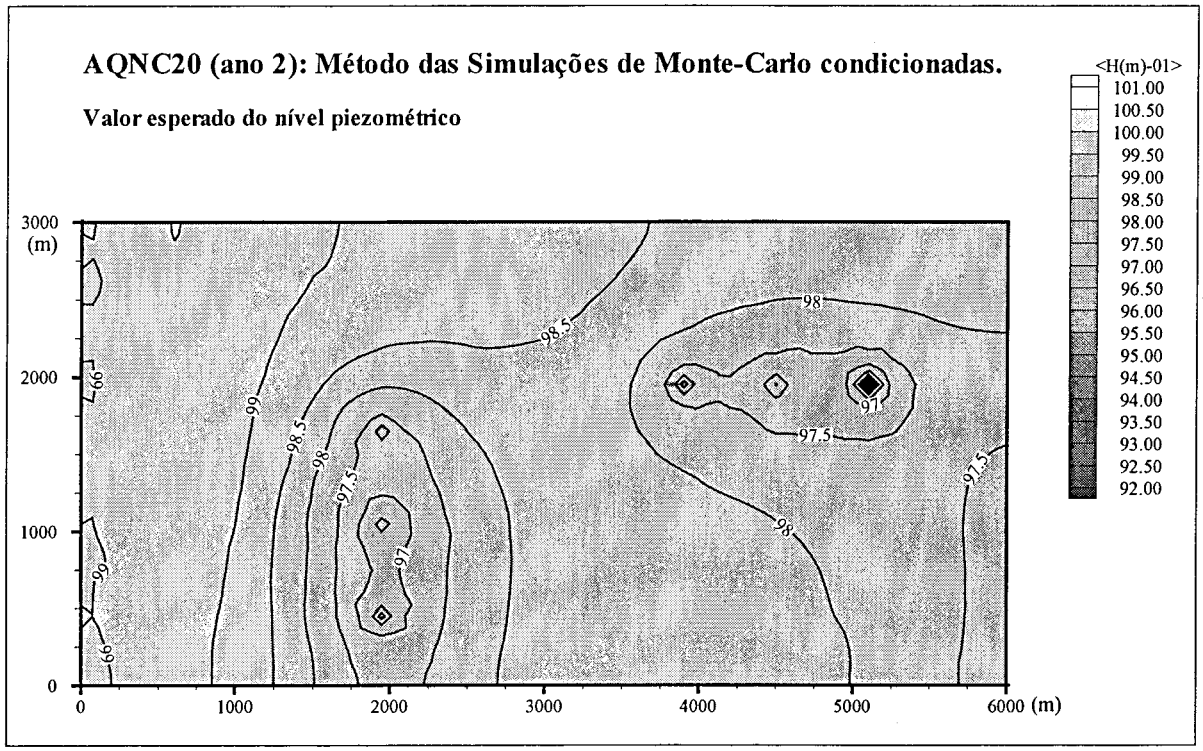



Figura 5.220 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 01.

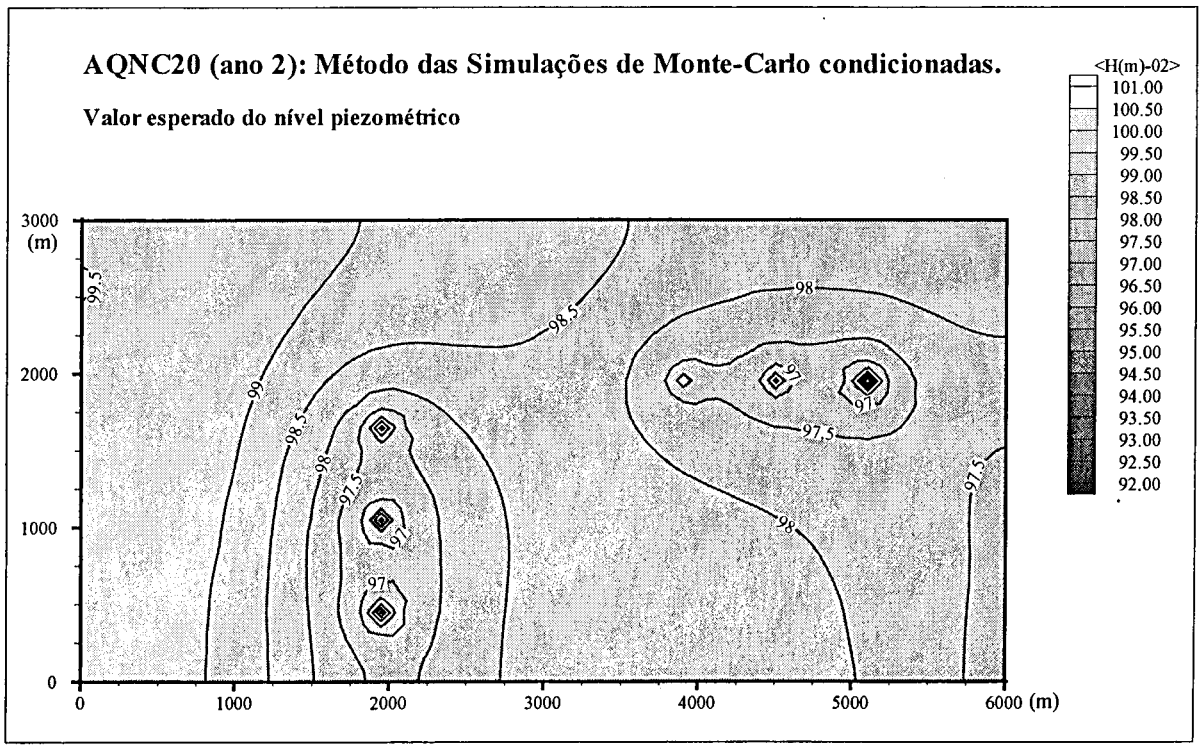



Figura 5.221 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 02.

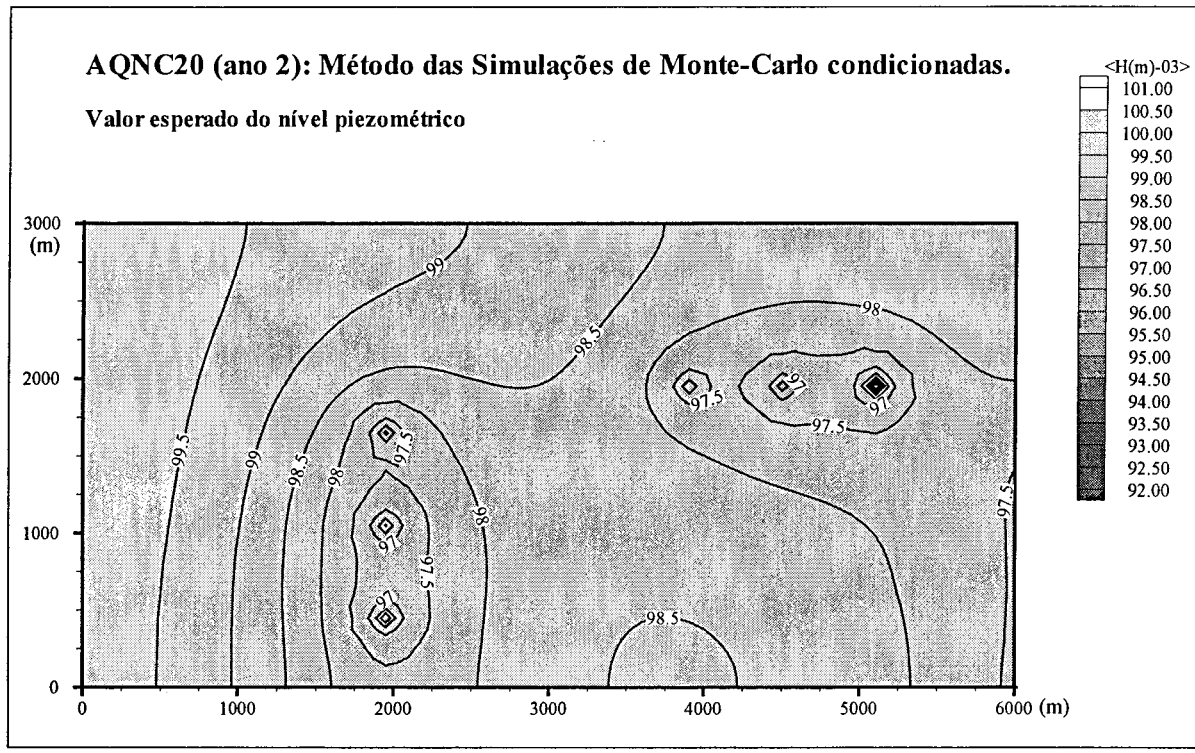



Figura 5.222 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 03.

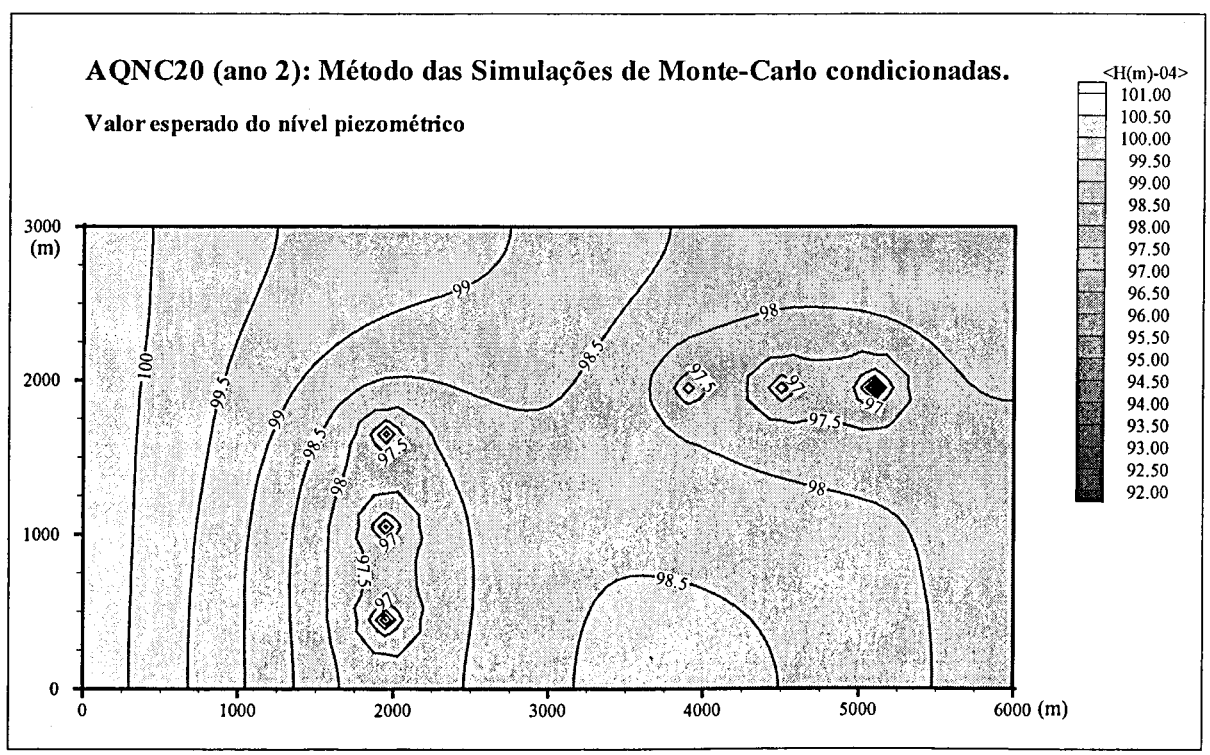



Figura 5.223 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 04.

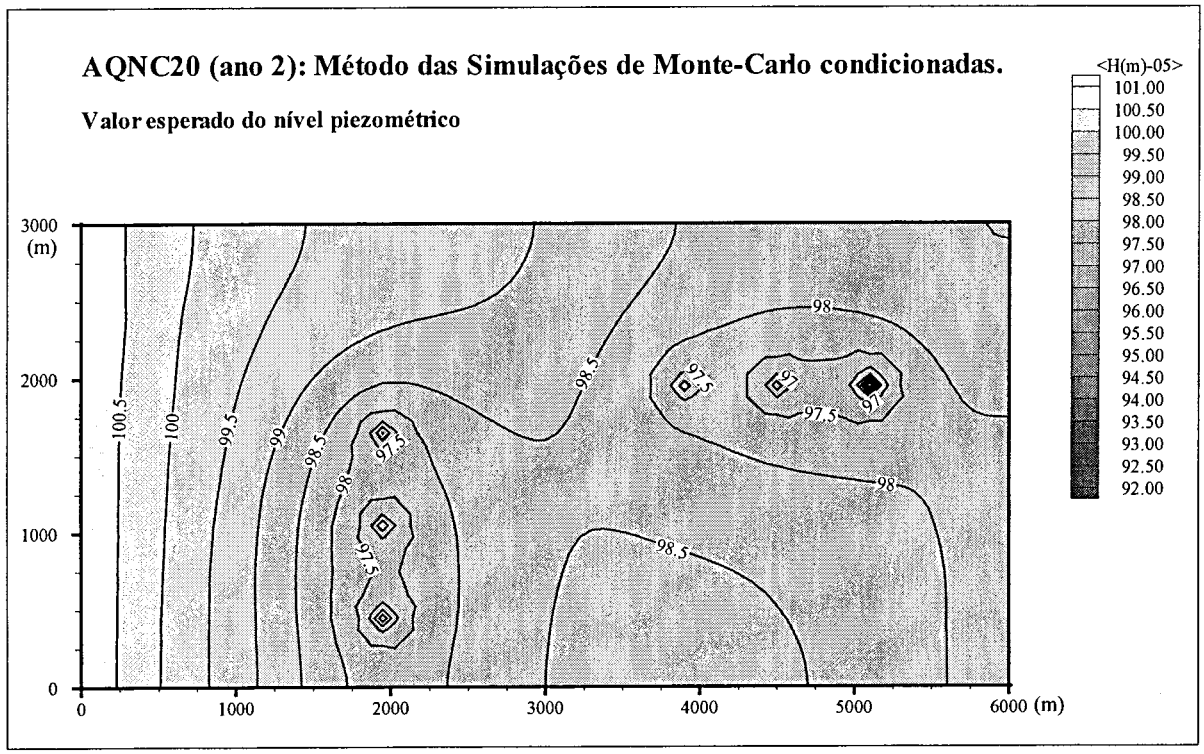



Figura 5.224 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 05.

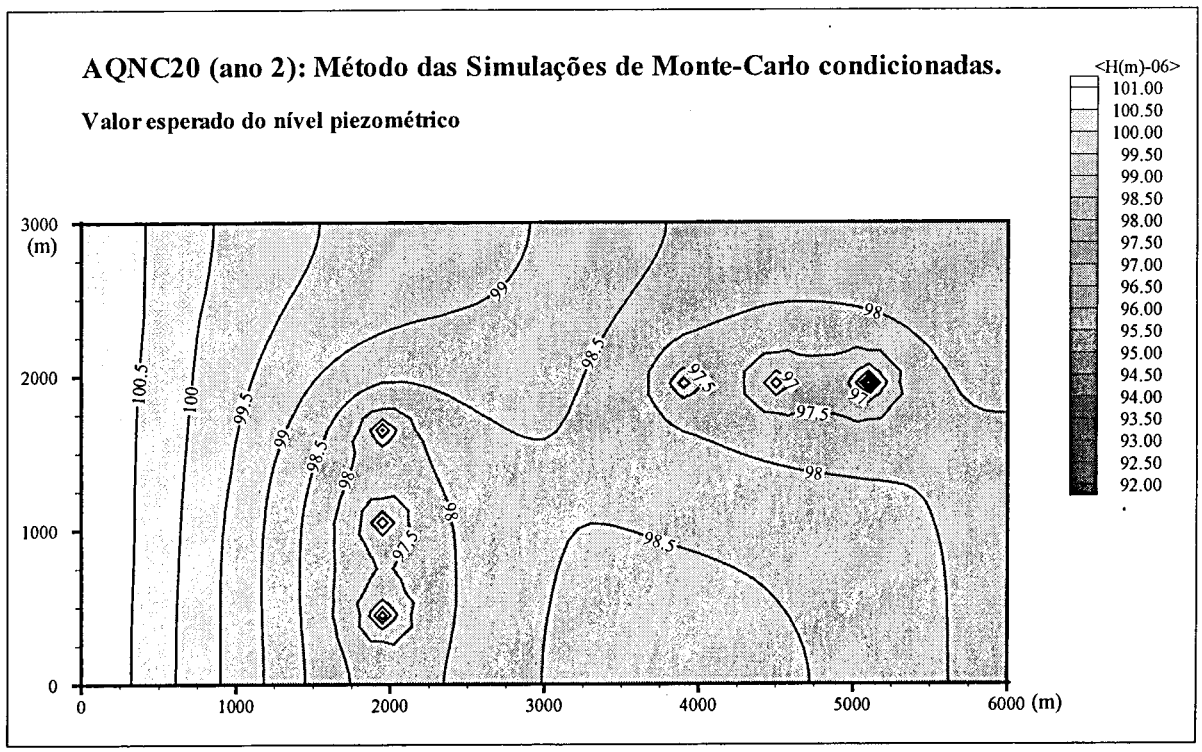



Figura 5.225 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 06.

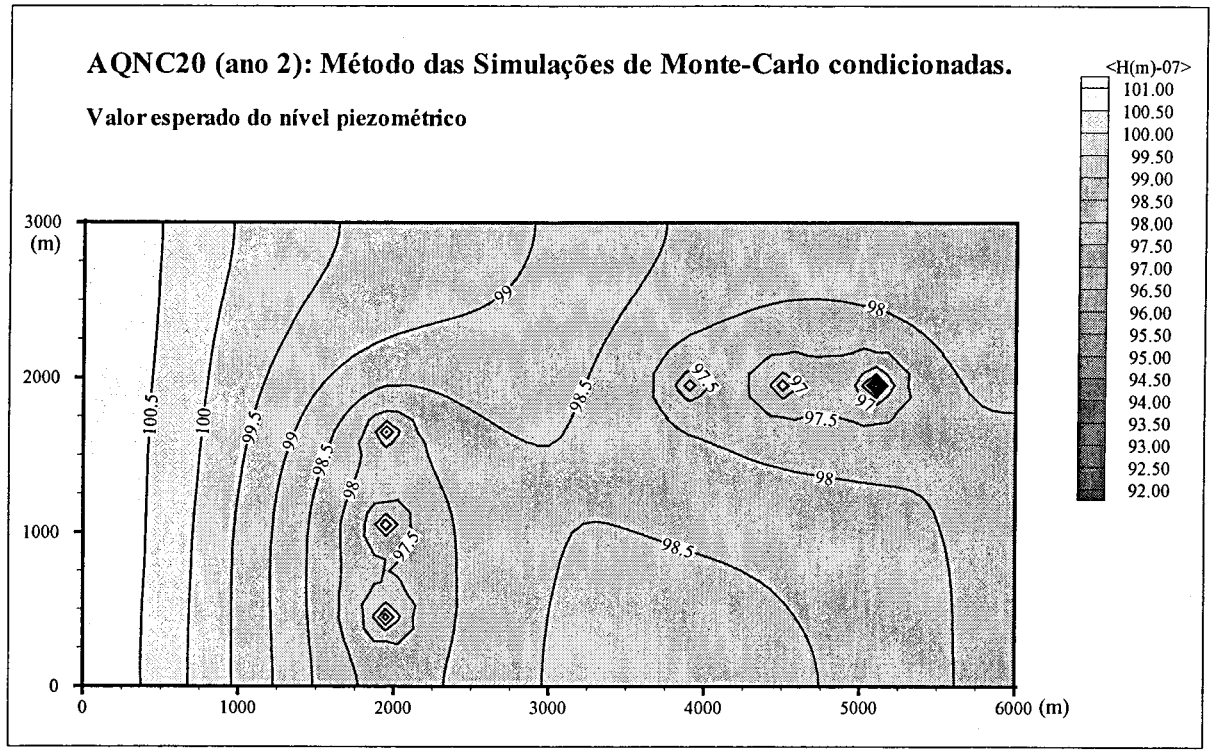



Figura 5.226 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 07.

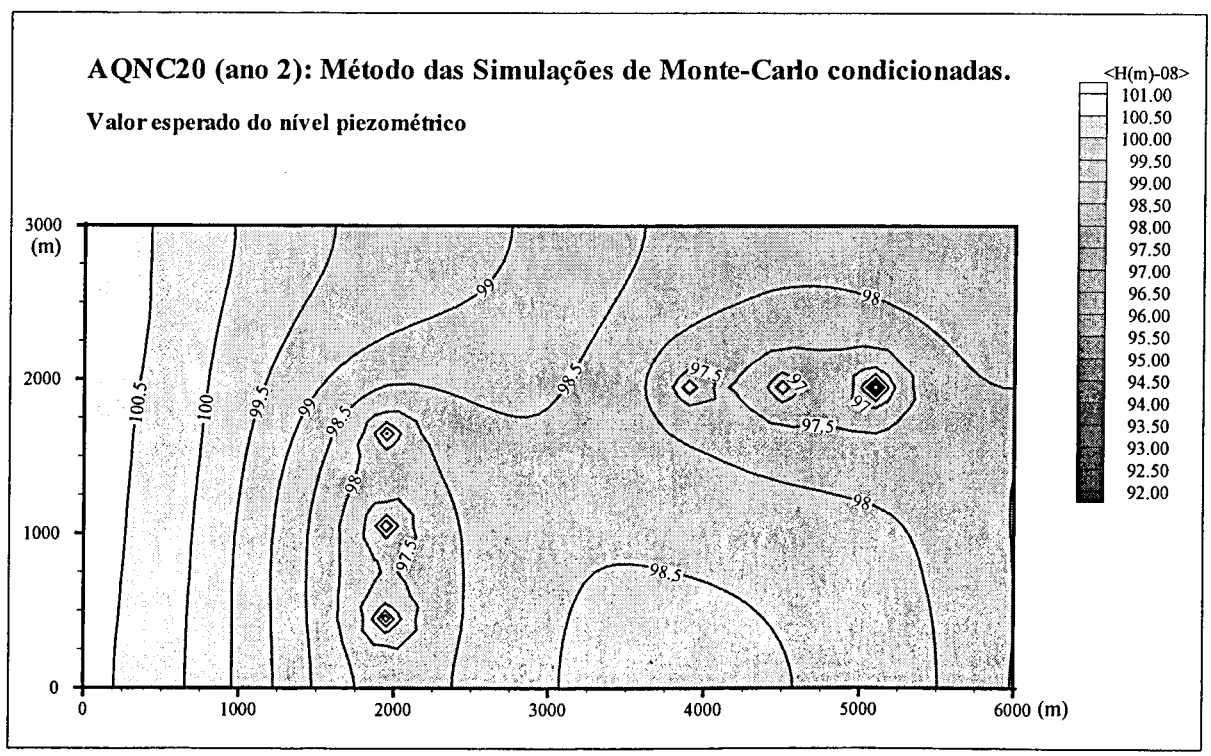



Figura 5.227 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 08.

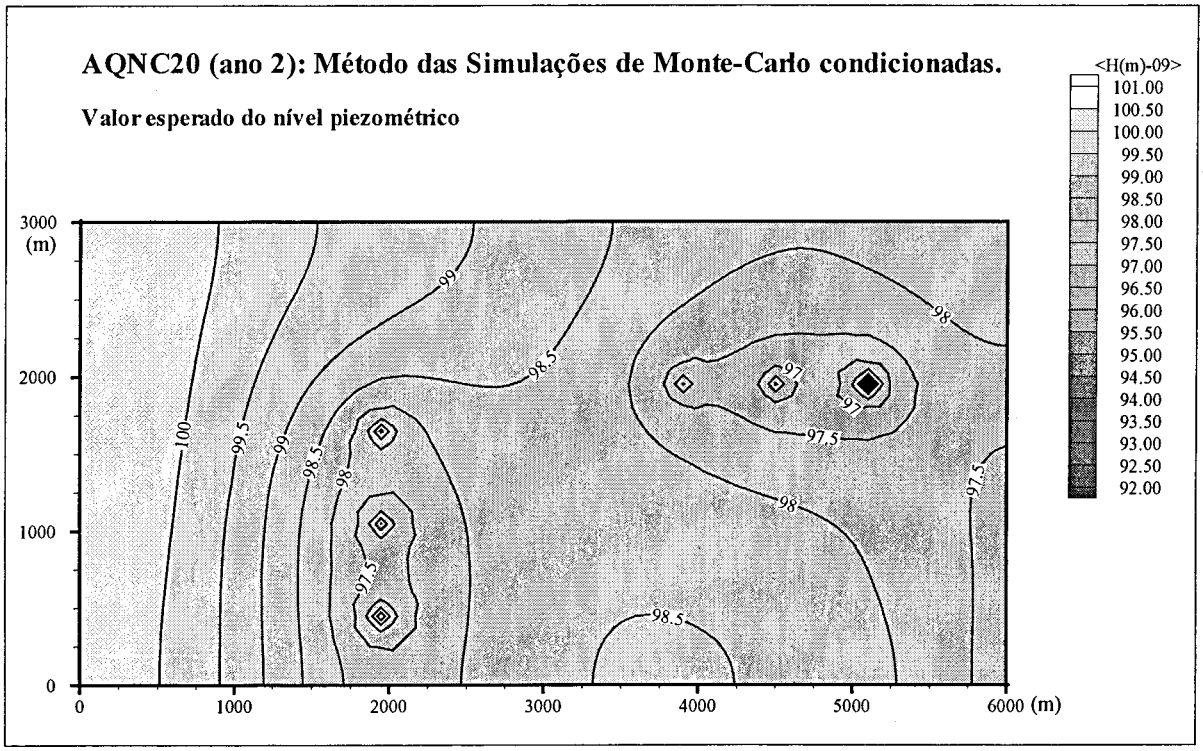



Figura 5.228 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 09.

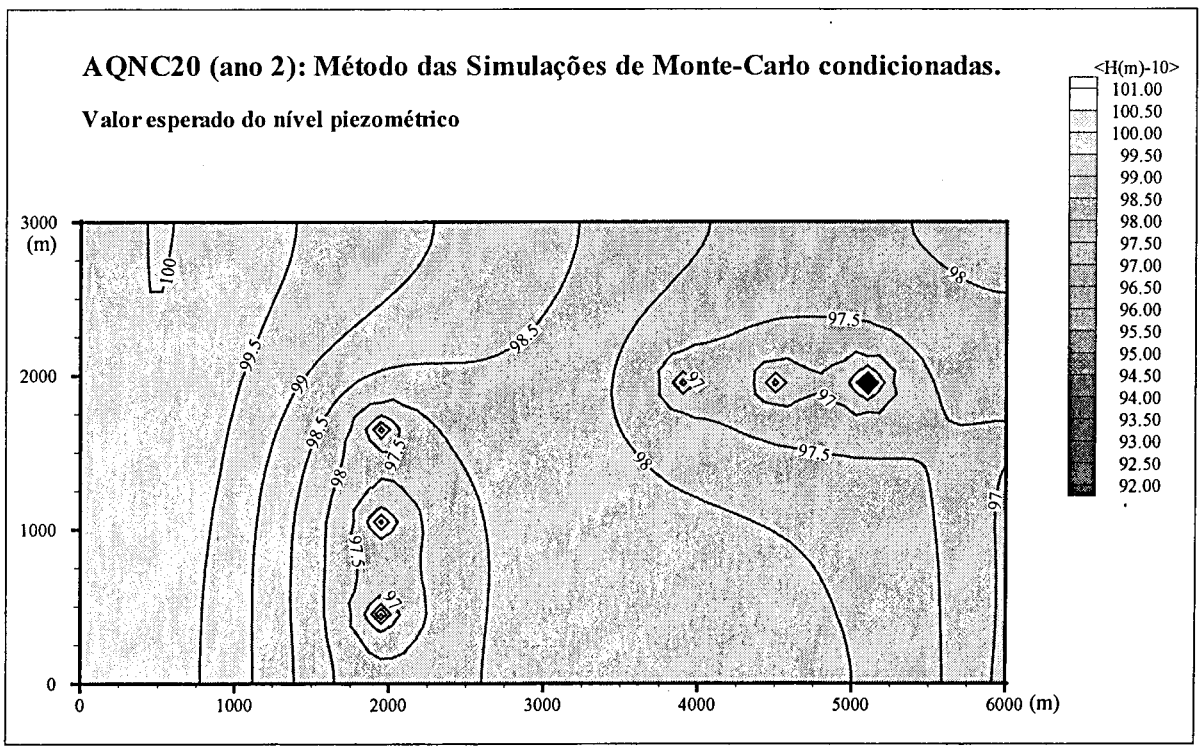



Figura 5.229 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 10.

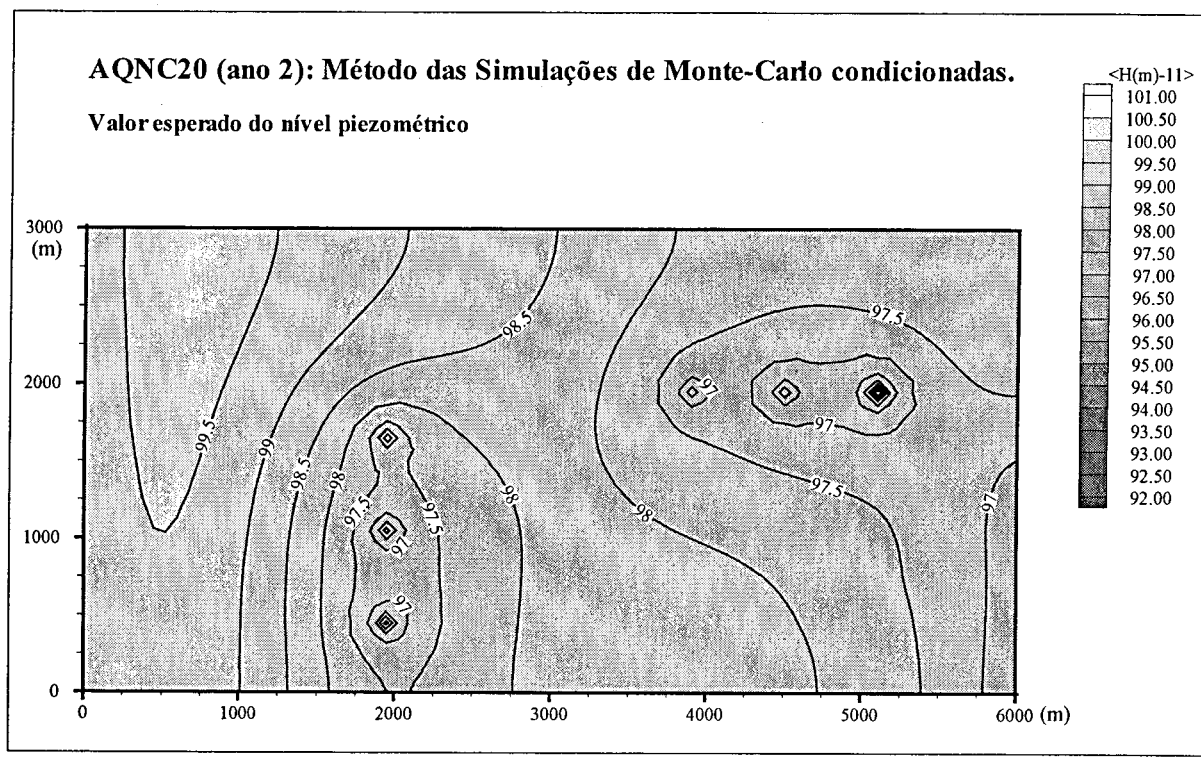



Figura 5.230 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 11.

