



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE FILOSOFIA E CIÊNCIAS HUMANAS
DEPARTAMENTO DE GEOLOGIA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM GEOLOGIA

Rossana Maira Borelli

**AVALIAÇÃO DA FERRAMENTA GEOMODELLER PARA A SIMULAÇÃO DE
FLUXO DE ÁGUA SUBTERRÂNEA EM REGIÃO DE ALTA COMPLEXIDADE
GEOLÓGICA**

Florianópolis
2023

Rossana Maira Borelli

**AVALIAÇÃO DA FERRAMENTA GEOMODELLER PARA A SIMULAÇÃO DE
FLUXO DE ÁGUA SUBTERRÂNEA EM REGIÃO DE ALTA COMPLEXIDADE
GEOLÓGICA**

Trabalho de Conclusão do Curso de Graduação em Geologia do Centro de Filosofia e Ciências Humanas da Universidade Federal de Santa Catarina como requisito para a obtenção do título de Bacharela em Geologia.

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo de Almeida Heringer
Coorientador: Prof. Dr. Nilson Guiguer Júnior

Florianópolis

2023

Ficha de identificação da obra.

Borelli, Rossana Maira

Avaliação da ferramenta GeoModeller para a simulação de fluxo de água subterrânea em região de alta complexidade geológica / Rossana Maira Borelli ; orientador, Rodrigo de Almeida Heringer, coorientador, Nilson Guiguer Júnior, 2023.

108 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Filosofia e Ciências Humanas, Graduação em Geologia, Florianópolis, 2023.

Inclui referências.

1. Geologia. 2. Hidrogeologia. 3. Modelagem numérica de fluxo. 4. Modelagem geológica implícita. 5. Malha de elementos finitos não estruturada. I. de Almeida Heringer, Rodrigo . II. Guiguer Júnior, Nilson. III. Universidade Federal de Santa Catarina. Graduação em Geologia. IV. Título.

Rossana Maira Borelli

**AVALIAÇÃO DA FERRAMENTA GEOMODELLER PARA A SIMULAÇÃO DE
FLUXO DE ÁGUA SUBTERRÂNEA EM REGIÃO DE ALTA COMPLEXIDADE
GEOLÓGICA**

Este Trabalho de Conclusão de Curso foi julgado adequado para obtenção do título de Bacharela em Geologia e aprovado em sua forma final pelo Curso de Graduação em Geologia.

Florianópolis, 12 de dezembro de 2023.



Documento assinado digitalmente
Manoela Bettarel Ballico
Data: 27/12/2023 09:38:24-0300
CPF: ***.441.650-**
Verifique as assinaturas em <https://v.ufsc.br>

Prof.^a Dr.^a Manoela Bettarel Bállico
Coordenação do Curso

Banca examinadora



Documento assinado digitalmente
RODRIGO DE ALMEIDA HERINGER
Data: 21/12/2023 17:15:15-0300
CPF: ***.860.371-**
Verifique as assinaturas em <https://v.ufsc.br>

Prof. Dr. Rodrigo de Almeida Heringer
Orientador



Documento assinado digitalmente
SERGIO KOIDE
Data: 21/12/2023 09:00:25-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Sergio Koide
Universidade de Brasília

Dr. Konrad Miotlinski
Edith Cowan University

Florianópolis, 2023

Ao meu companheiro Rafael
e à nossa filha Florinha.

AGRADECIMENTOS

Ao concluir esta jornada acadêmica, é com imenso respeito e gratidão que expresso meu agradecimento às pessoas e instituições que foram essenciais nesta caminhada.

Primeiramente, gostaria de expressar um agradecimento especial ao meu orientador, Rodrigo de Almeida Heringer, cuja sabedoria, direção, serenidade e apoio foram fundamentais para a finalização deste trabalho. Agradeço à professora Liliana Osako por sua orientação inicial e ao professor Nilson Guiger por ter disponibilizado o banco de dados e as licenças dos *softwares* GeoModeller e FEFLOW. Além disso, sou imensamente grata aos pesquisadores que compartilharam generosamente seu tempo e conhecimento comigo durante minha jornada de aprendizado em modelagem, incluindo Carlos Marín Lechado, Luis Camilo Suescún, Evren Pakyuz-Charrier, Nico van Zyl, Breno Pereira, Celina Magalhães, Hamza Salhi, Igor Pavlovskii, Guilherme Nogueira e todos os demais.

Meus agradecimentos se estendem à Universidade Federal de Santa Catarina e à todos os funcionários. Agradeço especialmente ao Vilson Arthur e aos professores do departamento de Geologia, em particular às professoras Patrícia Hadler, Luana Florisbal, Liliana Osako, Manoela Bállico e aos professores Roberto Campos, Fernando Althoff e Marivaldo Nascimento.

Um agradecimento caloroso aos meus amigos da geologia, em especial a Lucas Vargas Moraes, Gabriel Loureiro, Carolina Peixoto, Ana Cláudia Canela, Alina Gabardo, Eduardo Rapanos, Jackson Simionato, Jéferson Drozczak, Daniel Oliveira, Mariana Muniz, Isabela Coutinho, Carolina Pereira, Pedro Mallmann, Luis Henrique Biagioni, Djonathan Goulart, Victor Gualberto, Maiara Rech e Igor Pavesi.

Por último, mas definitivamente não menos importante, gostaria de agradecer à minha família: aos meus pais, Rogério e Elmerita, ao meu irmão Ginho e a minha irmã e melhor amiga, Chele. Além disso, desejo expressar a minha profunda gratidão ao meu marido, Rafael Candido Ribeiro, e à nossa filha, Flora, pelo apoio incondicional, compreensão e amor que me proporcionaram nos momentos mais desafiadores desta jornada.

RESUMO

Diante do crescimento demográfico acelerado, do avanço econômico e das mudanças climáticas, o aproveitamento das águas subterrâneas enfrenta desafios crescentes, incluindo problemas de superexploração, degradação e insuficiência na recarga dos aquíferos. Essa realidade tem impulsionado a necessidade de um melhor entendimento a respeito da exploração, vulnerabilidade, contaminação e gestão desses recursos. Nesse cenário, a modelagem geológica implícita emerge como uma ferramenta valiosa, facilitando a compreensão do arcabouço geológico, da geometria dos aquíferos e das direções de fluxo. Além disso, esses modelos podem ser utilizados como base para a construção de modelos hidrogeológicos numéricos que empregam métodos matemáticos e computacionais para simular processos hidrogeológicos subterrâneos, proporcionando um gerenciamento mais eficiente e sustentável dos recursos hídricos subterrâneos. Neste estudo, teve-se como objetivo principal o desenvolvimento de um modelo numérico de fluxo, gerado a partir de um modelo geológico, de uma área na Serra da Moeda, Minas Gerais. O modelo geológico da área foi elaborado de forma implícita, pelo método do campo potencial e utilizando o programa GeoModeller. Essa abordagem permitiu não apenas a visualização espacial dos sólidos geológicos, mas também a identificação de áreas previamente não mapeadas e o cálculo volumétrico das litologias. O modelo geológico foi convertido em uma malha de elementos finitos não estruturada através do algoritmo computacional CGAL, sendo posteriormente exportada para o *software* FEFLOW, onde foi realizada a modelagem numérica de fluxo, em regime permanente. Apesar das complexidades geológicas da área, o modelo desenvolvido demonstrou uma capacidade satisfatória na simulação do fluxo da água subterrânea. Após a calibração e os ajustes necessários, o modelo foi capaz de representar razoavelmente bem o comportamento do fluxo. Para aprimorar ainda mais o modelo e reduzir as incertezas, destaca-se a importância de complementar o banco de dados existente. Além disso, é fundamental realizar uma análise de sensibilidade dos parâmetros de entrada. Essas medidas são cruciais para aprimorar a precisão e a confiabilidade do modelo, permitindo uma melhor compreensão do sistema hidrogeológico em estudo.

Palavras-chave: hidrogeologia; gestão das águas subterrâneas; modelagem geológica implícita; modelagem numérica de fluxo; malha de elementos finitos não estruturada.

ABSTRACT

Given the rapid demographic growth, economic development, and climate change, groundwater uses faces increasing challenges, including overexploitation, degradation, and insufficient recharge of aquifers. This has driven the need for a better understanding of the availability, vulnerability, contamination, and management of these resources. In this scenario, implicit geological modeling emerges as a valuable tool, facilitating the understanding of the geological framework, the geometry of aquifers, and flow directions. Moreover, these models can serve as a basis for constructing numerical hydrogeological models that employ mathematical and computational methods to simulate underground hydrogeological processes, enabling more efficient and sustainable management of underground water resources. This study aimed primarily to develop a numerical flow model, generated from a geological model, of an area in the Serra da Moeda, Minas Gerais. The area's geological model was developed implicitly using the potential field method and the software GeoModeller. This approach allowed not only the spatial visualization of geological solids but also the identification of previously unmapped areas and the volumetric calculation of lithologies. The geological model was converted into an unstructured finite element mesh using the CGAL computational algorithm and subsequently exported to the FEFLOW software, where a steady-state simulation was conducted. Despite the geological complexities of the area, the numerical model satisfactorily represented the groundwater flow. After the calibration, the model represented the flow behavior reasonably well. To further enhance the model and reduce uncertainties, it is important to highlight the significance of supplementing the existing database. Additionally, conducting a sensitivity analysis of input parameters is fundamental. These measures are crucial for improving the accuracy and reliability of the model, allowing for a better understanding of the hydrogeological system under study.

Keywords: hydrogeology; groundwater management; implicit geological modeling; numerical flow modeling; unstructured finite element mesh.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Representação do ciclo hidrológico, indicando a interação e movimentação contínua da água em diferentes ambientes.	21
Figura 2 - Corte transversal vertical da subsuperfície, com a categorização das águas subterrâneas e respectiva relação dos poros ocupados por água em cada zona.	22
Figura 3 - Representação dos diferentes tipos de aquíferos de acordo com o sistema de pressão atuante da superfície superior.	23
Figura 4 - Representação dos tipos de aquíferos, de acordo com a porosidade das rochas.	24
Figura 5 - Variação dos valores de condutividade hidráulica de acordo com a litologia.	27
Figura 6 - Demonstração esquemática de diferentes possíveis meios porosos envolvendo os conceitos de isotropia, anisotropia, homogeneidade e heterogeneidade.	28
Figura 7 - Esquema ilustrativo do experimento de Darcy, indicando os fatores que controlam a taxa de fluxo de água através de um meio poroso composto por areia.	29
Figura 8 - Diferença entre o processo de discretização utilizando o método de diferenças finitas (a) e o método de elementos finitos (b).	38
Figura 9 - Fluxograma representado as diferentes formas de geração de malha no FEFLOW.	40
Figura 10 - Comparação entre os dois tipos de malhas geradas no programa FEFLOW. a) Malha estruturada em camadas, apresentando um refinamento vertical em zonas distantes da área de interesse. b) Malha não estruturada, na qual foi possível representar um alto nível de refinamento em zonas específicas, enquanto em áreas de menor importância o grau de refinamento foi reduzido para otimizar o tempo de execução da simulação do modelo.	41
Figura 11 - Fluxograma das etapas de elaboração de um modelo hidrogeológico. ..	42
Figura 12 - Representação gráfica da interpolação com base no método do campo potencial. a) Dados iniciais para a interpolação: os pontos em azul e vermelho indicam duas diferentes formações e representam os dados dos contatos geológicos. Os vetores definem as medições de direção e mergulho das camadas. b) Resultado da interpolação: os contatos geológicos são representados pelos isovalores do campo	

potencial. As curvas vermelha e azul representam os isovalores que demarcam as limites dos contatos geológicos modelados.	45
Figura 13 - Ilustração da representação de relações erosivas e concordantes entre formações geológicas usando múltiplos campos potenciais. a) Interpolação da Formação 1 e dados iniciais para o campo potencial da Formação 2. b) Interpolação da Formação 2 demonstrando uma relação concordante e dados preliminares para o campo potencial da Formação 3. c) Interpolação da Formação 3 evidenciando uma relação erosiva.	46
Figura 14 - O algoritmo CGAL oferece um pacote de geração de malha de superfícies e volumes, utilizando elementos tetraédricos a partir de modelos implícitos gerados pelo programa GeoModeller.	48
Figura 15 - Mapa de localização da área de estudos.	53
Figura 16 - Mapa regional do Cráton do São Francisco com destaque para o Quadrilátero Ferrífero.	55
Figura 17 - Mapa geológico da região, com destaque para a área de estudo.	56
Figura 18 - Coluna estratigráfica do Quadrilátero Ferrífero.	60
Figura 19 - Fluxograma do estudo, indicando as etapas metodológicas adotadas. ...	65
Figura 20 - Representação do domínio do modelo com o arquivo raster Modelo Digital de Elevação (MDE), indicando as diferenças de altitude na área de estudo.	68
Figura 21 - Pilha estratigráfica definida para o desenvolvimento do modelo geológico implícito. Foi selecionada a opção “Bottom” para determinar os volumes internos e externos das unidades litológicas. A opção “erode” indica uma relação transversal entre as camadas geológicas, enquanto “onlap” indica uma relação paralela.	69
Figura 22 - Visualização da seção de superfície: a) Representação dos dados de entrada extraídos dos mapas geológicos: as linhas ilustram os contatos geológicos das formações. Os círculos destacam os pontos de dados dos contatos geológicos, enquanto as setas indicam os dados de orientação das camadas. b) Representação por meio de linhas amarelas das seções geológicas verticais georreferenciadas. ...	70
Figura 23 - Representação de uma seção vertical e da seção de superfície: a) Interface da seção vertical incluindo os contatos geológicos e dados de mergulho adicionados posteriormente. b) Unidades da seção vertical “a” após serem modeladas, destacando a representação de duas falhas geológicas. c) Visualização da seção de superfície modelada, incluindo as falhas e diques mapeados.	71

Figura 24 - Visualização da interface gráfica do GeoModeller, exibindo os parâmetros utilizados para a construção do modelo tridimensional.	72
Figura 25 - Especificações das configurações de discretização da malha utilizando o algoritmo CGAL. Foi possível ajustar a dimensão dos tetraedros, permitindo maior detalhamento em áreas de interesse.	73
Figura 26 - Definição das propriedades do problema, onde optou-se por representar o modelo em regime permanente e pela aplicação da equação de Richards para calcular o fluxo de água.	79
Figura 27 - Configuração da anisotropia, onde os ângulos de Euler foram associados as dados estruturais importados do software GeoModeller.	81
Figura 28 - Ilustração do modelo geológico tridimensional, gerado no software GeoModeller, e respectiva coluna estratigráfica.	83
Figura 29 - Visualização tridimensional dos dados do modelo geológico: a) Dados referentes às atitudes das camadas geológicas, representando direção e mergulho. b) Dados dos contatos geológicos ao longo da área. c) Representação individualizada da Formação Cauê (tons de rosa escuro e claro), Formação Batatal (cor roxa), diques (cor verde) e falhas mapeadas na área de estudo.	85
Figura 30 - Valores de volume dos diferentes sólidos geológicos, correspondendo às litologias da área de estudo.	86
Figura 31 - a) Visualização do modelo geológico implícito junto à malha numérica de elementos finitos, evidenciando a incorporação dos dados geológicos por meio da funcionalidade de preenchimento dos centroides dos elementos. b) Imagem da interface do FEFLOW, exibindo a malha numérica em um corte transversal, com destaque para a discretização da Formação Batatal.	88
Figura 32 - Gráfico de distribuição percentual de tetraedros por unidade litológica. .	90
Figura 33 - Interface das configurações do FEFLOW, exibindo as informações detalhadas da malha numérica, incluindo o número de elementos, de nós e as dimensão do domínio.	91
Figura 34 - Representação gráfica dos valores de condutividade hidráulica (m/s) resultantes do processo de calibração.	93
Figura 35 - Resultado dos valores de recarga obtidos após o processo de calibração.	94

Figura 36 - Perfil transversal da área, representando: a) A distribuição da carga hidráulica simulada pelo domínio e o nível do lençol freático. b) Mapa da direção de fluxo das água subterrâneas.	95
Figura 37 - Resultado do balanço hídrico do modelo após o processo de calibração.	96
Figura 38 - a) Visualização da distribuição dos pontos de observação utilizados na calibração. b) Gráfico de correlação dos valores observados de carga hidráulica versus os computados pelo modelo.	97

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Dados de entrada utilizados na construção do modelo geológico tridimensional.	67
Tabela 2 - Resumo das unidades hidrogeológicas da área de estudo.	74
Tabela 3 - Intervalos dos valores de condutividade hidráulica e respectivas litologias das principais unidades da área de estudo.	76
Tabela 4 - Valores de precipitação e taxas de recarga referentes aos dois principais aquíferos investigados.	76
Tabela 5 - Dados referentes ao nível d'água dos piezômetros que foram utilizados na calibração do modelo.	77
Tabela 6 - Valores de condutividade hidráulica obtidos após o processo de calibração.	92

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	16
1.1	OBJETIVOS.....	17
1.1.1	Objetivo geral	17
1.1.2	Objetivos específicos	17
1.2	JUSTIFICATIVA.....	18
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	20
2.1	REFERENCIAL TEÓRICO.....	20
2.1.1	Água subterrânea	20
2.1.1.1	<i>Aquíferos</i>	22
2.1.1.2	<i>Propriedades dos aquíferos</i>	25
2.1.1.3	<i>Fluxo da água subterrânea</i>	28
2.1.2	Modelagem hidrogeológica	30
2.1.2.1	<i>Modelos matemáticos</i>	32
2.1.2.1.1	<i>Componentes de um modelo matemático</i>	33
2.1.2.2	<i>Modelos analíticos</i>	36
2.1.2.3	<i>Modelos numéricos</i>	36
2.1.2.3.1	<i>Método dos elementos finitos</i>	37
2.1.2.3.2	<i>FEFLOW</i>	39
2.1.2.4	<i>Etapas da elaboração de um modelo hidrogeológico</i>	41
2.1.3	Modelagem geológica implícita	44
2.1.3.1.1	<i>GeoModeller</i>	47
2.1.4	Gestão das águas subterrâneas	49
2.2	CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO.....	52
2.2.1	Localização e acesso	52
2.2.2	Aspectos Fisiográficos	53
2.2.3	Geologia Regional	54
2.2.4	Hidrogeologia	61
3	MATERIAIS E MÉTODOS	64
3.1	OBTENÇÃO E ANÁLISE DE DADOS GEOGRÁFICOS.....	65
3.2	BASE DE DADOS.....	66
3.3	MODELAGEM GEOLÓGICA IMPLÍCITA.....	67

3.4	MODELO HIDROGEOLÓGICO CONCEITUAL	74
3.5	MODELAGEM HIDROGEOLÓGICA NUMÉRICA.....	77
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	82
4.1	MODELO GEOLÓGICO IMPLÍCITO.....	82
4.2	MALHA TETRAÉDRICA NÃO ESTRUTURADA.....	87
4.3	MODELO NUMÉRICO DE FLUXO	90
4.3.1	Calibração do modelo.....	91
5	CONCLUSÃO	99
	REFERÊNCIAS	101

1 INTRODUÇÃO

As águas subterrâneas representam aproximadamente 99% de toda a água doce líquida do planeta Terra (UNESCO, 2022) e são consideradas uma fonte de abastecimento segura tanto para o uso doméstico quanto industrial e agrícola (Megdal, 2018). Conforme o Relatório Mundial das Nações Unidas sobre o Desenvolvimento dos Recursos Hídricos (UNESCO, 2022), metade do volume da água captada para uso doméstico pela população mundial e 25% de toda a água destinada para a irrigação são provenientes das águas subterrâneas.

No entanto, com o constante crescimento demográfico, o desenvolvimento econômico e as mudanças climáticas, a exploração das águas subterrâneas enfrenta desafios significativos, sendo cada vez mais recorrentes os problemas relacionados à superexploração, degradação da qualidade da água e redução da recarga dos aquíferos (Hirata *et al.*, 2019; Li, Peyue *et al.*, 2021; Scanlon *et al.*, 2023). Essas questões têm motivado o desenvolvimento de estudos interdisciplinares que abordam principalmente a exploração, vulnerabilidade, contaminação e gestão dessas águas. A realização destes estudos exige um entendimento profundo das características geológicas e hidrogeológicas, bem como da dinâmica do fluxo de água nas áreas de interesse (Fitts, 2015).

Uma etapa crucial desse processo é a avaliação hidrogeológica, que compreende a coleta e análise de dados geológicos, hidrogeológicos e fisiográficos. Esses dados são essenciais para entender o fluxo de água subterrânea. Nesse sentido, o conhecimento da litologia, estratigrafia e estruturas das formações geológicas é imprescindível, pois são essas características que determinam o arcabouço e a disposição dos aquíferos (Rebouças, 2006).