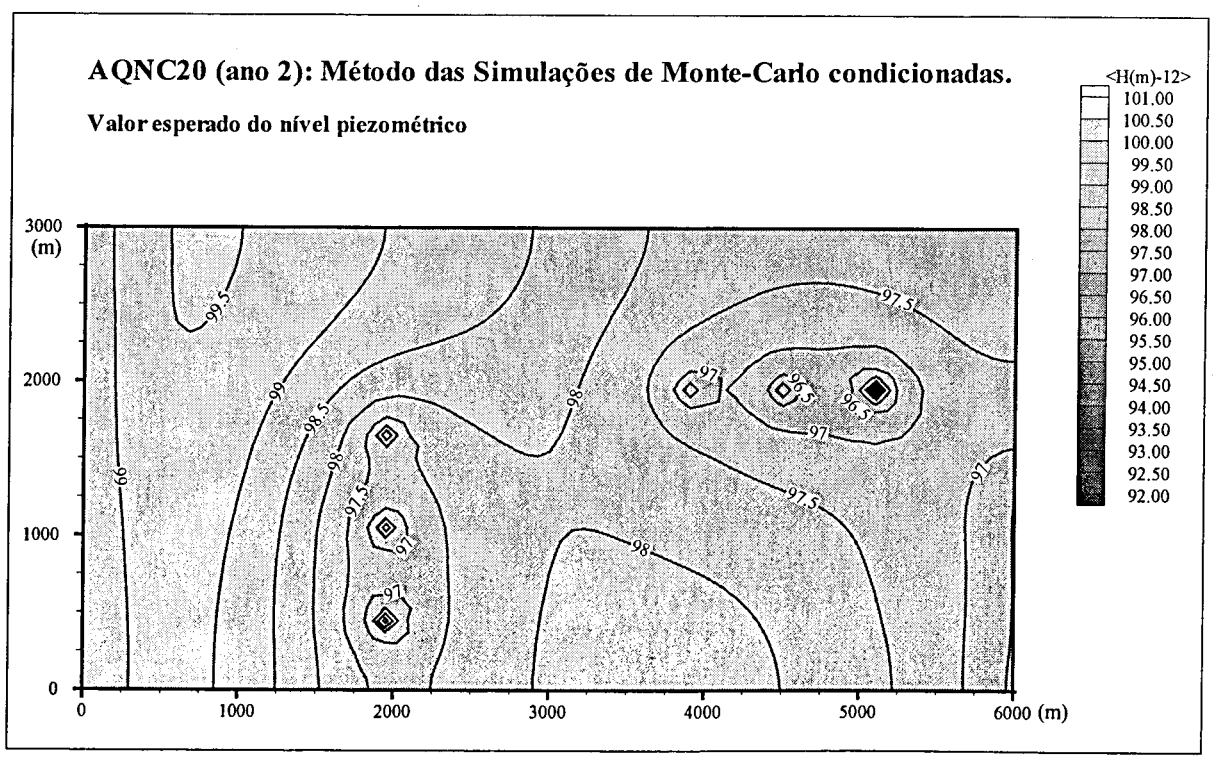



Figura 5.231 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Piezometria esperada, no final do mês 12.

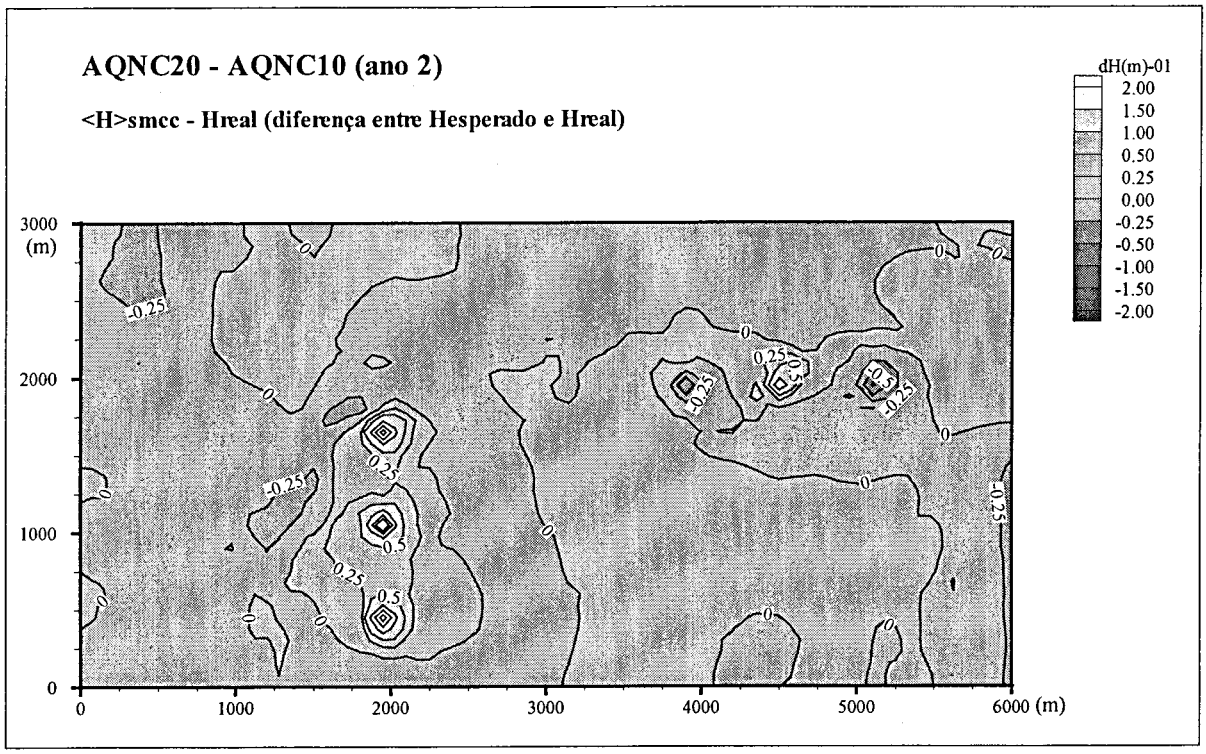



Figura 5.232 – AQNC20-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 01.

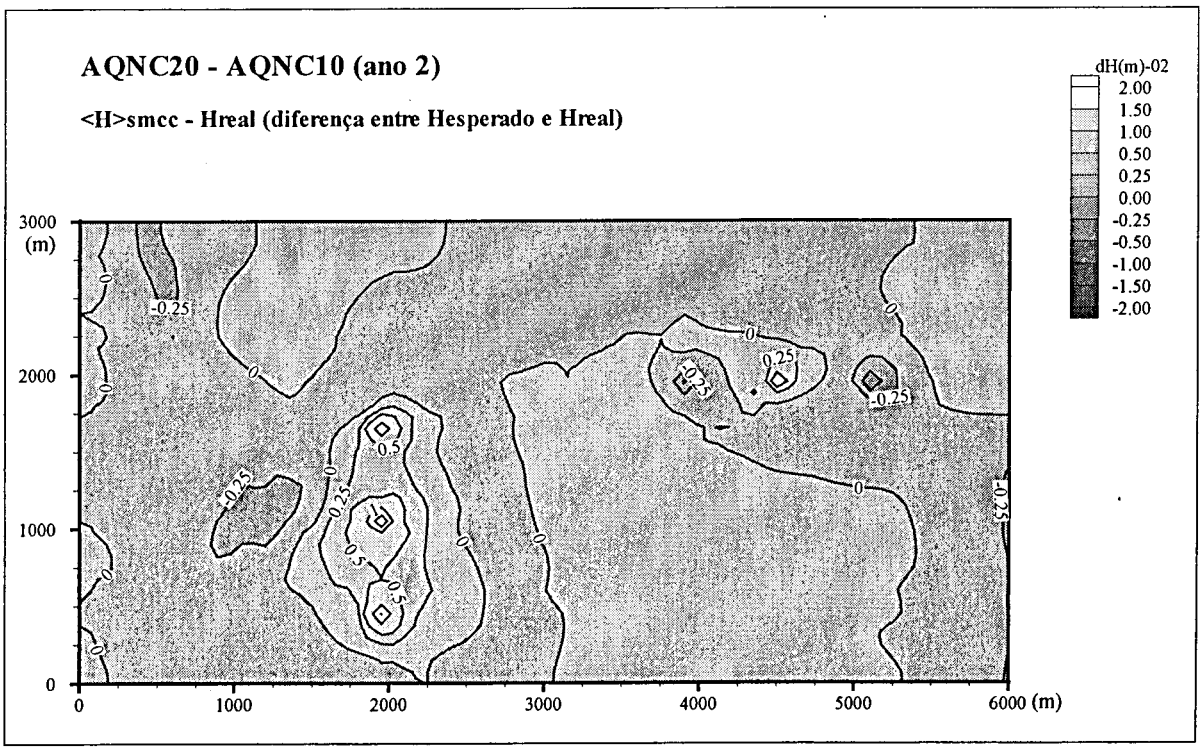



Figura 5.233 – AQNC20-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 02.

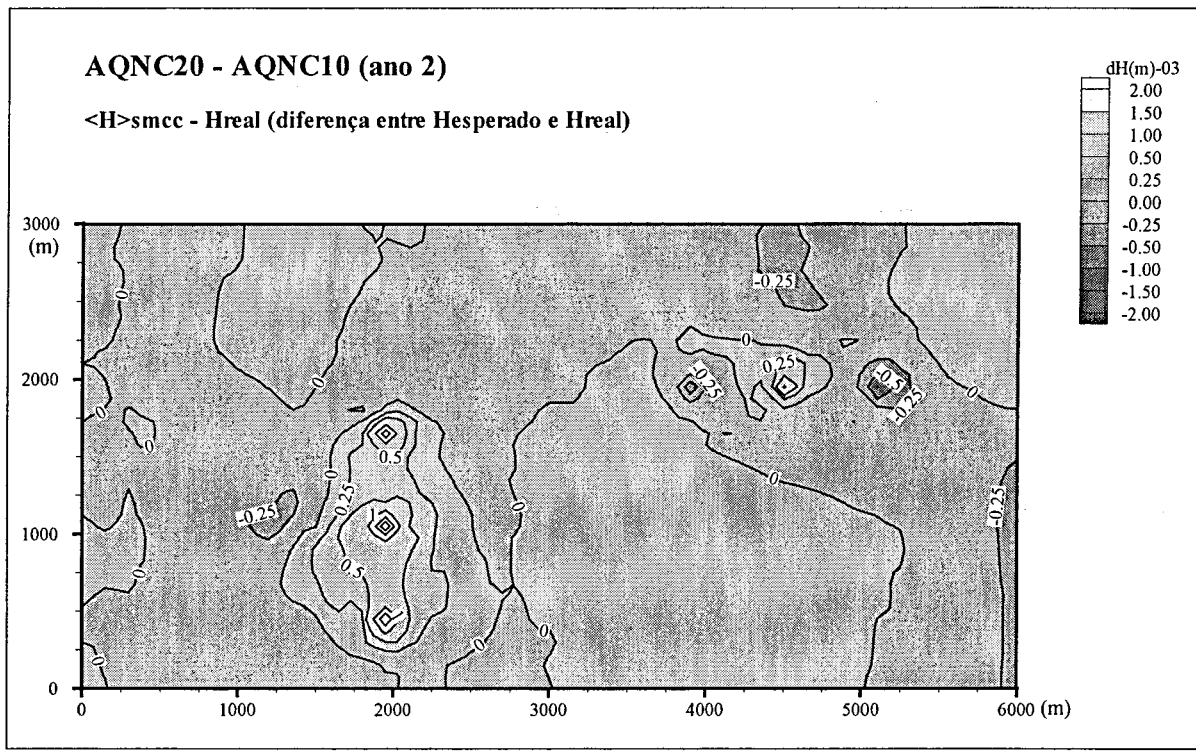



Figura 5.234 – AQNC20-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 03.

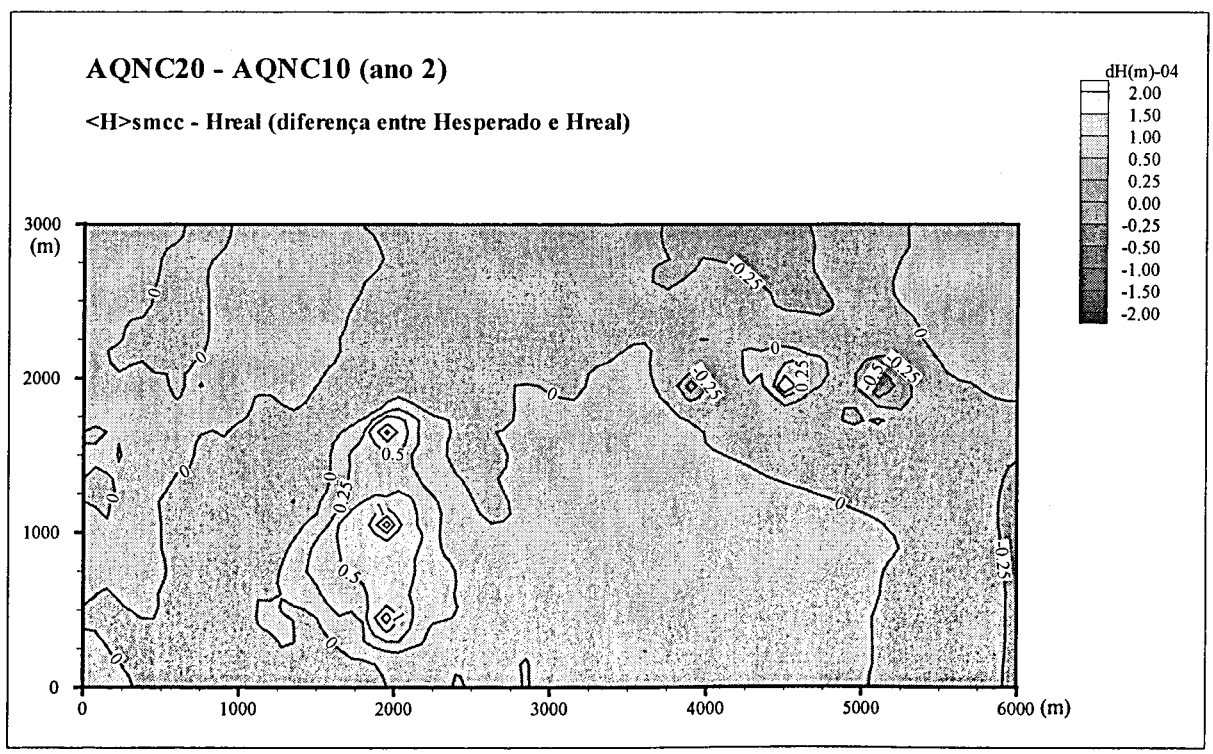



Figura 5.235 – AQNC20-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 04.

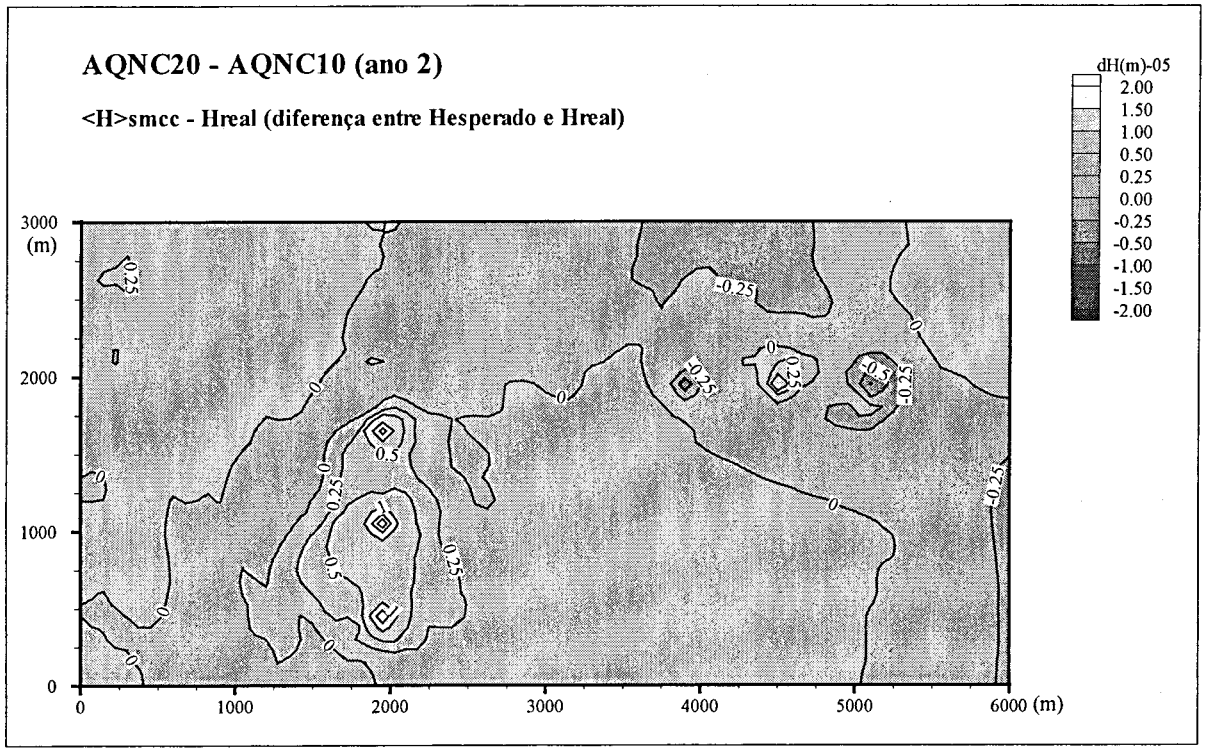



Figura 5.236 – AQNC20-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 05.

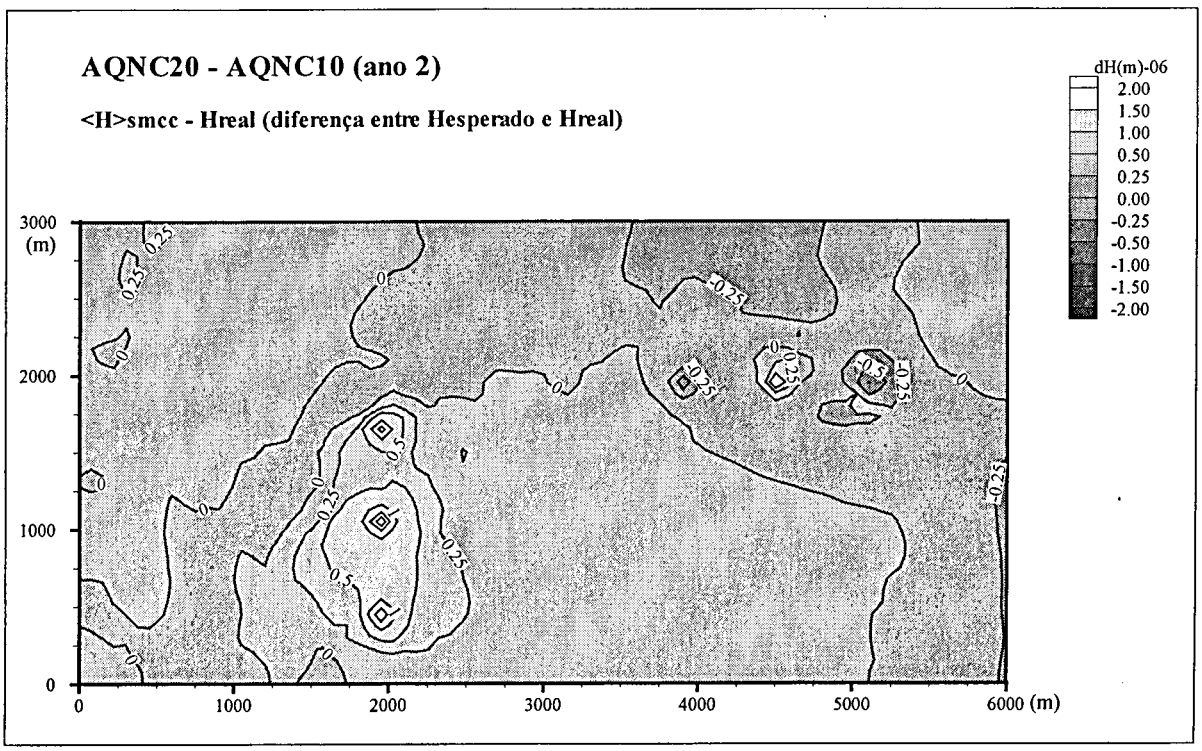



Figura 5.237 – AQNC20-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 06.

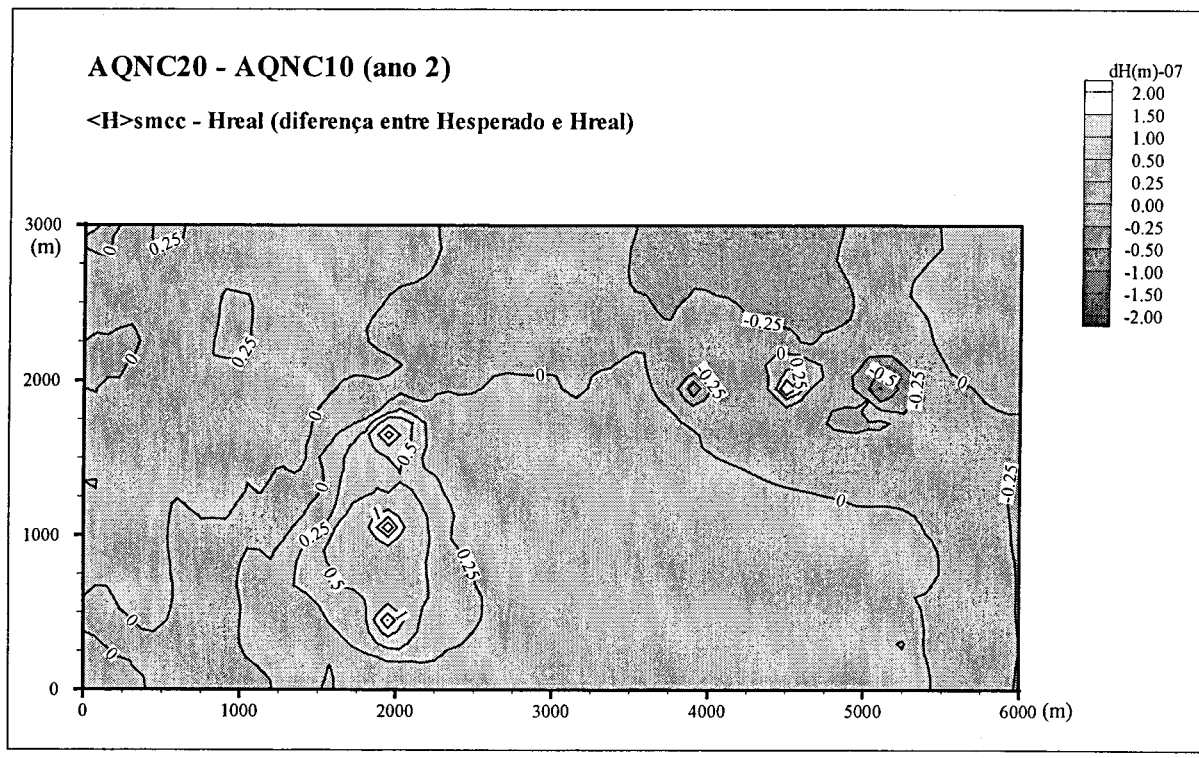



Figura 5.238 – AQNC20-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 07.

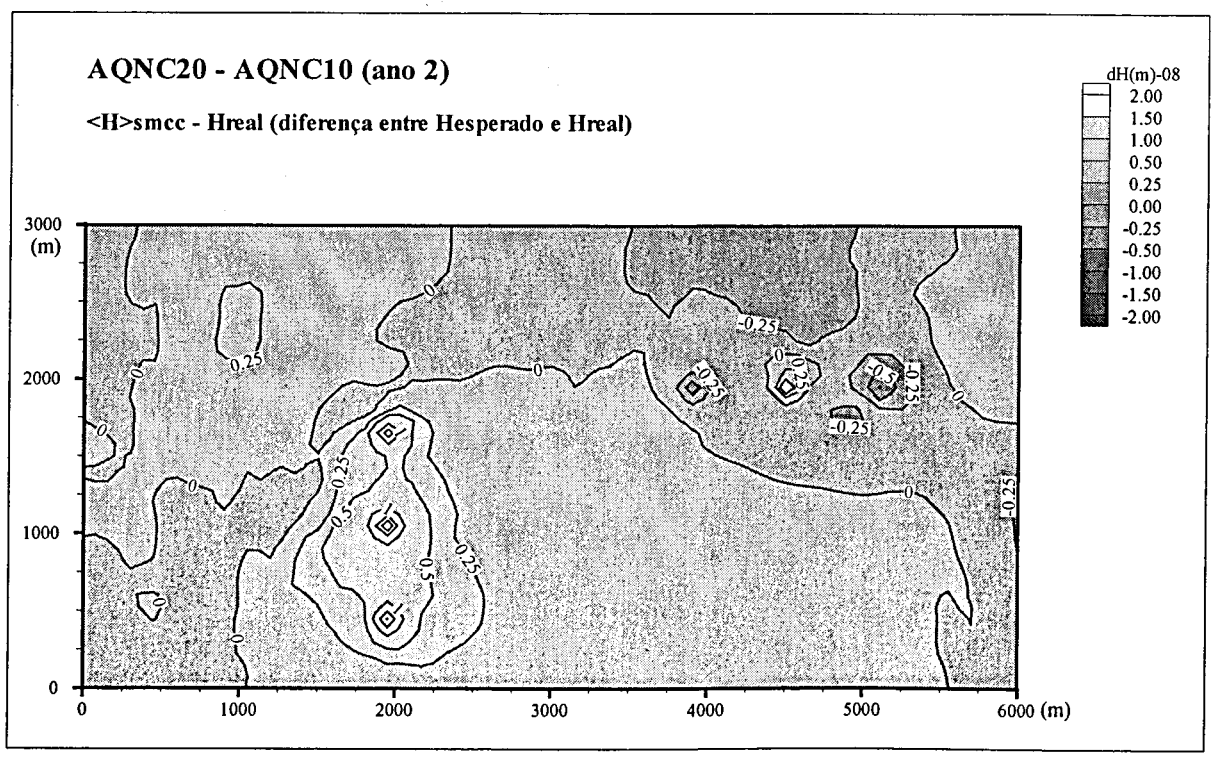



Figura 5.239 – AQNC20-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 08.

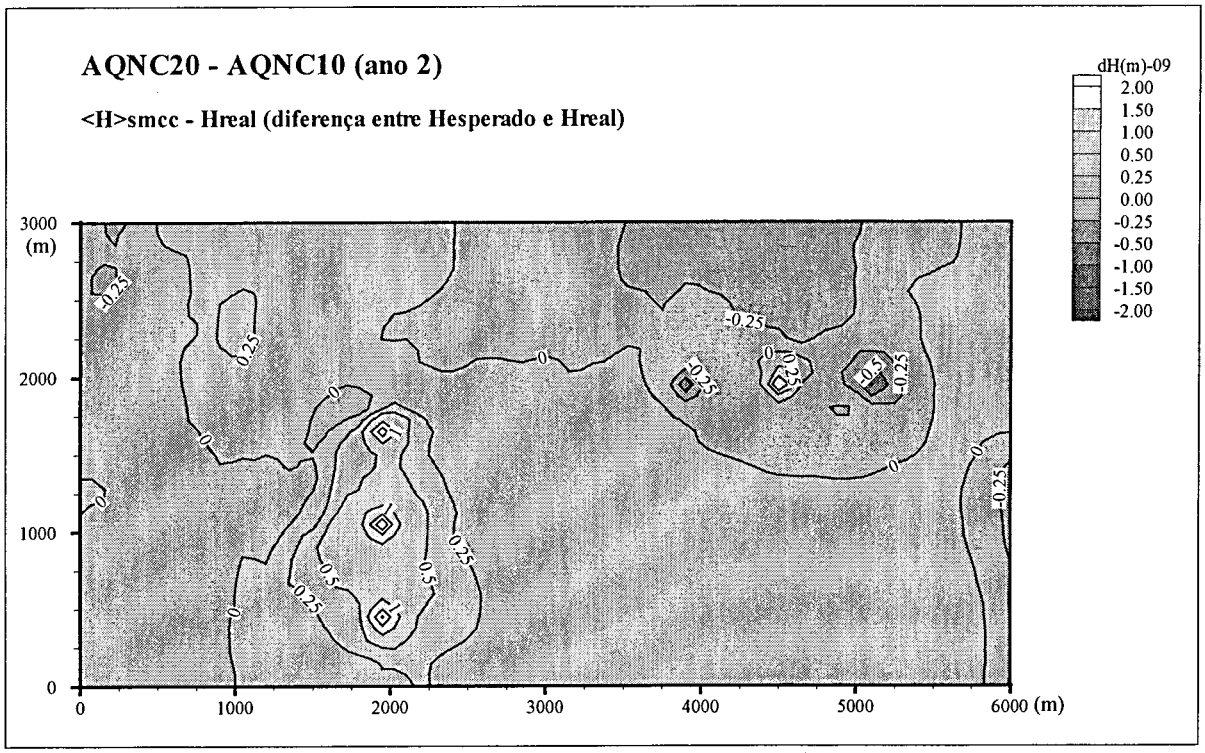



Figura 5.240 – AQNC20-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 09.

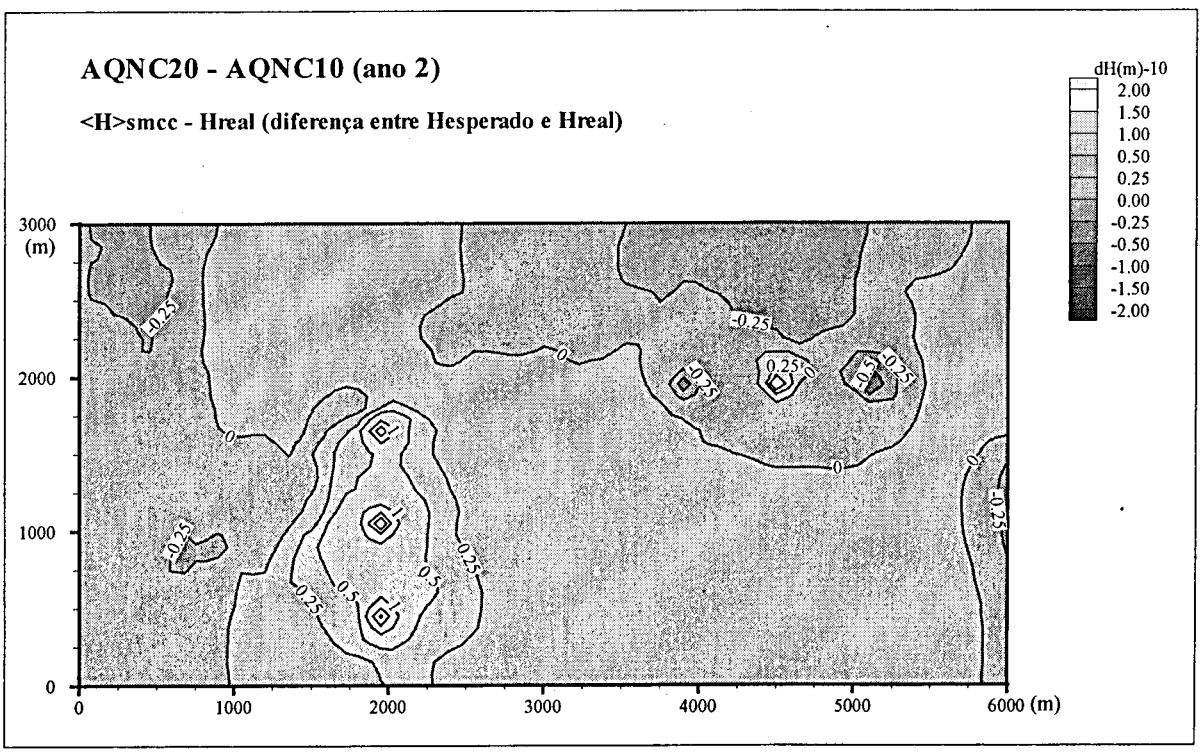



Figura 5.241 – AQNC20-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 10.

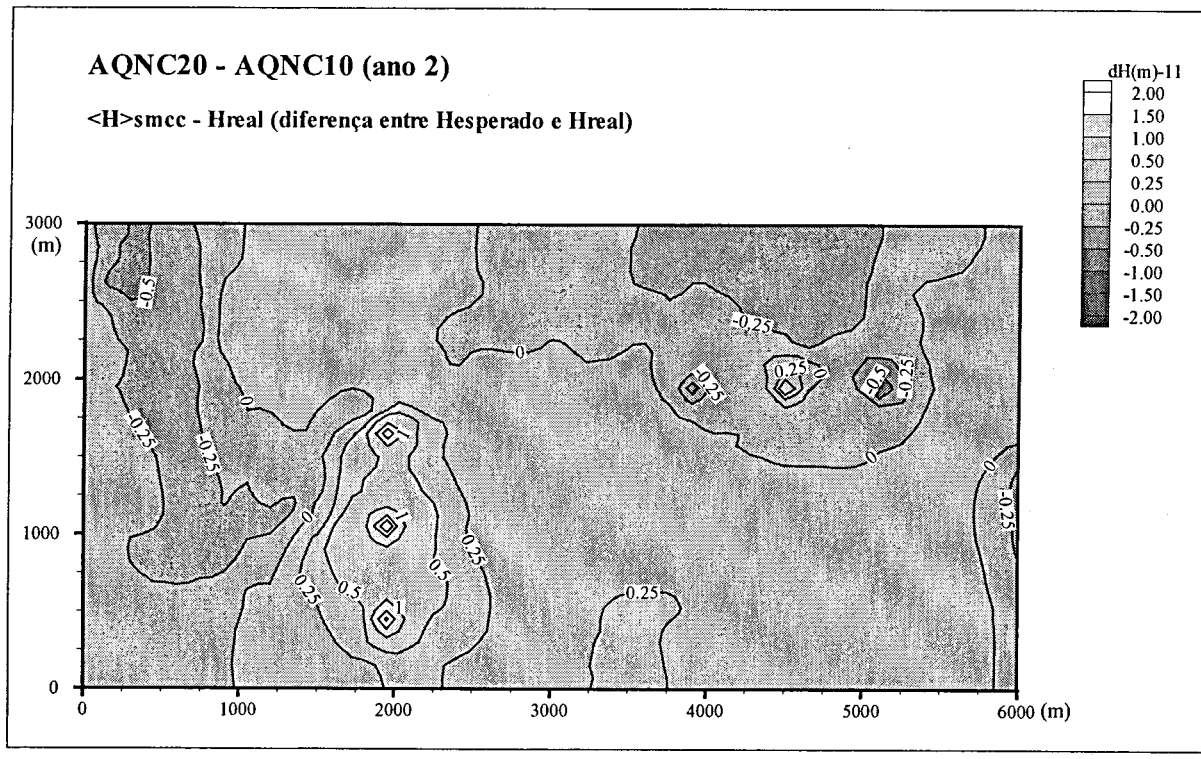



Figura 5.242 – AQNC20-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 11.

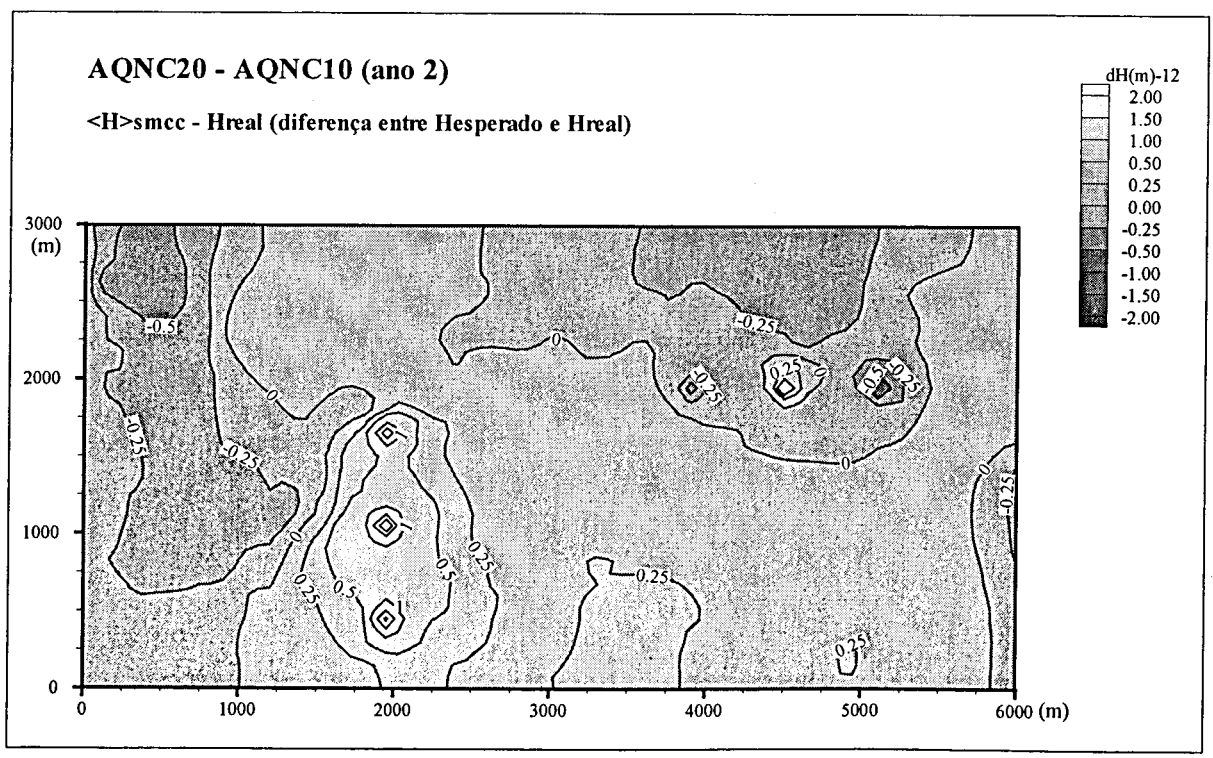



Figura 5.243 – AQNC20-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (*msM-C* condicionadas) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 12.

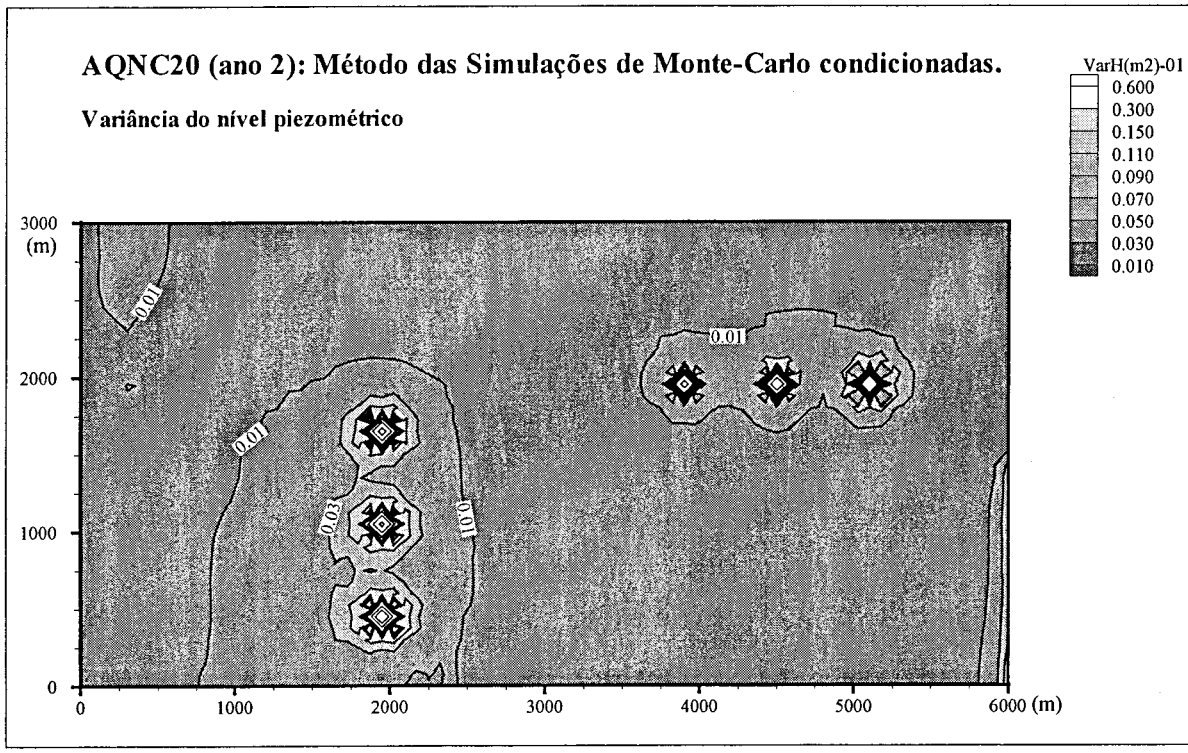



Figura 5.244 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 01.

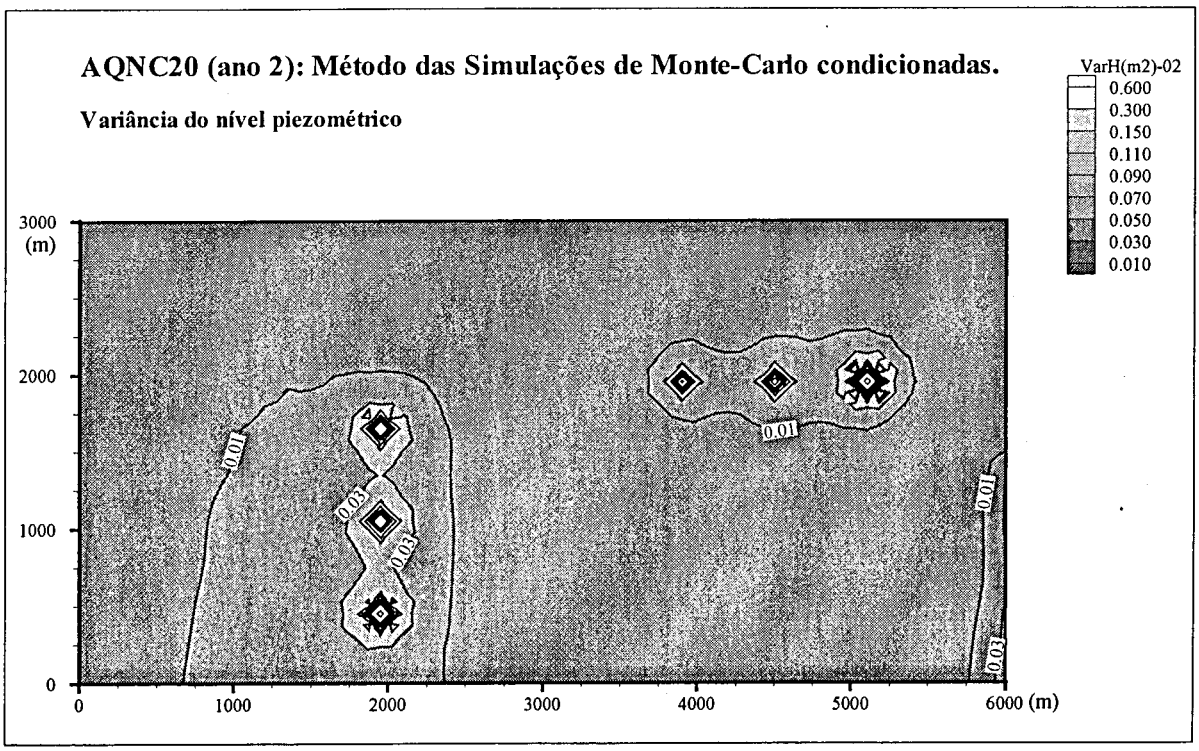



Figura 5.245 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 02.

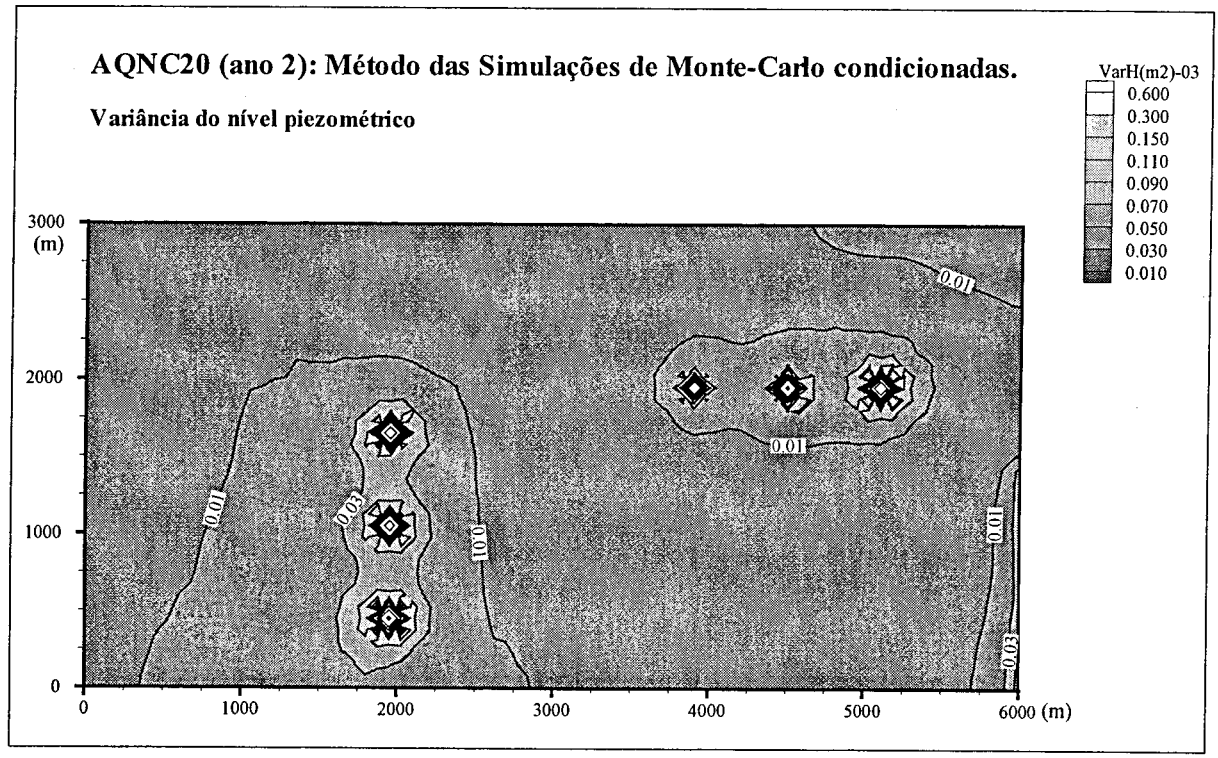



Figura 5.246 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 03.

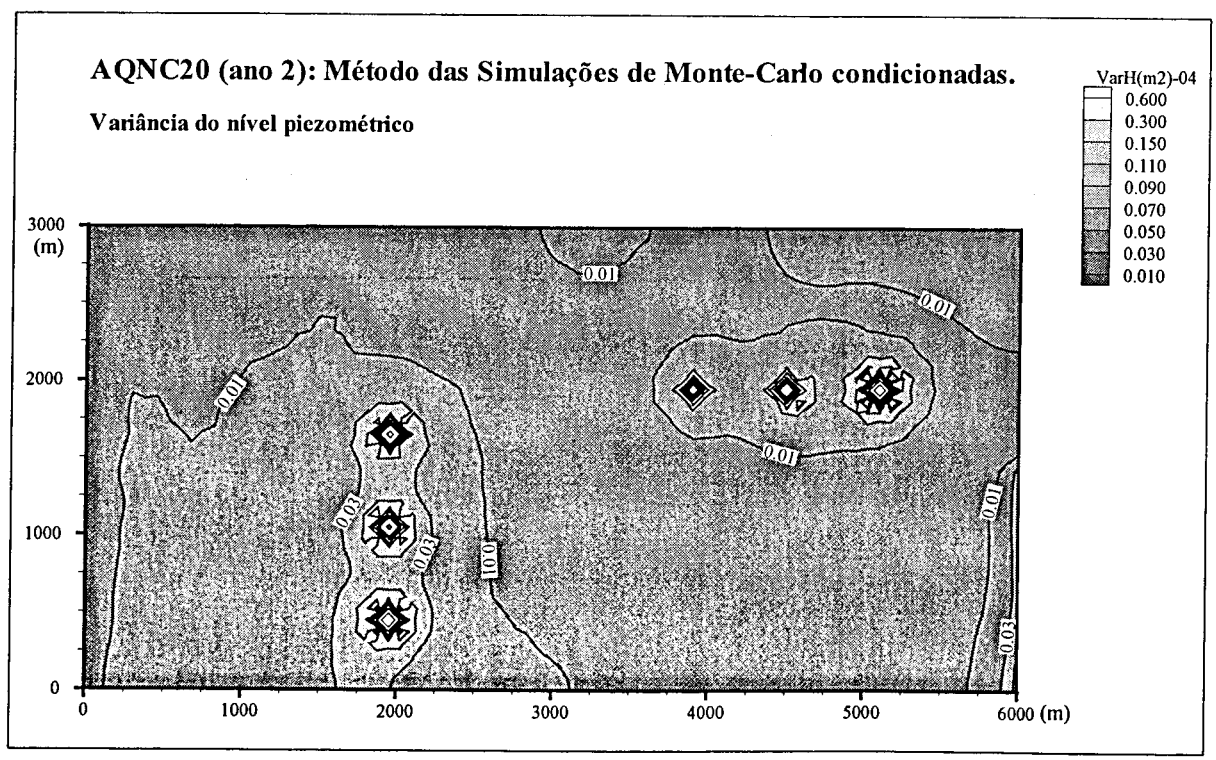



Figura 5.247 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 04.

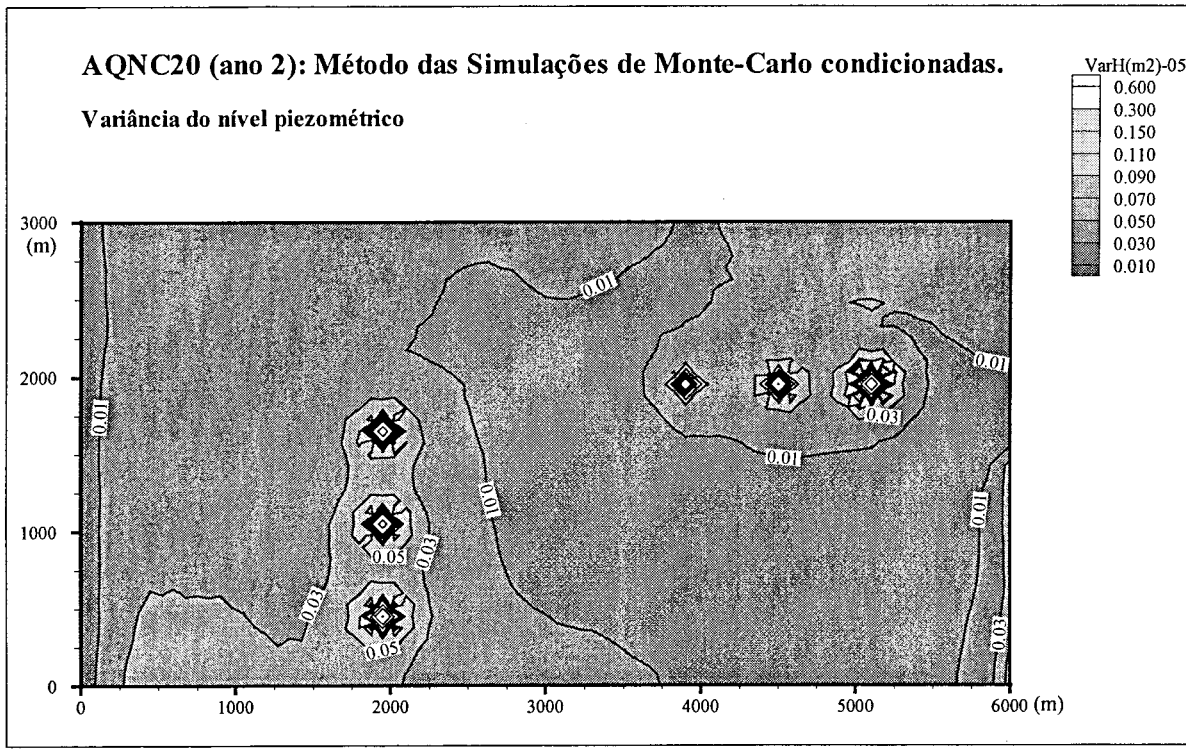



Figura 5.248 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 05.

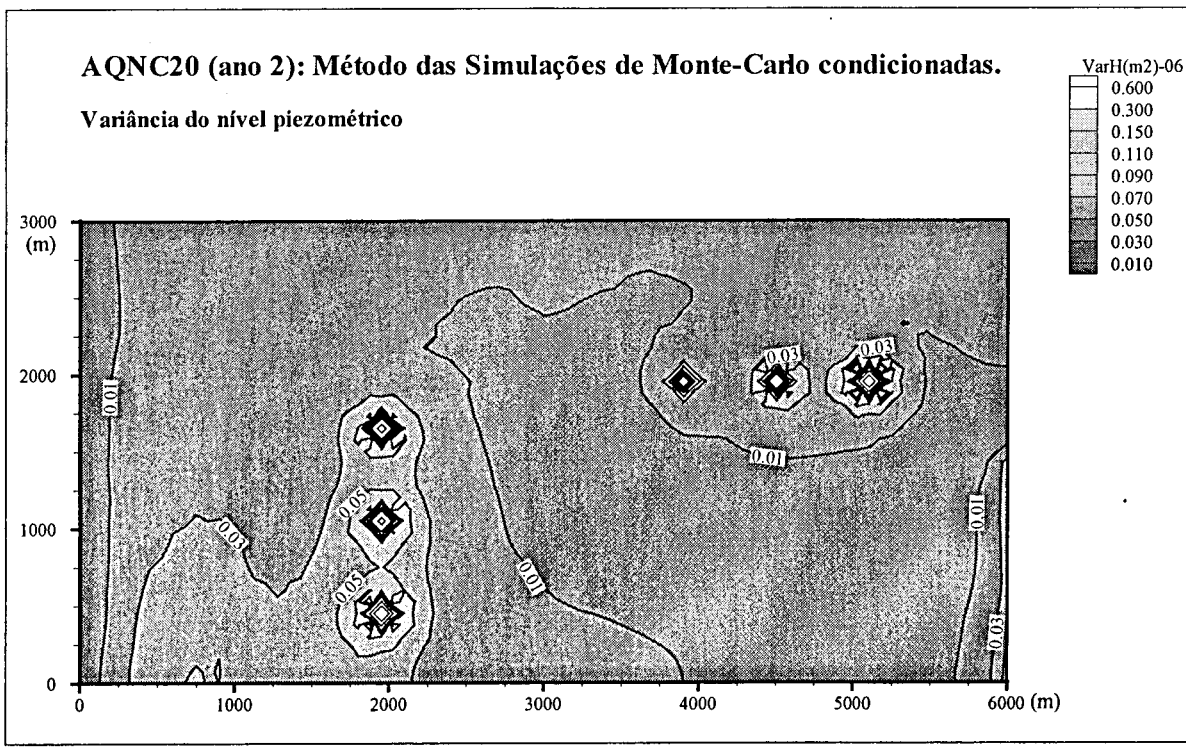



Figura 5.249 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 06.

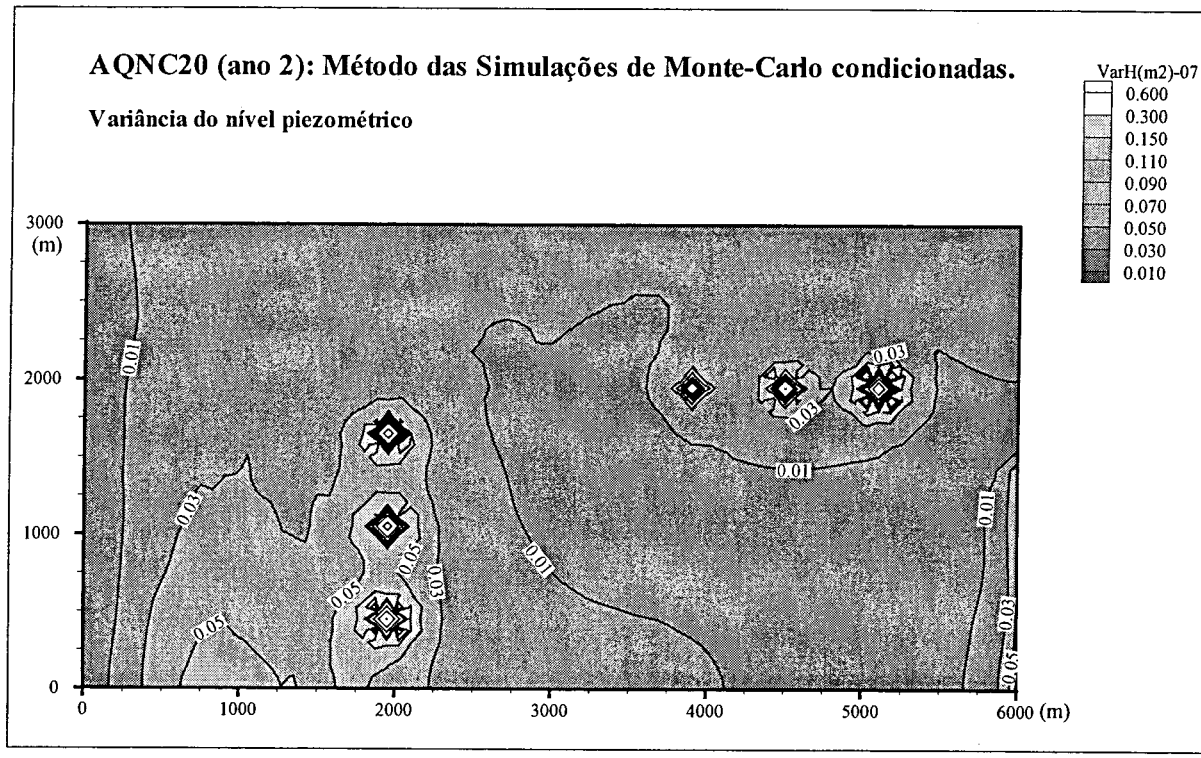



Figura 5.250 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 07.

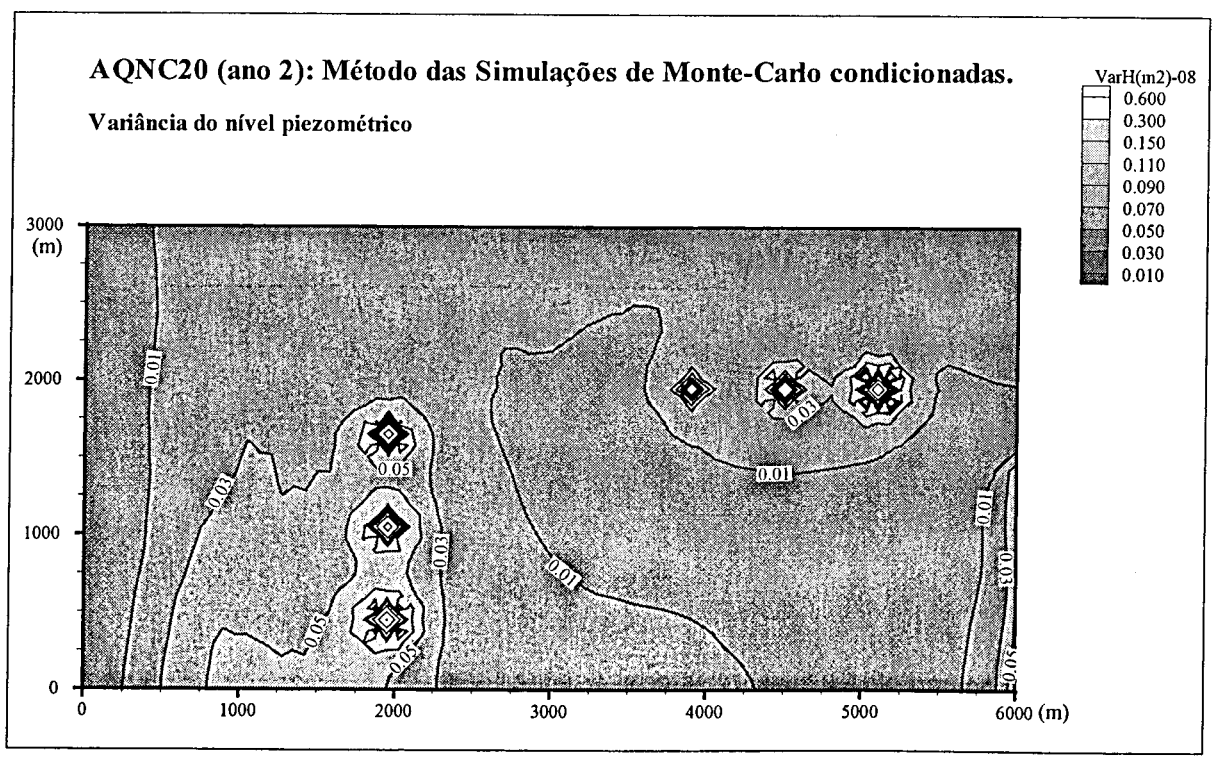



Figura 5.251 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 08.

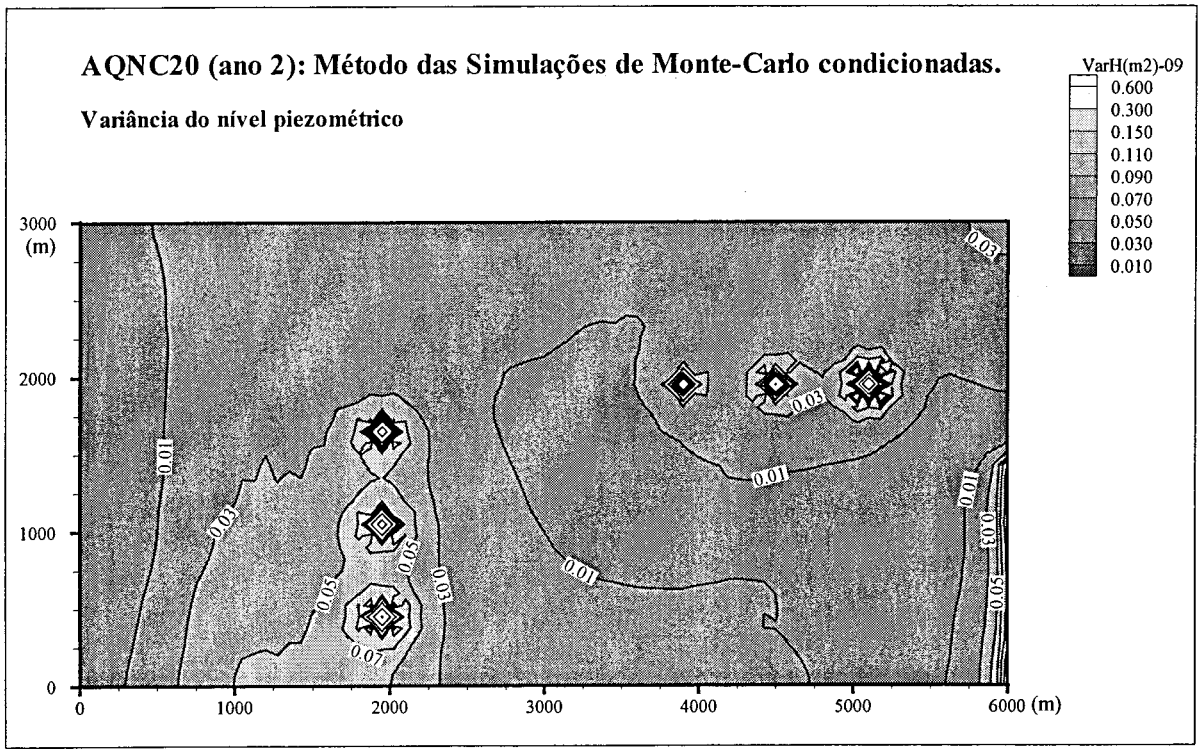



Figura 5.252 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 09.

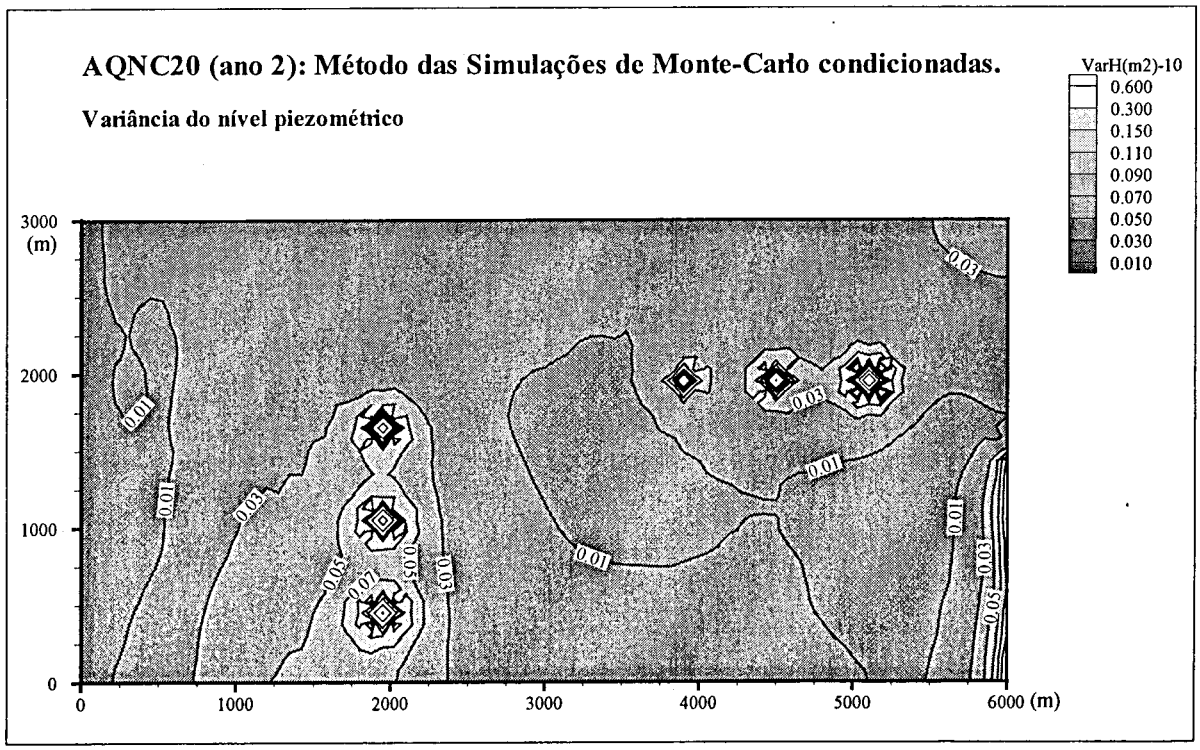



Figura 5.253 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 10.