A modelagem geológica, que tem ganhado destaque como ferramenta para representar esses dados espacialmente, contribui para uma compreensão e reprodução mais precisa de um determinado ambiente geológico (Hassen *et al.*, 2021). Esses modelos podem ser utilizados como base para a elaboração de modelos hidrogeológicos numéricos, uma vez que fornecem informações detalhadas sobre o arcabouço geológico-estrutural e facilitam o entendimento da geometria dos aquíferos e das direções preferenciais de fluxo das águas subterrâneas (Hassen *et al.*, 2016).

A modelagem numérica de águas subterrâneas consiste em uma abordagem quantitativa que aplica métodos matemáticos e computacionais para representar e

simular processos hidrogeológicos em subsuperfície (Anderson e Woessner, 1992). Sua aplicação tem se expandido consideravelmente nas últimas décadas, principalmente devido aos avanços tecnológicos e à necessidade de gerenciamento mais eficiente e sustentável dos recursos hídricos subterrâneos.

Diante do exposto, o presente estudo consistiu na utilização de um modelo numérico para simular o fluxo de água subterrânea, gerado a partir de um modelo geológico implícito de uma área na Serra da Moeda, em Minas Gerais.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo geral

Este estudo tem como objetivo principal simular o fluxo de água subterrânea na região da Serra da Moeda, Minas Gerais, por meio da utilização do programa de elementos finitos FEFLOW[®], com malha gerada a partir de um modelo geológico implícito construído com o *software* GeoModeller[®].

1.1.2 Objetivos específicos

Os objetivos específicos delineados com base nas etapas do estudo são os seguintes:

1. Elaborar um modelo geológico implícito utilizando o *software* de modelagem tridimensional GeoModeller[®]. O objetivo é construir um modelo geológico detalhado da área de estudo, na Serra da Moeda, incluindo a definição das diferentes unidades geológicas, suas propriedades e relações espaciais.

2. Gerar uma malha não estruturada utilizando a ferramenta CGAL (Computational Geometry Algorithms Library). Esta malha será completamente não estruturada e adaptável, capaz de representar com precisão a geometria e as características geológicas da área de estudo, a partir do modelo geológico gerado.

3. Discretizar e importar a malha com todos os atributos geológicos, para o programa FEFLOW®. Isso implica na discretização da malha gerada e na incorporação de todos os parâmetros hidrodinâmicos necessários para a simulação do fluxo de água subterrânea. A malha, juntamente com os atributos geológicos, será importada para o *software* FEFLOW®, que é especializado na modelagem numérica de fluxo e transporte de contaminantes em meios porosos.

4. Desenvolver e simular o modelo numérico do fluxo de água subterrânea na área de estudo, utilizando o programa FEFLOW®. O objetivo é analisar e interpretar os resultados obtidos da simulação para compreender o comportamento do fluxo de água subterrânea na área estudada e suas implicações.

1.2 JUSTIFICATIVA

De acordo com as Nações Unidas, atualmente 31 países no mundo estão enfrentando uma crise de escassez hídrica e mais de um bilhão de pessoas não tem acesso à água potável (Barlow; Clarke, 2017). Neste cenário, os recursos hídricos subterrâneos exercem um papel crucial, muitas vezes sendo a única fonte de água potável disponível para diversas populações ao redor do mundo (Morris *et al.*, 2003; Famiglietti, 2014).

A crescente demanda por água e a limitação dos recursos hídricos superficiais impulsionam a necessidade de recorrer às águas subterrâneas como complemento ou substituto do abastecimento superficial. Isso exige um gerenciamento eficiente e sustentável desses recursos, que seja capaz de atender as necessidades de todos os usuários. No entanto, a gestão das águas subterrâneas é uma tarefa desafiadora, dada a complexidade dos processos hidrogeológicos e as dificuldades em observá-los e mensurá-los. Estudos geológicos, hidrológicos, hidrogeológicos e ensaios hidráulicos e hidrodinâmicos são fundamentais para entender esses processos (Domenico e Schwartz, 1990).

Neste contexto de desafios e impulsionados pelos avanços tecnológicos, os modelos matemáticos que simulam o fluxo de água subterrânea têm sido amplamente utilizados. Estes modelos sintetizam diferentes tipos de dados e levam em consideração os efeitos dos fenômenos climáticos, facilitando a compreensão sobre

os aquíferos e a dinâmica das águas subterrâneas (Bear e Cheng, 2010). Em hidrogeologia, tais modelos são fundamentais não só para identificar incertezas e entender as características específicas dos aquíferos, mas também são aplicados em uma variedade de situações práticas. Isso inclui o estudo do fluxo e transporte de contaminantes, a avaliação da disponibilidade hídrica e o gerenciamento eficaz de áreas contaminadas.

Compreender a geologia local é a espinha dorsal de qualquer projeto de modelagem numérica de água subterrânea, uma vez que características como carga hidráulica, direções e trajetórias de fluxo e tempos de residência são fortemente controladas pelas propriedades e pelo arranjo litológico (D'affonseca *et al.*, 2020; Barsi *et al.*, 2022). Nesse contexto, os modelos geológicos emergem como ferramentas importantes, fornecendo uma base sólida e robusta para a construção de modelos numéricos em hidrogeologia.

Através da abordagem integrada entre a modelagem geológica implícita e a criação do modelo numérico de fluxo de água subterrânea, o estudo permite uma compreensão mais profunda da dinâmica do fluxo das águas subterrâneas na área selecionada, sob a perspectiva da análise hidrogeológica.

Ao gerar o modelo geológico implícito e convertê-lo em um modelo numérico, estabelece-se uma base para explorar a interação entre os elementos geológicos e hidrogeológicos que influenciam o comportamento do sistema aquífero. Essa abordagem interativa possibilita a formulação de hipóteses sobre os fatores que controlam o sistema hidrogeológico.

Ao longo do processo, as hipóteses podem ser testadas e refinadas à medida que o modelo é verificado em relação aos dados observados ou conhecimentos prévios. Isso permite uma abordagem progressiva para lidar com as incertezas do modelo, pois é possível ajustar e melhorar as representações do modelo geológico e hidrogeológico com base nos resultados da simulação e nas informações disponíveis.

Portanto, essa metodologia não apenas fornece uma representação do fluxo de água subterrânea na área estudada, mas também oferece uma estrutura flexível para investigar e lidar com as incertezas inerentes aos processos hidrogeológicos, contribuindo para uma compreensão mais sólida e refinada da dinâmica do sistema hidrogeológico em questão.

A área selecionada para o desenvolvimento do modelo está localizada na Serra da Moeda, em Minas Gerais, sendo a principal fonte de abastecimento de água da

região metropolitana de Belo Horizonte. Além deste importante aspecto, a escolha da área de estudo baseou-se também na disponibilidade de um banco de dados geológicos e hidrogeológicos da área, fornecido pela empresa Water Service and Technologies (WST) e na disponibilização da licença dos programas utilizados no desenvolvimento deste trabalho.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 REFERENCIAL TEÓRICO

A seguir é apresentado o referencial teórico sobre águas subterrâneas e os principais conceitos associados a esta temática. Também serão abordadas definições sobre modelagem hidrogeológica, dando enfoque para o método de elementos finitos e modelagem geológica tridimensional.

2.1.1 Água subterrânea

A água subterrânea pode ser considerada o recurso hídrico mais importante na atualidade, correspondendo a 30% de toda a água doce do planeta e representando aproximadamente 99% quando excluída a porção aprisionada nas calotas polares (Morris *et al.*, 2003; UNESCO, 2022). Quando comparada à água superficial, a água subterrânea é menos suscetível à contaminação e aos impactos de períodos de estiagens que afetam rios e reservatórios superficiais, além de apresentar padrões superiores de potabilidade e possuir uma considerável capacidade de armazenamento (Fetter *et al.*, 1994; Conicelli e Hirata, 2016). Essas características únicas conferem-lhe uma importância estratégica diante de diversos desafios, como as mudanças climáticas e o crescimento populacional, que ampliam as demandas por água.

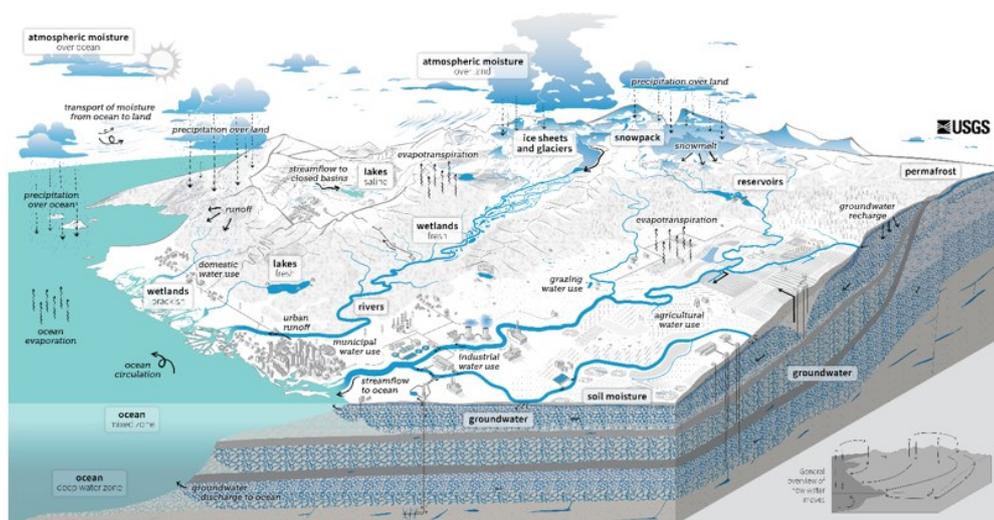
Conforme Todd (1959) a água subterrânea é definida como toda a água presente na porção saturada do subsolo. A ocorrência desse recurso em uma determinada região é resultado da interação de múltiplas condições, que dependem da influência de fatores climáticos, geomorfológicos e geológicos. A natureza

geológica constitui o principal componente dos processos relacionados com a água subterrânea, em que a litologia, estratigrafia e feições estruturais determinam a natureza e distribuição dos mananciais subterrâneos (Freeze e Cherry, 1979).

A água subterrânea tem sua origem na superfície e está intrinsecamente relacionada com a água superficial, ambas integrando o ciclo hidrológico (Figura 1) (Bear 1982; Winter *et al.*, 1998). Este ciclo, também conhecido como ciclo da água, é um processo contínuo de movimentação da água entre os reservatórios terrestres e a atmosfera, afetado por uma variedade de fatores ambientais e climáticos (Sophocleous, 2004). Após as precipitações, a água pode seguir diferentes caminhos, influenciada por elementos como clima, relevo, geologia, pedologia, cobertura do solo, nuvens e a sazonalidade.

Parte dessa água pode escoar superficialmente, ser absorvida pela vegetação, evaporar ou infiltrar no solo. Quando a quantidade de água infiltrada excede a capacidade de campo do solo (sua capacidade de reter umidade), o excesso de água flui verticalmente até alcançar o lençol freático e conseqüentemente recarregar as formações geológicas que armazenam água (Feitosa *et al.*, 2008).

Figura 1 - Representação do ciclo hidrológico, indicando a interação e movimentação contínua da água em diferentes ambientes.

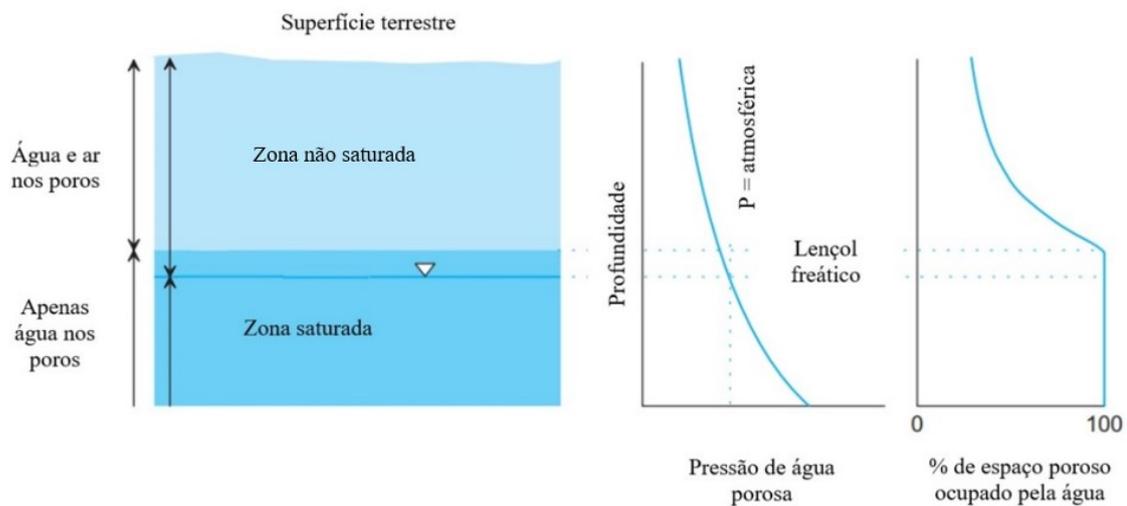


Fonte: United States Geological Survey (USGS).

O armazenamento da água em subsuperfície após a infiltração da água através do solo ocorre em duas porções: zona de aeração ou não saturada e zona de saturação ou saturada, conforme a proporção relativa do espaço poroso que é

preenchido por água (Figura 2). Na zona de saturação, situada abaixo da superfície freática, os espaços vazios estão preenchidos por água enquanto na zona de aeração, situada entre a superfície freática e a superfície do terreno, os poros contêm duas fases fluidas compostas de ar e água (Bear e Verruijt, 1987). Na zona de aeração a pressão é menor que a atmosférica enquanto na zona saturada a pressão é maior ou igual à pressão atmosférica.

Figura 2 - Corte transversal vertical da subsuperfície, com a categorização das águas subterrâneas e respectiva relação dos poros ocupados por água em cada zona.



Fonte: Fitts (2015).

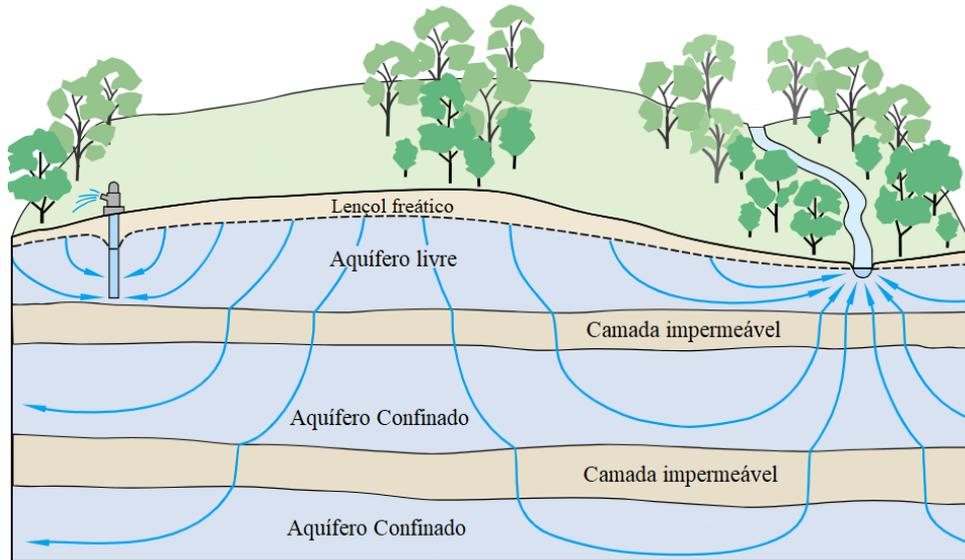
2.1.1.1 Aquíferos

Os aquíferos são formações geológicas com permeabilidade e porosidade capazes de armazenar e transmitir volumes significativos de água subterrânea passível de ser explorada (Cleary, 1989). Usualmente estes reservatórios são classificados com base em dois critérios principais: quanto ao tipo de porosidade ou quanto à existência de uma superfície freática, onde a pressão é igual à pressão atmosférica.

Baseando-se no sistema de pressão, os aquíferos podem ser classificados em dois tipos: livre ou confinado (Figura 3). O aquífero livre, também conhecido como freático, é caracterizado por ter seu limite superior definido por uma superfície freática, onde a pressão é igual à pressão atmosférica. Por outro lado, um aquífero confinado

é delimitado em sua parte superior por uma camada confinante impermeável ou pouco permeável, e a pressão no seu topo (base da camada confinante) é maior que a pressão atmosférica. Desta forma, em qualquer ponto de um aquífero confinado, a pressão é maior que a atmosférica enquanto no aquífero livre a superfície freática é definida como a superfície onde a pressão é igual à pressão atmosférica (Feitosa *et al.*, 2008).

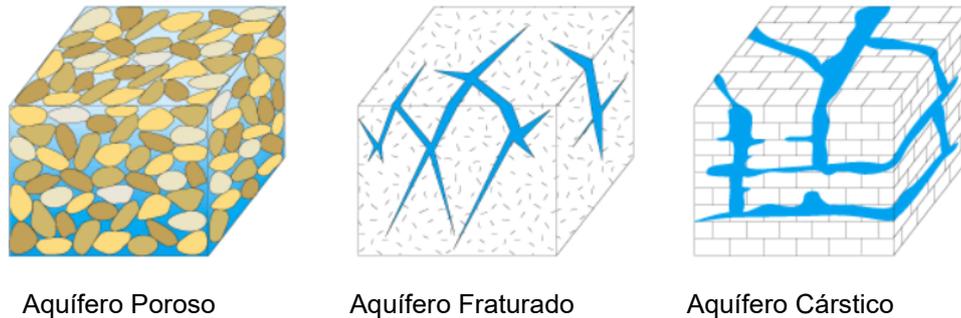
Figura 3 - Representação dos diferentes tipos de aquíferos de acordo com o sistema de pressão atuante da superfície superior.



Fonte: Adaptado e traduzido de Winter *et al.* (1998).

Os aquíferos também podem ser classificados com relação ao tipo de porosidade. Borghetti *et al.* (2004) classificam os aquíferos em três diferentes tipos: aquífero poroso, formado geralmente por rochas sedimentares, sedimentos e solos, em que a circulação das águas e seu armazenamento ocorre por meio da porosidade intergranular; aquífero fraturado, formado por rochas cuja capacidade de armazenamento e circulação das águas ocorrem em fraturas e juntas, e aquífero cárstico, que compõe um tipo peculiar de aquífero, em que a circulação e o armazenamento das águas ocorre em uma rede de condutos e diaclases gerados por meio da dissolução de rochas carbonáticas (Figura 4).

Figura 4 - Representação dos tipos de aquíferos, de acordo com a porosidade das rochas.



Fonte: Modificado de Heath (1998).

Diversas propriedades dos aquíferos condicionam os padrões de fluxo das águas que circulam em profundidade (Heller, 2006). A porosidade e a permeabilidade são duas características importantes dos aquíferos que governam a capacidade desses sistemas em armazenar e transmitir a água subterrânea. A porosidade representa a razão entre o volume de vazios, ou poros, e o volume total (matriz sólida e espaços vazios). Esses poros podem variar em tamanho e forma, abrangendo desde espaços intergranulares até cavidades produzidas pela dissolução de rochas carbonáticas.

A permeabilidade, por sua vez, que consiste na capacidade de um material em conduzir fluidos e está diretamente relacionada ao tamanho dos poros e da conexão entre eles. Aquíferos com alta permeabilidade apresentam maior facilidade na transmissão de água, enquanto aqueles com baixa permeabilidade podem restringir o fluxo e reduzir a recarga ou descarga do sistema (Custodio e Llamas, 1983).

Além dos aquíferos, existem outras formações que evidenciam a capacidade do meio na circulação da água subterrânea, como aquícludes, aquíardes e aquífugos. Os aquícludes tem a capacidade de armazenar água em grandes quantidades, mas não permitem a sua circulação. Já os aquíardes, consistem em formações semipermeáveis que armazenam quantidades significativas de água, porém com um fluxo de circulação lenta. Os aquífugos por sua vez, são estratos com porosidade extremamente baixa, sendo incapazes de armazenar ou transmitir água.

2.1.1.2 *Propriedades dos aquíferos*

Os fatores hidrogeológicos que governam as características de armazenamento e transmissão de fluidos de um aquífero são denominados de propriedades ou parâmetros do aquífero. As propriedades relacionadas ao armazenamento são porosidade, porosidade efetiva, retenção específica, rendimento específico, coeficiente de armazenamento e armazenamento específico. Por outro lado, as propriedades do aquífero relacionadas à transmissão de fluidos são permeabilidade intrínseca, condutividade hidráulica e transmissividade (Woessner e Poeter, 2020; Freeze e Chery, 1979).

A porosidade (n) de um meio é definida como a razão entre o volume de vazios (V_v) e o volume total do meio (V). Esta propriedade desempenha um papel crucial na determinação da capacidade de armazenamento de água subterrânea. Já a porosidade efetiva (n_e) é a razão entre o volume dos poros interconectados e o volume total, representando a parte dos poros que contribui para a permeabilidade do material.

A retenção específica (S_r) refere-se à quantidade de água que um meio poroso é capaz de reter em seus poros contra a força da gravidade. Ela representa a capacidade do solo de reter água após a saturação inicial, quando a água é adicionada ao solo e preenche os poros até o ponto em que a água começa a drenar, devido à gravidade.

O rendimento específico (S_y) é definido como a razão entre o volume de água que, após a saturação, pode escoar devido à gravidade e o volume total desse meio. A determinação dos valores de S_y envolve considerações sobre o tamanho do grão, formato e distribuição dos poros, a compactação da formação subterrânea e a duração da drenagem. À medida que a profundidade aumenta, o valor de S_y apresenta uma tendência de redução devido ao processo de compactação. Esses valores normalmente variam de 0,01 a 0,30, conforme indicado por Freeze e Cherry (1979), dependendo do tipo de material poroso presente na zona saturada/aquífero ou zona vadosa.

Já o coeficiente de armazenamento (S), é um parâmetro adimensional e representa o volume de água que pode ser liberado ou armazenado em um aquífero confinado por variação unitária do nível potenciométrico. Indica a relação entre mudanças de quantidade de água armazenada no aquífero e é obtido por meio da

relação do armazenamento específico do aquífero (S_s) e da espessura saturada (Bear, 1972).

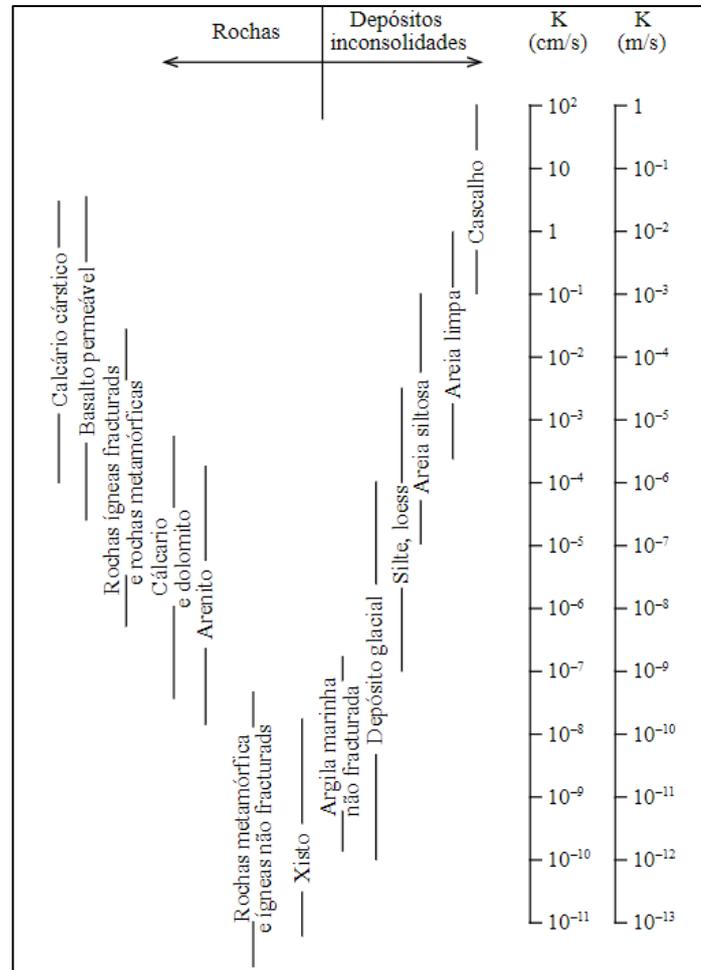
O armazenamento específico (S_s) é definido como o volume de água que uma unidade de volume do aquífero libera do seu armazenamento ao sofrer uma diminuição unitária na carga hidráulica. Essencialmente, S_s representa a capacidade do aquífero de liberar água em resposta às variações na carga hidráulica. A determinação precisa dos valores de S_s envolve considerações detalhadas sobre as propriedades do meio, incluindo a compressibilidade do material poroso, a permeabilidade e a estrutura dos poros.

Com relação às propriedades dos aquíferos associadas à transmissão de fluidos, destaca-se a permeabilidade intrínseca (k), uma constante que representa somente as características do meio poroso, independentemente das propriedades do fluido (Fetter, 1994). Esta propriedade tem dimensões de área e é dependente do tamanho dos grãos, arranjo, forma e distribuição dos poros do material do solo.

Já a condutividade hidráulica representa a habilidade de um meio poroso em conduzir água, ou outro fluido, quando submetido ao gradiente de uma superfície piezométrica (Cleary, 1989). Esta constante reflete a facilidade com que um fluido é transportado através dos espaços vazios e está diretamente relacionada às características físicas do meio como porosidade, granulometria, forma, tamanho, arranjo e distribuição das partículas, bem como as propriedades do fluido como viscosidade e peso específico (Feitosa, 2008).

A condutividade hidráulica é um parâmetro chave a ser avaliado, pois influencia tanto a direção quanto a velocidade do fluxo de água dos aquíferos. Essa propriedade pode variar em várias ordens de grandeza dentro de uma mesma unidade geológica, o que destaca a importância de ter estimativas precisas e ampla cobertura da área para reduzir erros de simulação de fluxo de água ou transporte de massa. A Figura 5 exemplifica a amplitude de valores de condutividade hidráulica correspondente a distintos tipos de rochas e depósitos inconsolidados. Quanto maior o valor da condutividade hidráulica, maior será a eficácia do aquífero em conduzir água.

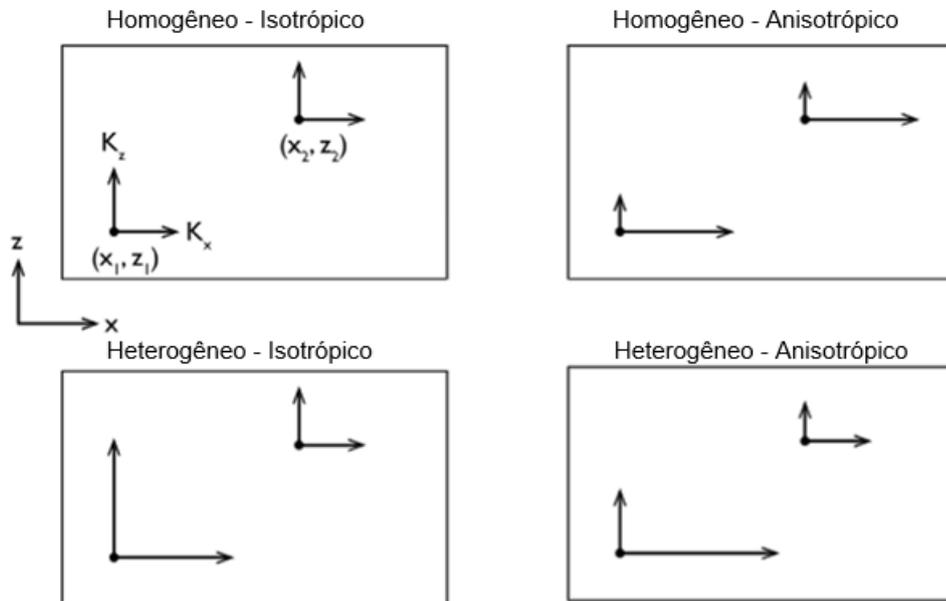
Figura 5 - Variação dos valores de condutividade hidráulica de acordo com a litologia.



Fonte: Modificado de Freeze e Cherry (1979).

A condutividade hidráulica geralmente apresenta variações dentro de uma mesma formação geológica, sendo essa característica denominada heterogeneidade. Quando o valor de K é o mesmo, independentemente da posição, o meio poroso é considerado homogêneo. Além disso, esse parâmetro também pode variar conforme a direção em um dado ponto do aquífero, sendo essa propriedade conhecida como anisotropia. Assim, se a condutividade hidráulica é a mesma em todas as direções, o meio poroso é considerado isotrópico (Freeze e Cherry, 1979). O conceito geral de anisotropia/isotropia e heterogeneidade/homogeneidade é demonstrado na Figura 6. É importante enfatizar que na natureza os meios são predominantemente anisotrópicos e heterogêneos, devido à complexa interação entre os componentes geológicos e hidrogeológicos.

Figura 6 - Demonstração esquemática de diferentes possíveis meios porosos envolvendo os conceitos de isotropia, anisotropia, homogeneidade e heterogeneidade.



Fonte: Freeze e Cherry (1979).

A transmissividade (T), por sua vez, representa a quantidade de água que pode ser transmitida horizontalmente através da espessura saturada do aquífero (Fetter, 1994). Conforme delineado por Freeze e Cherry (1979), esse parâmetro pode ser conceitualmente definido como a taxa de escoamento de água através de uma faixa vertical do aquífero, com largura unitária, sob a influência de um gradiente hidráulico unitário. Ou seja, a transmissividade é o produto entre a condutividade hidráulica e a espessura do aquífero.

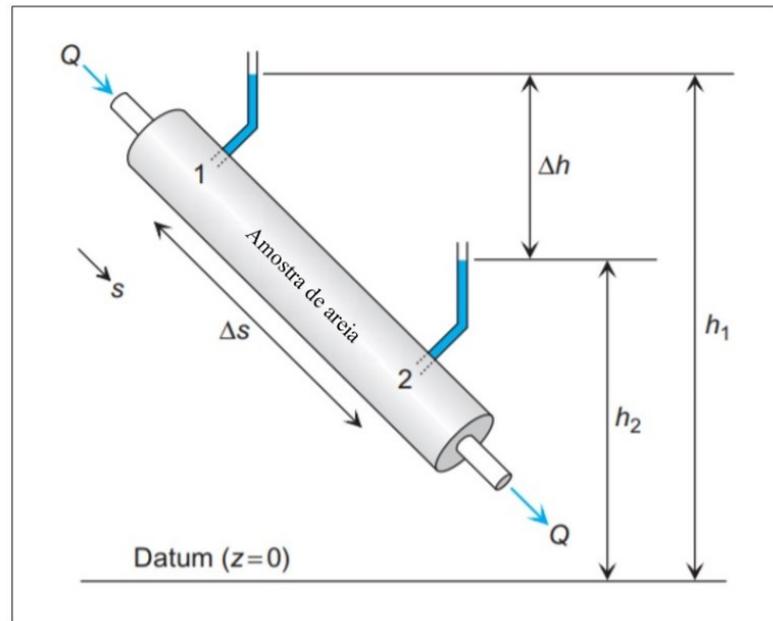
2.1.1.3 Fluxo da água subterrânea

O fluxo de água subterrânea normalmente apresenta uma velocidade extremamente baixa e se movimenta de acordo com um gradiente hidráulico, deslocando-se de um valor potencial maior para um menor, considerando a posição espacial, energia cinética e a pressão do fluido.

A dinâmica do fluxo da água subterrânea encontra a sua fundamentação na Lei de Darcy, a qual postula que o fluxo de água é proporcional ao gradiente hidráulico. Em 1956, a partir de experimentos com tubos preenchidos de areia, o engenheiro

francês Henry Darcy definiu princípios empíricos básicos do fluxo de água subterrânea unidimensional e em meios porosos (Figura 7), que estão incorporados na Equação 01.

Figura 7 - Esquema ilustrativo do experimento de Darcy, indicando os fatores que controlam a taxa de fluxo de água através de um meio poroso composto por areia.



Fonte: Fitts (2015).

$$Q = -K \frac{dh}{ds} A \quad (01)$$

Onde Q , é a descarga na direção s ; K , é a condutividade hidráulica; $\frac{dh}{ds}$, é uma grandeza adimensional que representa o gradiente hidráulico e A , é a área da seção transversal perpendicular a direção do fluxo. O sinal negativo na equação, indica que o fluxo se dá no mesmo sentido do gradiente (Fitts, 2015).

Considerando um ambiente real tridimensional a Lei de Darcy deve considerar o fluxo nas três dimensões x , y e z (Equações 02, 03 e 04).

$$q_x = -K_x \frac{\partial h}{\partial x} \quad (02)$$

$$q_{y=} - K_y \frac{\partial h}{\partial y} \quad (03)$$

$$q_{z=} - K_z \frac{\partial h}{\partial z} \quad (04)$$

Onde, q_x , q_y e q_z são as velocidades darcianas nas três direções x , y e z , respectivamente. O sistema de coordenadas, x , y e z , pode assumir qualquer orientação, mas usualmente x e y são definidos como fluxos horizontais e z como fluxo vertical (Fitts, 2015).

2.1.2 Modelagem hidrogeológica

Um modelo pode ser definido como uma ferramenta utilizada para representar uma versão simplificada da realidade, podendo reproduzir algumas, mas não todas, as características do sistema natural (Anderson e Woessner, 1992). Existem duas razões técnicas principais pelas quais se faz necessário o uso de modelagem em problemas de água subterrânea. A primeira é porque os sistemas naturais são de natureza muito complexa e altamente dinâmica e, portanto, o conhecimento atual sobre estes sistemas é limitado. A segunda razão deriva das limitações existentes das técnicas atuais de medições, resultando na disponibilidade limitada de dados hidrológicos, geológicos, climatológicos, pedológicos e de uso do solo.

Devido às dificuldades de se obter todos os dados desejados sobre os sistemas hidrogeológicos, torna-se essencial encontrar maneiras de extrapolar informações a partir de medições disponíveis, tanto espacial quanto temporalmente. Nesse contexto, os modelos assumem um papel primordial na resolução de problemas hidrogeológicos, já que fornecem um meio de extrapolação ou previsão quantitativa, extremamente útil no processo de tomada de decisões. Segundo Anderson e Woessner (1992), em hidrogeologia, os modelos podem ser utilizados como uma das seguintes ferramentas:

- Ferramenta Preditiva: Empregados para prever impactos de ações propostas nas condições hidrogeológicas existentes;

- Ferramenta Interpretativa: Utilizados para estudar a dinâmica do sistema, compreender processos de fluxo e transporte, e assim, proporcionar *insights* sobre os parâmetros que controlam um ambiente específico, além de organizar dados de campo e formular concepções sobre a dinâmica do sistema;
- Ferramenta Genérica: Aplicados no estudo de processos em sistemas hidrogeológicos hipotéticos, úteis para desenvolver normas e diretrizes de gestão para regiões específicas, ou para identificar áreas adequadas ou inadequadas para determinadas ações propostas.

A modelagem hidrogeológica é uma ferramenta crucial na gestão dos recursos hídricos subterrâneos, especialmente considerando a complexidade inerente à essas questões e a disponibilidade crescente de programas de computador especializados. A utilização de modelos hidrogeológicos se tornou essencial para abordar e resolver uma ampla gama de problemas nesse contexto.

Esses modelos oferecem a capacidade de sintetizar dados coletados em campo, juntamente com informações geológicas, hidrológicas e hidrogeológicas, possibilitando responder a diversas perguntas relacionadas à variabilidade espacial e temporal do comportamento dos aquíferos.

Ao integrar dados de observações de campo, como níveis de água, vazões de nascentes, características hidráulicas do solo e da rocha, com informações sobre a estrutura geológica do subsolo, os modelos hidrogeológicos permitem simular e prever o comportamento dos aquíferos em diferentes condições. Isso é essencial para compreender como os sistemas aquíferos se comportam ao longo do tempo, como respondem a estímulos externos (como mudanças climáticas ou intervenções humanas) e como podem ser gerenciados de maneira mais eficaz e sustentável.

Anderson *et al.* (2015) ressaltam a importância crescente dos modelos hidrogeológicos como uma ferramenta valiosa para consolidar informações e oferecer respostas a questões complexas relacionadas à gestão e uso sustentável dos recursos hídricos subterrâneos.

Em estudos hidrogeológicos, os modelos são aplicados predominantemente aos problemas de fluxo de água subterrânea e transporte de contaminantes. Porém existe uma necessidade contínua do uso de modelos de água subterrânea para resolver problemas relativos à avaliação dos recursos hídricos, impactos do clima e

das atividades antrópicas na qualidade e quantidade da água, incidentes de contaminação e mitigação, licenciamento de poços de captação, dentre outros (Anderson e Woessner, 1992).

De acordo com Wang e Anderson (1982), os modelos hidrogeológicos podem ser classificados em modelos físicos, analógicos ou numéricos. Os modelos físicos são usados principalmente em experimentos laboratoriais. Tanques de areia são comumente utilizados para representar aquíferos e simular diversas situações, como por exemplo, plumas de contaminação. Por sua vez, os modelos analógicos consistem na representação de fenômenos específicos por meio de analogias com outros fenômenos em menor escala, fundamentados nas leis físicas que os regem. Contudo, é importante salientar que este tipo de modelo requer meios homogêneos, isotrópicos e de geometria simples, ou seja, condições pouco realistas considerando as inúmeras complexidades inerentes ao meio geológico.

Já os modelos matemáticos, buscam descrever por meio de equações diferenciais os processos físicos associados ao fluxo de água subterrânea (Bear e Cheng, 2010; Fetter, 1994). Comparativamente, os modelos matemáticos são mais versáteis quando comparados aos modelos físicos e analógicos, principalmente porque são capazes de gerar inúmeros resultados, para diferentes cenários em um mesmo sistema, além de apresentarem uma velocidade de resposta consideravelmente maior. A partir da década de 1960, com a evolução computacional e o surgimento de *softwares* cada vez mais sofisticados, os modelos matemáticos têm sido o método mais utilizado para estudos relacionados aos recursos hídricos subterrâneos (Anderson *et al.*, 2015).

2.1.2.1 Modelos matemáticos

Os modelos matemáticos representam os processos de natureza física, como o fluxo de água subterrânea, por meio de um conjunto de equações matemáticas (Anderson *et al.*, 2015). Uma das grandes vantagens destes modelos é a capacidade de representar a heterogeneidade e anisotropia de um sistema de maneira mais precisa, permitindo a incorporação de uma ampla gama de parâmetros.

A modelagem matemática é considerada uma das ferramentas mais completas e eficientes para a compreensão da dinâmica de um aquífero, pois são capazes de reproduzir uma representação simplificada da realidade e buscam a

melhor correlação dos dados coletados em campo, reduzindo o número de incertezas na representação de um sistema hidrogeológico (Anderson e Woessner, 1992). Além disso, qualquer problema relacionado à hidrogeologia pode ter sua solução beneficiada pela utilização destes modelos, mesmo que sirva apenas para visualizar os dados de campo ou fazer simulações de fluxo (Anderson *et al.*, 2015).

Entretanto, a modelagem não deve ser adotada como um resultado final e absoluto de uma investigação, mas sim, como um dos instrumentos para apoiar as decisões. Além disso, é importante salientar que a modelagem é uma ferramenta dinâmica, que requer revisões e atualizações contínuas durante a busca por representações do cenário real (Seyf-Laye *et al.*, 2012).

2.1.2.1.1 Componentes de um modelo matemático

Os modelos matemáticos se estruturam sempre a partir dos seguintes elementos: equações governantes, condições de contorno e condições iniciais (para problemas dependentes do tempo), descritos a seguir.

A etapa inicial no desenvolvimento de um modelo matemático é formular as equações governantes, as quais derivam dos princípios físicos que controlam o processo que será modelado. No caso do fluxo da água subterrânea, os princípios físicos envolvidos são a Lei de Darcy e a equação do balanço de massas (Fitts, 2015). Combinando as relações matemáticas que descrevem esses princípios, e considerando um meio heterogêneo, anisotrópico e em regime permanente ou transiente, tem-se como resultado a equação fundamental do fluxo de água subterrânea em aquíferos porosos confinados (Wang e Anderson, 1982; Cleary, 1989):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) \pm W = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (05)$$

Sendo, h a carga hidráulica (L); K_x , K_y e K_z , os valores de condutividade hidráulica ao longo dos eixos x , y e z - que são considerados paralelos aos eixos da condutividade hidráulica; S_s , o coeficiente de armazenamento específico (1/L) - equivale ao volume de água liberado (L³), por unidade de volume do material poroso e por unidade de decréscimo da carga hidráulica; t , o tempo; e W , o fluxo volumétrico

por unidade de volume, que representam fontes ou sumidouros de água (L^3/TL^3). Esta equação pressupõe que a diferença entre a quantidade de água que entra e a que sai em um determinado ponto (x , y ou z) de um aquífero, em função do tempo, corresponde à mudança de armazenamento em função do tempo (Anderson e Woessen, 1992). No regime permanente, ou estacionário, a variação da carga hidráulica no tempo é nula e conseqüentemente a equação será simplificada.