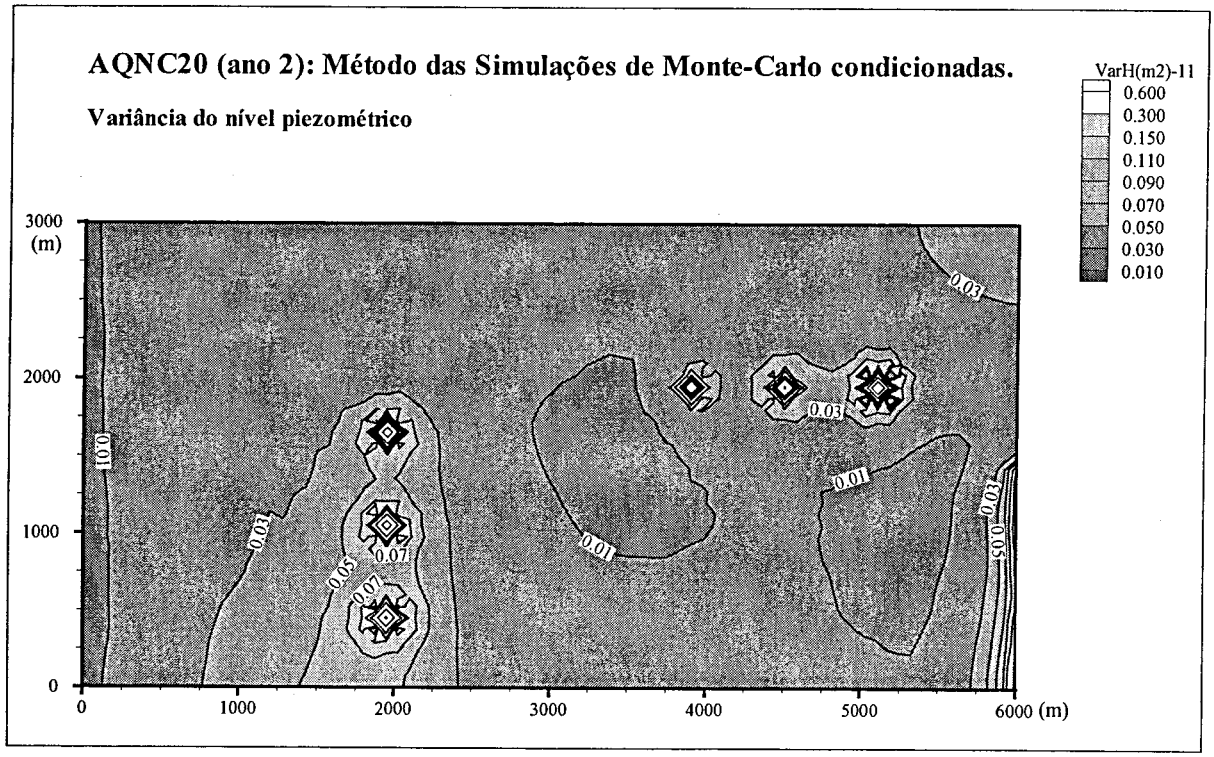



Figura 5.254 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 11.

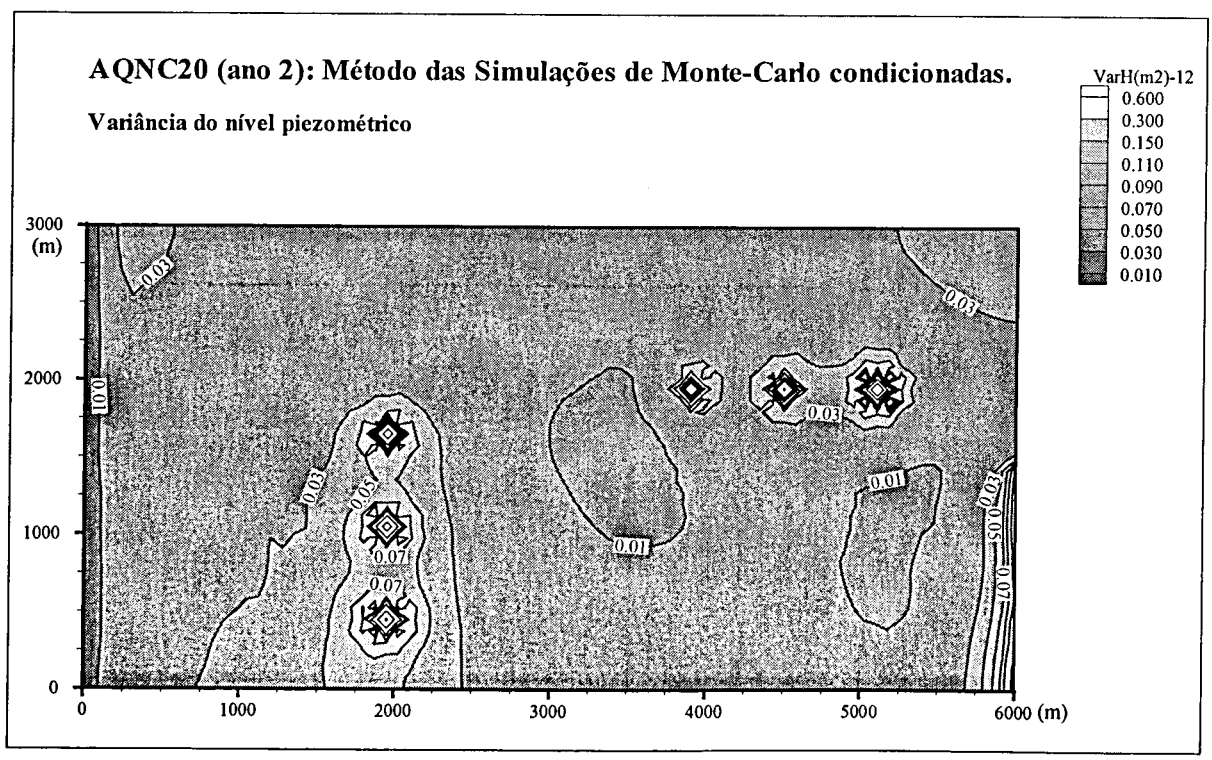



Figura 5.255 – AQNC20: Simulações de Monte-Carlo condicionadas. Variância do nível piezométrico no final do mês 12.

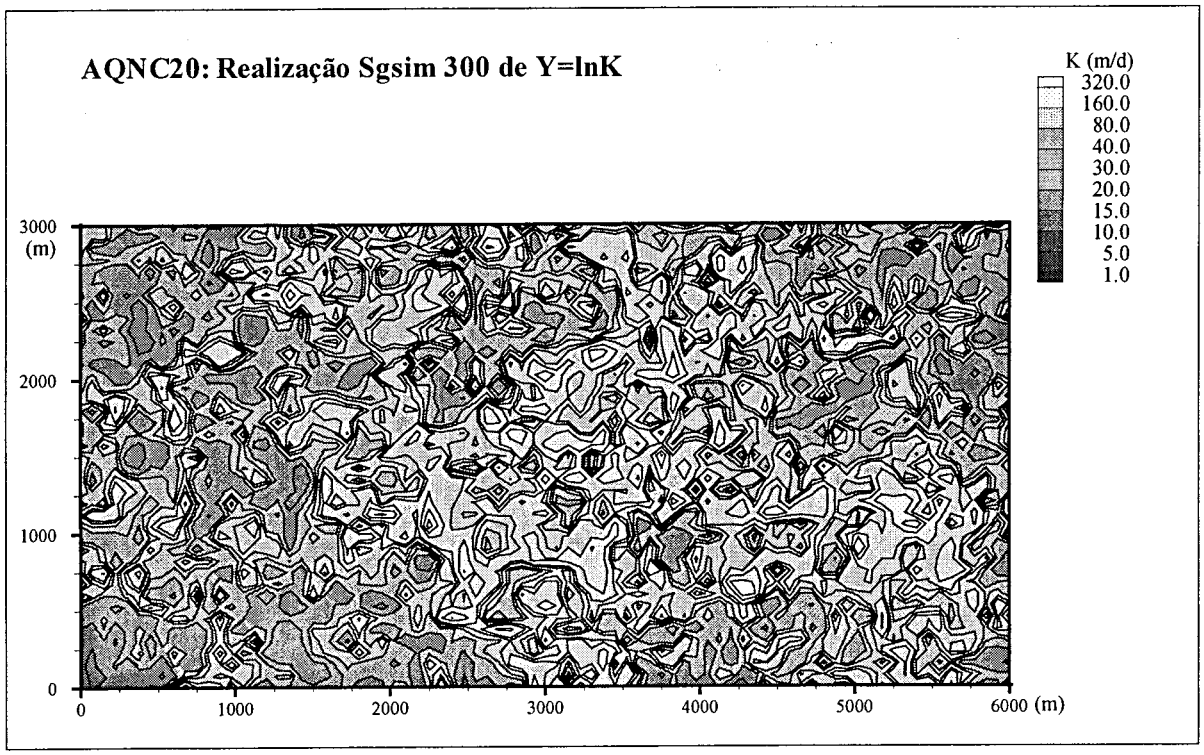



Figura 5.256 – AQNC20: Realização condicionada nº 300 de $Y$=ln$K$.

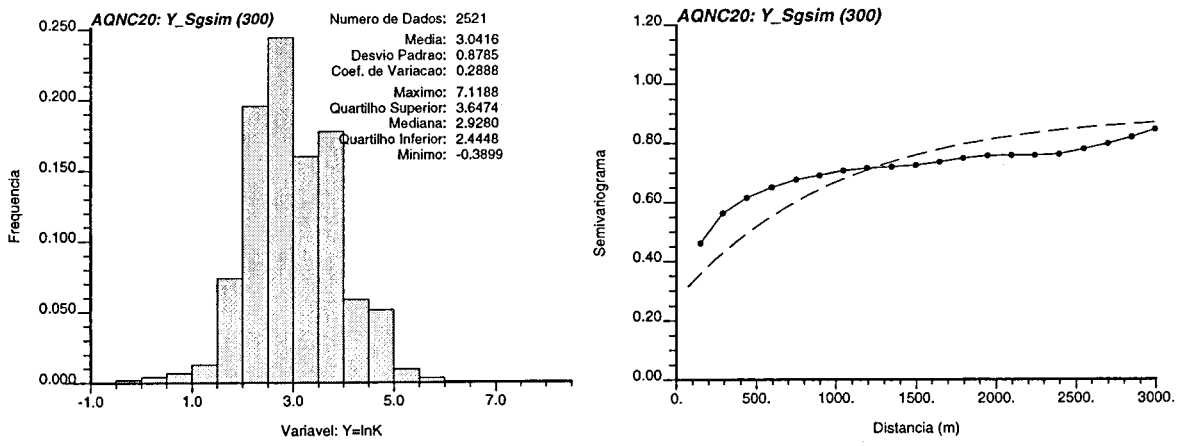



Figura 5.257 – AQNC20: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 300 de $Y$=ln$K$.

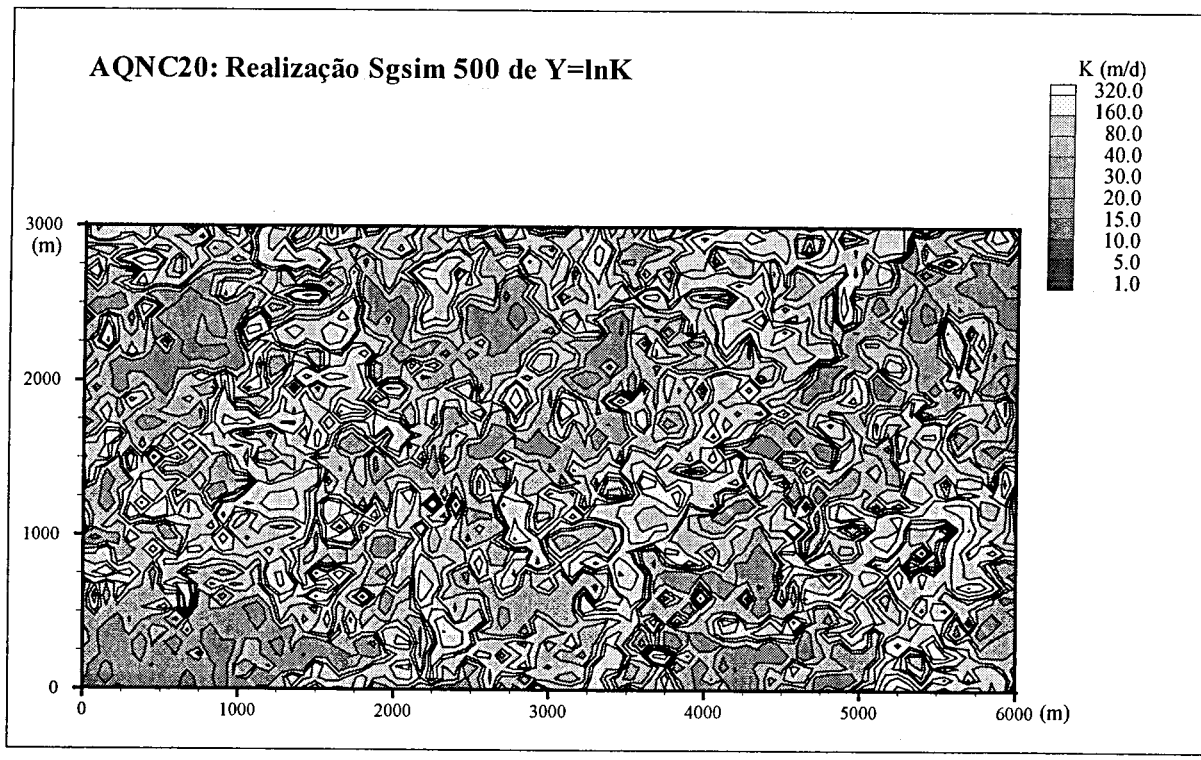



Figura 5.258 – AQNC20: Realização condicionada nº 500 de $Y$=ln$K$.

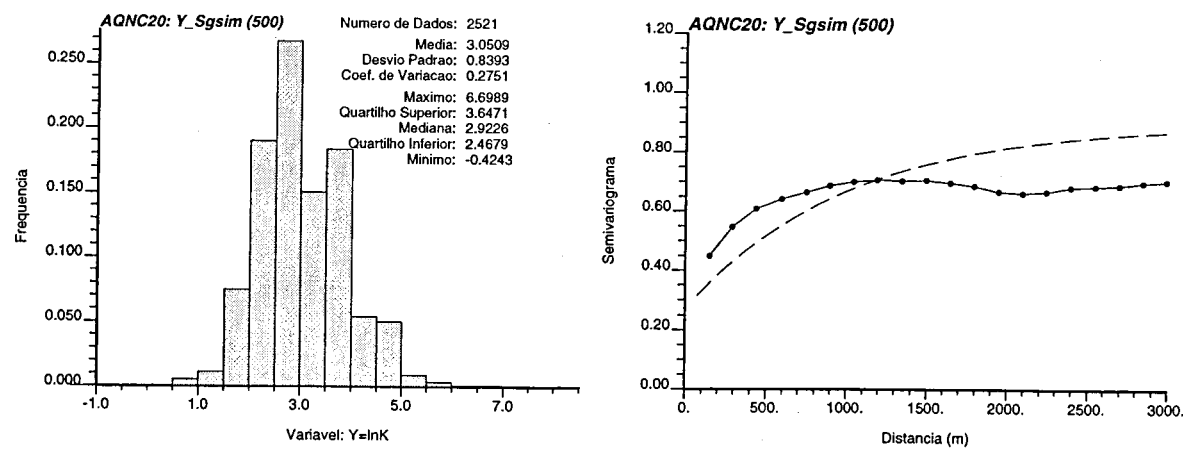



Figura 5.259 – AQNC20: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 500 de $Y$=ln$K$.

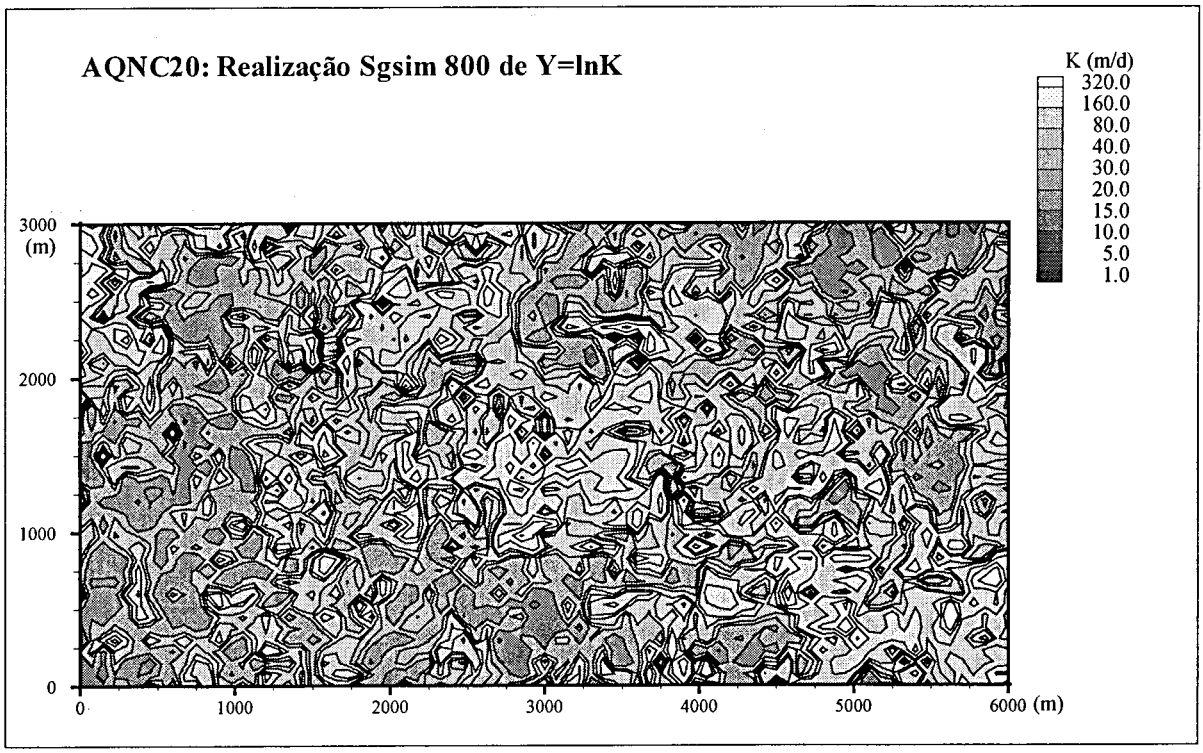



Figura 5.260 – AQNC20: Realização condicionada nº 800 de $Y$=ln$K$.

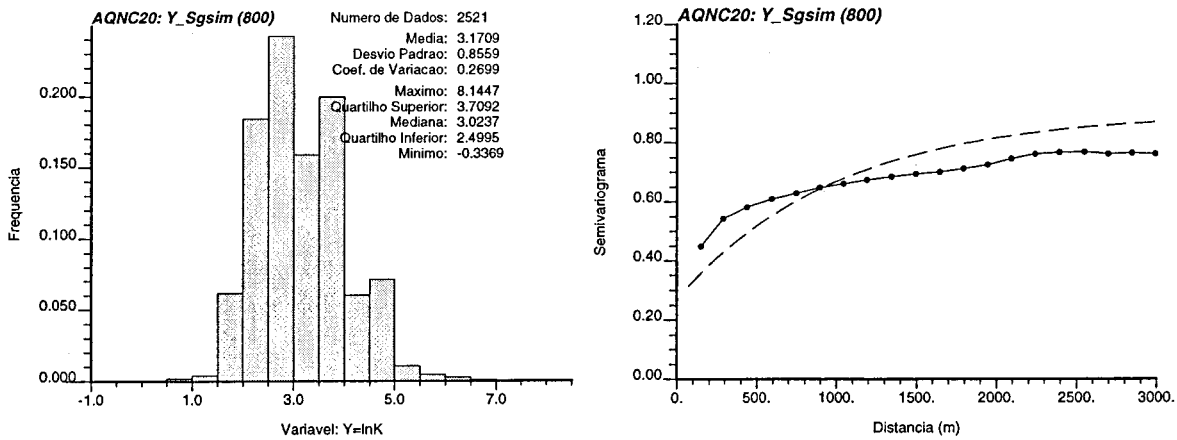



Figura 5.261 – AQNC20: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 800 de $Y$=ln$K$.

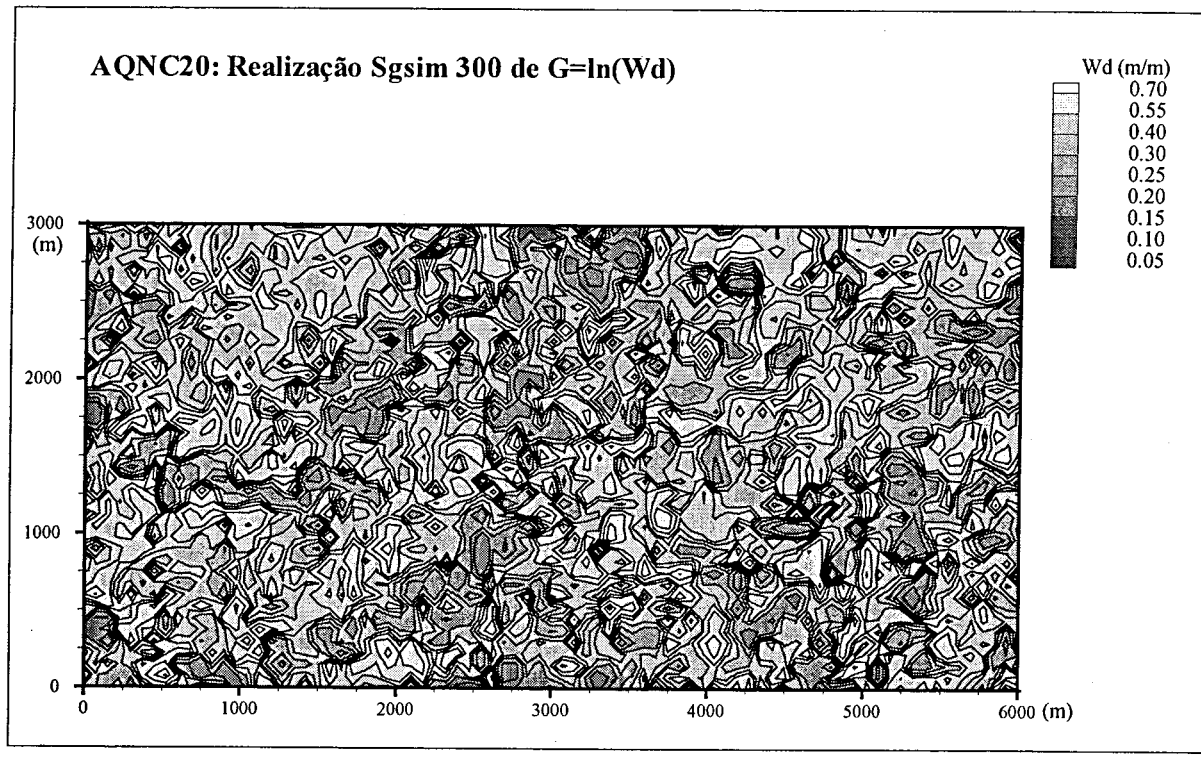



Figura 5.262 – AQNC20: Realização condicionada nº 300 de $G=\ln(\omega_i)$.

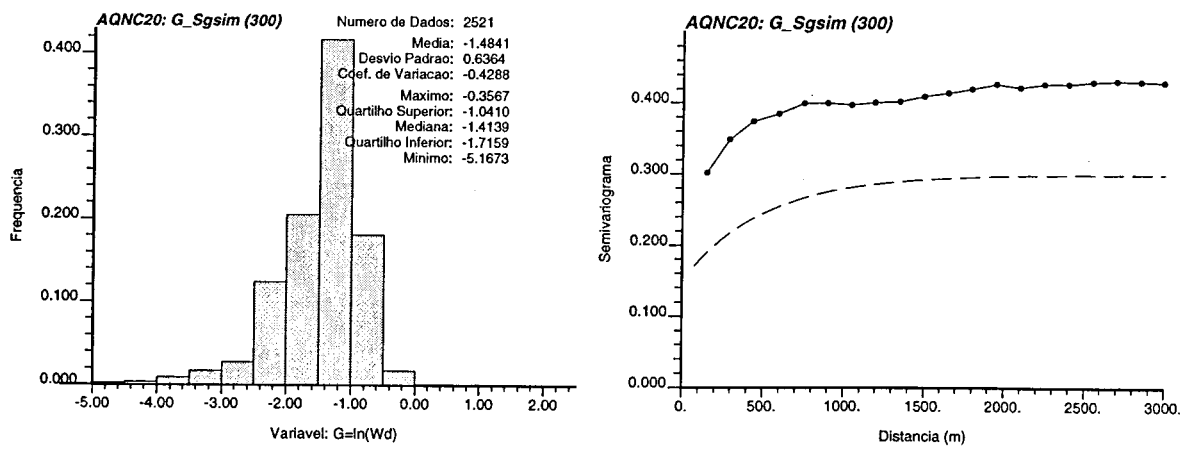



Figura 5.263 – AQNC20: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 300 de $G=\ln(\omega_i)$.

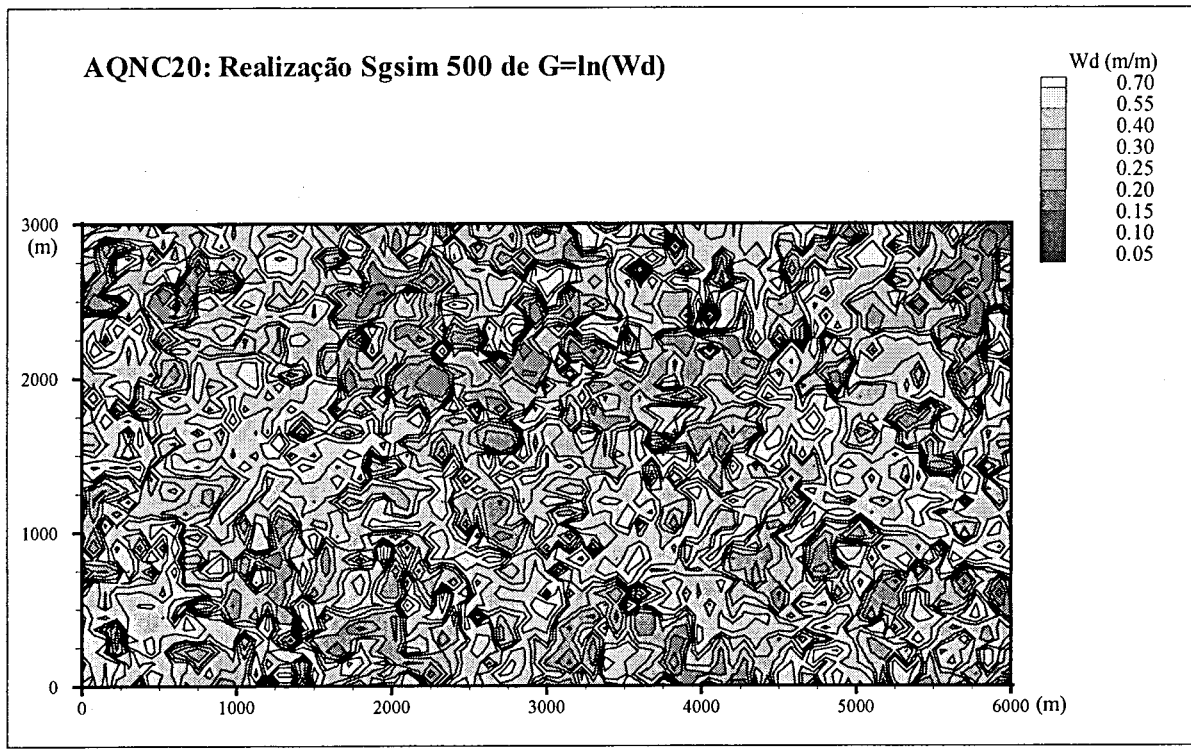



Figura 5.264 – AQNC20: Realização condicionada nº 500 de $G$=ln($\omega_{ij}$).

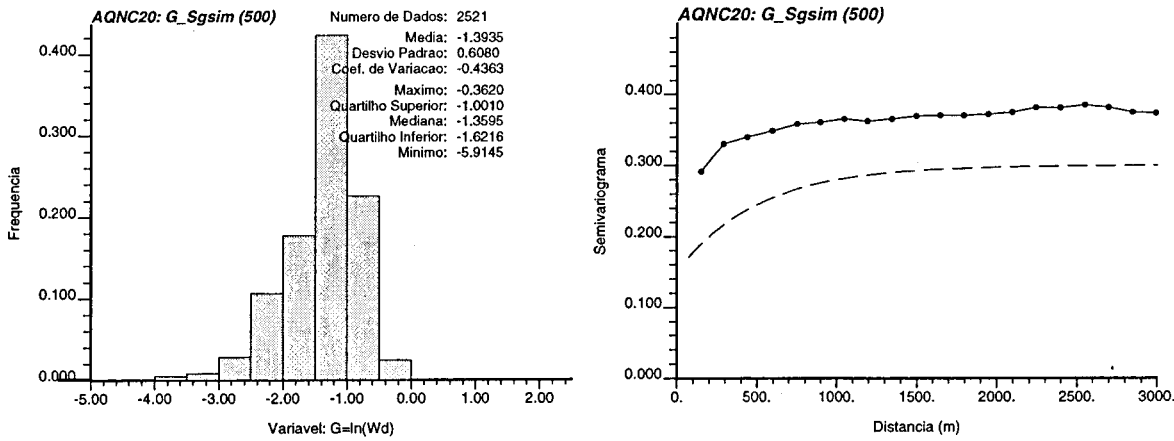



Figura 5.265 – AQNC20: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 500 de $G$=ln($\omega_{ij}$).

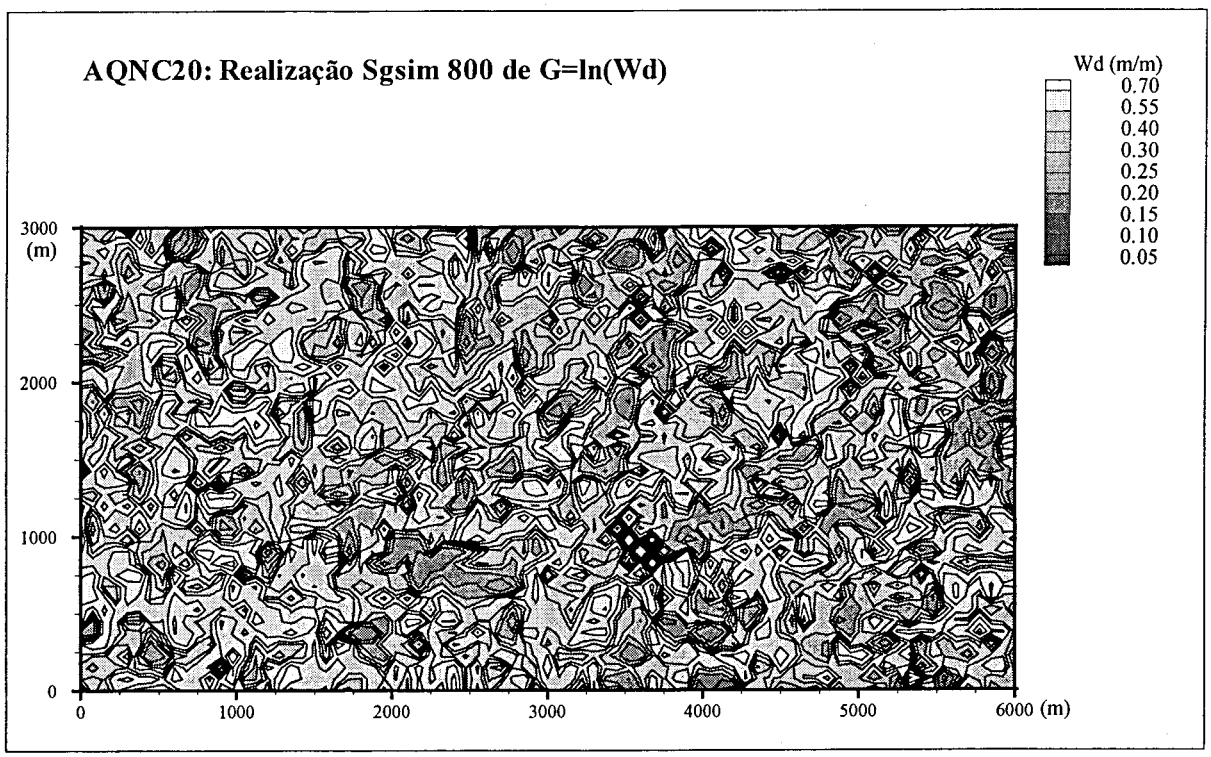



Figura 5.266 – AQNC20: Realização condicionada nº 800 de $G=\ln(\omega_i)$.