Para meios porosos não saturados, aplica-se a equação diferencial de Richards, que resulta da combinação entre a equação da continuidade e a equação de Darcy-Buckingham. De acordo com Richards (1931), a principal diferença entre o fluxo em meios saturados e o fluxo em meios não saturados é que, sob essa última condição, a pressão é determinada pelas forças de capilaridade e a condutividade depende da saturação do meio. A equação 06 representa a abordagem proposta por Richards (1931) para fluxo em meios não saturados.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) \pm W = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (06)$$

Sendo K_x , K_y e K_z a condutividade hidráulica $K = K(x, y, z, t, \theta)$; θ é o conteúdo de água do solo $\theta = \theta(x, y, z, t)$; e h é a carga hidráulica $h = h(x, y, z, t, \theta)$.

De acordo com Bear e Cheng (2010), as equações que compõem os modelos matemáticos podem ser resolvidas de duas formas, classificando estes modelos em analíticos ou numéricos. A seleção da metodologia a ser aplicada depende dos objetivos a serem alcançados, além de outras condicionantes como por exemplo a complexidade do sistema, os dados disponíveis e a escala do problema.

As fronteiras de um sistema hidrogeológico definem as condições de contorno do modelo matemático, as quais permitem definir as fronteiras físicas e hidráulicas do domínio computacional. A presença de elementos físicos como aquícludes, aquíardes, aquífugos ou corpos d'água, bem com condições específicas de fluxo como divisores de água ou poços de bombeamento são traduzidas em equações matemáticas que definem as condições de contorno do modelo numérico.

Estas condições constituem um elemento fundamental para a representação precisa de um sistema de água subterrânea. Inicialmente, um modelo pode convergir

para um número infinito de soluções, sendo as condições de contorno as responsáveis por direcionar a convergência de um modelo para uma solução única.

Segundo Anderson *et al.*, (2015), as condições de contorno consistem em expressões matemáticas que determinam as relações existentes entre as cargas hidráulicas e o fluxo de água subterrânea. Tais formulações estabelecem os limites do domínio modelado, bem como determinam as entradas e as saídas de água do sistema. Essas condições de contorno podem ser classificadas em três tipos principais:

- **Tipo I - Dirichlet (carga específica):**

É uma condição de contorno de carga hidráulica conhecida, que deve ser determinada na fronteira de um nó como função do tempo e do espaço, ou seja, o valor da variável dependente (carga hidráulica) é especificado no contorno. Esta condição de contorno ocorre quando a carga é determinada por um corpo d'água ou por alguma obra de engenharia ou rebaixamento/recarga em poço.

- **Tipo II - Neumann (fluxo específico):**

Nesta condição de contorno, o gradiente da carga hidráulica é especificado ao longo de um limite. Este gradiente corresponde ao fluxo, o qual pode ser nulo ou não. Este tipo de condição é comum em situações de fluxo zero para representar barreiras impermeáveis (que não tem fluxo e nem velocidade) ou divisores de água.

- **Tipo III – Robin, Mista ou Cauchy (fluxo dependente da carga):**

Esta condição de contorno relaciona as condições de contorno da carga hidráulica (Dirichlet) e de fluxo (Neumann). Usualmente é utilizada em situações de contorno semipermeável ou interface entre materiais com diferentes propriedades, onde o modelo deve garantir a continuidade de fluxo dada uma mesma carga hidráulica.

A definição das condições de contorno é uma etapa crucial da modelagem de fluxo e deve estar embasada na compreensão dos parâmetros físicos e hidrogeológicos do aquífero estudado. Se forem mal definidas, podem resultar em erros graves e restringir os resultados das simulações.

As condições iniciais, por sua vez, descrevem a distribuição tridimensional da carga hidráulica no domínio do modelo matemático no início do processo de simulação, ou seja, no tempo igual a zero.

2.1.2.2 Modelos analíticos

Os modelos analíticos utilizam soluções matemáticas deduzidas para situações mais simplificadas, além disso necessitam de uma menor quantidade de dados, quando comparados aos modelos numéricos (Feitosa, 2008). Tais modelos geralmente são utilizados para simular o fluxo de água subterrânea unidimensional ou bidimensional em condições simplificadas, dentre elas a homogeneidade das propriedades do aquífero.

Tais modelos exigem um alto nível de simplificação em relação ao sistema natural, conferindo-lhes a capacidade de abordar problemas de natureza mais simples. São uma boa opção para áreas com dados hidrogeológicos restritos e sistemas aquíferos relativamente uniformes (Foster *et al.*, 2002). A utilização destes modelos se restringe a casos particulares e sem complexidades, e é aqui onde os modelos numéricos, por meio do seu esquema de solução por diferenças finitas ou elementos finitos, podem abordar os problemas mais complexos bidimensionais ou tridimensionais de um meio (homogêneo ou heterogêneo) que apresentam múltiplas configurações do sistema real (Anderson *et al.*, 2015; Bear, 1988).

2.1.2.3 Modelos numéricos

De acordo com Anderson *et al.* (2015), os modelos numéricos são ferramentas que permitem estudar os problemas relacionados à água subterrânea de forma eficiente e mais rápida. Estes modelos quando comparados aos analíticos são tecnicamente mais eficazes, pois têm a capacidade de simular variações complexas relacionadas à geometria, às propriedades e aos padrões de recarga dos aquíferos, fornecendo resultados mais robustos (Foster *et al.*, 2002).

O processo de discretização, que caracteriza os modelos numéricos, é resultado da segmentação do domínio simulado em intervalos finitos. Durante este processo ocorre a transformação de equações parciais em equações algébricas

simples, resultando em soluções aproximadas. A discretização permite que problemas associados à geometria ou heterogeneidade do aquífero sejam representados, considerando que regiões distintas podem ser individualizadas (Wang e Anderson, 1982).

A maioria dos programas utilizados em modelagem numérica de fluxo de água subterrânea soluciona as equações por meio do método das diferenças finitas ou o método dos elementos finitos (Diersch, 2014). A seleção do método a ser adotado está condicionada à complexidade do problema em questão e a disponibilidade do código para a sua aplicação.

Estes dois métodos constituem métodos aproximados que quebram o domínio contínuo em componentes discretos (Diersch, 2014). Com o método das diferenças finitas, a equação diferencial é descrita para cada nó e as derivadas são substituídas por equações diferenciais, tendo um conjunto de equações lineares simultâneas como resultado (Remson *et al.*, 1971). Já o método dos elementos finitos utiliza formulações integrais em vez de equações diferenciais, gerando um sistema de equações algébricas. Com relação à acurácia, estes métodos são similarmente equivalentes, porém a aproximação do método dos elementos finitos é mais versátil e a sua discretização mais flexível quando comparada ao método das diferenças finitas.

2.1.2.3.1 Método dos elementos finitos

O método dos elementos finitos é definido como uma análise matemática que consiste no processo de discretização de um domínio em pequenos elementos, mantendo as propriedades do meio original (Zienkiewicz e Taylor, 1989). Este método substitui a equação diferencial parcial por uma formulação integral e utiliza funções de interpolação para a definição das cargas hidráulicas ao longo do domínio (Wang e Anderson, 1982). Esta formulação composta por integrais é geralmente obtida através do método de Galerkin, que se baseia em um princípio particular dos resíduos ponderados e determina uma solução minimizando um parâmetro que mede o quanto o resultado aproximado se desvia das equações gerais (Wang e Anderson, 1982). A ideia fundamental deste método consiste em substituir a solução exata de uma equação diferencial parcial por uma solução aproximada contínua por partes.

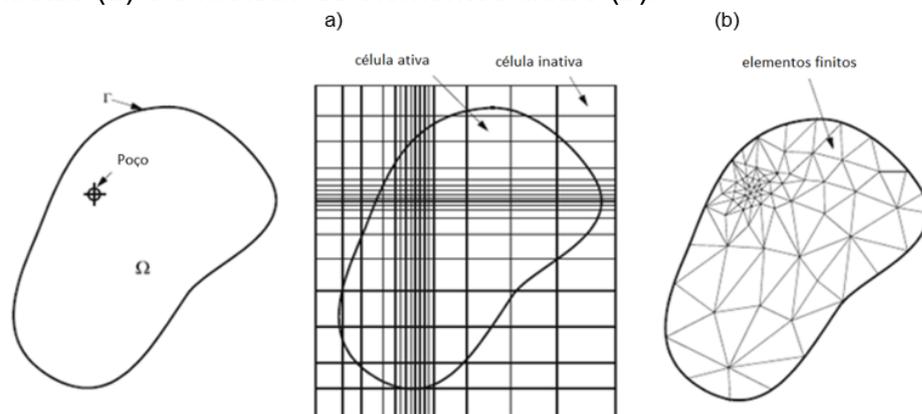
Este método permite que o domínio do problema seja dividido em subdomínios, objetivando representar áreas complexas como um conjunto de

subdomínios mais simples, denominados elementos finitos. Cada elemento finito é conectado aos elementos vizinhos por meio de pontos discretos, ou nós, e ao conjunto dos elementos dá-se o nome de malha (Pinder e Gray, 2013). Dentro de cada elemento, a variável dependente (carga hidráulica) é aproximada por uma função de interpolação (na maioria das vezes linear ou quadrática), que é definida em relação aos valores que a carga hidráulica assume nos nós relacionados a cada elemento. Desta forma, o problema original é transformado em uma integração, onde todos os elementos são combinados, formando um sistema de equações onde as incógnitas são os valores da carga hidráulica nos nós (Feitosa, 2008).

As formas dos elementos utilizados nesse método são mais flexíveis do que os retângulos utilizados no método de diferenças finitas, geralmente são triângulos e trapezoides para os fluxos bidimensionais e prismas triangulares e trapezoidais para os fluxos tridimensionais (Figura 8) (Fitts, 2015). Esta propriedade permite que os nós que formam os elementos possam ser arbitrariamente separados ou agrupados no domínio, formando elementos de distintos tamanhos, discretizando mais ou menos de acordo com a necessidade. Por exemplo, em regiões onde existem uma grande diferença entre os valores de certas propriedades e que necessitam uma maior precisão, podem ser melhor representadas devido a esta flexibilidade.

Segundo Beven (1997), a modelagem por elementos finitos permite a representação da curvatura natural das regiões de vertente e possibilita a manipulação de variações na condutividade hidráulica, bem como se adequa com maior facilidade às condições de contorno de Dirichlet, Neumann e Cauchy (Robin).

Figura 8 - Diferença entre o processo de discretização utilizando o método de diferenças finitas (a) e o método de elementos finitos (b).



Fonte: Diersch (2014).

Uma variedade de códigos, tanto de natureza livre quanto proprietária, emprega o método dos elementos finitos para a resolução de problemas de água subterrânea. Dentre esses, destacam-se exemplos como o FEFLOW[®] (Diersch, 2014), o HYDRUS[®] (Šimůnek *et al.*, 2012), o HydroGeoSphere - HGS[®] (Aquanty, 2015), o Flow123D[®] (Březina *et al.*, 2015) dentre outros.

2.1.2.3.2 FEFLOW[®]

O FEFLOW[®] (*Finite Element subsurface FLOW and transport system*) é um dos *softwares* de modelagem hidrogeológica mais utilizados na atualidade. Foi criado em 1979 por Hans-Jörg G. Diersch e atualmente é desenvolvido e comercializado pela empresa DHI Water & Environment. É considerado uma ferramenta computacional sofisticada que realiza simulações bidimensionais e tridimensionais de fluxo, massa e transporte em meios porosos e fraturados utilizando o método dos elementos finitos para resolução das equações diferenciais parciais.

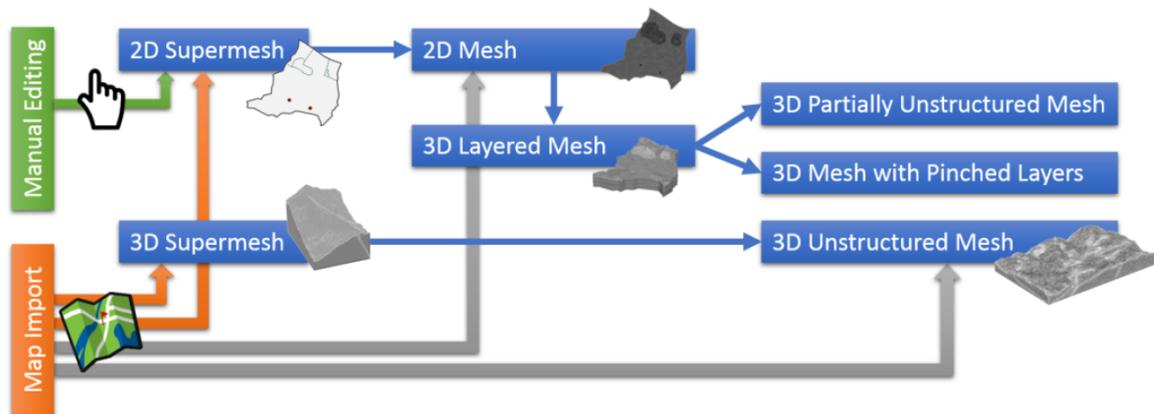
Esse código computacional oferece a capacidade de simular uma série de processos em diferentes dimensões espaciais e temporais, abrangendo desde modelos simples de fluxo bidimensional em estado permanente até modelos transientes, insaturados e acoplados à processos de transporte reativo. O programa resolve a equação de Darcy em três dimensões para os meios saturados e a equação de Richards para os meios não saturados (Diersch, 2014).

Por basear-se no método dos elementos finitos, este programa possibilita uma maior discretização da malha em locais que necessitam mais detalhe e onde as condições de contorno ou contatos possuem geometrias complexas. Nesse caso, os nós que interligam os elementos finitos favorecem a representação de algumas feições quando comparados à discretização em células, do método das diferenças finitas, conforme também mencionado por Diersch (2014).

O código FEFLOW[®] oferece diferentes fluxos de trabalho para a geração da malha (Figura 9), que pode ser criada manualmente no programa, importada de um mapa ou de um programa de modelagem geológica. Os tipos de malhas geradas podem ser tanto estruturadas quanto não estruturadas, ou mesmo parcialmente não estruturadas, dependendo das características específicas do problema a ser solucionado. Nas malhas estruturadas, são utilizados elementos triangulares prismáticos organizados em camadas horizontais contínuas. Em contrapartida, as

malhas não estruturadas são geradas por meio de elementos tetraédricos, hexaédricos ou prismas, proporcionando uma maior flexibilidade para representar geometrias irregulares e feições como rios, poços, falhas ou estruturas.

Figura 9 - Fluxograma representado as diferentes formas de geração de malha no FEFLOW®.

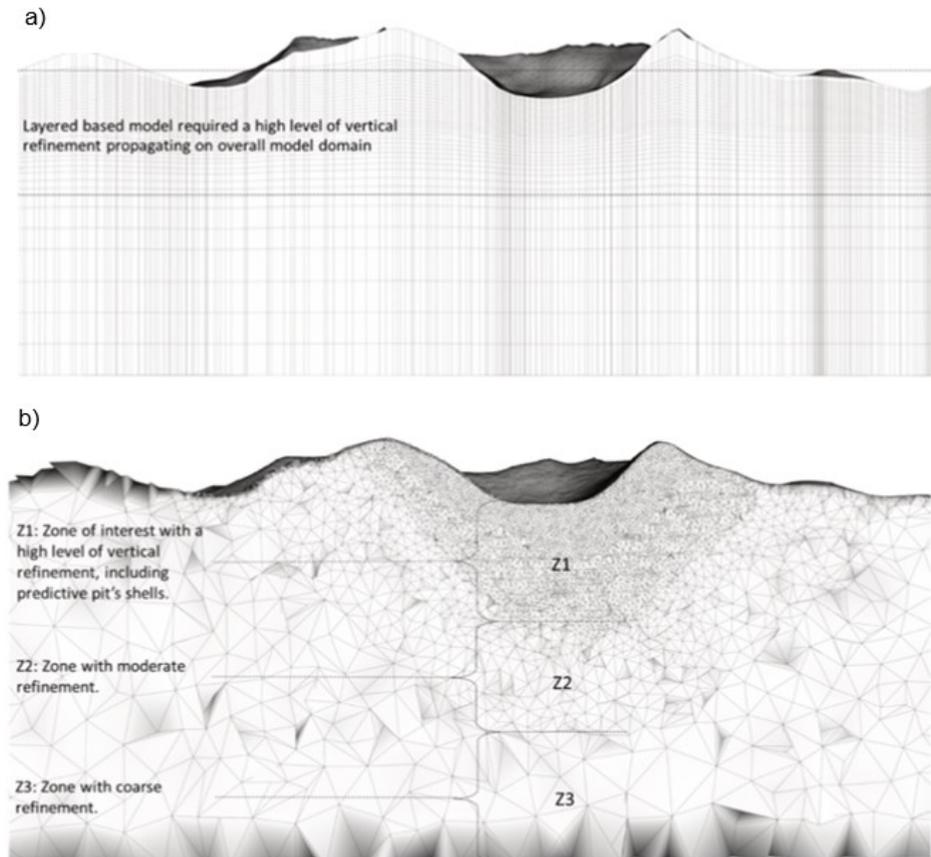


Fonte: Alexander Renz (2019).

Uma das principais vantagens da malha não estruturada é a capacidade de representar facilmente a variação da estratigrafia e permitir uma discretização versátil de domínios de modelos não retangulares. Além disso, esse tipo de malha proporciona uma melhor representação de anisotropia e heterogeneidade, permitindo um refinamento mais fácil em regiões de interesse sem comprometer a precisão (Anderson *et al.*, 2015).

Dufour *et al.* (2020), utilizaram o código FEFLOW® para desenvolver dois modelos hidrogeológicos da mesma área nos Andes peruanos. No projeto inicial, conduzido em 2012, foi utilizada uma malha estruturada, e posteriormente, em 2016, optaram pela malha não estruturada tridimensional (Figura 10). Os autores realizaram uma análise comparativa dos resultados obtidos nos dois projetos, destacando as vantagens significativas do uso da malha não estruturada. Eles enfatizaram o alto nível de refinamento alcançado nas áreas de interesse e uma redução de aproximadamente 70% do número de elementos utilizados na malha, resultando em uma considerável diminuição no tempo computacional necessário para a execução do modelo.

Figura 10 - Comparação entre os dois tipos de malhas geradas no programa FEFLOW®. a) Malha estruturada em camadas, apresentando um refinamento vertical em zonas distantes da área de interesse. b) Malha não estruturada, na qual foi possível representar um alto nível de refinamento em zonas específicas, enquanto em áreas de menor importância o grau de refinamento foi reduzido para otimizar o tempo de execução da simulação do modelo.

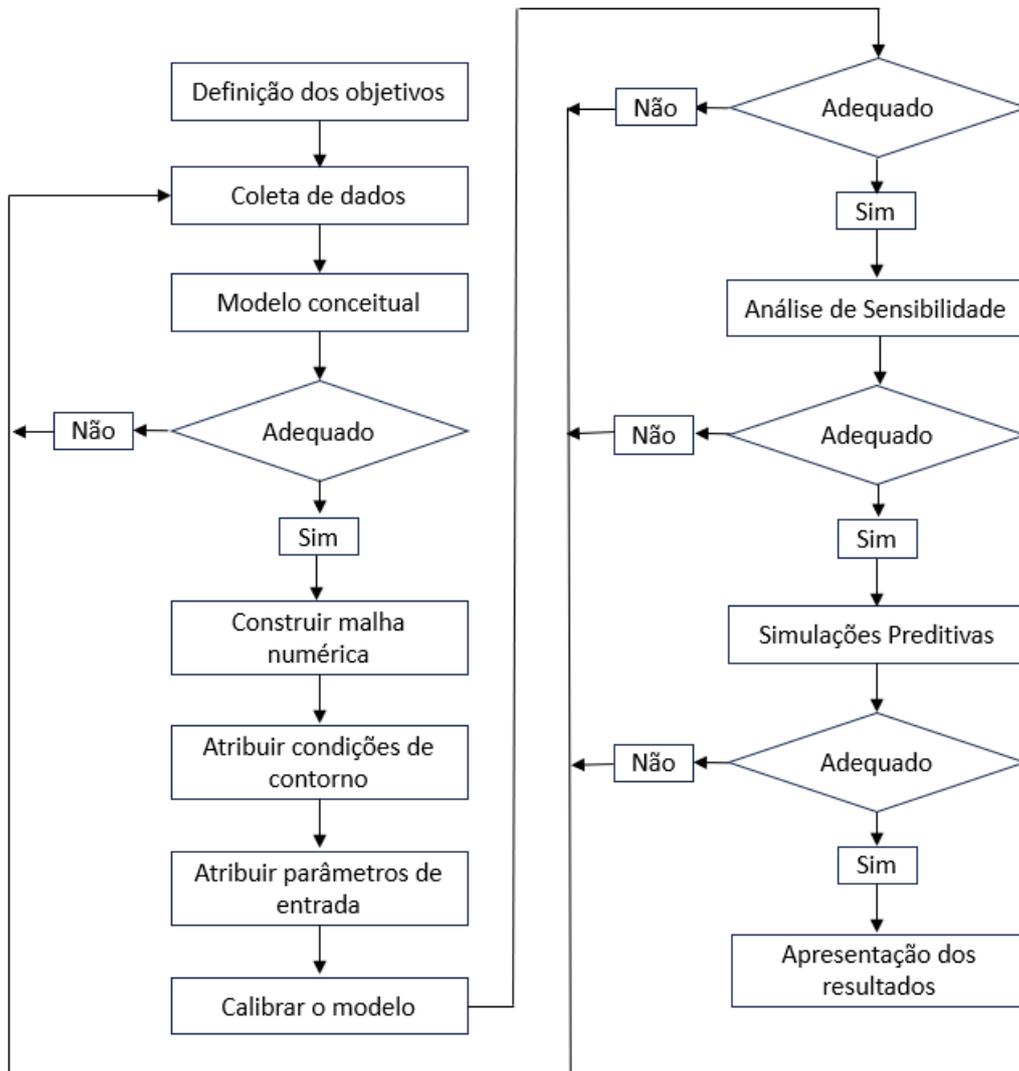


Fonte: Dufour *et al.* (2020).

2.1.2.4 Etapas da elaboração de um modelo hidrogeológico

Diversos autores propõem abordagens semelhantes sobre a elaboração de modelos hidrogeológicos, como evidenciado por Diersh (2014), Bear e Cheng (2010) e Anderson e Woessner (1992). Neste estudo, adotou-se como referência o fluxograma de ações representado na Figura 11.

Figura 11 - Fluxograma das etapas de elaboração de um modelo hidrogeológico.



Fonte: Adaptado de Anderson e Woessner (1982).

A definição dos objetivos representa a primeira ação de todo processo de modelagem de água subterrânea. Esta etapa é extremamente importante, uma vez que ela estabelece a direção a ser seguida nas fases subsequentes do processo. Neste estágio, o modelador deve claramente determinar quais questões pretende responder por meio da modelagem. Posteriormente, procede-se à coleta e análise de dados, lembrando que a confiabilidade do modelo está intrinsecamente relacionada à qualidade e precisão dos dados utilizados.

A etapa seguinte envolve a elaboração do modelo conceitual, que se baseia na descrição dos processos físicos e químicos que governam as reações e interações entre a água e o meio, objetivando a representação da realidade hidrogeológica da

região com a máxima fidelidade possível. Durante esse estágio, são adotadas suposições a respeito do domínio modelado, das dimensões e geometria do sistema, e de diversos parâmetros que auxiliem na sua construção (Bear e Cheng, 2010).

A construção de um modelo conceitual é necessária para que se tenha uma visão geral do aspecto hidrogeológico da área investigada, bem como a identificação de todos os elementos que, de alguma forma, condicionam o fluxo subterrâneo e que por sua importância requerem maior detalhamento. Na execução do modelo conceitual busca-se representar o sistema de forma esquemática e simplificada, para permitir a implementação do modelo computacional.

O processo de escolha do código computacional é realizado de acordo com o modelo conceitual previamente definido, optando por aquele que mais se adapte às complexidades do objetivo proposto (Bear e Cheng, 2010). Nesse processo, diversos fatores devem ser considerados, incluindo: o objetivo do trabalho; a estrutura do modelo; a escala; os dados; o tempo; os recursos disponíveis; os principais mecanismos que governam o fluxo das águas; e as particularidades do sistema que será modelado.

Para a elaboração de um modelo matemático, é necessário traduzir o modelo conceitual para a linguagem do programa selecionado a partir da discretização da geometria do problema através de uma malha. Posteriormente, as condições iniciais, condições de contorno e as propriedades hidrodinâmicas devem ser incorporadas, de modo que o programa possa representar, da melhor forma possível, as condições reais do sistema hidrogeológico (Iritani, 1999).

Durante a calibração, o modelo compara as cargas hidráulicas e as vazões de descarga estimadas com os valores medidos em campo. Este processo pode ser conduzido manualmente, através de um método de tentativa e erro, ou automaticamente, sendo que o objetivo principal é reduzir ao mínimo os erros quadráticos.

O último estágio da elaboração de um modelo hidrogeológico é a análise de sensibilidade, que consiste na validação do modelo e é responsável por apontar a intensidade com que um parâmetro influencia nos resultados (Anderson e Woessner, 1992). Esta análise pode identificar inconsistências na parametrização do modelo, cuja correção pode aprimorar a sua precisão. No entanto, a duração dessa etapa pode ser substancial, dependendo da complexidade do modelo e número de análises de

sensibilidade conduzidas para parâmetros individuais e suas combinações, bem como o tempo computacional necessário.

Após o processo de calibração e análise de sensibilidade do modelo, este pode ser utilizado para simulações preditivas e interpretações de cenários futuros. No entanto, é importante ressaltar que a avaliação dos resultados deve sempre considerar as limitações e incertezas do modelo.

2.1.3 Modelagem geológica implícita

A modelagem geológica consiste no processo de criação de modelos tridimensionais baseados em interpretações de dados geológicos (Calgano *et al.*, 2008). É uma ferramenta que sintetiza diferentes tipos de dados, auxiliando na tomada de decisões importantes e é amplamente utilizada em projetos de mineração, petróleo, gás, engenharia, hidrogeologia, energia geotérmica, dentre outros (Cowan *et al.*, 2003).

Tradicionalmente, os modelos geológicos eram criados de forma explícita, em que a modelagem era realizada por meio de desenhos manuais a partir de seções geológicas, sendo um processo demorado e trabalhoso (Calgano *et al.*, 2006). As limitações intrínsecas a este tipo de modelagem incentivaram o surgimento de novas técnicas, como a modelagem geológica implícita. Bloomenthal e Bajaj (1997), introduziram essa técnica no campo da computação gráfica, permitindo a construção de objetos com diferentes geometrias.

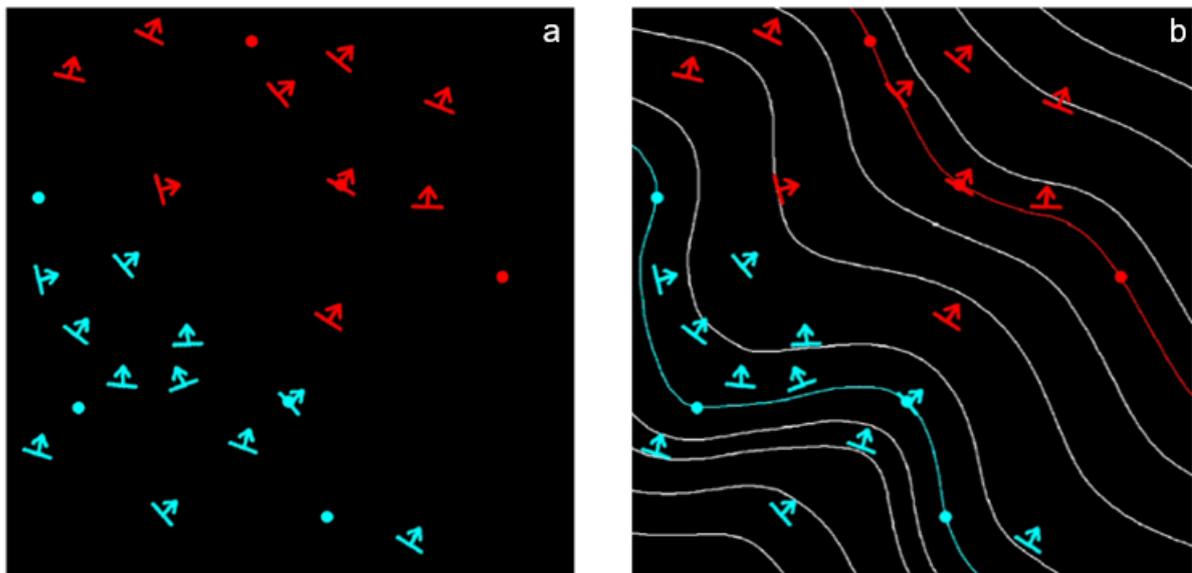
A abordagem implícita oferece um processo de construção de domínios mais rápido, com alta flexibilidade e facilidade de replicação. Além disso, facilita a atualização dinâmica dos modelos conforme a incorporação de novos dados (Thornton *et al.*, 2018). Segundo Cowan *et al.* (2003), ao comparar a modelagem implícita com a explícita, observam-se inúmeras vantagens, incluindo a capacidade de modelar geometrias complexas, processar um grande número de dados em diferentes formatos, redução significativa do tempo de modelagem (pode chegar a um terço do tempo da técnica de modelagem explícita), geração rápida de inúmeros modelos hipotéticos e agilidade na atualização do modelo.

A modelagem implícita é caracterizada como um método automatizado para gerar superfícies a partir de dados geológicos, facilitando a compreensão da geologia de uma área ao integrar dados bidimensionais em um espaço tridimensional. Esse

mecanismo se fundamenta em algoritmos que determinam a utilização de pontos de dados conhecidos para estimar pontos de dados desconhecidos, criando superfícies que representem os contatos geológicos ou planos de falha. Essa técnica possibilita a construção de superfícies e volumes tridimensionais definidos por uma única função matemática, denominada função implícita, calculada por meio de interpolação espacial (Cowan *et al.*, 2003; Calcagno *et al.*, 2006). Diversas metodologias foram desenvolvidas para essa construção, sendo o método do campo potencial de interpolação um dos mais utilizados (Lajaunie *et al.*, 1997).

O método de interpolação gera um campo escalar onde os isovalores simbolizam os limites geológicos. Esse campo é interpolado por um método estatístico de cokrigagem, que utiliza simultaneamente pontos tridimensionais localizados nos contatos geológicos a serem modelados e vetores tridimensionais que indicam o mergulho destes contatos. Estes dois conjuntos de dados correspondem aos isovalores e aos gradientes do campo escalar a serem interpolados. Como resultado obtém-se um campo de potencial escalar tridimensional com isovalores representados (Figura 12) (Calcagno *et al.*, 2022).

Figura 12 - Representação gráfica da interpolação com base no método do campo potencial. a) Dados iniciais para a interpolação: os pontos em azul e vermelho indicam duas diferentes formações e representam os dados dos contatos geológicos. Os vetores definem as medições de direção e mergulho das camadas. b) Resultado da interpolação: os contatos geológicos são representados pelos isovalores do campo potencial. As curvas vermelha e azul representam os isovalores que demarcam os limites dos contatos geológicos modelados.

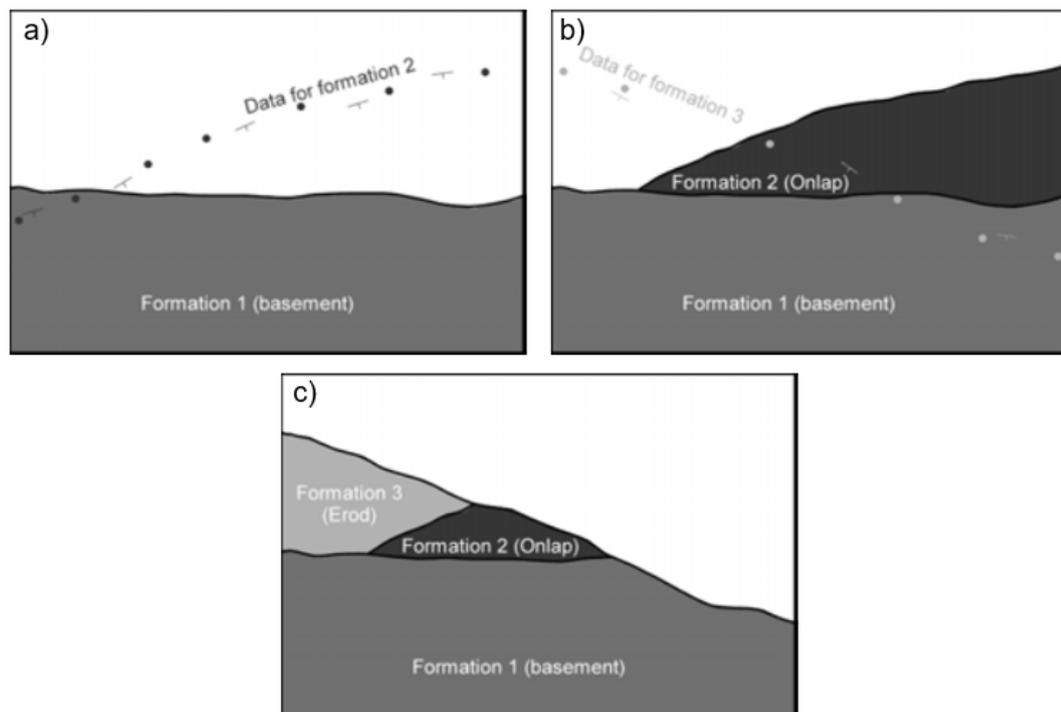


Fonte: Calcagno *et al.* (2022).

Cada formação geológica é associada a um campo potencial específico e a sequência estratigráfica estabelece as relações cronológicas e topológicas entre essas formações, facilitando a delimitação automática dos contornos geológicos durante a modelagem. De acordo com Calgano *et al.* (2022) é possível integrar múltiplos campos potenciais em um único modelo para representar, por exemplo, relações estratigráficas erosivas (*erode*) ou concordantes (*onlap*) entre distintas séries geológicas (Figura 13). Thornton *et al.* (2018), também salientam que falhas geológicas podem ser representadas por meio de descontinuidades introduzidas no campo potencial.

Uma vez computadas, as superfícies ou volumes podem ser visualizadas por meio de um algoritmo de computação gráfica denominado *marching cubes*. Este método é especializado na geração de malhas geométricas de isossuperfícies a partir de um campo escalar tridimensional (Lorensen e Cline, 1987).

Figura 13 - Ilustração da representação de relações erosivas e concordantes entre formações geológicas usando múltiplos campos potenciais. a) Interpolação da Formação 1 e dados iniciais para o campo potencial da Formação 2. b) Interpolação da Formação 2 demonstrando uma relação concordante e dados preliminares para o campo potencial da Formação 3. c) Interpolação da Formação 3 evidenciando uma relação erosiva.



Fonte: Calgano *et al.* (2006).

Diversos *softwares*, como o GeoModeller®, o Vulcan® e o Leapfrog Geo®, foram desenvolvidos especificamente para a modelagem geológica implícita. Estes programas utilizam técnicas avançadas, como Krigagem e cokrigagem, para interpolar dados e gerar superfícies geológicas consistentes. A versatilidade desses programas permite a incorporação de uma vasta gama de dados, desde mapas geológicos e seções transversais até perfis de sondagem e interpretações geofísicas (Marín-Lechado *et al.*, 2022).

2.1.3.1.1 GeoModeller®

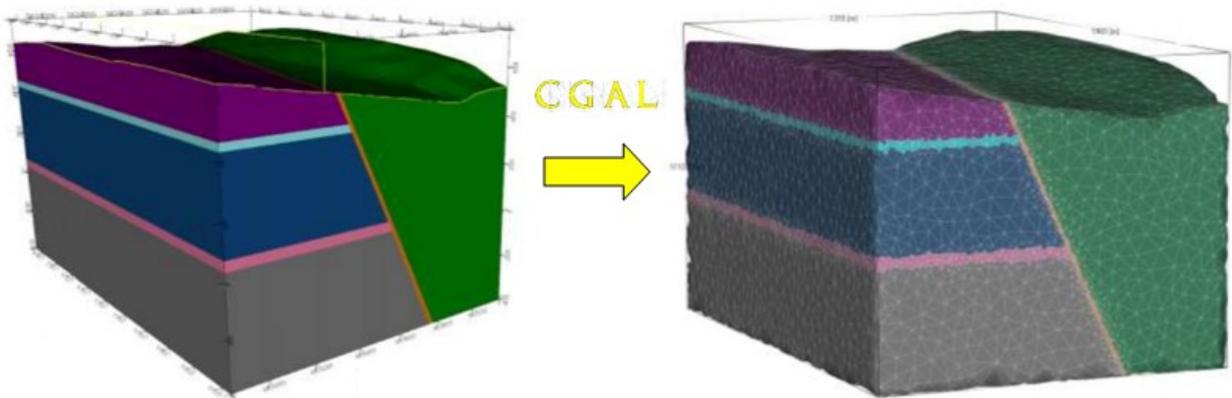
O GeoModeller® é um *software* desenvolvido em parceria entre o Serviço Geológico Francês (BRGM) e a empresa Intrepid Geophysics, que utiliza o método do campo potencial de interpolação no processo de modelagem. Na construção dos modelos, ele segue três diretrizes centrais: os dados de contatos geológicos estabelecem os limites entre as formações, os dados estruturais são utilizados para modelar os contatos que separam as formações, e por fim, todos os dados de contatos geológicos são interpretados como parte de um conjunto infinito de superfícies que estão alinhados com a orientação do campo potencial implícito (Calcagno *et al.*, 2008).

O programa utiliza um conceito próprio de coluna estratigráfica, facilitando a consolidação dos contatos entre as formações e preservando as relações estratigráficas e a cronologia das falhas. A definição da coluna se baseia na topologia dos contatos geológicos para caracterizar sua arquitetura espacial sem considerar sua ordem cronológica. A modelagem da geometria das falhas é definida por meio de campos potenciais específicos, e a partir disso, o programa calcula os deslocamentos das falhas a partir de cálculos de krigagem universal das descontinuidades. Essencialmente, a coluna estratigráfica previamente definida, estabelece as relações espaciais entre os modelos individuais de cada série para completar o modelo (Thornton *et al.*, 2018).

O GeoModeller® possui ferramentas de geração de malhas numéricas que permitem a exportação dos modelos em diferentes formatos. Dentre estas ferramentas, destaca-se o algoritmo computacional CGAL (Computational Geometry Algorithms Library), responsável por gerar malhas de elementos finitos não estruturadas (Figura 14). Essas malhas podem ser exportadas diretamente para

outros programas sem a necessidade de etapas intermediárias de conversão. Além disso, o algoritmo CGAL oferece recursos específicos de validação e refinamento, garantindo melhores resultados em simulações de elementos finitos.

Figura 14 - O algoritmo CGAL oferece um pacote de geração de malha de superfícies e volumes, utilizando elementos tetraédricos a partir de modelos implícitos gerados pelo programa GeoModeller®.



Fonte: Alexander Renz, (2019).

Esta funcionalidade facilita a integração com outros programas, como o FEFLOW®, preservando todas as características cruciais do modelo geológico necessárias para a modelagem numérica de fluxo (Calcagno *et al.*, 2018). Em um estudo realizado por Hassen *et al.* (2017), o GeoModeller® foi empregado para desenvolver um modelo geológico tridimensional de um sistema aquífero na Tunísia. Este modelo serviu como uma importante ferramenta para orientar os gestores de recursos hídricos na estratégica localização de novos poços, bem como para aprofundar a compreensão das águas subterrâneas e da geologia da área, incluindo a conectividade das falhas. Como um dos resultados, o estudo possibilitou a exportação da malha para o FEFLOW®, facilitando investigações científicas adicionais e posteriores realizações de simulações de fluxo.

Thornton *et al.* (2018) apresentaram um modelo geológico de uma área estruturalmente complexa nos Alpes Suíços utilizando o *software* GeoModeller®. Dados extraídos de mapas geológicos e seções transversais foram compilados ao longo de um Modelo Digital de Terreno (MDT) resultando em um modelo tridimensional robusto. Esse modelo não só fundamenta os estudos das águas

subterrâneas da região, mas também está disponível em formato *voxel*, o que facilita a sua aplicabilidade em modelos hidrogeológicos.

O *software* GeoModeller foi utilizado por Magnabosco *et al.* (2020) na construção do modelo geológico de uma região cárstica em Sete Lagoas, Minas Gerais. Para isso, foram integrados dados geológicos de superfície, dados geofísicos, dados estruturais e dados provenientes de furos de sondagem. Esse modelo serviu como ferramenta na elaboração do modelo hidrogeológico conceitual, que por sua vez, foi utilizado para mapear a favorabilidade hidrogeológica da área e para contribuir com a gestão dos recursos hídricos da região.

Mas *et al.* (2022) propuseram um modelo geológico dos aquíferos profundos na região de Orléans, França, também utilizando o programa GeoModeller®. O estudo integrou dados provenientes de linhas sísmicas, dados de poços e um modelo geológico prévio para construir o modelo tridimensional. O objetivo do estudo era prever a profundidade dos aquíferos profundos e analisar as suas evoluções térmicas e hidrológicas, visando minimizar os riscos associados às operações de energia geotérmica.