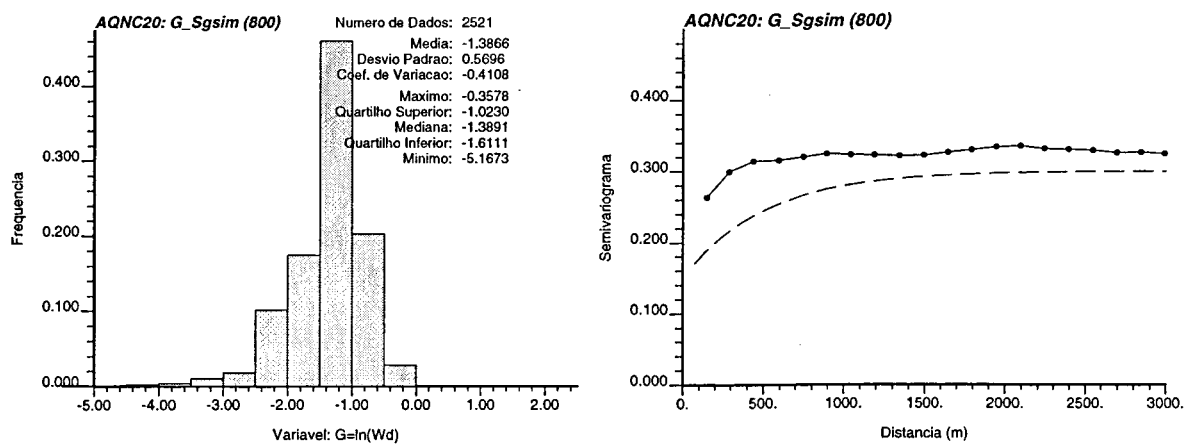



Figura 5.267 – AQNC20: Histograma e semivariograma experimentais da realização condicionada nº 800 de $G=\ln(\omega_i)$.

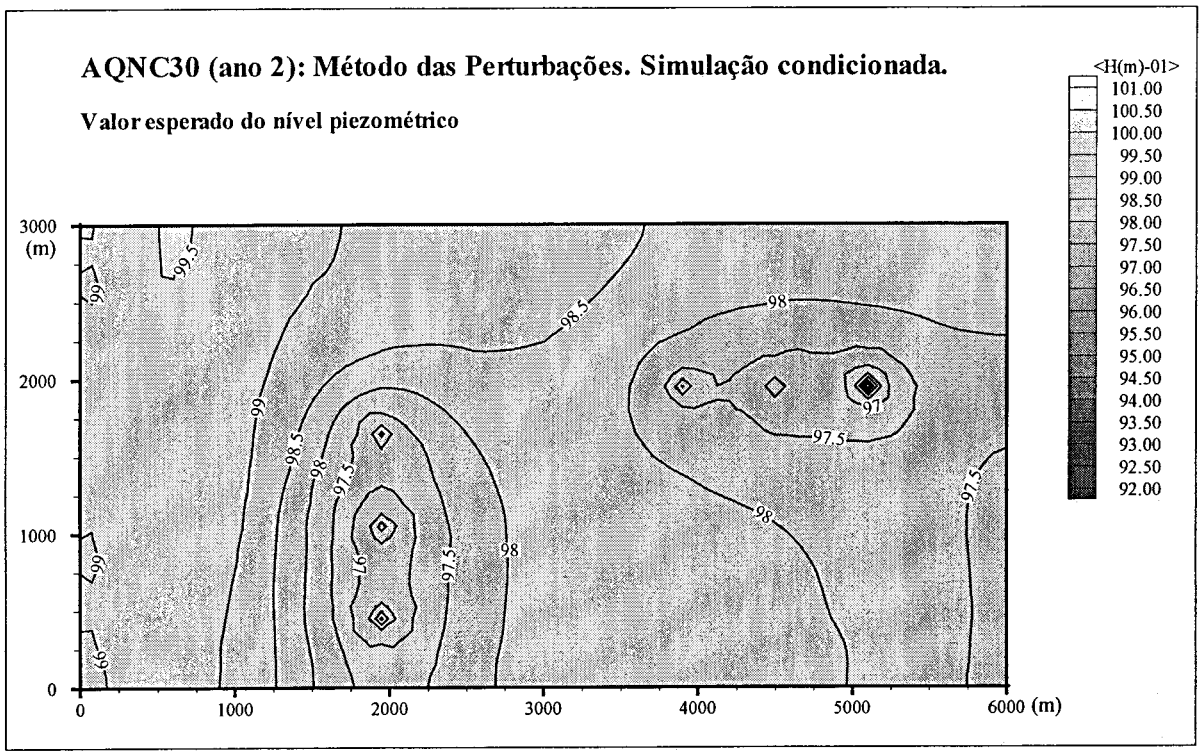



Figura 5.268 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 01.

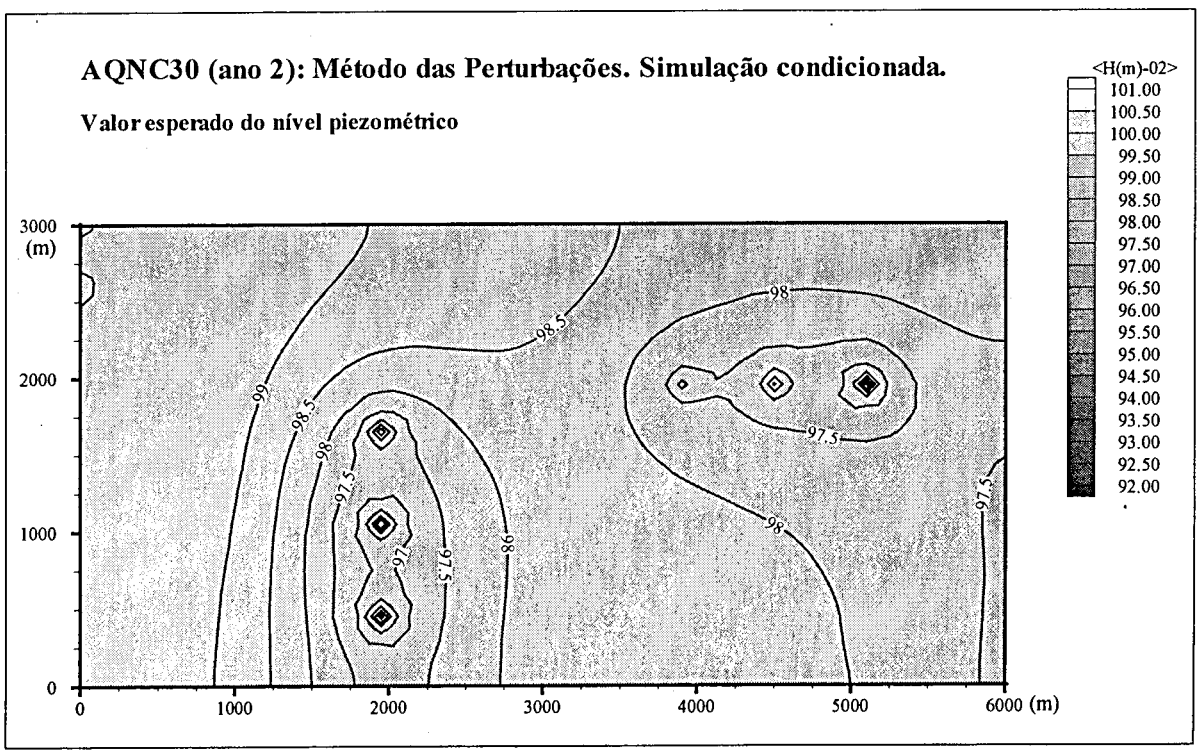



Figura 5.269 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 02.

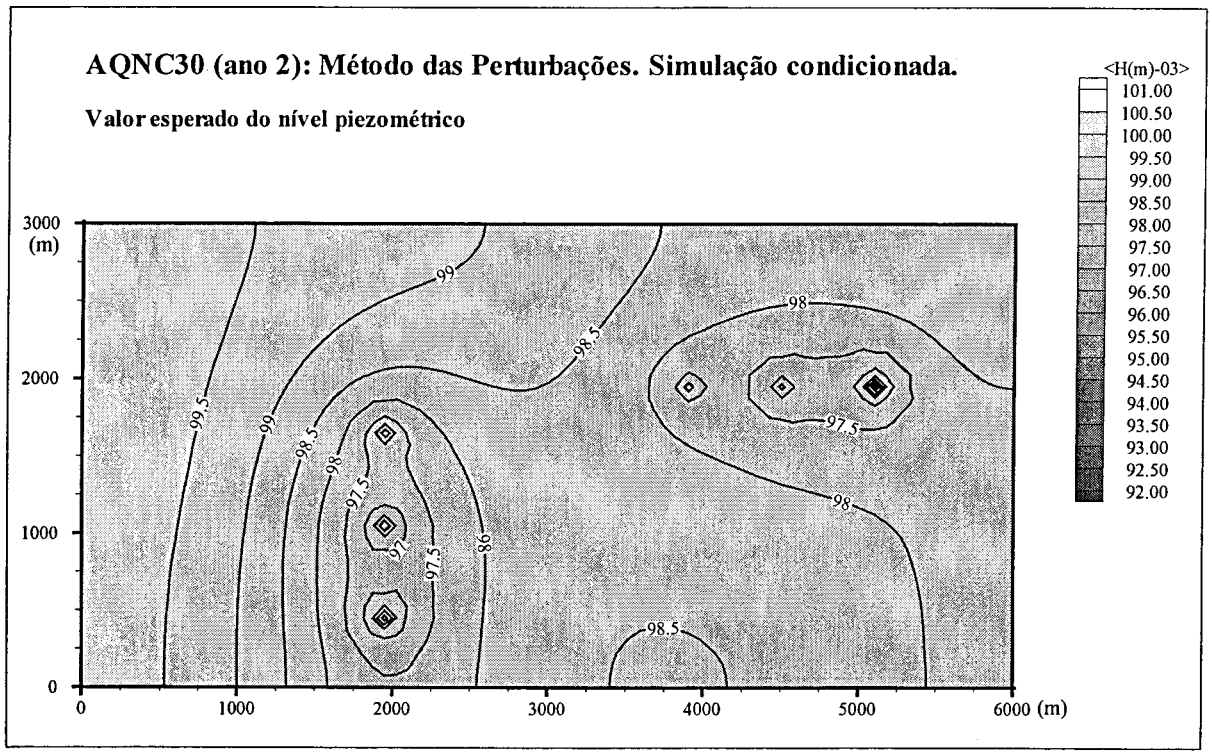



Figura 5.270 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 03.

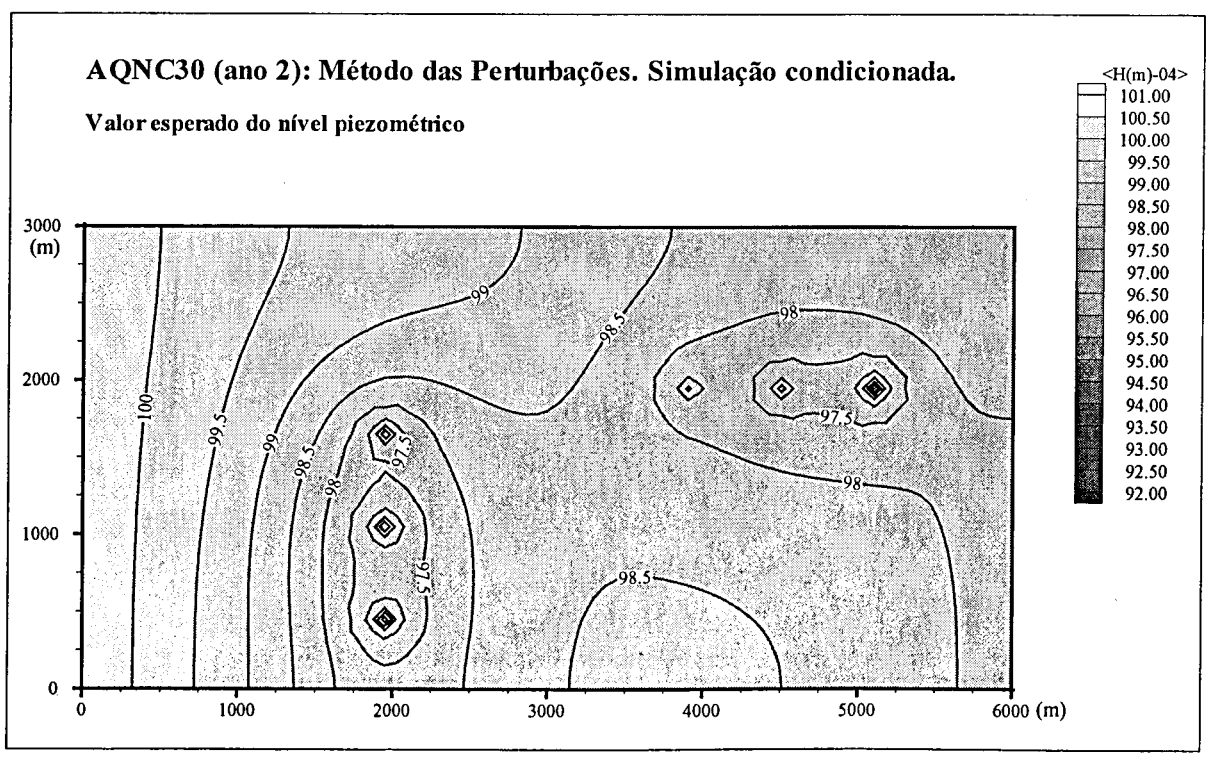



Figura 5.271 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 04.

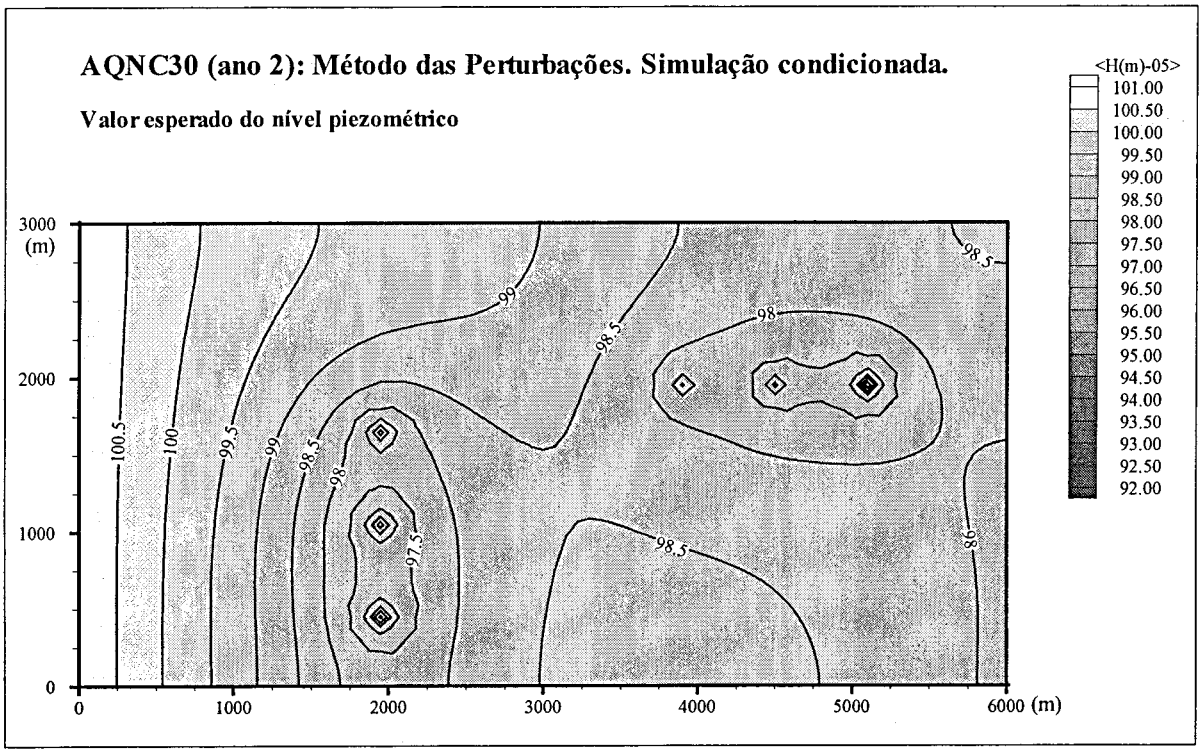



Figura 5.272 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 05.

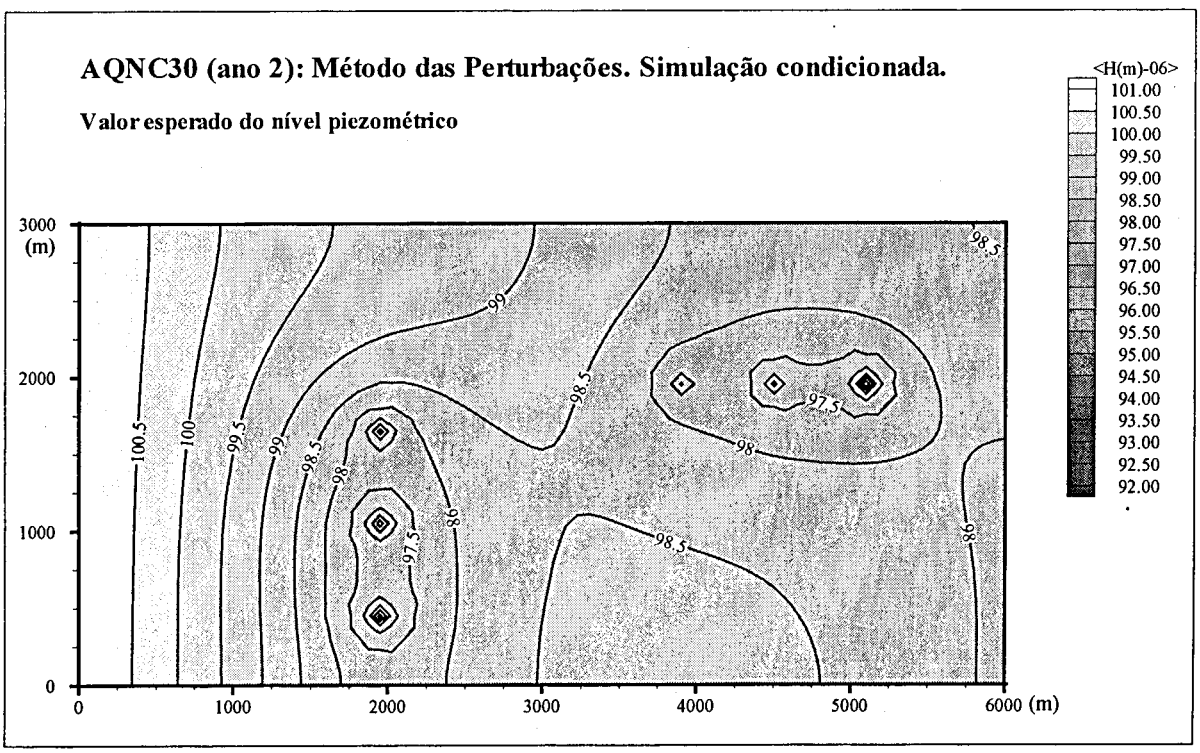



Figura 5.273 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 06.

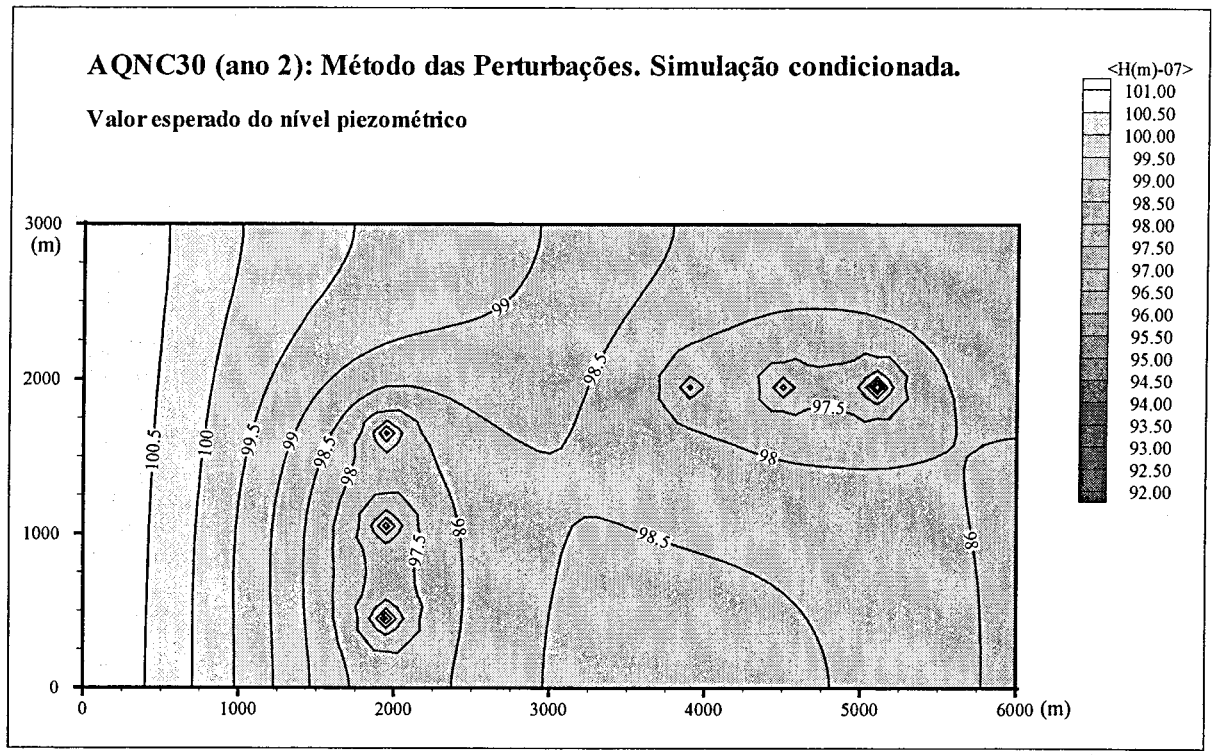



Figura 5.274 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 07.

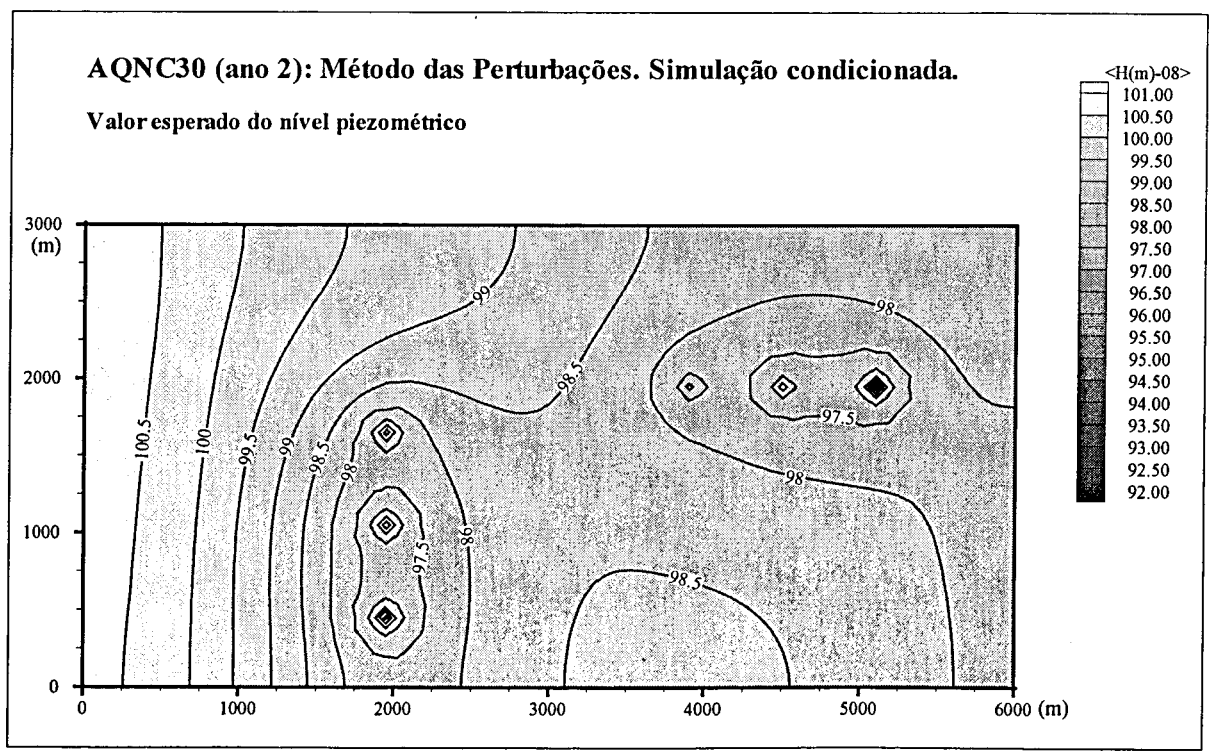



Figura 5.275 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 08.

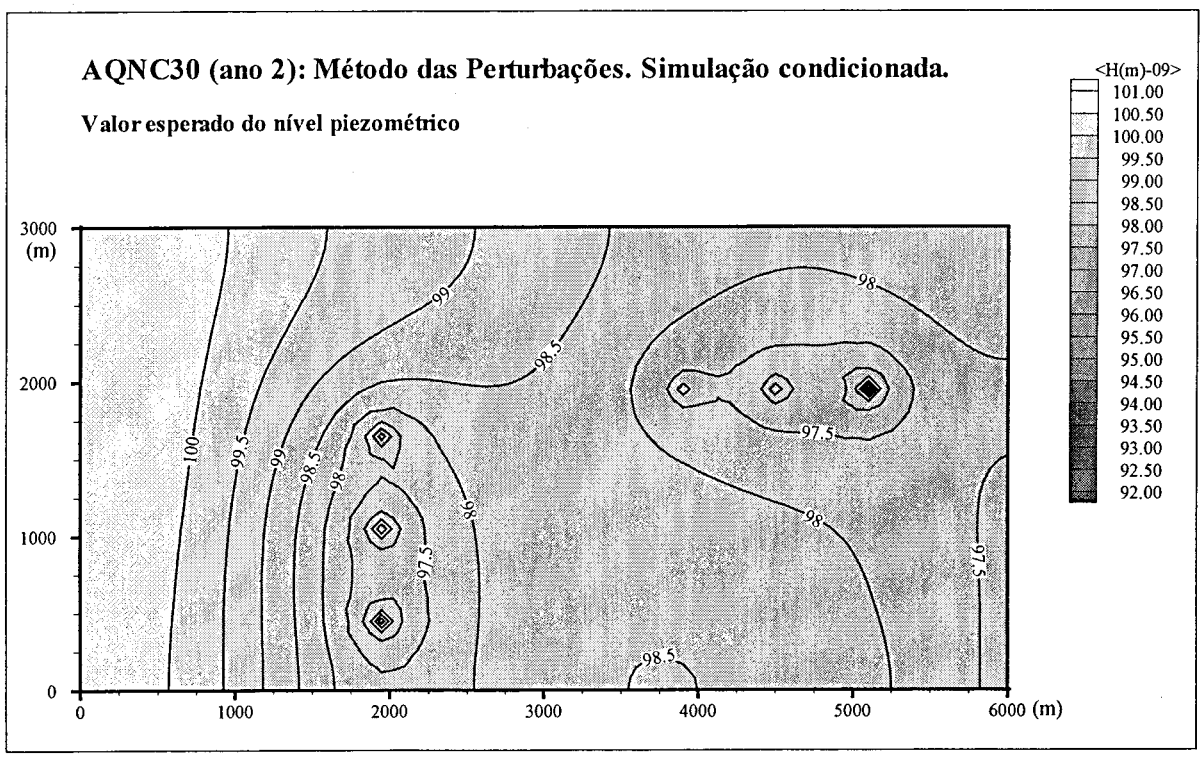



Figura 5.276 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 09.

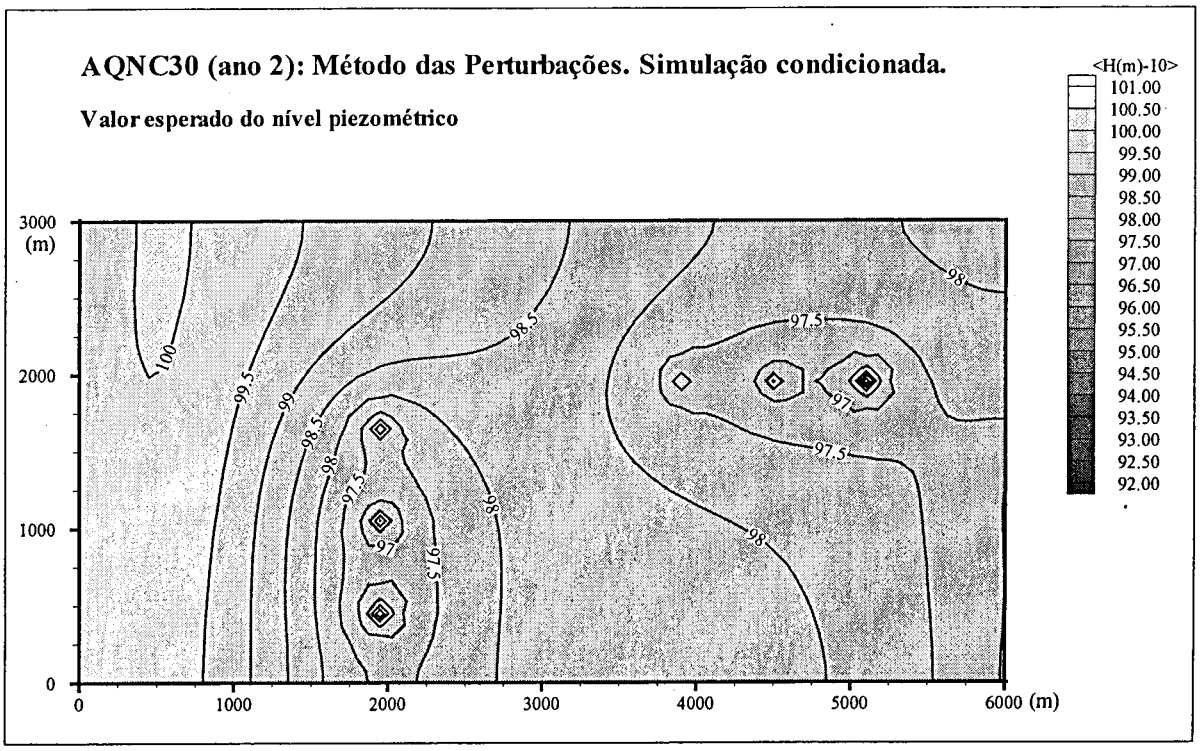



Figura 5.277 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 10.

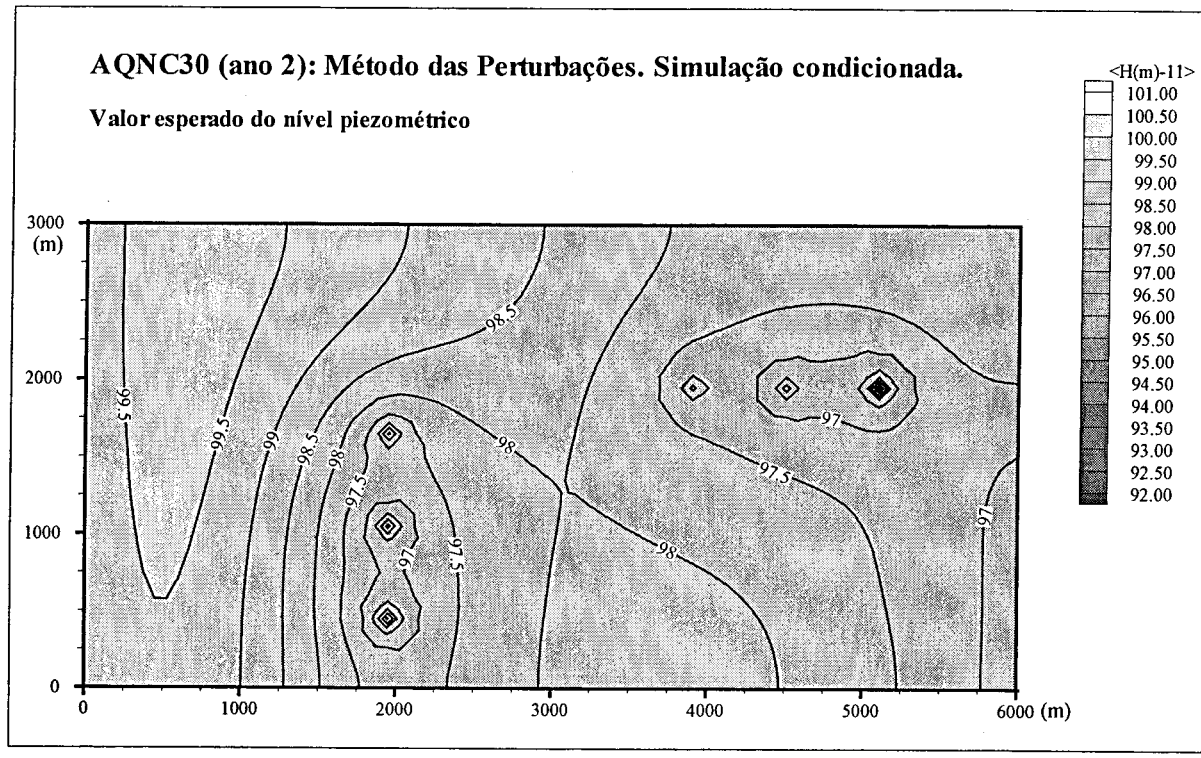



Figura 5.278 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 11.