2.1.4 Gestão das águas subterrâneas

O uso da água subterrânea vem crescendo exponencialmente nas últimas décadas, tanto para o abastecimento nos setores públicos e privados quanto no uso agrícola e industrial, beneficiando dois bilhões de pessoas no mundo (Gleeson *et al.*, 2010). Conforme Hirata (2019), o baixo custo de captação e a qualidade natural, que na maioria dos casos dispensa qualquer tipo de tratamento, são dois fatores determinantes para justificar a sua crescente utilização. Entretanto, o uso intensivo e não regulamentado desse recurso pode comprometer os mananciais subterrâneos e o meio ambiente, levando a danos muitas vezes irreparáveis (Famiglietti, 2014).

A água subterrânea, embora esteja mais bem protegida e ser menos vulnerável que a água superficial, não está imune aos efeitos da superexploração e contaminação, sejam elas derivadas de atividades antrópicas ou contaminação natural, como a dissolução de minerais presentes nos aquíferos (Foster *et al.*, 2002). Uma exploração intensa e não regulamentada, frequentemente agravada pela presença de inúmeros poços de captação, muitas vezes operando sem as devidas

autorizações, pode desencadear diversos impactos negativos. Estes incluem o rebaixamento dos níveis de aquíferos, redução do fluxo base, subsidência do terreno, degradação da qualidade da água, seja por poluição ou intrusão salina, e também disputas e desigualdades entre usuários, resultando em conflitos entre grandes e pequenos proprietários de poços (Conicelli e Hirata, 2016).

Um exemplo alarmante desta situação é observado no aquífero de Nubia, um dos maiores reservatórios de água subterrânea do mundo, localizado no nordeste da África (Gleeson *et al.*, 2010). Com taxas de recarga praticamente insignificantes, grandes quantidades de água são extraídas diariamente deste aquífero sem o devido monitoramento, principalmente para suprir projetos privados de irrigação no setor agrícola. Constatou-se que a quantidade disponível de água deste manancial está em declínio acelerado nas últimas décadas e que em algumas regiões os níveis de água do aquífero tiveram uma redução de até 60 metros (Gleeson *et al.*, 2010).

Considerando que a maior parte da água subterrânea provém da infiltração de água através do solo (Freeze e Cherry, 1979), é evidente que as atividades superficiais podem impactar significativamente esse recurso. A urbanização, por exemplo, altera o ciclo hidrológico subterrâneo ao impermeabilizar o solo, o que interfere na recarga natural dos aquíferos. A contaminação dos aquíferos é frequentemente associada ao crescimento urbano, à produção industrial, à mineração e, de forma mais expressiva, às práticas agrícolas (Foster *et al.*, 2002).

Van Der Gun (2021) destaca que a agricultura representa a maior fonte de poluição difusa de água subterrânea em nível global, devido ao uso intensivo de fertilizantes e pesticidas. Witten *et al.* (1995) apontam as vantagens tanto sustentáveis quanto econômicas de se prevenir a contaminação dos aquíferos em comparação com os custos e complexidades de sua remediação. A descontaminação pode ser extraordinariamente custosa, atingindo valores até cem vezes superiores aos de medidas preventivas. Além disso, muitos aquíferos contaminados jamais retornam à sua condição original (Bredehoeft, 1992).

Para garantir a manutenção dos mananciais e a qualidade das suas águas, é imprescindível a prática da gestão dos recursos hídricos visando proteger os aquíferos e garantir a sustentabilidade da disponibilidade hídrica aos usuários. Uma boa gestão é extremamente importante para a preservação dos ecossistemas relacionados a este recurso e para enfrentar os desafios que surgem com a crescente demanda de água (Van Der Gun, 2021; Tundisi, 2008).

De acordo com Bear *et al.* (1992), a gestão das águas subterrâneas pode ser definida como um conjunto de decisões que visam reduzir o custo da extração e maximizar os benefícios provenientes deste recurso. Essas decisões envolvem a definição de vazão e localização de poços, definição de recarga artificial, desenvolvimento de incentivos para uso racional e programas de compensação, bem como o manejo prudente do uso do solo. O Relatório Mundial das Nações Unidas sobre o Desenvolvimento dos Recursos Hídricos (UNESCO, 2022) destaca que um dos componentes mais importantes da gestão dos recursos hídricos subterrâneos é o controle efetivo sobre a localização e o volume de extração de água dos aquíferos.

Para que o gerenciamento seja efetivo, é essencial haver uma regulamentação do uso das águas subterrâneas, acompanhados de uma fiscalização rigorosa. Requer-se, igualmente, planejamento governamental integrado, gerenciamento da demanda e uso da água, e um esforço contínuo de educação da sociedade sobre a relevância desse recurso (Morris *et al.*, 2003; UNESCO, 2022). Também é indispensável ter uma compreensão detalhada sobre a quantidade e qualidade da água disponível, a configuração dos aquíferos, as taxas de recarga e os padrões de fluxo das águas subterrâneas (Hirata *et al.*, 2010). No entanto, é frequente essas exigências não serem plenamente atendidas, e a falta de conhecimento científico e técnico sobre os sistemas aquíferos permanece como um grande desafio para os gestores de recursos hídricos.

O conhecimento das características dos reservatórios subterrâneos e a compreensão da sua dinâmica são fundamentais para fornecer bases científicas que auxiliem no gerenciamento da água subterrânea. Tal conhecimento é crucial para antecipar e mitigar riscos de contaminação, conduzir medidas de remediação em aquíferos poluídos e orientar o planejamento urbano e projetos de mineração. Ele permite também identificar áreas de potencial superexploração, avaliar a disponibilidade hídrica e entender a interação entre águas superficiais e subterrâneas.

Tendo em conta as complexidades e incertezas relacionadas ao fluxo da água subterrânea, a utilização de modelagem matemática é considerada uma importante ferramenta de apoio durante a sua gestão, pois permite a compreensão da dinâmica dos aquíferos, a determinação do fluxo de água subterrânea através de simulações e a predição de cenários futuros. Esta abordagem incrementa a confiabilidade das decisões tomadas no âmbito da gestão hídrica e se torna um pilar para qualquer

programa de planejamento e gestão de águas subterrâneas (Bonganha *et al.*, 2007; Kresic, 2023).

Modelos matemáticos têm se mostrado extremamente úteis na gestão de águas subterrâneas, como evidenciado por estudos recentes. Sidiropoulos *et al.* (2013) demonstraram a aplicabilidade desses modelos na remediação do aquífero Lake Karla na Grécia, contaminado por nitrato. Cavicchia (2007) desenvolveu um modelo numérico para o Sistema Aquífero Guarani em Ribeirão Preto, um apoio crucial para o gerenciamento hídrico em uma região desafiada por superexploração e contaminação. Korkmaz e Keskin (2019) utilizaram a modelagem para demarcar áreas de risco de inundação em Eskisehir, Turquia. No Marrocos, El Idrysy e De Smedt (2003) projetaram um modelo hidrogeológico para o aquífero de Triffa, avaliando impactos climáticos futuros. Além disso, Schuster (2002) empregou modelos matemáticos para regularizar a exploração de águas subterrâneas através de critérios de outorga na região Oeste da Bahia.

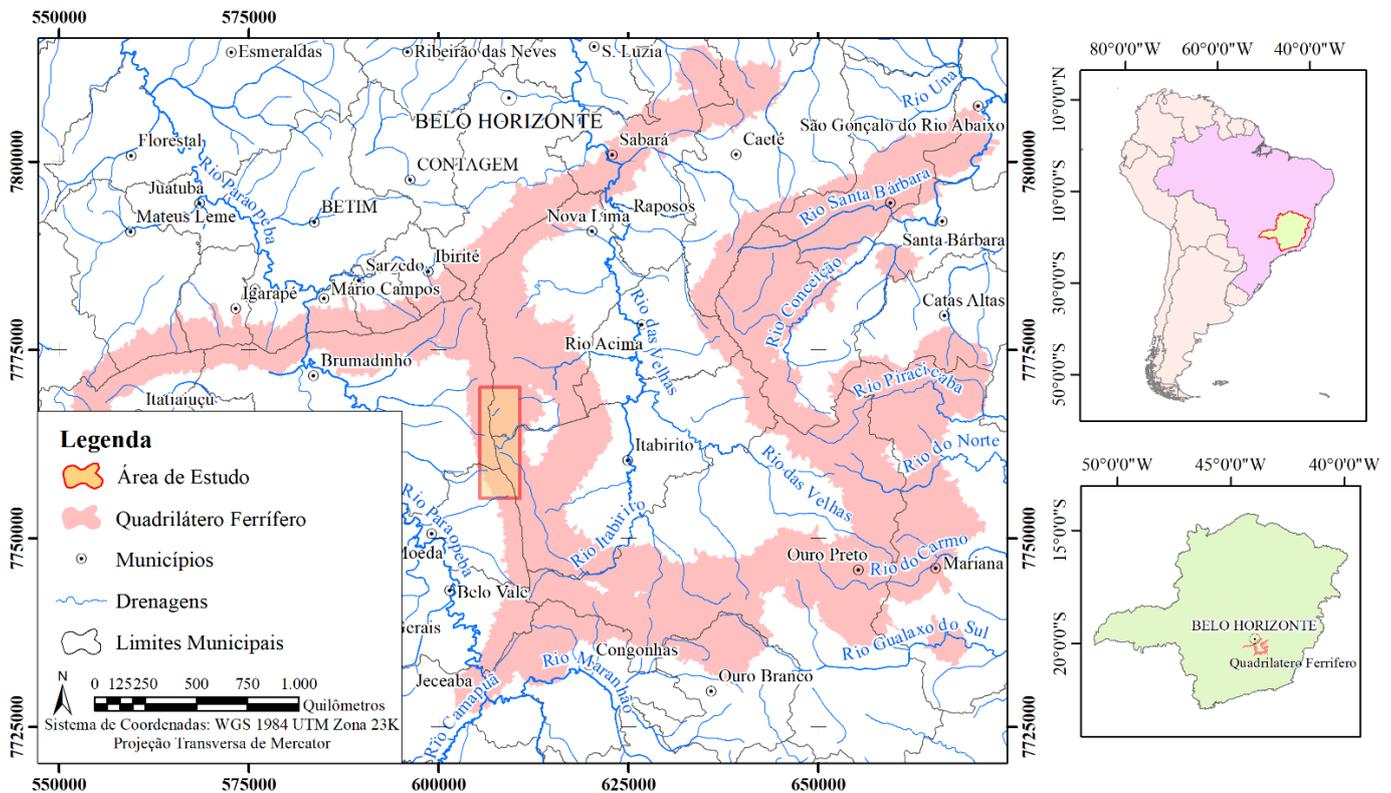
2.2 CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO

2.2.1 Localização e acesso

A área de estudo possui aproximadamente 78 Km² e está localizada na Serra da Moeda, região central do estado de Minas Gerais, coincidindo com a divisa entre os municípios de Nova Lima e Itabirito a leste da serra e os municípios de Brumadinho e Moeda a oeste (Figura 15).

O principal acesso para a área de pesquisa, considerando Belo Horizonte como o ponto de partida, é a rodovia BR - 040, que liga o Estado do Rio de Janeiro ao Distrito Federal.

Figura 15 - Mapa de localização da área de estudos.



Fonte: Elaborado por Celina Magalhães.

2.2.2 Aspectos Fisiográficos

A conformação atual do relevo do Quadrilátero Ferrífero (QF) foi principalmente moldada pela erosão diferencial e pelas características lito-estruturais da região, conforme descrito por Dorr (1969). As áreas compostas por rochas quartzíticas e itabiríticas, devido à sua maior resistência, formam as cristas elevadas do relevo. Já os filitos e xistos, encontrados em relevo intermediário, preenchem frequentemente as estruturas sinclinais e anticlinais da área. Gnaisses, por sua vez, mais susceptíveis ao intemperismo e erosão, são encontrados predominantemente nas áreas mais baixas do relevo.

A Serra da Moeda está inserida no setor oeste do Quadrilátero Ferrífero, no interior de uma megaestrutura denominada Sinclinal Moeda. Abrangendo aproximadamente 470 km² o Sinclinal Moeda, engloba as Serras da Moeda e do

Itabirito, compreendendo os municípios de Brumadinho, Nova Lima, Rio Acima, Itabirito, Moeda, Belo Vale, Congonhas e Ouro Preto. A área é caracterizada pela presença de duas importantes bacias hidrográficas: a bacia do Rio Paraopeba, a oeste, e a bacia do Rio das Velhas, dominando as regiões centrais e orientais. Especificamente na região da área de estudo deste trabalho, a Serra da Moeda atua como um divisor de fluxo hidrológico, delineando o limite destas duas bacias.

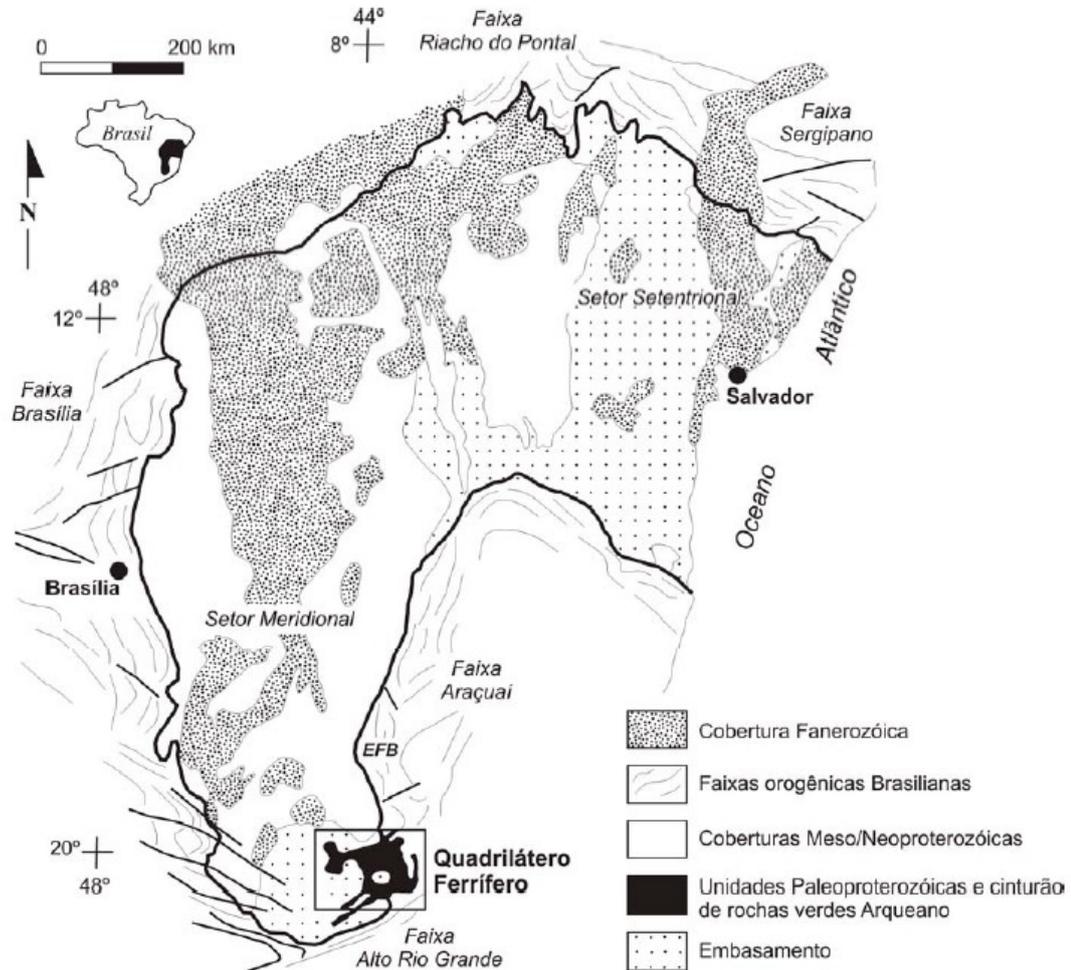
A região é caracterizada por marcantes variações sazonais em suas vazões fluviais, reflexo direto do clima local. Este clima é definido por duas estações bem definidas: uma estação seca, que vai de abril a setembro, e uma estação úmida, de outubro a março, período em que ocorre a maior concentração de precipitações anuais. O clima é tipicamente tropical chuvoso com invernos secos. Esta distribuição climática define a região como de clima subtropical úmido do tipo Cwb, de acordo com a classificação de Köppen-Geiger (1928), atualizada por Álvares *et al.* (2014).

2.2.3 Geologia Regional

A Serra da Moeda está inserida no interior de uma megaestrutura geológica denominada Sinclinal Moeda, que nucleou-se precocemente dentro da evolução do Quadrilátero Ferrífero (Dorr, 1969). Chemale *et al.* (1991), descrevem o Sinclinal Moeda como produto do colapso das sequências crustais em resposta ao soergimento do embasamento granito-gnáissico.

O Quadrilátero Ferrífero, situado na porção centro-sudeste do Estado de Minas Gerais, ocupa uma área de aproximadamente 7000 Km² e encontra-se no segmento meridional do Cráton do São Francisco (Figura 16), que por sua vez, constitui uma entidade geotectônica neoproterozóica composta por rochas arqueanas e paleoproterozóicas (Alkmim e Marshak, 1998).

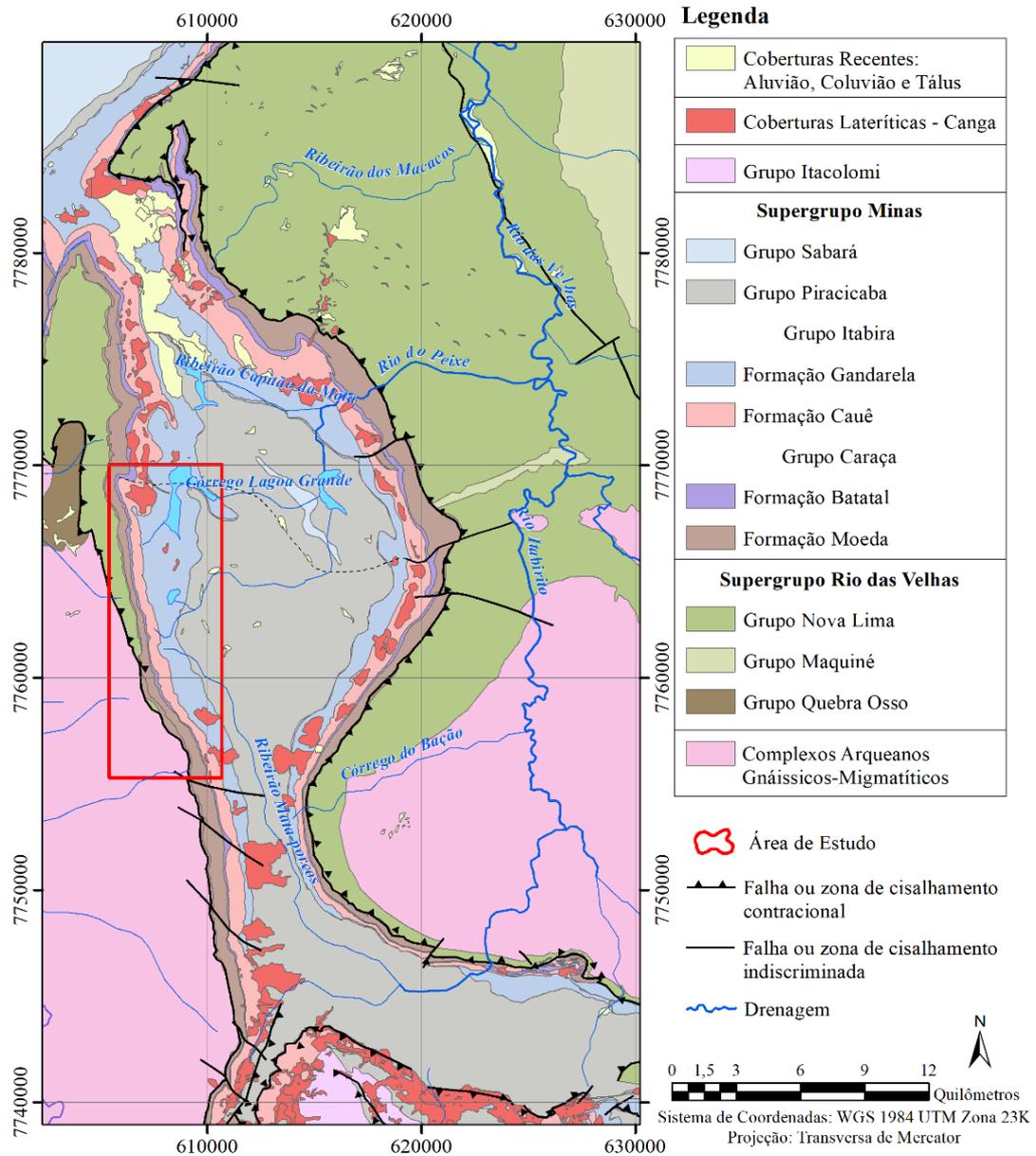
Figura 16 - Mapa regional do Cráton do São Francisco com destaque para o Quadrilátero Ferrífero.



Fonte: Alkmim e Marshak, 1998.

O contexto geológico do Quadrilátero Ferrífero é caracterizado por quatro grandes associações de litotipos: o embasamento, representado por Complexos Ortognáissicos e o Supergrupo Rio das Velhas, de idade Arqueana e o Supergrupo Minas e o Grupo Itacolomi, do Paleoproterozóico (Figura 17). Recobrimo as rochas metamórficas pré-cambrianas, ocorrem os depósitos sedimentares terciários, terciário-quaternários, lateritas e cangas, de idade Fanerozóica (Silva, 1992).

Figura 17 - Mapa geológico da região, com destaque para a área de estudo.



Fonte: Elaborado por Celina Magalhães - baseado em CPRM (2003) e Lobato *et al.* (2005)

Complexos Ortognáissicos

Os complexos ortognáissicos correspondem ao embasamento cristalino e representam as rochas mais antigas da região (Ca. 2800 Ma). Estas rochas distribuem-se ao redor e na parte central do Quadrilátero Ferrífero, e, geralmente, apresentam estrutura dômica. Suas principais ocorrências são os complexos do Bação, Belo Horizonte, Caeté, Bonfim e Florestal (Renger *et al.*, 1994). Abrangem terrenos granito-gnáissicos compostos por tonalitos migmatizados a gnaisses

granodioríticos com características geoquímicas de suítes tonalíticas-trondjemíticas-granodioríticas arqueanas (Machado e Carneiro, 1992). Corpos granitóides, assim como rochas básicas e metabásicas provenientes de diferentes etapas de acreção mantélica ou retrabalhamento crustal, ocorrem intrudindo esses complexos. Os plútons são de natureza cálcio-alcálica ou correspondem a granitos anorogênicos de acordo com a classificação de Noce em 1995.

Supergrupo Rio das Velhas

O Supergrupo Rio das Velhas é constituído por uma sequência de rochas metavulcano-sedimentares, que em conjunto com os plútons contemporâneos, caracterizam a unidade como um terreno granito-greenstone arqueano clássico, segundo a caracterização de Alkim e Marshak em 1998. Estratigraficamente, o supergrupo é estruturado da base para o topo, pelos grupos Quebra Osso (Schorschen, 1978), Nova Lima e Maquiné (Dorr, 1969). Na área de estudo, o Supergrupo Rio das Velhas é representado pelas rochas do Grupo Nova Lima, que consiste em filitos, filitos grafitosos, clorita xistos, sericita xistos, metagrauvacas, rochas máficas e ultramáficas, formações ferríferas do tipo algoma, metacherts e dolomitos.

O Grupo Nova Lima é encontrado aflorando junto à base da Serra da Moeda, em contato com o Complexo Ortognáissico do Bonfim a oeste, e com a Formação Moeda do Supergrupo Minas a leste. Esta unidade diminui em espessura direcionando-se ao Sul da área, e em algumas regiões, o Complexo do Bonfim está em contato diretamente com o Supergrupo Minas, o que evidencia a ausência do Grupo Nova Lima nesta área (Dorr, 1969).

Supergrupo Minas

O Supergrupo Minas, consiste em uma sequência de rochas metassedimentares de origem química e clástica, com idade neoarqueana e paleoproterozóica (Babinski *et al.*, 1995). Na área de estudo, as rochas do Supergrupo Minas estão contidas no Sinclinal Moeda, compondo a Serra da Moeda e a maior parte do plateau no interior do sinclinal.

A organização estratigráfica do Supergrupo Minas é composta por três grupos: Caraça, Itabira e Piracicaba (Dorr, 1969). A sua base é representada pelo Grupo Caraça, que é subdividido nas Formações Moeda e Batatal. A Formação Moeda constitui a base do Grupo, sendo composta essencialmente por meta-arenitos e metapelitos (Dorr, 1969). De acordo com Wallace, 1958, esta unidade pode ser dividida em três membros: Membro Inferior, composto de quartzito sericítico com lentes de conglomerado; Membro Intermediário, constituído de filito arenoso e Membro Superior, formado por quartzito sericítico com lentes de filito arenoso.

A Formação Batatal constitui o topo do Grupo Caraça e marca uma mudança de deposição clástica para os processos de acumulação bioquímica. Esta Formação é caracterizada por uma predominância de filitos, com quantidades menores de metachert, formações ferríferas dolomíticas, filitos carbonosos e dolomitos. O contato com a Formação Moeda é, de forma geral abrupto, enquanto o contato com a Formação Cauê é gradacional e varia de um a dois metros de espessura (Dorr, 1969).

A unidade intermediária do Supergrupo Minas é representada pelo Grupo Itabira, que constitui as Formações Cauê e Gandarela. A Formação Cauê é constituída essencialmente por itabiritos (Dorr, 1969). Esta é uma unidade de relevância econômica para a região, por ser hospedeira dos corpos de minério de ferro, ao mesmo tempo em que constitui um importante sistema aquífero da região (Beato, 2006).

Processos de percolação de fluidos, decorrentes tanto de infiltração de água como da remobilização metamórfica, desempenharam um papel crucial nas formações ferríferas bandadas da Formação Cauê. Essa dinâmica foi responsável pela dissolução de sílica e carbonato, um processo que resultou na formação de dois tipos de hematitas: hematita compacta e de hematita friável. Essa transformação foi fundamental para a origem dos depósitos de minério de ferro da região, e concomitantemente, contribuiu para a formação do aquífero Cauê, conforme elucidado por Mourão (2007).

Dorr (1969) e Rosière & Chemale Jr. (2013), classificam três tipos composicionais para os itabiritos da Formação Cauê: quartzo itabiritos, que correspondem a jaspilitos metamórficos com alternância de níveis de quartzo e óxidos de ferro; itabiritos dolomíticos, constituídos principalmente de bandas de dolomita, quartzo e óxidos de ferro; e itabiritos anfíbolíticos, produtos da alteração do itabirito

dolomítico com anfibólitos de composição variada. A presença de material carbonático na parte basal da Formação Cauê é documentada por Raposo (1996).

A espessura da Formação Cauê varia consideravelmente, com estimativas que vão de 200 a 400 metros em áreas menos deformadas, podendo ultrapassar 1000 metros em zonas intensamente deformadas. Por sua vez, a Formação Gandarela, apresenta uma espessura média de 200 metros.

Constituindo o membro superior do Grupo Itabira, a Formação Gandarela é composta principalmente por dolomitos e calcários, enriquecidos em ferro e com estromatólitos preservados (Souza e Muller, 1984). Na área de estudo, a Formação Gandarela está posicionada no interior do Sinclinal, a leste da Serra da Moeda e apresenta poucos afloramentos, devido a sobreposição de material intemperizado.

A unidade superior do Supergrupo Minas é representada pelo Grupo Piracicaba, que ocorre na porção central do Sinclinal Moeda. Esta unidade abrange a Formação Cercadinho, composta principalmente de quartzito ferruginosos e filitos; a Formação Fecho do Funil, formada por filitos com lentes de mármore dolomítico; a Formação Taboões, composta por quartzitos e a Formação Barreiro, consistindo essencialmente de filitos carbonosos e manganesíferos (Dorr, 1969).

Grupo Itacolomi

O Grupo Itacolomi, de idade paleoproterozóica, é separado do Supergrupo Minas por uma inconformidade regional, representando uma unidade independente dentre as sequências supracrustais do Quadrilátero Ferrífero. Esta unidade, descrita por Dorr em 1969, é composta por uma sequência espessa de rochas, variando de 1000 a 2000 metros de espessura, e sua distribuição ocorre em uma área limitada nesta região, ocupando principalmente a zona central do Sinclinal Moeda. A litologia deste Grupo compreende quartzitos de granulação grossa com lentes de filito e metaconglomerados, sobrepondo às unidades superiores do Super Grupo Minas através de uma discordância angular (Dorr, 1969).

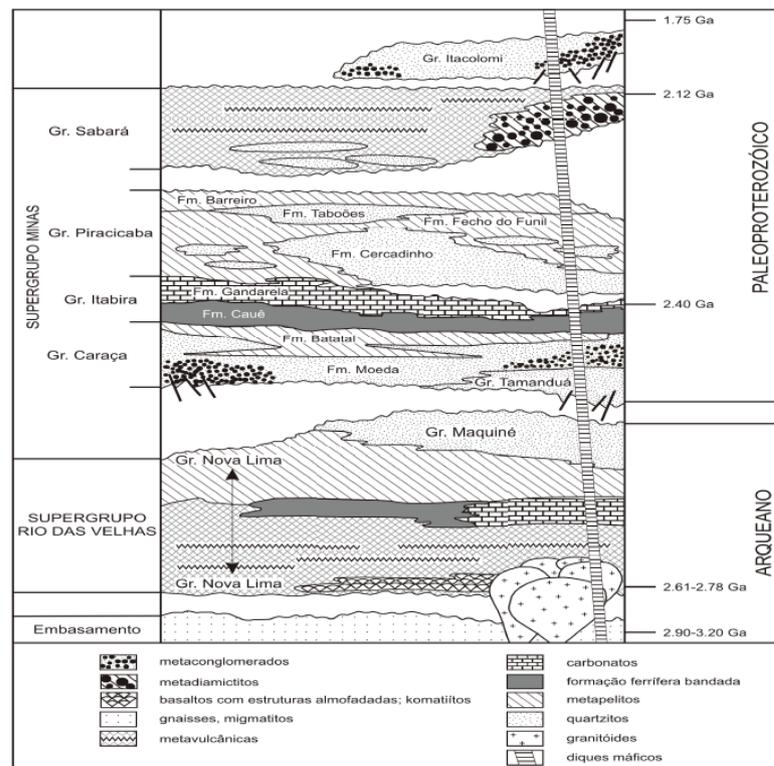
Diques máficos seccionam todas as unidades supracitadas e são resultantes de uma sequência de quatro importantes eventos: a abertura da bacia Espinhaço, os estágios iniciais do ciclo Panafricano/Brasiliano, estágios finais do ciclo Brasiliano e fragmentação do Supercontinente Gondwana (Silva, 1992).

Formações Terciárias e Quaternárias

As Formações de idades Terciárias e Quaternárias na área de estudo são compostas principalmente por sedimentos em distintos tipos de depósitos. Estes incluem coberturas detrito-lateríticas, depósitos elúvio-coluviais, depósitos lacustrinos, depósitos coluviais e de talus e depósitos aluviais (Dorr, 1969).

Destacam-se os depósitos elúvio-coluvionais, que estão associadas principalmente às Formações Cauê e Gandarela. Dorr (1969) descreve que a origem da canga está associada ao ferro dissolvido no processo de intemperismo e depositado pela evaporação da água subterrânea, durante as estações secas, que cimentou os detritos provenientes da desagregação das rochas da Formação Cauê. Constituídas principalmente de fragmentos de formação ferrífera, hematita compacta, e outros minerais, sendo estes componentes cimentados por óxido de ferro hidratado (Figura 18).

Figura 18 - Coluna estratigráfica do Quadrilátero Ferrífero.



Fonte: Alkmim e Marshak (1998).

2.2.4 Hidrogeologia

As unidades geológicas anteriormente mencionadas possuem propriedades físicas hidrodinâmicas diferentes, constituindo distintas unidades hidrogeológicas. Para a caracterização efetiva dessas unidades, realizou-se uma compilação das informações apresentadas principalmente por Mourão (2007) e Beato *et al.* (2006) juntamente com o relatório técnico disponibilizado pela empresa Water Service and Technologies. As unidades hidrogeológicas identificadas na área de estudo, dispostas sequencialmente de oeste para leste, incluem:

Embasamento Arqueano

O embasamento arqueano constitui uma unidade hidrogeológica formada principalmente por gnaisses graníticos do Complexo Metamórfico Bonfim e por xistos do Grupo Nova Lima. Estas rochas são predominantemente classificadas como pouco permeáveis, atuando como um aquífero ou aquíclodo.

No entanto, em determinadas áreas, estas formações rochosas podem originar aquíferos localizados e descontínuos, que estão associados a zonas fraturadas ou intemperizadas. Conforme Beato *et al.* (2001), o intemperismo nessas áreas pode atingir dezenas de metros, com espessuras que podem chegar a 120 metros.

Aquíferos Inconsolidados

Unidade hidrogeológica constituída por depósitos coluvionares que se sobrepõem ao embasamento arqueano. Ocorrem principalmente junto à base ocidental da Serra da Moeda e foram classificadas por Mourão (2007) como aquíferos inconsolidados. Caracterizam-se como aquíferos livres e descontínuos, apresentando heterogeneidade e porosidade granular primária.

Esses depósitos dão origem a zonas aquíferas localizadas, geralmente sobre rochas impermeáveis e em áreas de depressões topográficas. Portanto, embora presentes, esses depósitos não constituem grandes reservatórios subterrâneos de água.

Aquíferos Quartzíticos e Aquitardes Filitos da Formação Moeda

Os aquíferos quartzíticos são constituídos pelas unidades quartzíticas da Formação Moeda, estando intercalados com pacotes de filitos pertencentes à mesma Formação geológica. Os aquíferos desta formação são classificados como predominantemente livres e heterogêneos. Conforme as observações de campo documentadas por Schlumberger em 2017, o fluxo de água subterrânea nos quartzitos ocorre principalmente por meio de porosidade secundária. A capacidade de armazenamento de água nesses aquíferos é relativamente limitada, uma vez que as variações faciológicas influenciam de maneira significativa as suas propriedades hidrodinâmicas.

Por outro lado, as unidades aquitardes compostas por filitos - rochas caracterizadas pela sua baixa permeabilidade - atuam como barreira de fluxo, compartimentando os dois aquíferos quartzíticos da Formação Moeda (Mourão, 2007).

Aquitarde/aquiclude da Formação Batatal

Trata-se de uma unidade hidrogeológica constituída por filitos da Formação Batatal e que foi identificada por Mourão (2007) como a principal unidade confinante da região. Segundo informações coletadas pela mesma autora, essa unidade é classificada como aquitarde ou aquiclude em função das grandes diferenças nos níveis piezométricos observados nessa unidade em comparação à Formação Cauê. Desta forma, a Formação Batatal atua como uma barreira ao fluxo de água subterrânea entre o aquífero da Formação Cauê e os aquíferos quartzíticos da Formação Moeda.

Aquífero da Formação Cauê

O aquífero Cauê é reconhecido como o principal aquífero do Quadrilátero Ferrífero, o que é evidenciado pela ocorrência de inúmeras nascentes com vazões elevadas, conforme documentado por Schlumberger (2017) e Mourão (2007). A diversidade litológica e a complexidade estrutural da Formação Cauê conferem a este aquífero características do tipo descontínuo, anisotrópico, heterogêneo, tanto

fraturado quanto poroso, condicionado pelo fraturamento e pela dissolução química do carbonato e do quartzo. É categorizado como aquífero livre a confinado, uma classificação derivada de sua conformação estratigráfica, que inclui padrões de dobramentos e falhamentos.

Composta principalmente por formações ferríferas bandadas, incluindo itabiritos e corpos de hematita compacta e friável, a Formação Cauê é recoberta por uma camada de material laterítico, canga e colúvio de canga (Beato *et al.*, 2006). A complexidade e heterogeneidade do aquífero Cauê são refletidas na variabilidade do grau e tipo de porosidade do meio. Os valores mais elevados de condutividade hidráulica estão associados aos corpos de hematita friável, enquanto as áreas com corpos de hematita compacta são conhecidas pelo seu alto potencial de armazenamento de água (Mourão, 2007).

Diques básicos cortam essa Formação, compartimentando o aquífero e causando variações significativas nos níveis piezométricos, mesmo entre pontos de observação geograficamente próximos (Beato *et al.*, 2006). Além disso, o processo de lixiviação de minerais contribuiu para elevar a porosidade do meio, ao mesmo tempo que promoveu o enriquecimento em óxidos e hidróxidos de ferro. Este processo foi fortemente controlado pela composição das bandas resultando na criação de zonas preferenciais de fluxo ao longo do acamamento, como destacado por Dorr (1969) e Rosière & Chemale Jr. (2013).

Conforme relatado por Schlumberger (2017), o fluxo de água subterrânea na Formação Cauê ocorre preferencialmente ao longo do acamamento, resultando em um comportamento hidráulico anisotrópico. Na área de estudo, esse acamamento apresenta um mergulho aproximado de 60°, predominantemente para leste. Essa orientação indica que a condutividade hidráulica é mais elevada na direção norte-sul, do que na leste-oeste, facilitando o fluxo de água ao longo do eixo norte-sul.

Aquífero/Aquitarde da Formação Gandarela

A Formação Gandarela, sobrepõe o aquífero Cauê e por se tratar de uma unidade bastante heterogênea, pode se comportar tanto como um aquífero quanto como um aquitarde. Nas áreas de ocorrência dos dolomitos, a unidade pode se comportar como um aquífero em decorrência da presença de fraturas e feições cársticas, como cavidades, constituindo um aquífero cárstico-fissural. Caracteriza-se

por ser predominantemente um aquífero livre, mas podendo se apresentar localmente como confinando.

Entretanto, a camada superficial intemperizada da Formação Gandarela é predominantemente argilosa, constituindo um aquitarde sobrejacente ao dolomito. De acordo com Mourão (2007), esta camada argilosa pode atuar como uma camada confinante do aquífero cárstico-fissural subjacente. Além disso, nas proximidades do contato com a Formação Cauê, são identificadas intercalações com os itabiritos e metacherts, as quais constituem lentes de aquíferos que estão potencialmente conectados ao aquífero Cauê.

Formação Cercadinho e Formação Fecho do Funil

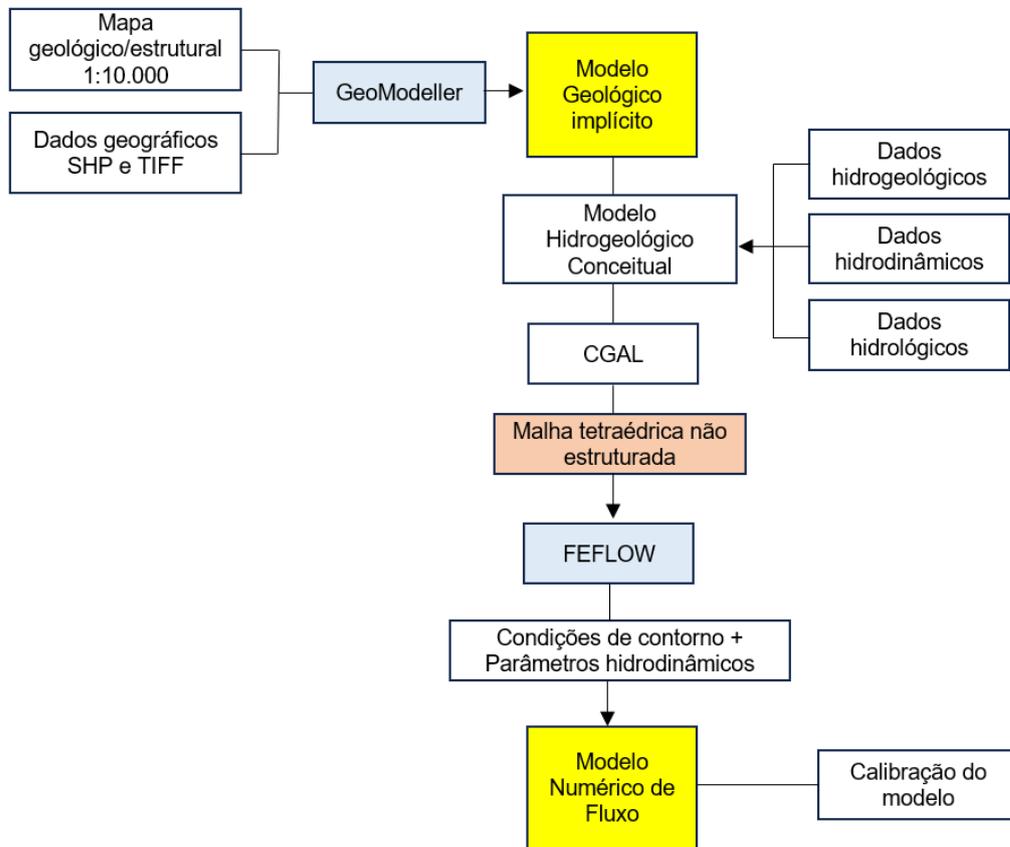
Trata-se das unidades predominantes na parte central do Sinclinal Moeda. A litologia nestas duas unidades é predominantemente quartzito com alternância de filitos e ocorrência eventual de dolomitos, conforme relatado por Mourão (2007). Podem se comportar tanto como aquíferos quanto como aquitardes, em decorrência das litologias intercaladas presentes nestas Formações.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

A abordagem metodológica adotada neste estudo iniciou com uma fase de revisão bibliográfica, que foi posteriormente complementada pela análise de dados fornecidos pela empresa Water Services and Technologies. Após esta fase preliminar, os dados foram utilizados para desenvolver um modelo geológico implícito, que por sua vez, serviu de base para a elaboração de um modelo hidrogeológico numérico.