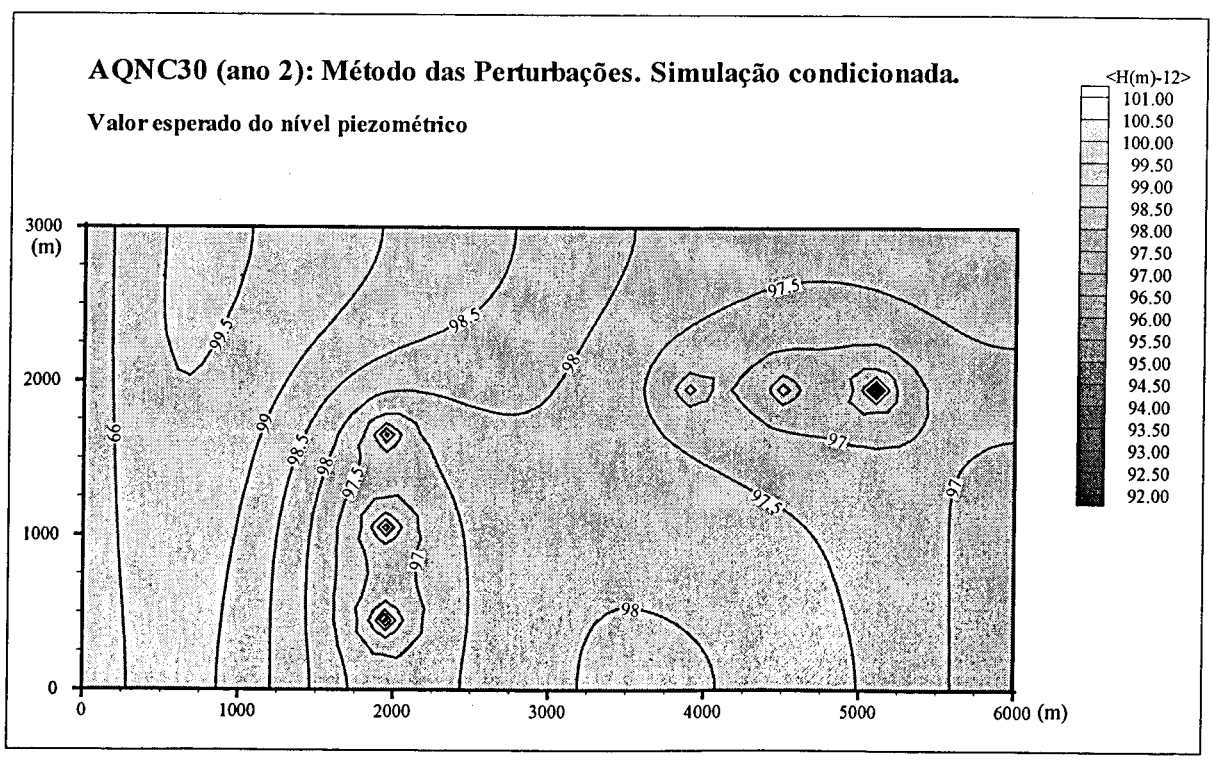



Figura 5.279 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Piezometria esperada, no final do mês 12.

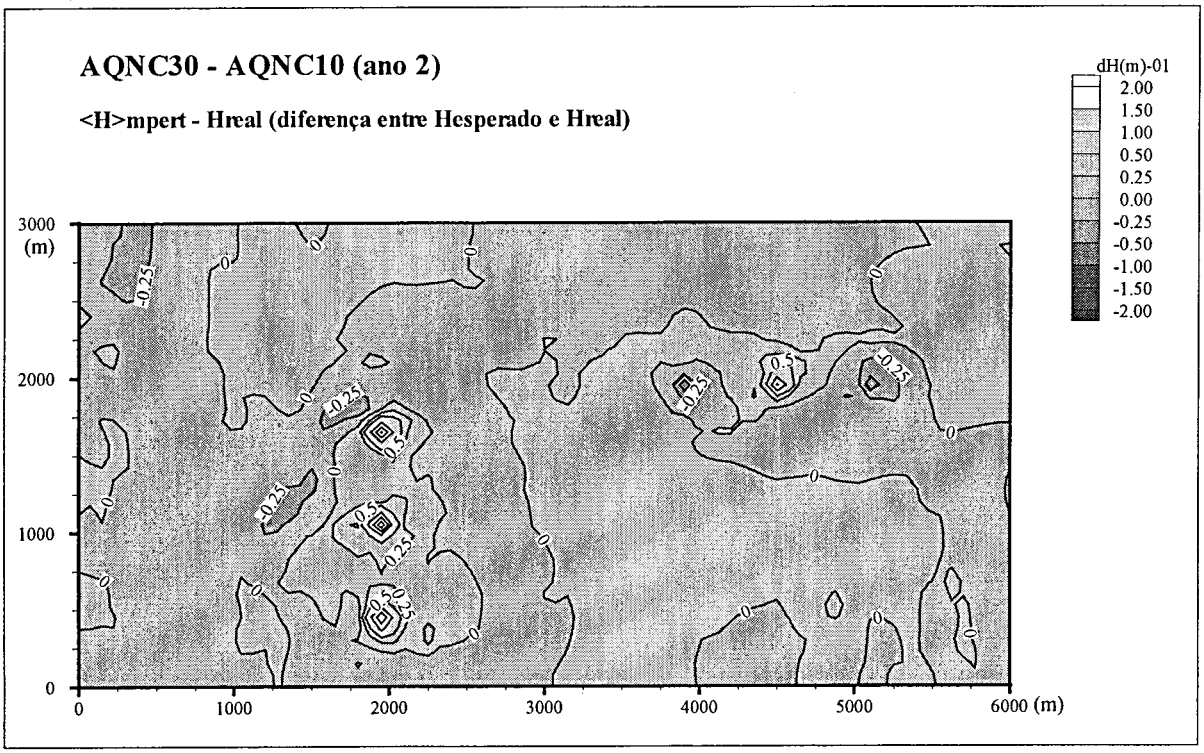



Figura 5.280 – AQNC30-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 01.

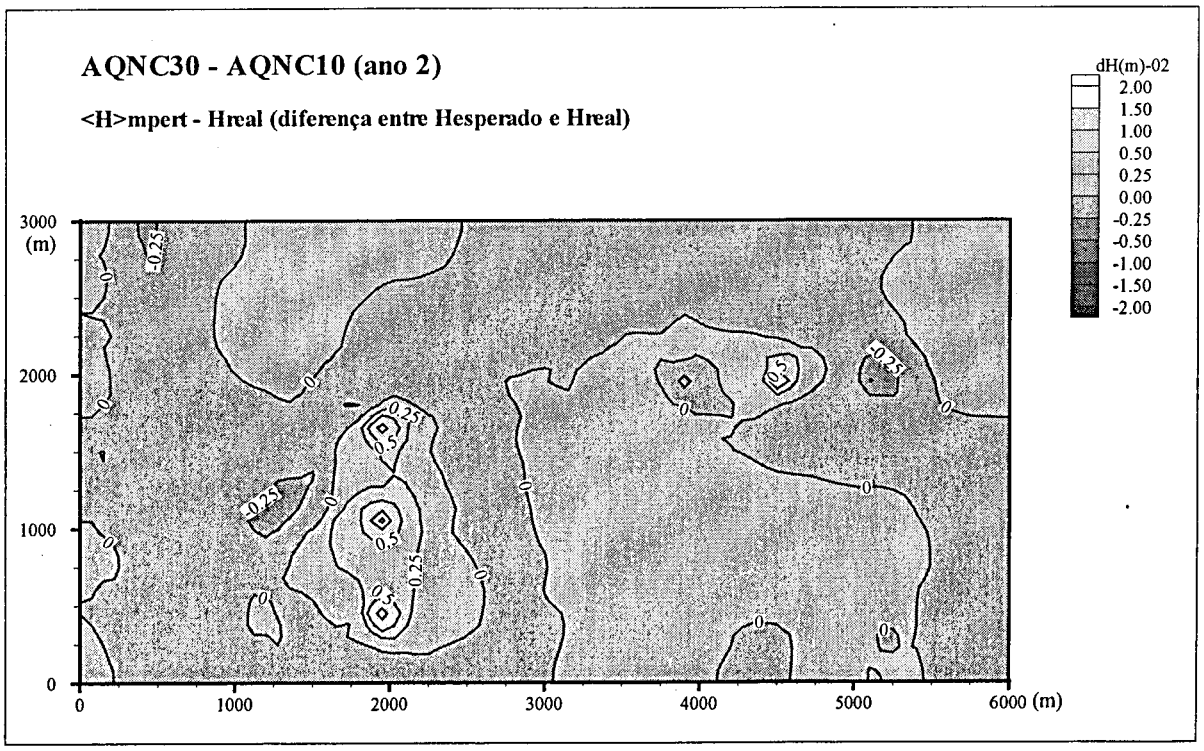



Figura 5.281 – AQNC30-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 02.

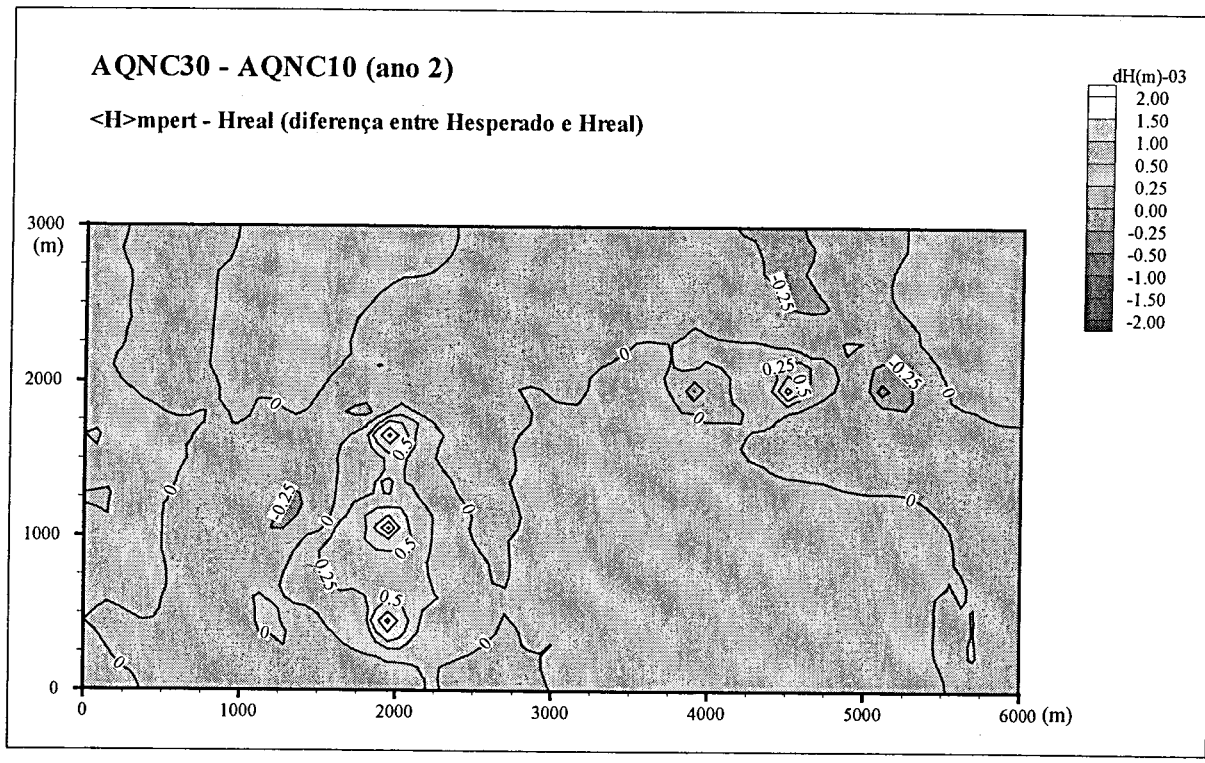



Figura 5.282 – AQNC30-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 03.

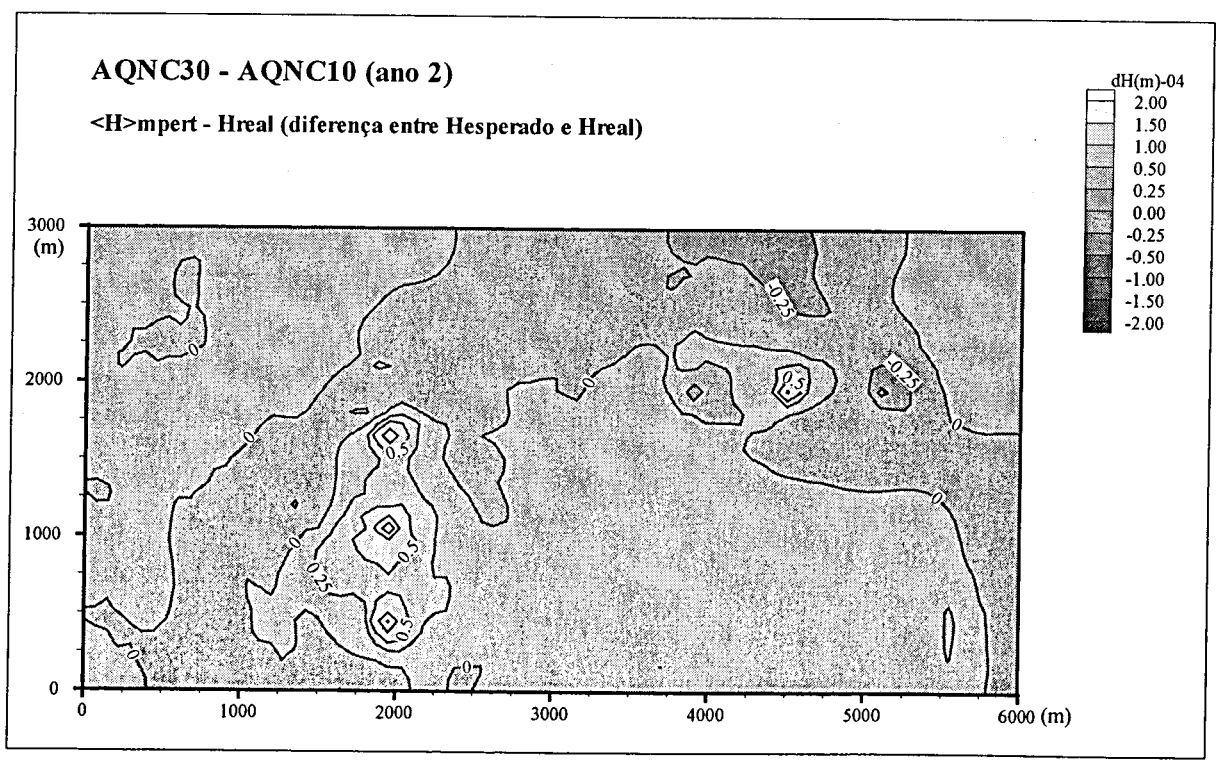



Figura 5.283 – AQNC30-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 04.

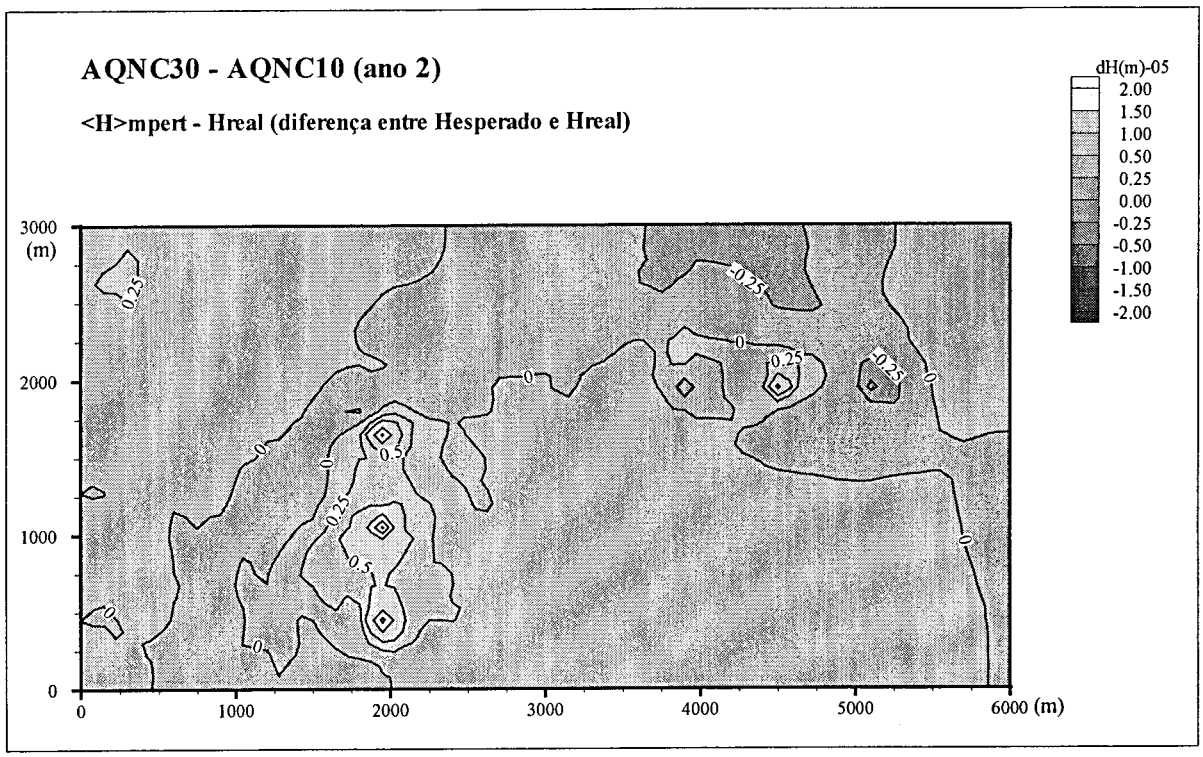



Figura 5.284 – AQNC30-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 05.

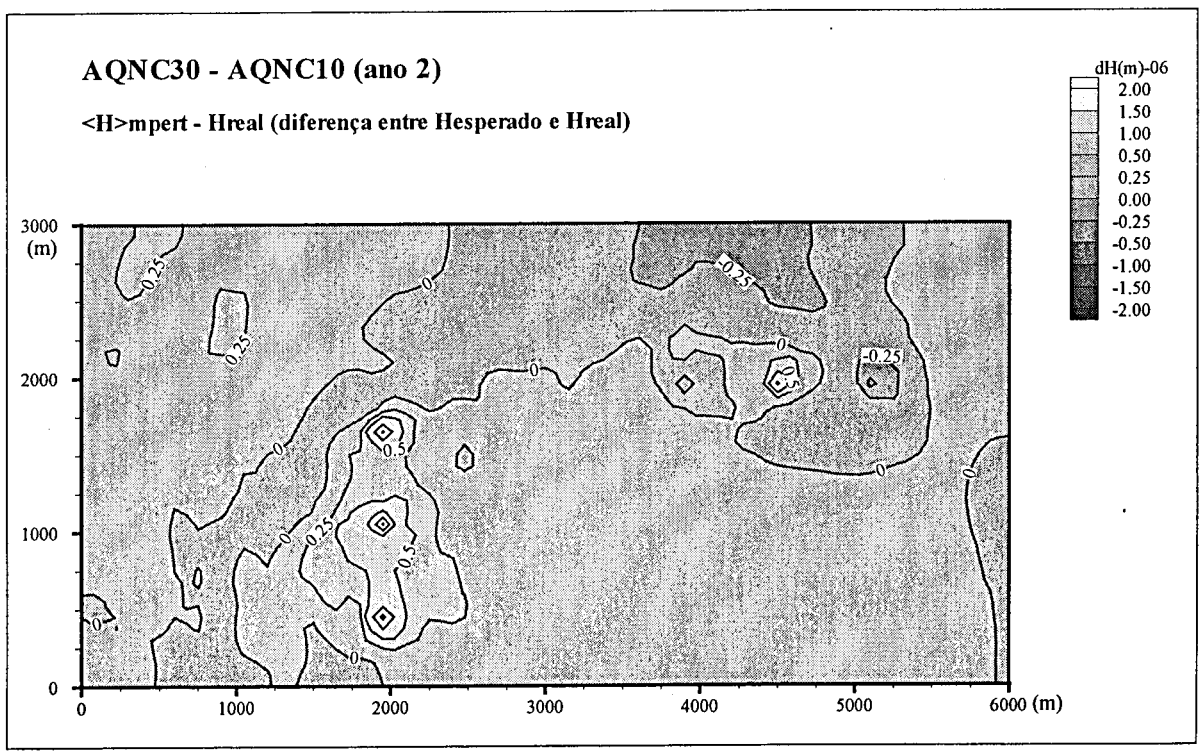



Figura 5.285 – AQNC30-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 06.

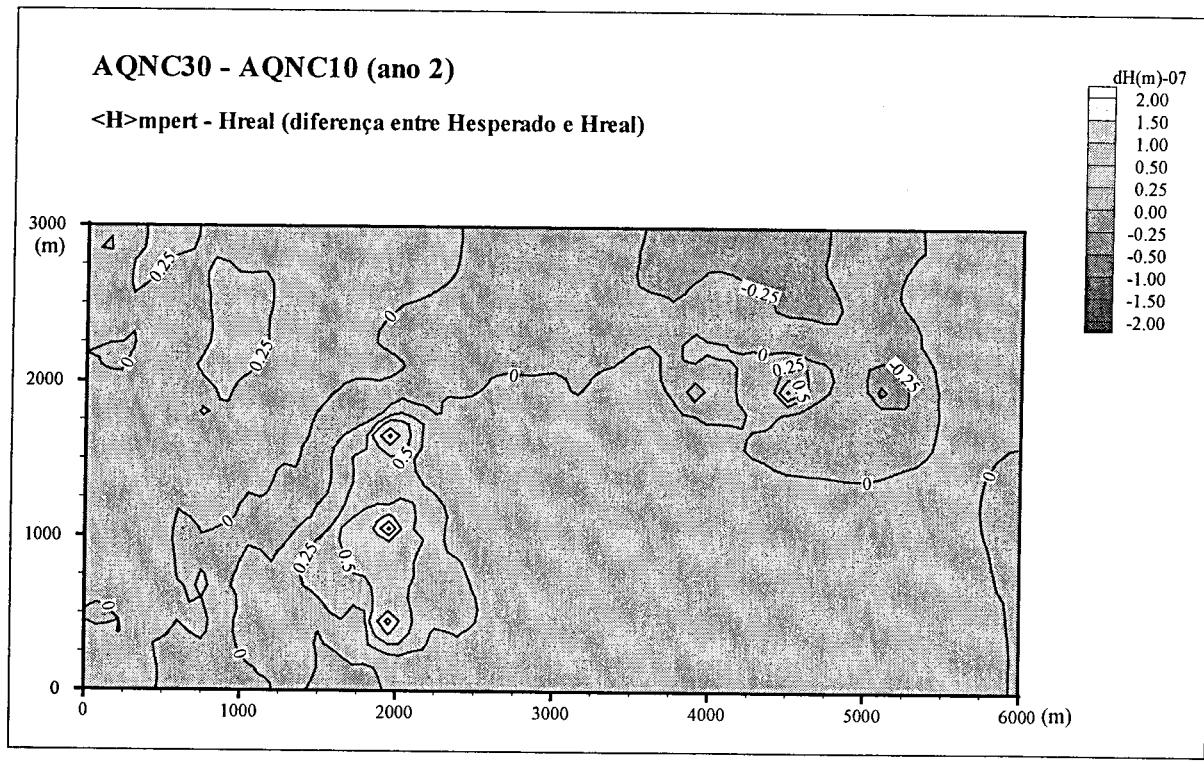



Figura 5.286 – AQNC30-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 07.

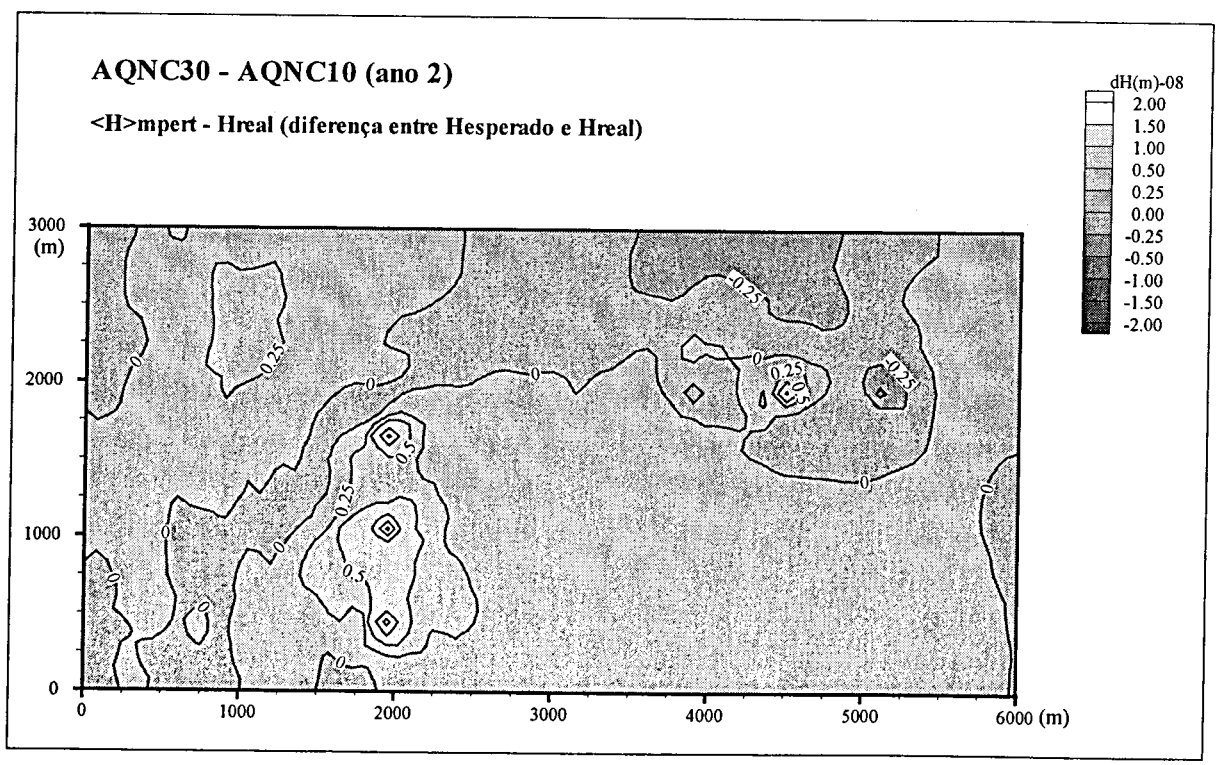



Figura 5.287 – AQNC30-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 08.

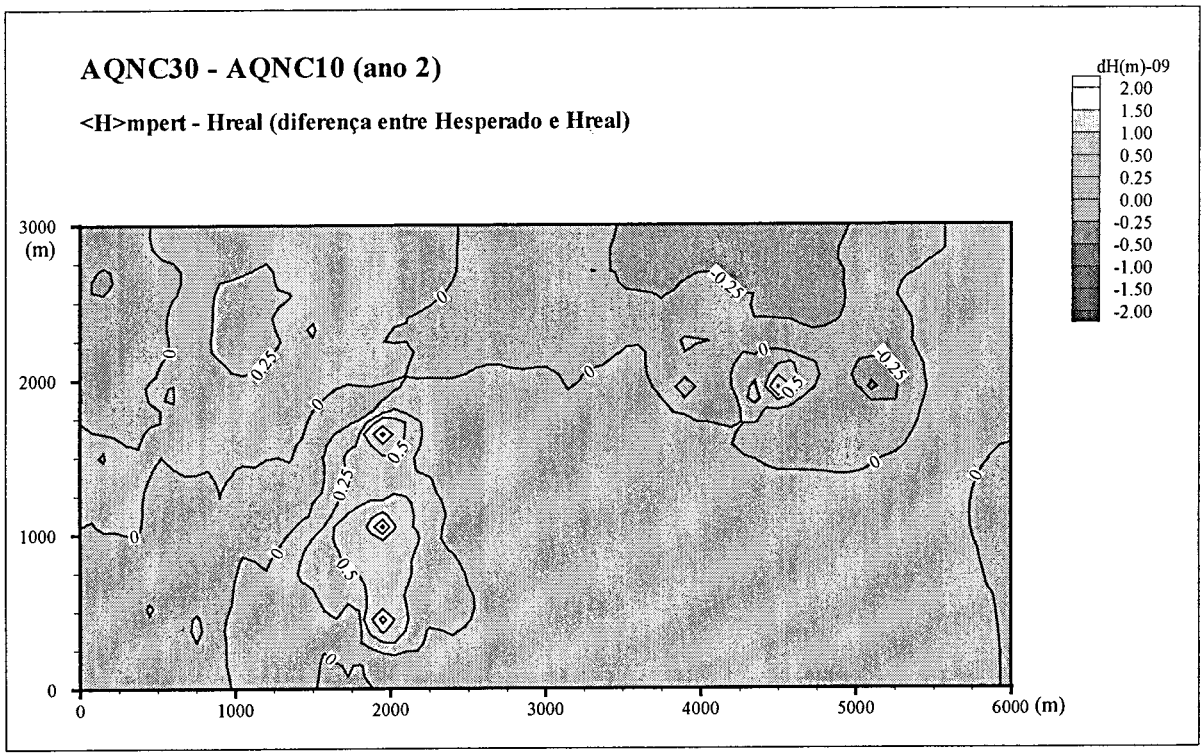



Figura 5.288 – AQNC30-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 09.

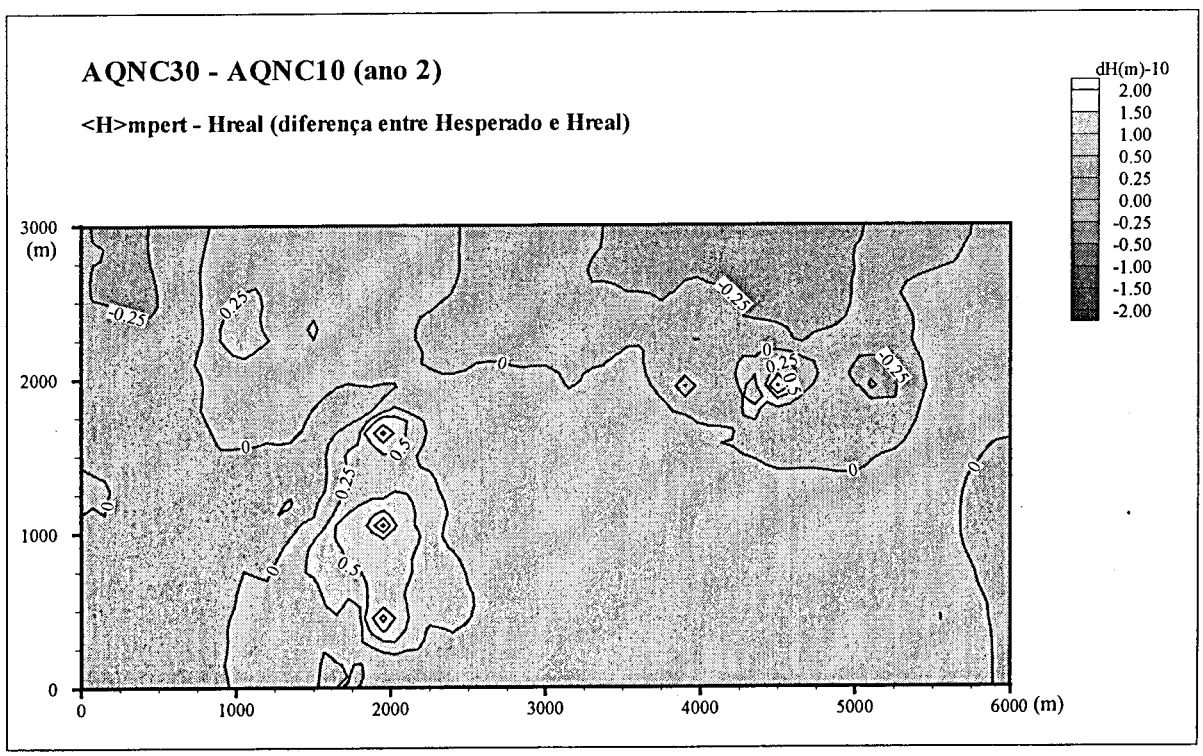



Figura 5.289 – AQNC30-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 10.

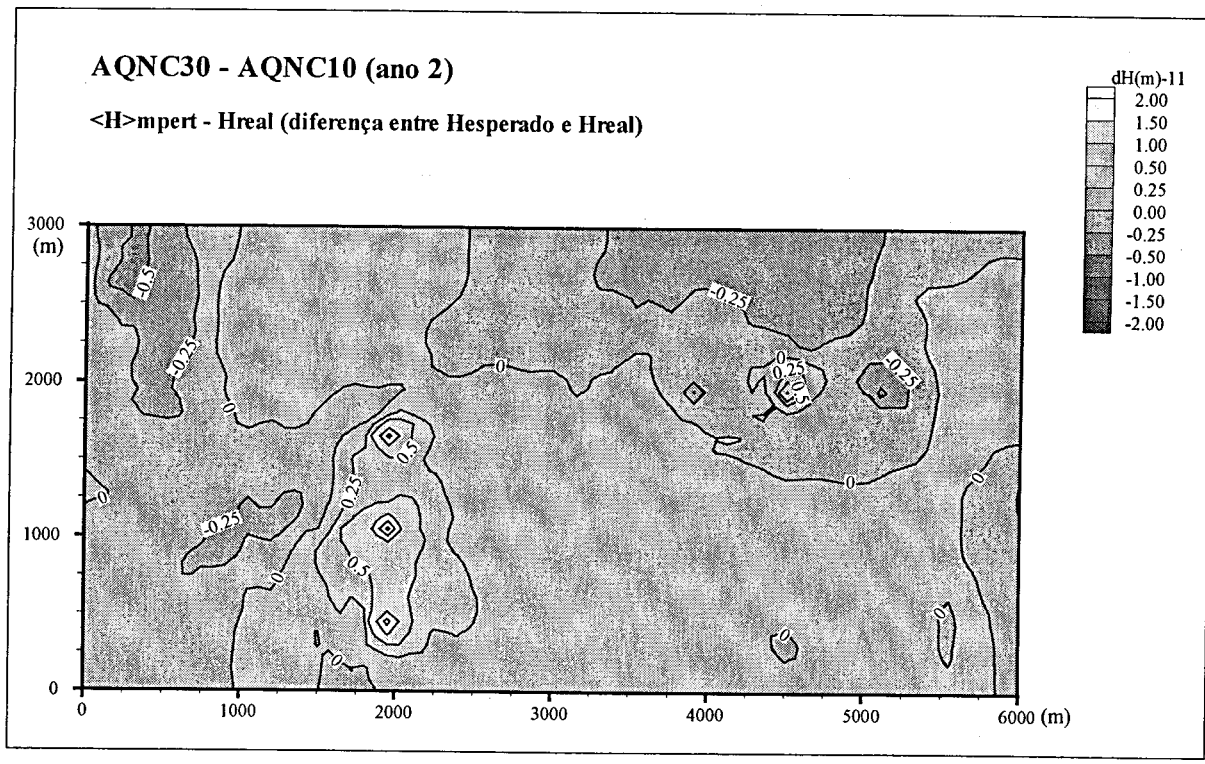



Figura 5.290 – AQNC30-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 11.

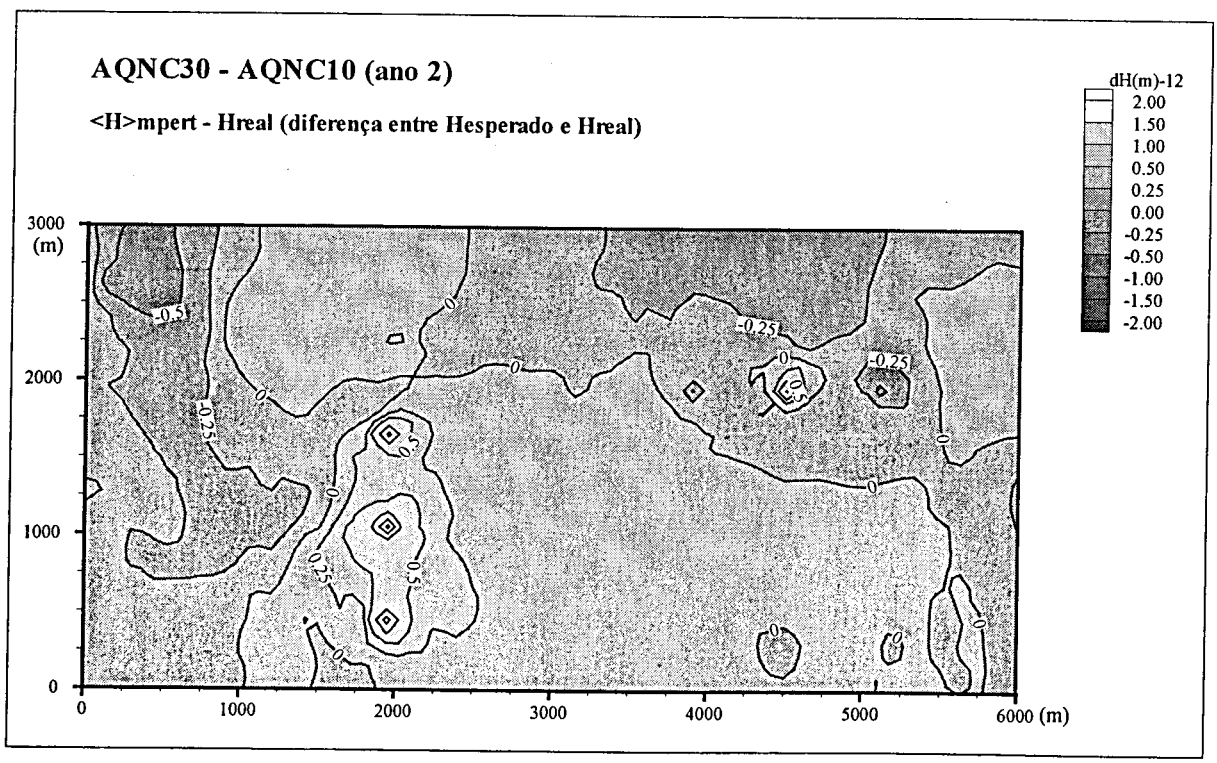



Figura 5.291 – AQNC30-AQNC10: Diferença entre a piezometria esperada (método das perturbações) e a piezometria "real" ( $\langle H \rangle_{smcc} - H$ ), no fim do mês 12.

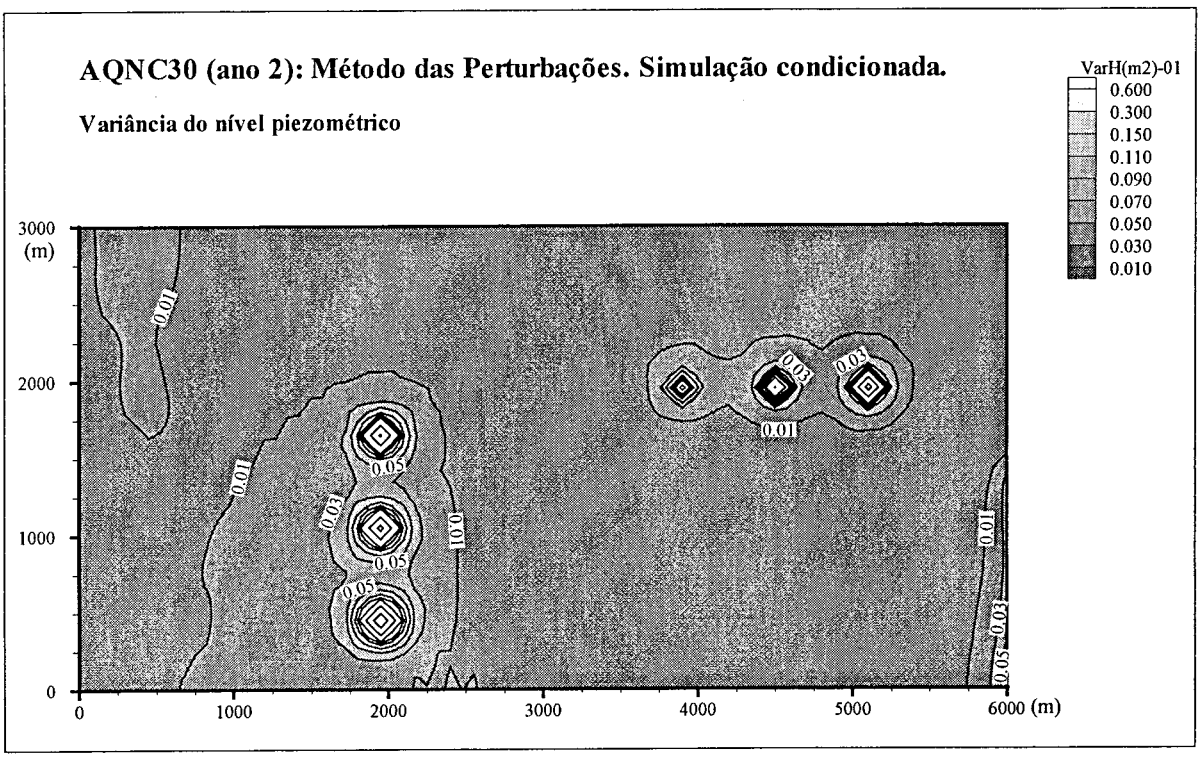



Figura 5.292 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 01.

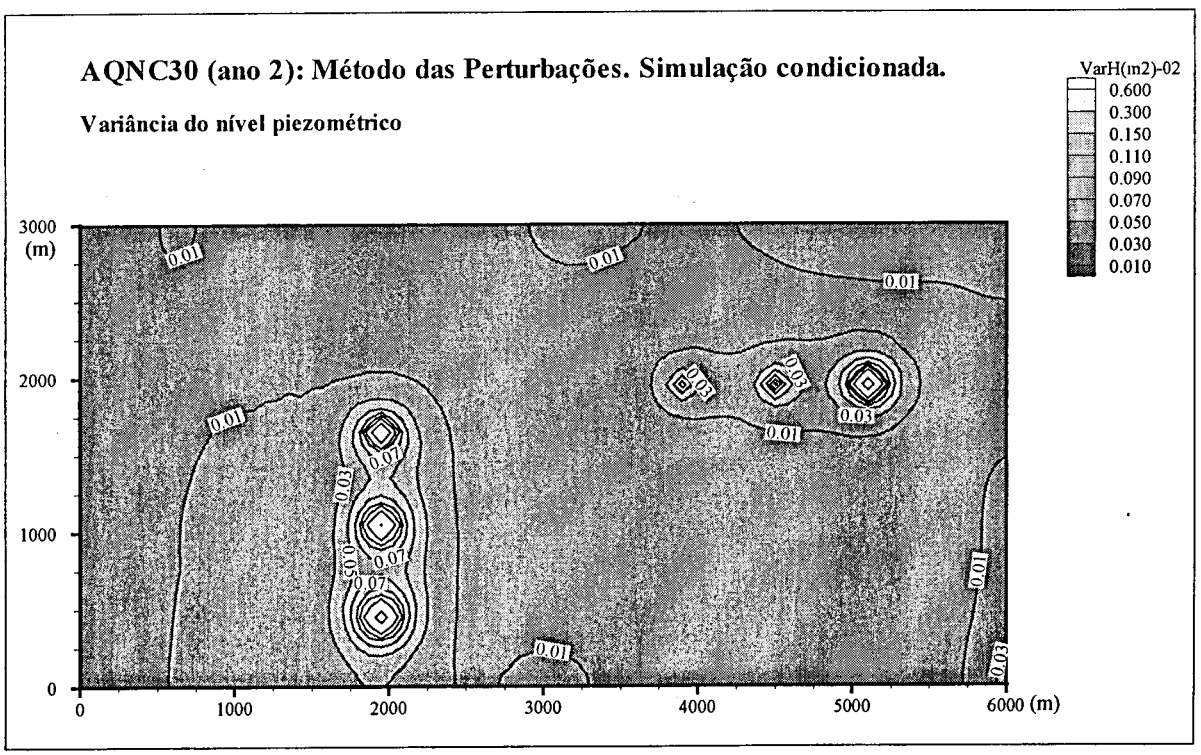



Figura 5.293 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 02.

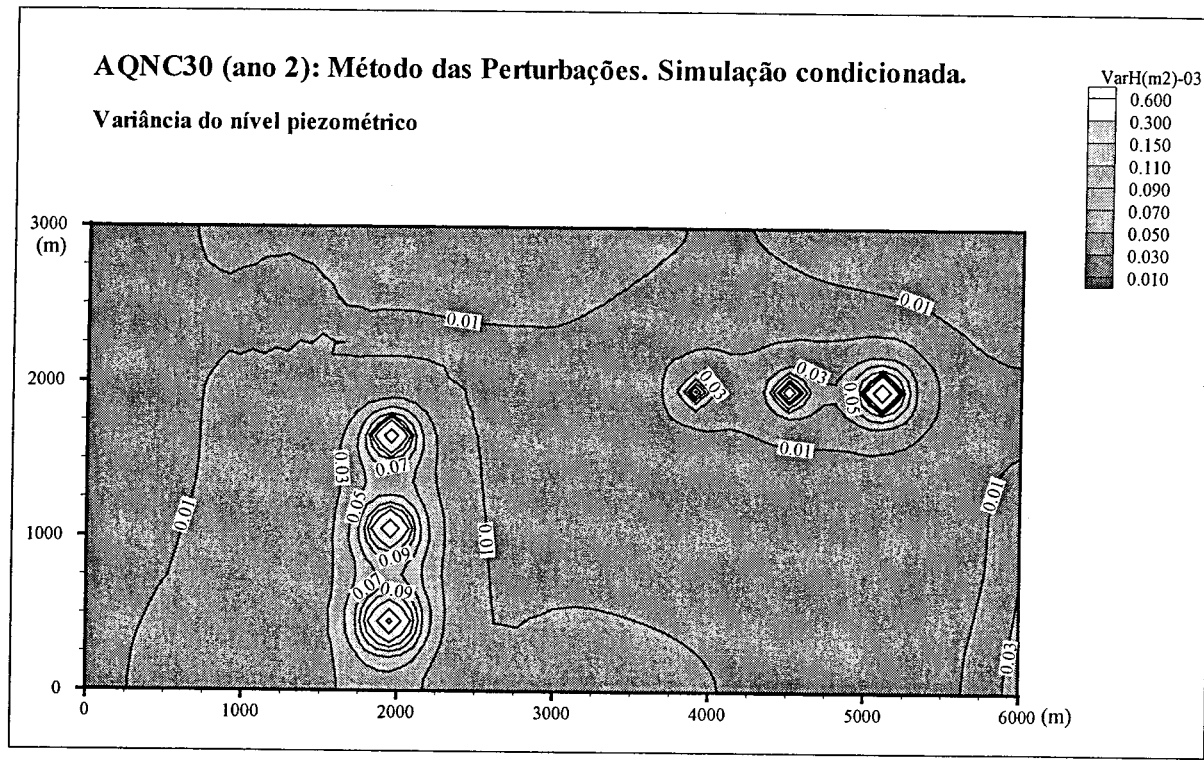



Figura 5.294 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 03.

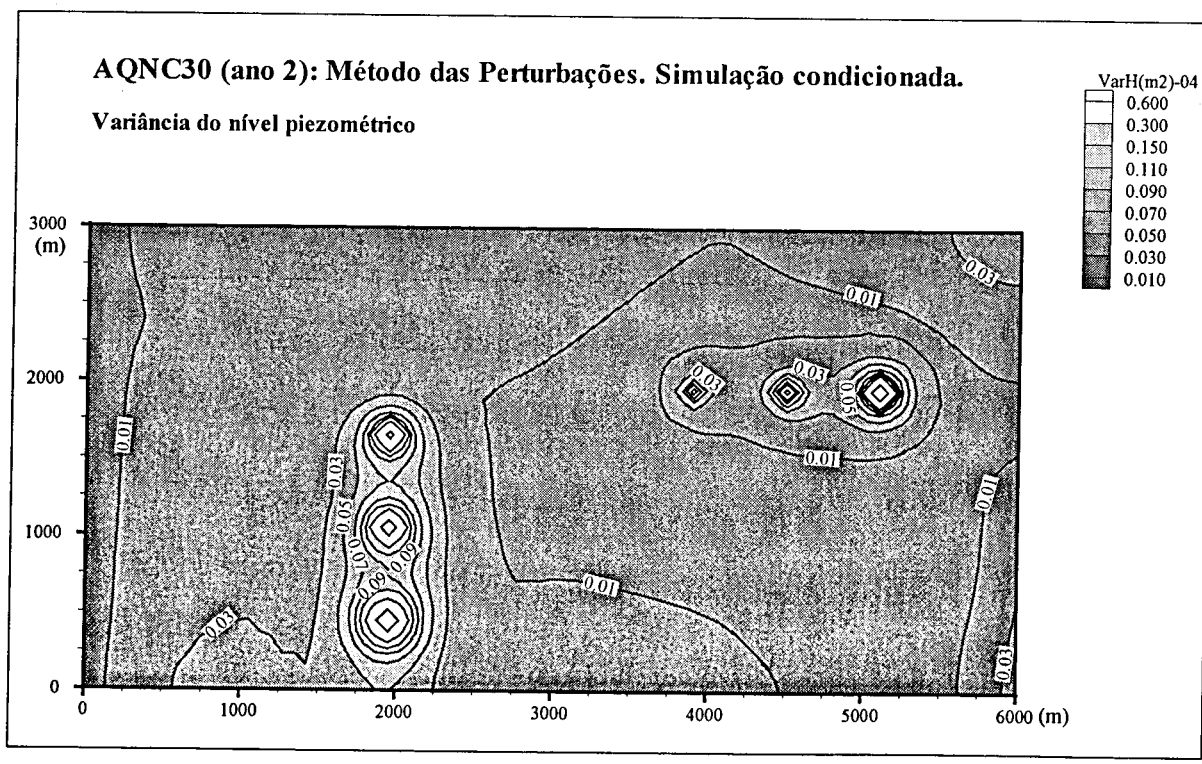



Figura 5.295 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 04.

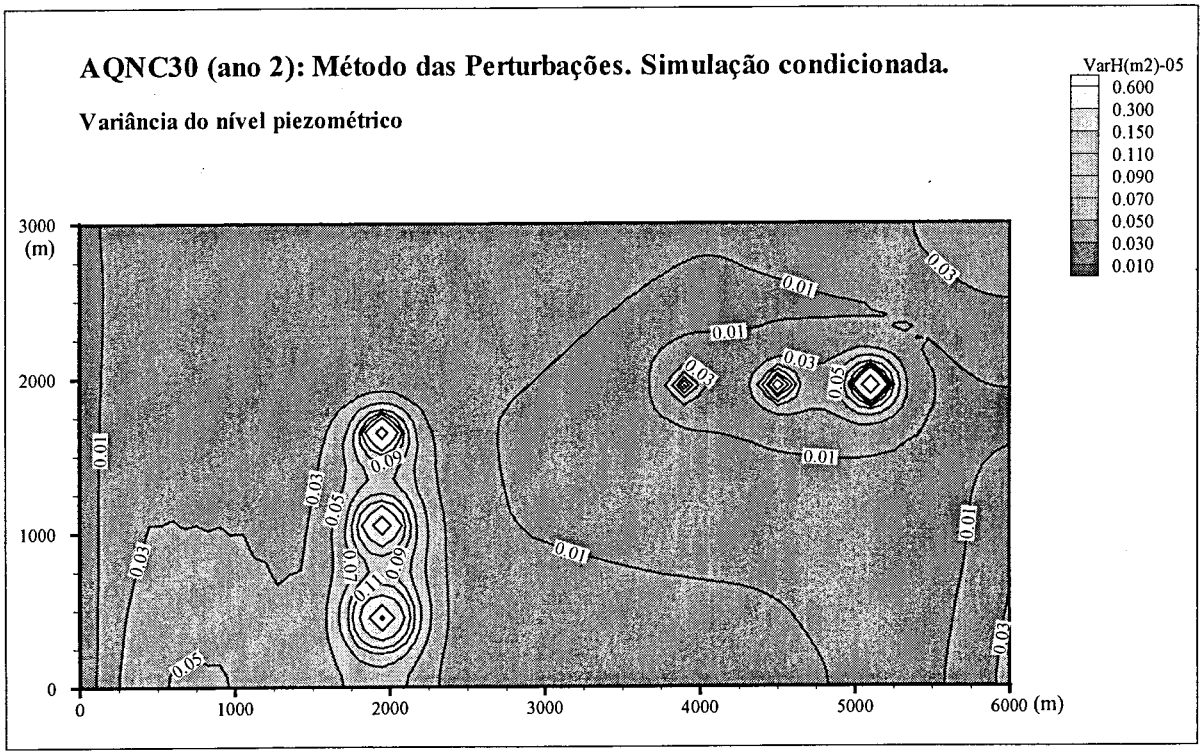



Figura 5.296 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 05.

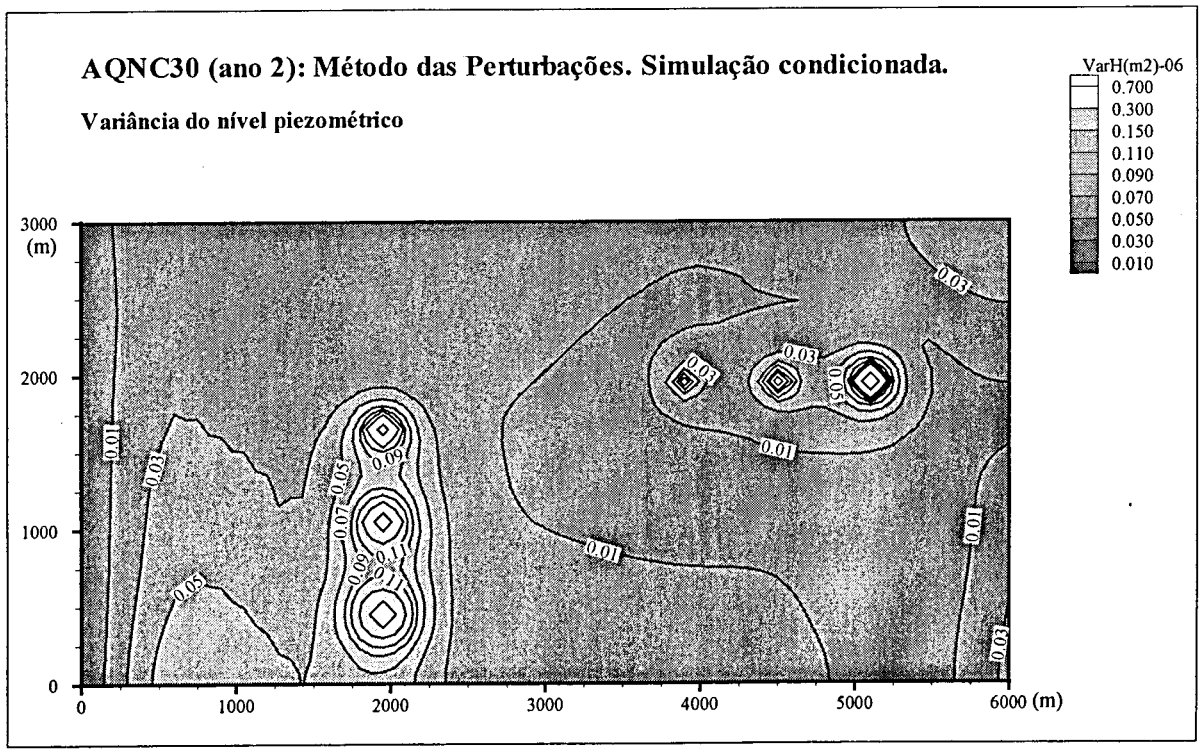



Figura 5.297 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 06.

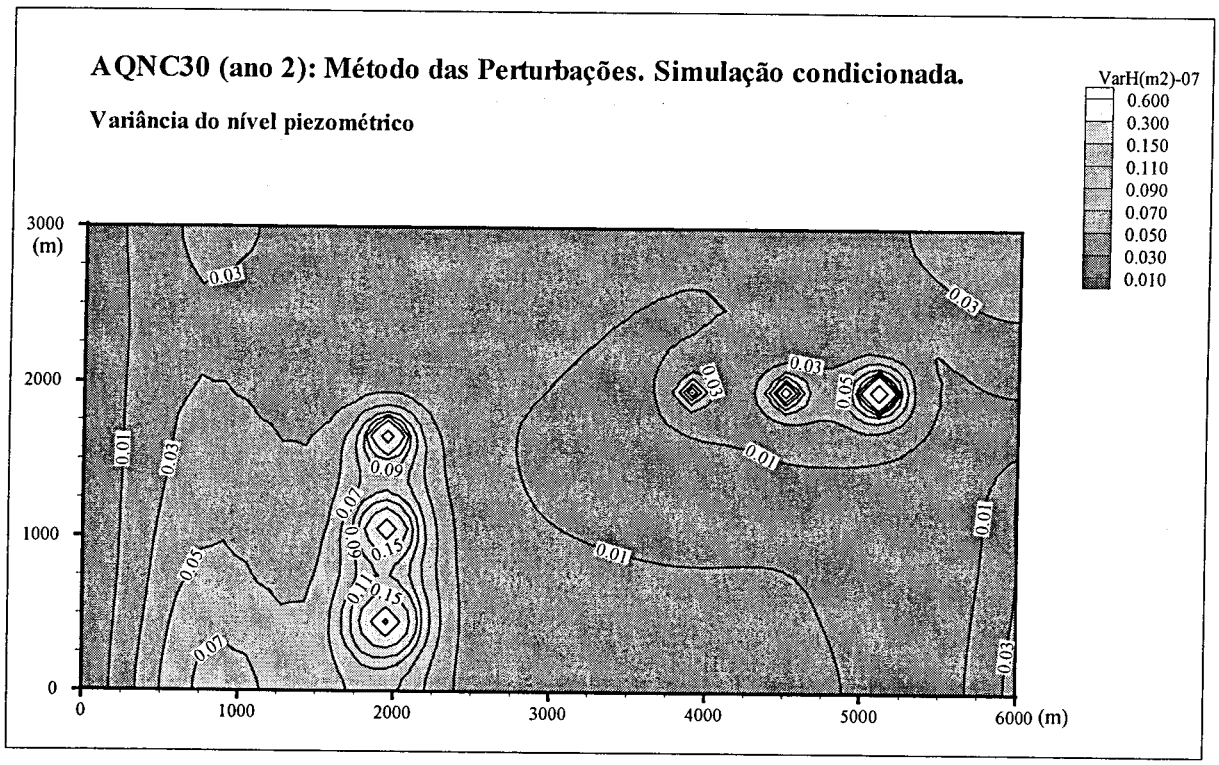



Figura 5.298 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 07.

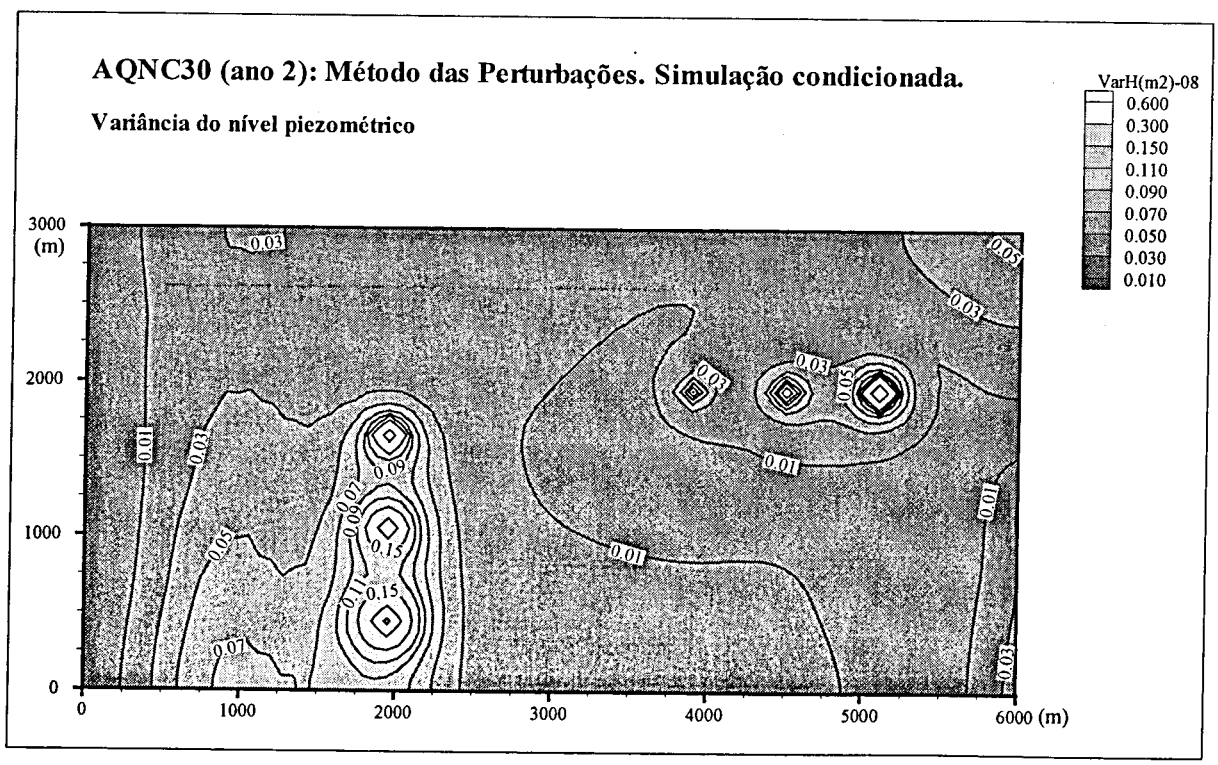



Figura 5.299 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 08.

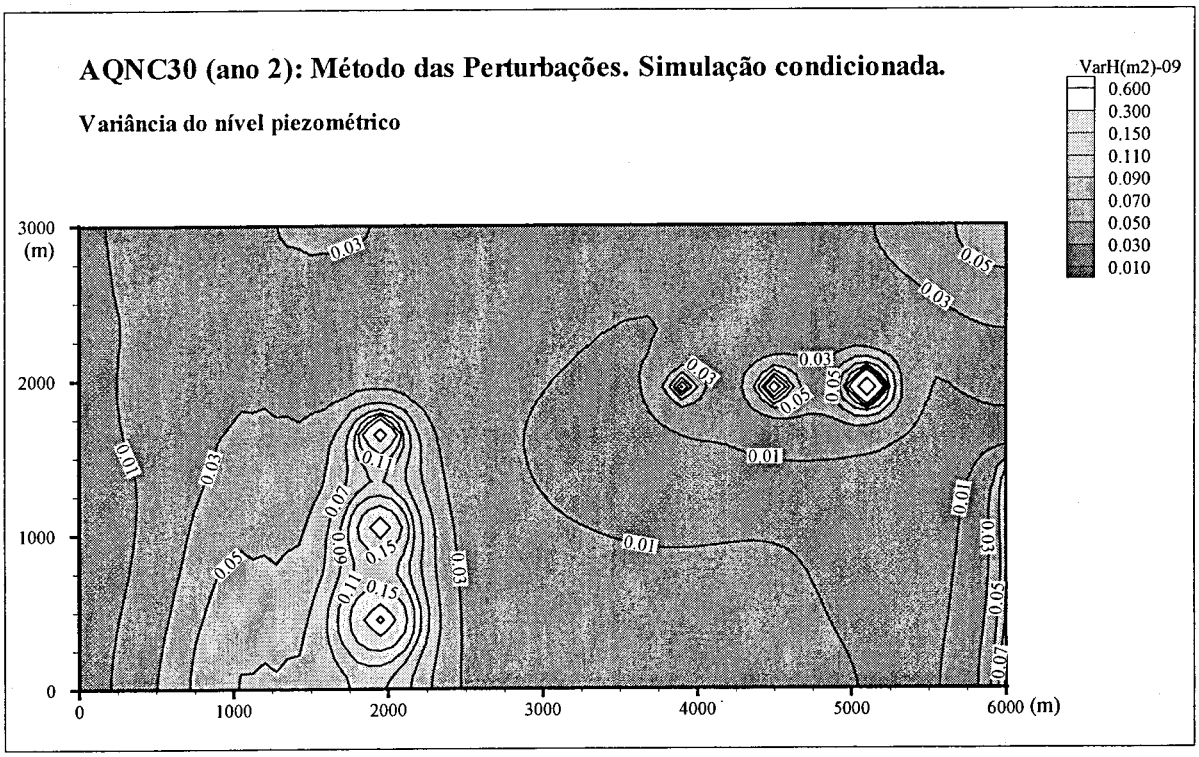



Figura 5.300 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 09.

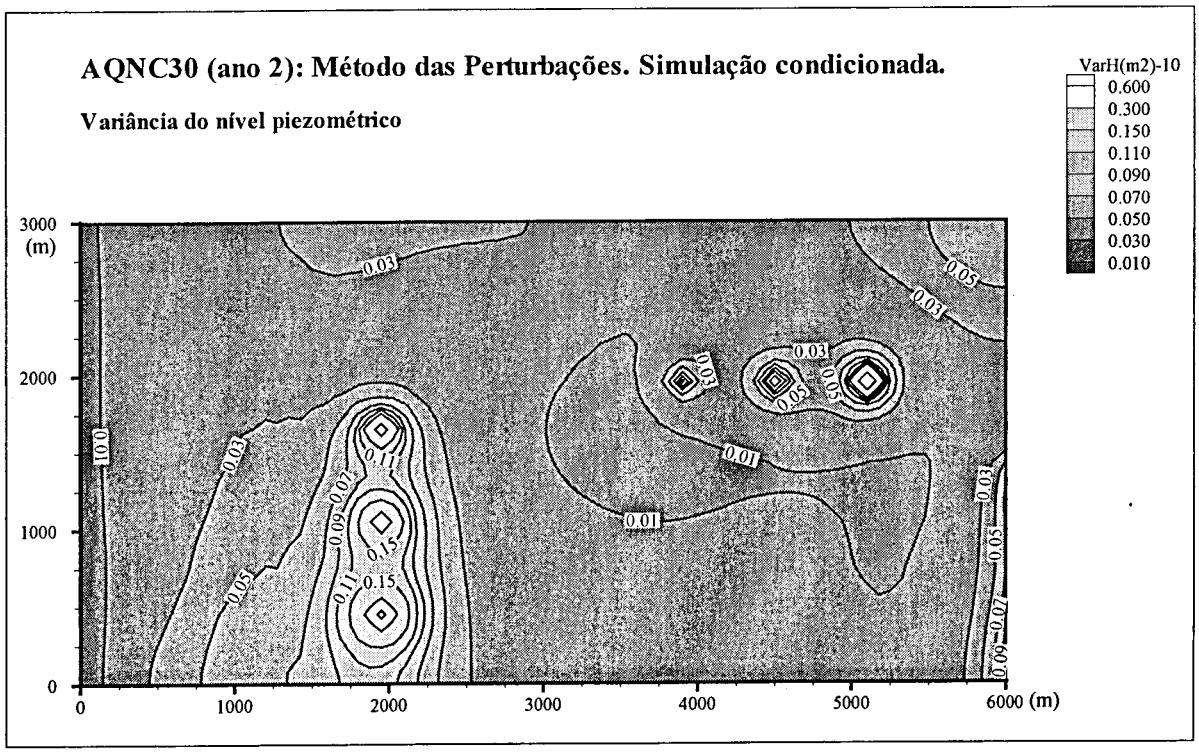



Figura 5.301 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 10.

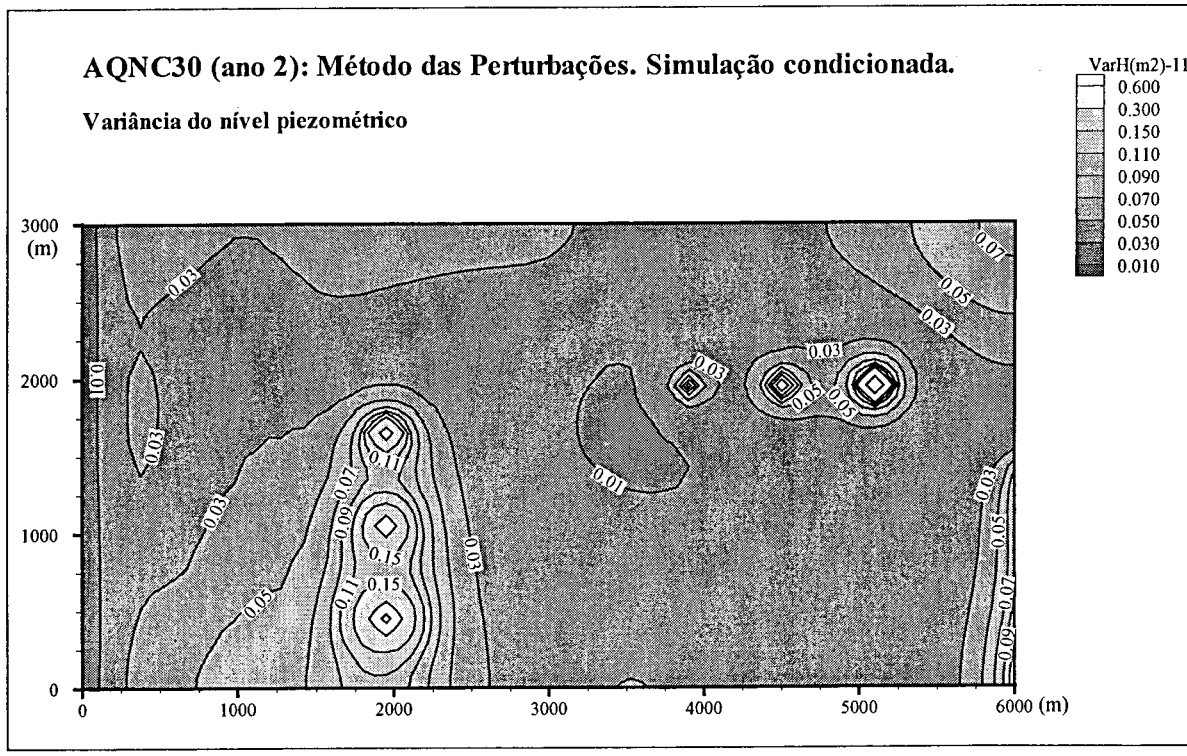



Figura 5.302 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 11.

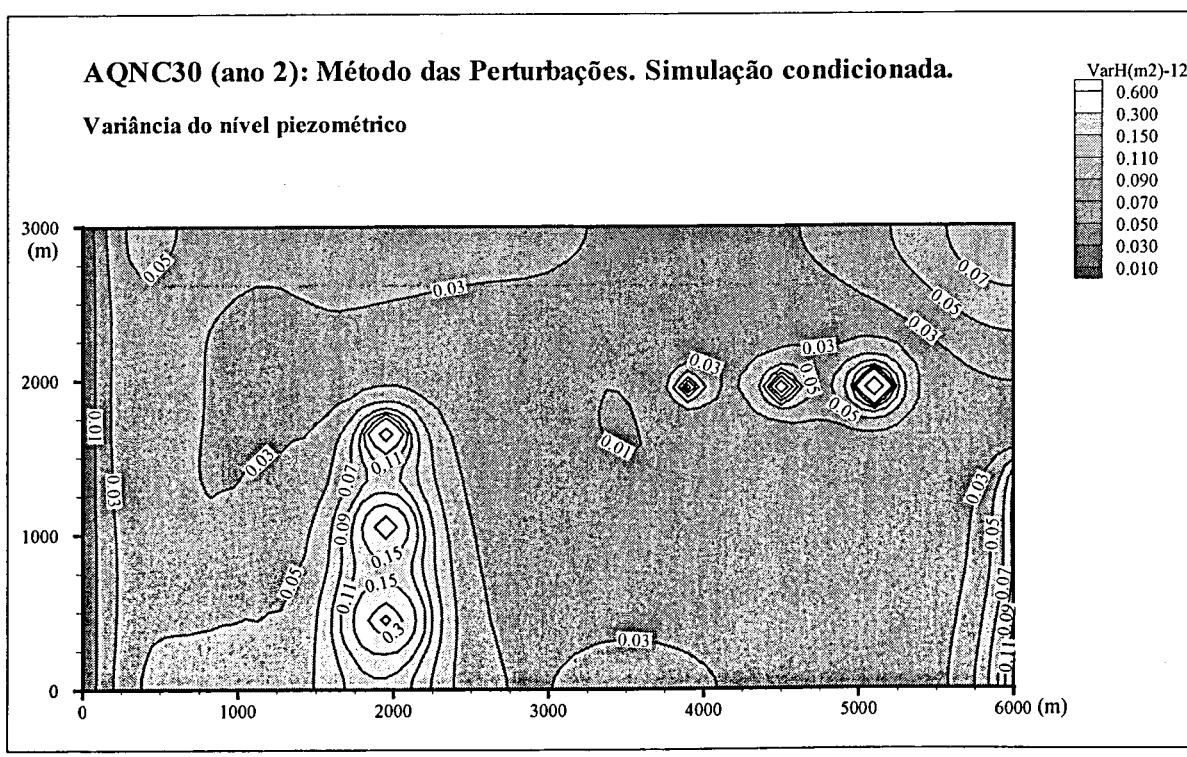



Figura 5.303 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Variância do nível piezométrico no final do mês 12.

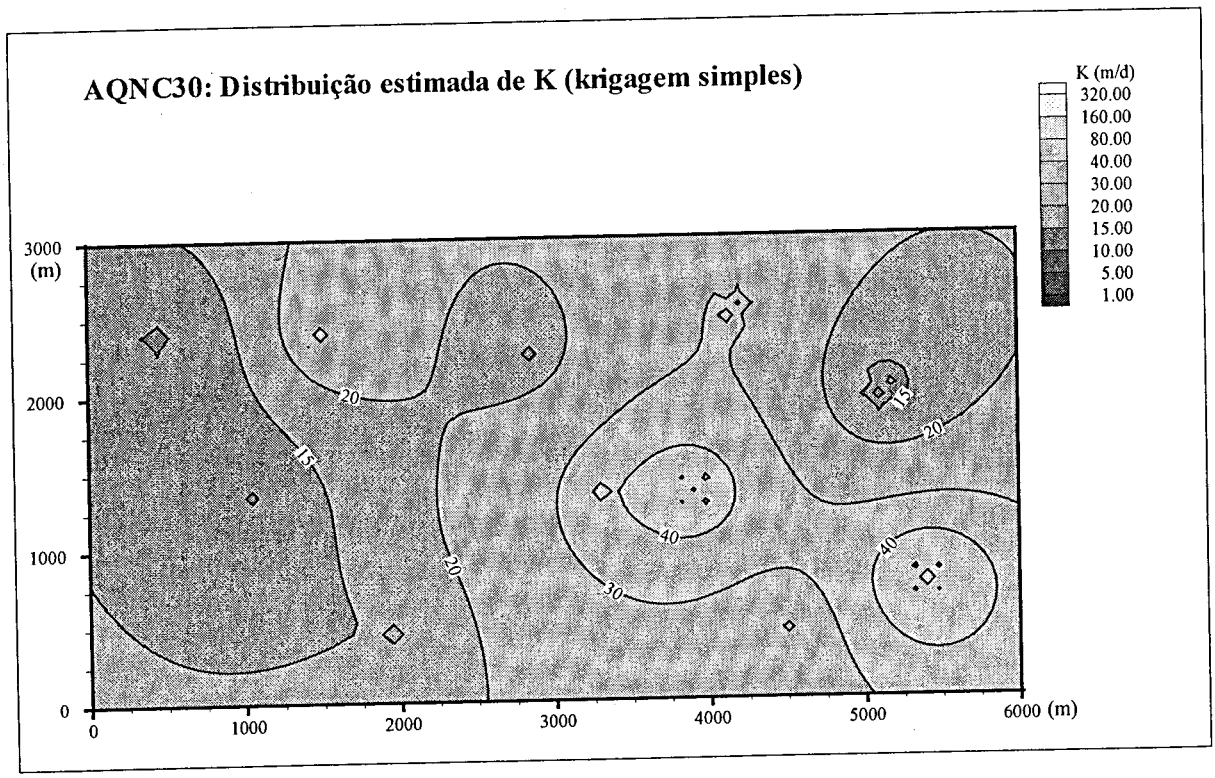



Figura 5.304 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Imagem da conductividade hidráulica, $K$ (m/d), estimada por krigagem simples.

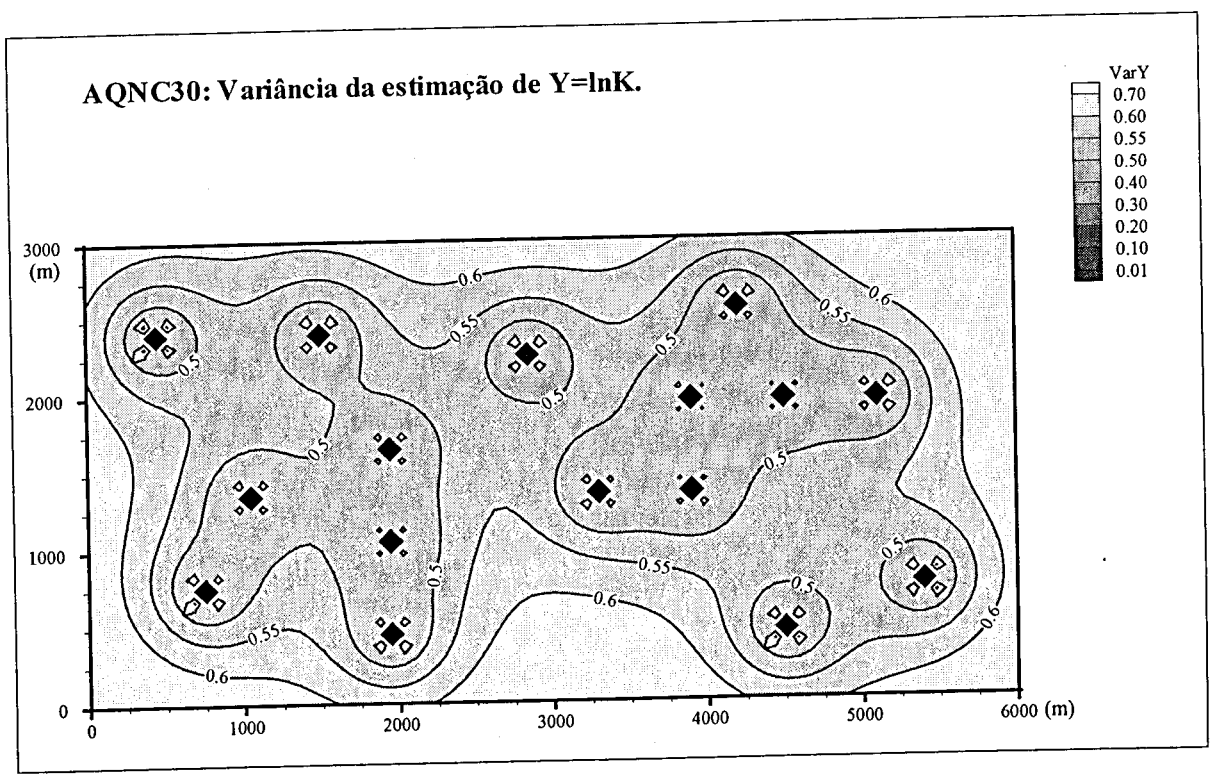



Figura 5.305 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Imagem da variância condicionada da transformada logarítmica da conductividade hidráulica, $Y$=ln$K$.

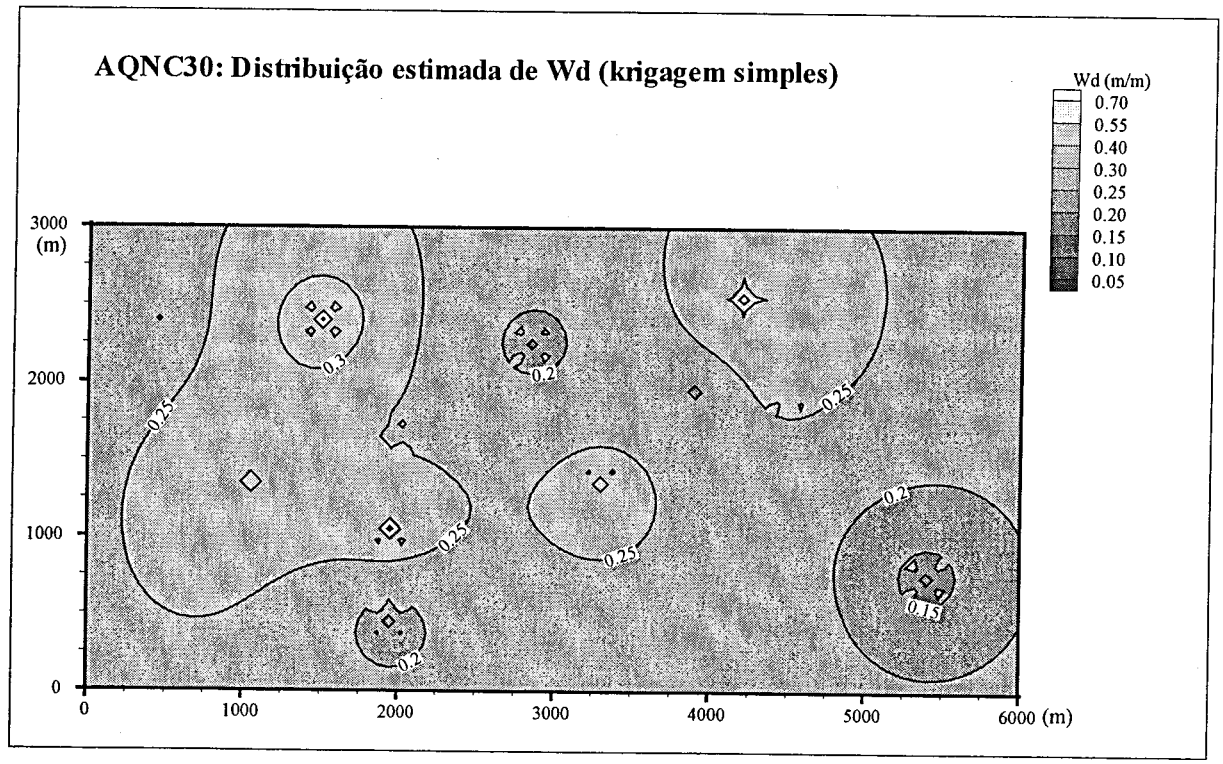



Figura 5.306 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Imagem da porosidade drenável, $\omega_d$, estimada por krigagem simples.

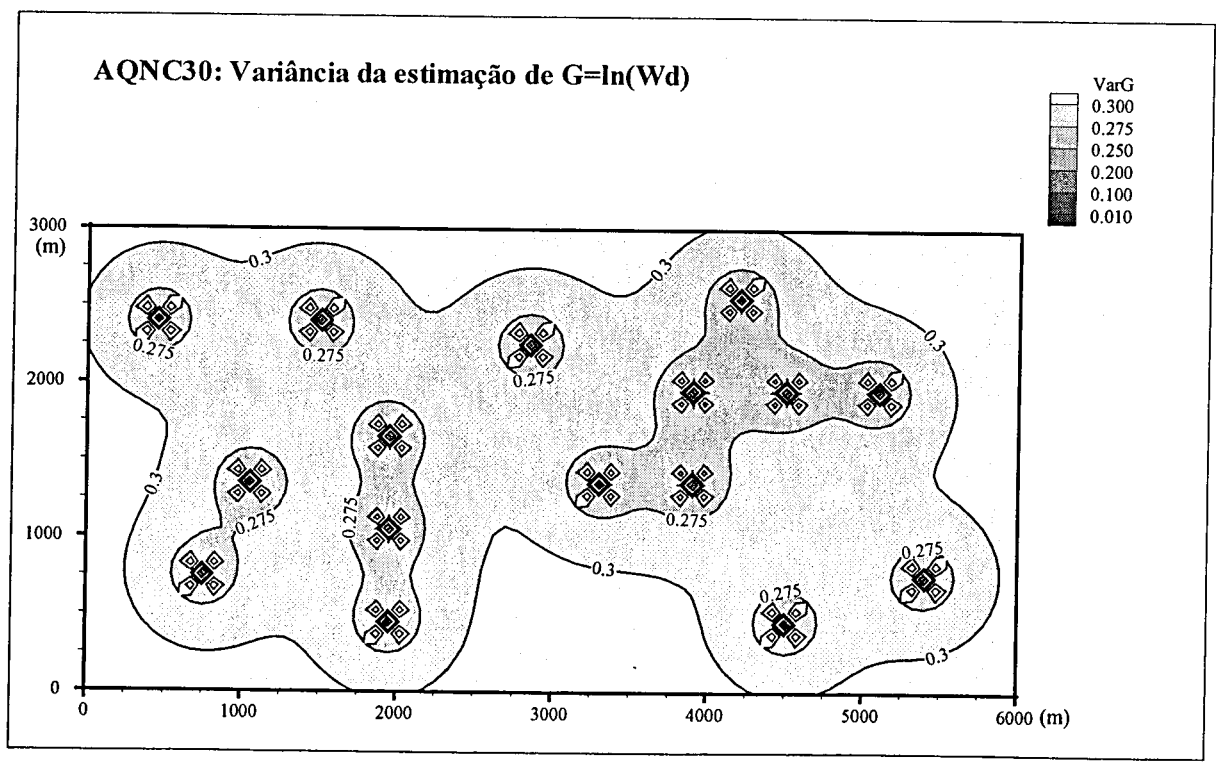



Figura 5.307 – AQNC30: Simulação pelo método das perturbações. Imagem da variância condicionada da transformada logarítmica da porosidade drenável, $\omega_d$.

| | AQNC10 | AQNC20 | | | AQNC30 | | Caudal total extraído | Caudal total infiltrado |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Mês | $Q_{\Gamma\text{-}1}$ ($m^3/d$) | $Q_{\Gamma\text{-}1}$ ($m^3/d$) | desvio(%) | $\sigma_Q$ ($m^3/d$) | $Q_{\Gamma\text{-}1}$ ($m^3/d$) | desvio (%) | ($m^3/d$) | ($m^3/d$) |
| 01 | + 420.1 | – 1 973.4 | – 569.7 | 2121 | – 74.3 | – 117.7 | 20 400 | 21 600 |
| 02 | – 1 079.0 | – 1 000.7 | – 7.3 | 812 | – 1 001.0 | – 7.2 | 20 160 | 21 600 |
| 03 | – 1 747.2 | – 3 201.8 | + 83.3 | 954 | – 1 985.8 | + 13.7 | 20 160 | 43 200 |
| 04 | – 3 111.8 | – 4 390.7 | + 41.1 | 906 | – 3 349.7 | + 7.6 | 20 160 | 32 400 |
| 05 | – 4 054.3 | – 5 749.8 | + 41.8 | 1095 | – 4 365.3 | + 7.7 | 20 160 | 32 400 |
| 06 | – 2 004.8 | – 2 711.6 | + 35.3 | 608 | – 1 980.5 | – 1.2 | 20 160 | 21 600 |
| 07 | – 1 643.0 | – 2 412.3 | + 46.8 | 574 | – 1 673.1 | + 1.8 | 20 400 | 21 600 |
| 08 | + 1 685.0 | + 2 082.4 | + 23.6 | 624 | + 2 006.2 | + 19.1 | 20 400 | 10 800 |
| 09 | + 2 808.8 | + 3 196.1 | + 13.8 | 640 | + 2 982.2 | + 6.2 | 21 600 | 5 400 |
| 10 | + 3 832.4 | + 4 350.1 | + 13.5 | 748 | + 3 923.4 | + 2.4 | 21 600 | 0 |
| 11 | + 4 726.4 | + 5 293.2 | + 12.0 | 812 | + 4 724.9 | – 0.0 | 21 600 | 0 |
| 12 | + 5 769.7 | + 6 508.5 | + 12.8 | 917 | + 5 770.9 | + 0.0 | 21 600 | 5 400 |

Tabela 5.20 – AQNC10, AQNC20 e AQNC30: Caudais totais ("reais" e estimados) na fronteira $\Gamma_1$, no final de cada mês. Desvios dos valores estimados relativamente aos de AQNC10. Desvio padrão obtido pelo *msM-C*. Caudal total extraído (na fronteira $\Gamma_3$ e nos pontos de bombagem) e infiltrado nos mesmos instantes.

| | AQNC10 | AQNC20 | | AQNC30 | | Caudal total extraído | Caudal total infiltrado |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Mês | $Q_{BG}$ ($m^3/d$) | $Q_{BG}$ ($m^3/d$) | desvio(%) | $Q_{BG}$ ($m^3/d$) | desvio (%) | ($m^3/d$) | ($m^3/d$) |
| 01 | – 779.9 | – 3 173.4 | + 306.9 | – 1 274.3 | + 63.4 | 20 400 | 21 600 |
| 02 | – 2 519.0 | – 2 440.7 | – 3.1 | – 2 441.0 | – 3.1 | 20 160 | 21 600 |
| 03 | – 24 787.2 | – 26 241.8 | + 5.9 | – 25 025.8 | + 1.0 | 20 160 | 43 200 |
| 04 | – 15 351.7 | – 16 630.7 | + 8.3 | – 15 589.7 | + 1.6 | 20 160 | 32 400 |
| 05 | – 16 294.3 | – 17 989.8 | + 10.4 | – 16 605.3 | + 1.9 | 20 160 | 32 400 |
| 06 | – 3 444.8 | – 4 151.6 | + 20.5 | – 3 420.5 | – 0.7 | 20 160 | 21 600 |
| 07 | – 2 843.0 | – 3 612.3 | + 27.1 | – 2 873.1 | + 1.1 | 20 400 | 21 600 |
| 08 | + 11 285.0 | + 11 682.4 | + 3.5 | + 11 606.2 | + 2.8 | 20 400 | 10 800 |
| 09 | + 19 008.8 | + 19 396.1 | + 2.0 | + 19 182.2 | + 0.9 | 21 600 | 5 400 |
| 10 | + 25 432.4 | + 25 950.1 | + 2.0 | + 25 523.4 | + 0.4 | 21 600 | 0 |
| 11 | + 26 326.4 | + 26 893.2 | + 2.2 | + 26 324.9 | – 0.0 | 21 600 | 0 |
| 12 | + 21 969.7 | + 22 708.5 | + 3.4 | + 21 970.9 | + 0.0 | 21 600 | 5 400 |

Tabela 5.21 – AQNC10, AQNC20 e AQNC30: Caudais de balanço global ("reais" e estimados) do aquífero, no final de cada mês. Desvios dos valores estimados relativamente aos de AQNC10. Caudal total extraído (na fronteira $\Gamma_3$ e nos pontos de bombagem) e infiltrado nos mesmos instantes.

Tendo presentes os resultados (imagens e valores) da simulação "real" (AQNC10) e das simulações estocásticas (AQNC20 e AQNC30) importa, à semelhança do problema da secção anterior, analisar o comportamento destas últimas relativamente à aproximação dos valores estimados à solução "real" e à incerteza da estimação produzida (variância), avaliar se a piezometria "real" se encaixa no intervalo de confiança de 95% $[\langle H\rangle - 2\sigma_H, \langle H\rangle + 2\sigma_H]$ e comparar o desempenho dos dois métodos de simulação directa estocástica.

Ao contrário do problema com o aquífero confinado apresentado na secção anterior, não se observam grandes diferenças entre a piezometria "real" e as estimadas. De facto, com a excepção das zonas circundantes dos pontos de extracção onde os desvios atingem os $2.0\,\mathrm{m}$, para o *msM-C* condicionadas, e $1.5\,\mathrm{m}$ para o método das perturbações, as diferenças praticamente não ultrapassam os $0.25\,\mathrm{m}$. Como consequência, os níveis piezométricos estimados revelam um padrão espacial muito semelhante, embora os valores estimados pelo *msM-C* condicionadas se afastem ligeiramente mais dos "reais" do que os estimados pelo método das perturbações. Analogamente, a distribuição espacial da variância do nível piezométrico é muito semelhante, sendo os valores mais elevados obtidos nos pontos de extracção, em perfeita coerência com o facto de os desvios mais significativos se verificarem nesses pontos.

Analisando as imagens[94] que representam, para os dois métodos de simulação directa estocástica, a posição relativa do campo piezométrico "real" face aos limites do intervalo de confiança de 95%, verifica-se que em algumas zonas do aquífero $H_{\text{real}}$ ultrapassa esses limites, numas o superior, noutras o inferior. Este facto deverá ser uma consequência da adopção do valor da variância total da amostra de $Y = \ln K$ ($w_Y + \sigma_Y^2 = 0.7234$) que é inferior ao da realização "real" (0.90).

Em resumo, conclui-se que os métodos de simulação estocástica revelam um razoável desempenho, em particular na estimação do nível piezométrico. Mas, tendo em conta que as transformadas logarítmicas das duas propriedades hidrogeológicas "reais", a conductividade hidráulica e a porosidade drenável, foram geradas para os mesmos semivariogramas teóricos

[94] Tal como no problema do aquífero confinado (secção anterior), estas imagens foram omitidas para não sobrecarregar o texto com quase cinco dezenas de figuras.

do problema da secção anterior, que os pontos de amostragem são os mesmos[95] e que as condições fronteira e as extracções são também as mesmas, é natural que se questione a razão para um desempenho qualitativo tão distinto dos métodos de simulação estocástica, neste problema e no da secção anterior. A justificação encontra-se, certamente, no facto de no problema do aquífero não confinado ter sido prevista uma recarga superficial resultante da precipitação. Esta recarga alimenta o aquífero de um modo significativo[96] e dá lugar a um escoamento substancialmente diferente do estabelecido no aquífero confinado. Em particular, não se verifica o varrimento resultante de uma alimentação do aquífero feita exclusivamente a partir de $\Gamma_1$, com tudo o que isso implica, nomeadamente a dependência do campo piezométrico em relação à conductividade hidráulica na zona adjacente a essa fronteira. Por outras palavras, a estimação, nessa zona, de valores da conductividade hidráulica diferentes dos "reais", em termos médios, não tem um impacto significativo no escoamento, ao contrário do que acontecia no problema com o aquífero confinado. Face ao exposto, compreende-se que as insuficiências dos métodos de simulação estocástica referidos na secção anterior, como por exemplo a dificuldade em realizar uma boa inferência estatística a partir das amostras ou as distorções do algoritmo de geração sequencial provocadas pela utilização da *FDP* experimental, tenham aqui um impacto muito atenuado.

Analisando a Tabela 5.20 com os caudais totais ("reais" e estimados) que atravessam a fronteira $\Gamma_1$ e a Tabela 5.21 com os caudais de balanço global ("reais" e estimados) verifica-se que, após um ajustamento inicial, os valores estimados acompanham razoavelmente os "reais". Este facto é particularmente evidente para o caudal de balanço global, relativamente ao qual o método das perturbações chega a ter um excelente desempenho. O período de adaptação da piezometria inicial (condição inicial) às propriedades hidrogeológicas estimadas (método das perturbações) ou geradas (*msM-C*) é muito mais curto (um mês) do que no aquífero confinado da secção anterior porque as diferenças iniciais são também substancialmente menores[97].

---

[95] As *f.a.*'s, com base nas quais foram obtidas $Y$ e $G$ nos dois problemas (aquífero confinado e aquífero não confinado), são as mesmas. Como os pontos de amostragem são também os mesmos nos dois problemas, o tratamento estatístico das amostras de $Y$ de $G$ produz a mesma variância e o mesmo semivariograma experimental, ficando as diferenças confinadas aos valores médios (por exemplo, em AQC10 $m_Y = \ln(1000)$ e em AQNC10 $m_Y = \ln(20)$).

[96] Em alguns meses chega a ultrapassar largamente as extracções (ver, por exemplo, Tabela 5.20).

[97] Relembre-se que as condições iniciais do escoamento (piezometria inicial) são, simultaneamente, as finais do período anterior de simulação, logo coerentes com as propriedades hidrogeológicas "reais" e com as características gerais do escoamento que, neste problema, são razoavelmente estimadas pelos dois métodos estocásticos.

Os caudais totais estimados em $\Gamma_1$ revelam desvios, relativamente aos valores "reais", percentualmente maiores do que os globais. Estes desvios relativos são também algo superiores aos obtidos no problema da secção anterior para a mesma fronteira. A explicação para esta aparente contradição reside no facto de os caudais que atravessam esta fronteira, no aquífero não confinado estudado nesta secção, dependerem fundamentalmente das condições locais do escoamento, ao contrário do que acontece no aquífero confinado onde o escoamento é fortemente condicionado pelas extracções, pela recarga que se faz unicamente por esta fronteira e pela diminuta capacidade de armazenamento. Assim, as diferenças entre caudais totais estimados e "reais" em $\Gamma_1$, no aquífero não confinado, deverão ser explicadas por diferenças locais entre os valores estimados, ou gerados, das propriedades hidrogeológicas e os correspondentes valores "reais". Já os caudais de balanço, que reflectem o comportamento global do aquífero, apresentam uma aproximação maior entre valores estimados e "reais", o que não surpreende face ao razoável desempenho global dos métodos estocásticos, traduzido pelas pequenas diferenças entre os campos piezométricos estimados e "reais".

Finalmente, e apesar do razoável desempenho dos métodos de simulação directa estocástica no problema estudado nesta secção, as considerações do parágrafo final da secção anterior permanecem válidas. Na realidade, e tal como acima se procurou demonstrar, o bom desempenho destes métodos resultou em grande medida do facto de as condições gerais do escoamento serem menos exigentes do que as do aquífero confinado. Mas a dificuldade em inferir a estrutura de correlação espacial das *f.a.*'s $Y$ e $G$ a partir do semivariograma experimental da amostra permanece, tal como o conhecimento dos valores de $K$ e de $\omega_d$ nos pontos de extracção não impede que as maiores diferenças entre os níveis piezométricos estimados e "reais" se registem precisamente nesses pontos. De facto, só o estabelecimento de uma correlação com a piezometria permitirá melhorar a definição probabilística dos parâmetros hidrogeológicos, aproximar os valores estimados dos "reais" e reduzir a incerteza associada a essa estimação. No capítulo seguinte é apresentada uma metodologia, a modelação inversa estocástica, que procura atingir estes objectivos.

BIBLIOTECA F.E. PORTO

FACULDADE DE ENGENHARIA
UNIVERSIDADE DO PORTO
BIBLIOTECA

0000051934