Para a visualização desse processo metodológico, as etapas seguidas foram detalhadamente esquematizadas no fluxograma apresentado na Figura 19.

Figura 19 - Fluxograma do estudo, indicando as etapas metodológicas adotadas.



Fonte: Elaborado pela autora.

3.1 OBTENÇÃO E ANÁLISE DE DADOS GEOGRÁFICOS

Esta fase do estudo envolveu o levantamento de dados geográficos por meio de mapas geológicos e hidrogeológicos, mapas topográficos e hidrográficos, além de arquivos vetoriais, incluindo vias de acesso e limites municipais da área de estudo e arquivos matriciais, que abrangem o Modelo Digital de Elevação (MDE) e aerofotografias.

Os dados foram adquiridos por meio dos websites de instituições incluindo o Serviço Geológico do Brasil (CPRM), o Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE), United States Geological Survey (USGS) e Alaska Satellite Facility. Para o processamento e análise desses dados geográficos, utilizou-se um Sistema de Informações Geográficas (SIG), empregando o programa QGIS na sua versão 3.34,

uma ferramenta de código aberto e amplamente utilizada na área de geoprocessamento.

3.2 BASE DE DADOS

A base de dados utilizada neste estudo, disponibilizada pela empresa Water Service and Technology, constituiu os seguintes elementos:

- Mapa geológico-estrutural de detalhe, escala 1:10.000, produto do mapeamento realizado pela empresa GeoLogos – Geologia e Mineração Ltda, disponível em formato vetorial e matricial. A metodologia implementada para o mapeamento de campo foi baseada nos procedimentos aplicados pelo Serviço Geológico Britânico (NAPIER, B. 2011), especialmente com relação à aquisição e apresentação dos dados;
- Medidas estruturais de campo (totalizando 482) e seções geológicas verticais, disponíveis em formato vetorial;
- Descrição das unidades hidrogeológicas da área de pesquisa;
- Valores dos parâmetros hidrodinâmicos;
- Valores de taxas de recarga associados a cada uma das unidades hidrogeológicas da área de estudo;
- Modelo conceitual previamente elaborado.

Um dos resultados do mapeamento geológico-estrutural realizado pela empresa GeoLogos foi a identificação de três subunidades da Formação Cauê. Esta classificação foi baseada nas propriedades mineralógicas, hidroquímicas e físicas da formação. As subunidades estão descritas do topo para a base como segue:

- Formação Cauê C: constituída de itabiritos silicosos com lentes de hematita compacta e intercalados com camadas de hematita friável, apresentando contato transicional com a Formação Gandarela.
- Formação Cauê B: composta predominantemente de itabiritos anfíbolíticos com lâminas de hematita friável e hematita compacta.
- Formação Cauê A: distinta por conter itabiritos silicosos com intercalação de itabiritos anfíbolíticos. Sua classificação ocorreu devido

à observação de patamares planos no contato com a Formação Batatal, além de dados de subsuperfície.

3.3 MODELAGEM GEOLÓGICA IMPLÍCITA

O modelo geológico tridimensional foi desenvolvido de forma implícita, empregando o método do campo potencial de interpolação por meio do *software* GeoModeller®. A construção do modelo pode ser sistematicamente dividida em cinco etapas principais: 1) Seleção dos dados de entrada (conforme detalhado na Tabela 1) ; 2) Definição do domínio; 3) Construção da pilha estratigráfica; 4) Digitalização dos dados geológicos e estruturais; 5) Cálculo do modelo e verificação dos resultados.

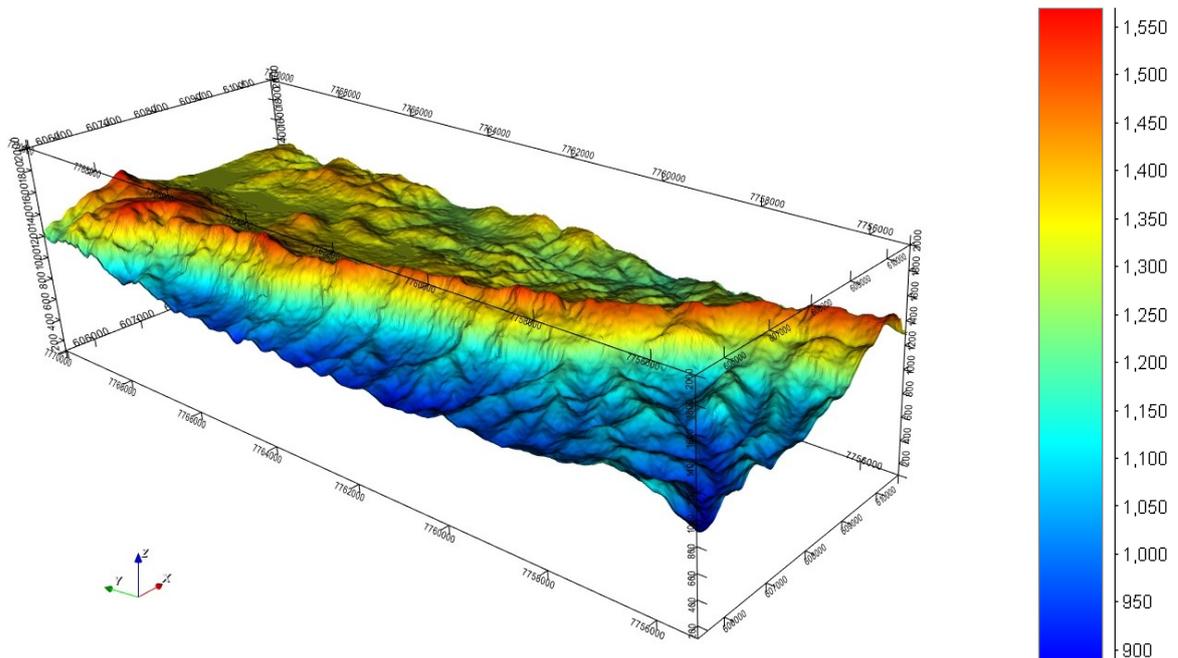
Tabela 1 - Dados de entrada utilizados na construção do modelo geológico tridimensional.

Dados	Descrição	Fonte
Dados geológicos e estruturais	Mapa geológico-estrutural, escala 1:10.000. Datum WSG 84 – UTM 23K	Relatório Schlumberger
Dados geológicos	Mapa geológico do Quadrilátero Ferrífero, escala 1:240.000. Datum WGS84	Alkmim e Marshak (1998)
Seções geológicas verticais	Seções geológicas distribuídas ao longo da área	Relatório Schlumberger
Modelo Digital de Elevação (MDE)	Resolução espacial 12,5 x 12,5 metros	ALOS PALSAR – JAXA (Serviço aeroespacial japonês)

Fonte: Elaborado pela autora.

O domínio do modelo foi definido com base no banco de dados disponível e apresenta dimensões de 5,27 Km x 14,75 Km e aproximadamente 1.600 metros de espessura. Após a definição das dimensões, foi adicionada a topografia da área, por meio do Modelo Digital de Elevação (MDE) derivado do satélite ALOS PALSAR, com resolução espacial 12,5 x12,5 metros (Figura 20).

Figura 20 - Representação do domínio do modelo com o arquivo raster Modelo Digital de Elevação (MDE), indicando as diferenças de altitude (em metros) na área de estudo.



Fonte: Elaborado pela autora.

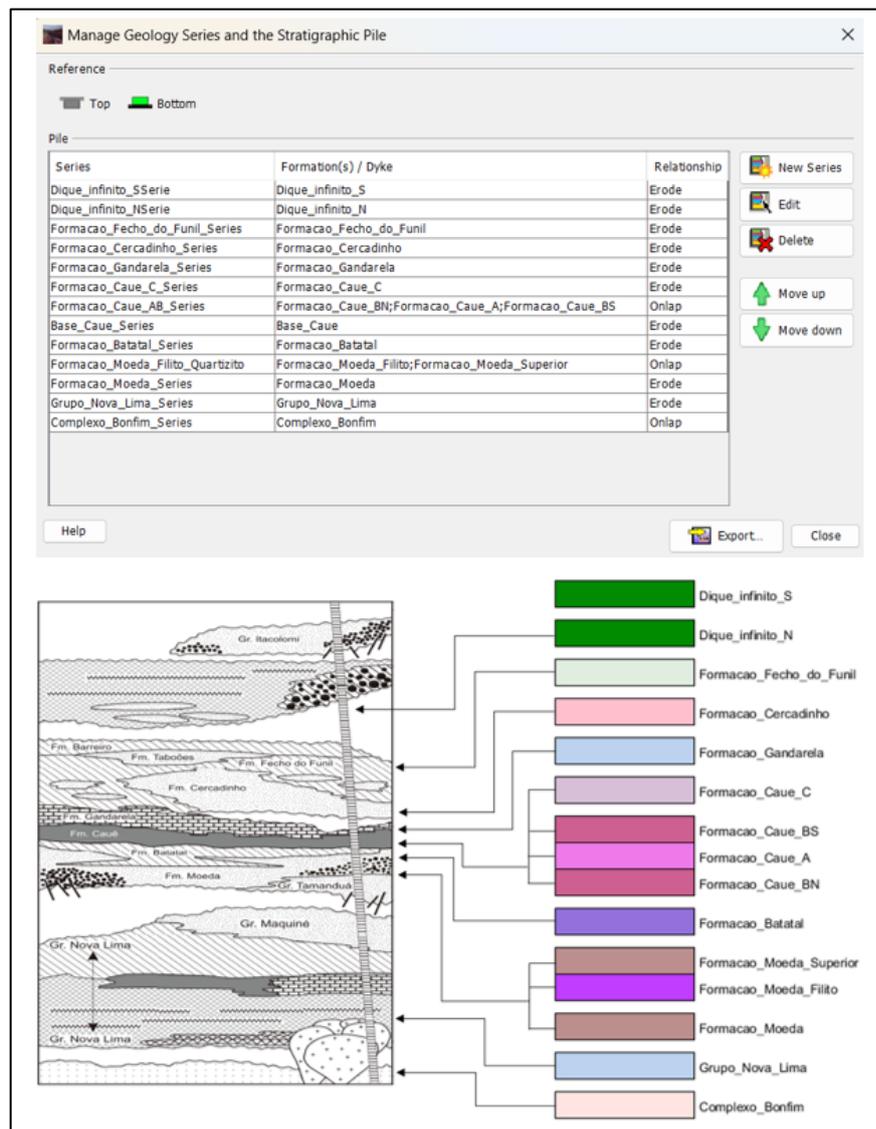
A construção da pilha estratigráfica é uma das etapas mais importantes para se obter um modelo geológico robusto e consistente. Ela define a sequência das relações topológicas e permite uma gestão automática dessas relações, resultando na criação de diferentes “séries”, conforme destacado por Thornton *et al.*, 2018. Dentro de uma mesma série, todas as formações obedecem às mesmas regras topológicas. O aspecto mais importante da pilha estratigráfica é que ela segue uma regra de influência de cima para baixo, ou seja, uma série aplica sua relação topológica à todas as outras séries (e suas respectivas formações) situadas abaixo (Calcagno *et al.*, 2022).

A elaboração da pilha estratigráfica deste projeto resultou em 12 litologias distintas, organizadas em 12 séries, as quais foram estabelecidas de acordo com as relações de contato entre as formações geológicas. Cada uma das litologias foi representada por uma cor específica, incluindo (Figura 21):

1. Complexo Bonfim (embasamento);
2. Grupo Nova Lima;
3. Formação Moeda;

4. Formação Moeda Filito;
5. Formação Batatal;
6. Formação Cauê A;
7. Formação Cauê B (subdividida em Base Norte e Base Sul);
8. Formação Cauê C;
9. Formação Gandarela;
10. Formação Cercadinho;
11. Formação Fecho do Funil;
12. Diques.

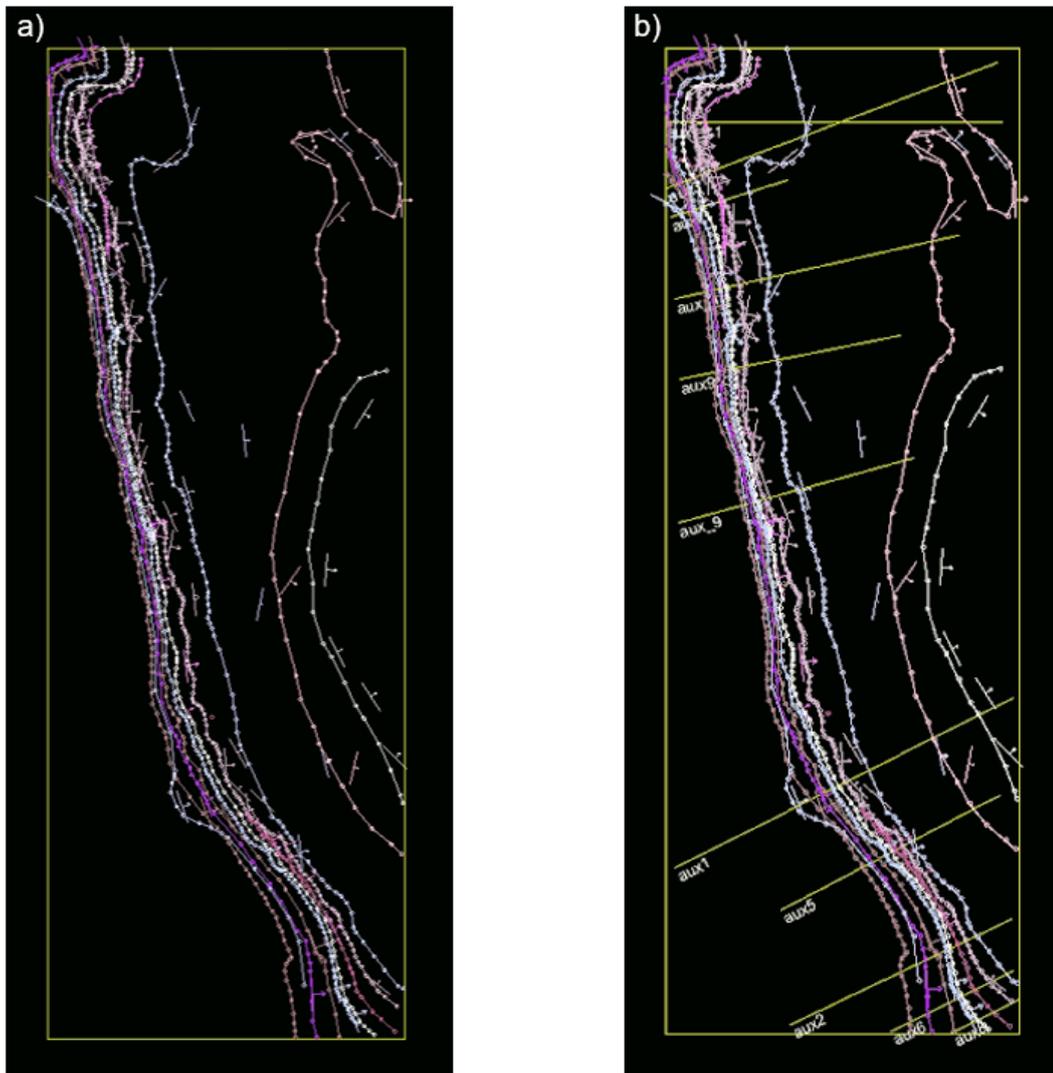
Figura 21 - Pilha estratigráfica definida para o desenvolvimento do modelo geológico implícito. Foi selecionada a opção “Bottom” para determinar os volumes internos e externos das unidades litológicas. A opção “erode” indica uma relação transversal entre as camadas geológicas, enquanto “onlap” indica uma relação paralela.



Fonte: Elaborado pela autora.

A etapa subsequente consistiu no georreferenciamento dos mapas geológicos, essenciais para a delimitação dos contatos litológicos e a representação das falhas. Os dados estruturais, que incluem informações sobre a orientação e o mergulho das camadas, foram importados em formato de arquivo CSV (*Comma Separated Values*) e as seções verticais foram utilizadas para o refinamento dos contatos e relações entre as camadas (Figura 22).

Figura 22 - Visualização da seção de superfície: a) Representação dos dados de entrada extraídos dos mapas geológicos: as linhas ilustram os contatos geológicos das formações. Os círculos destacam os pontos de dados dos contatos geológicos, enquanto as setas indicam os dados de orientação das camadas. b) Representação por meio de linhas amarelas das seções geológicas verticais georreferenciadas.

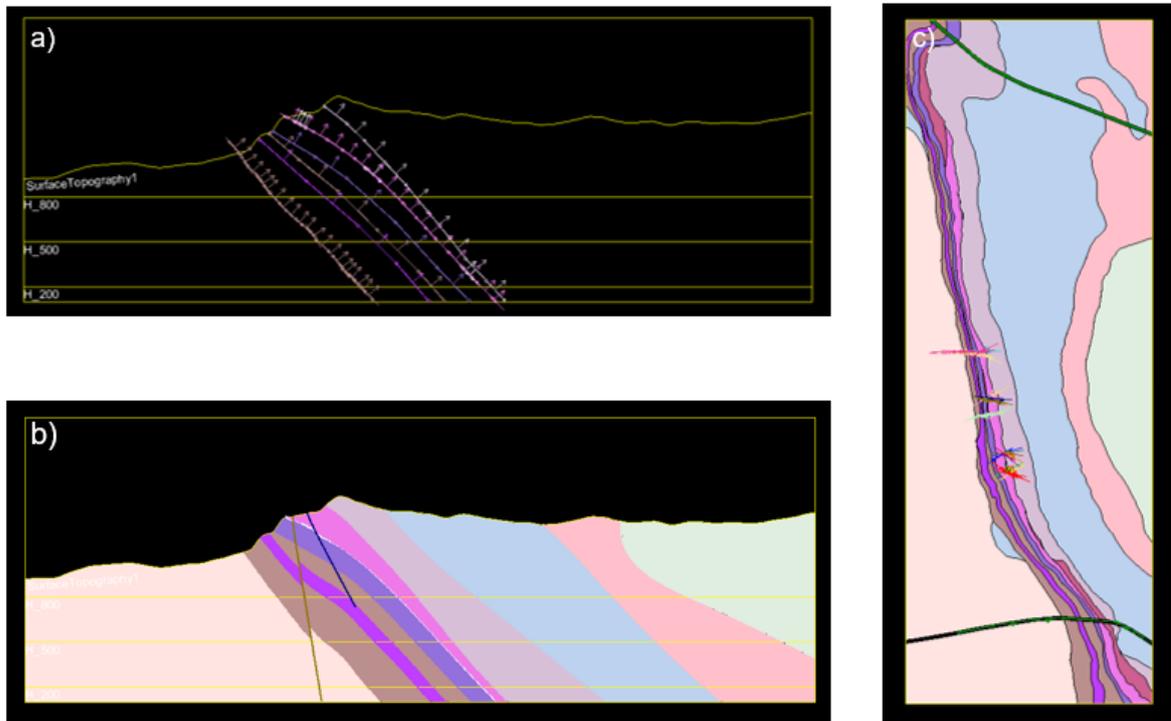


Fonte: Elaborado pela autora.

Para aprimorar o modelo geológico, especialmente em áreas onde os dados existentes eram limitados ou insuficientes, foram elaboradas 45 seções geológicas verticais e 4 seções horizontais. Essas seções foram essenciais em locais onde a interpolação das superfícies geológicas não correspondia adequadamente ao contexto geológico real da área. Para cada seção, procedeu-se à discretização, adicionando contatos litológicos e dados de mergulho ortogonais a direção do contato (Figura 23).

O processo de geração dessas seções geológicas verticais e subsequente cálculo das superfícies equipotenciais, que em profundidade geram o modelo completo em três dimensões, requer uma definição coerente tanto da espessura de cada unidade estratigráfica, quanto dos dados de direção/mergulho e de todas as falhas. Se não houver coerência, o modelo de superfícies equipotenciais não poderá ser calculado corretamente (Calcagno *et al.*, 2006).

Figura 23 - Representação de uma seção vertical e da seção de superfície: a) Interface da seção vertical incluindo os contatos geológicos e dados de mergulho adicionados posteriormente. b) Unidades da seção vertical “a” após serem modeladas, destacando a representação de duas falhas geológicas. c) Visualização da seção de superfície modelada, incluindo as falhas e diques mapeados.

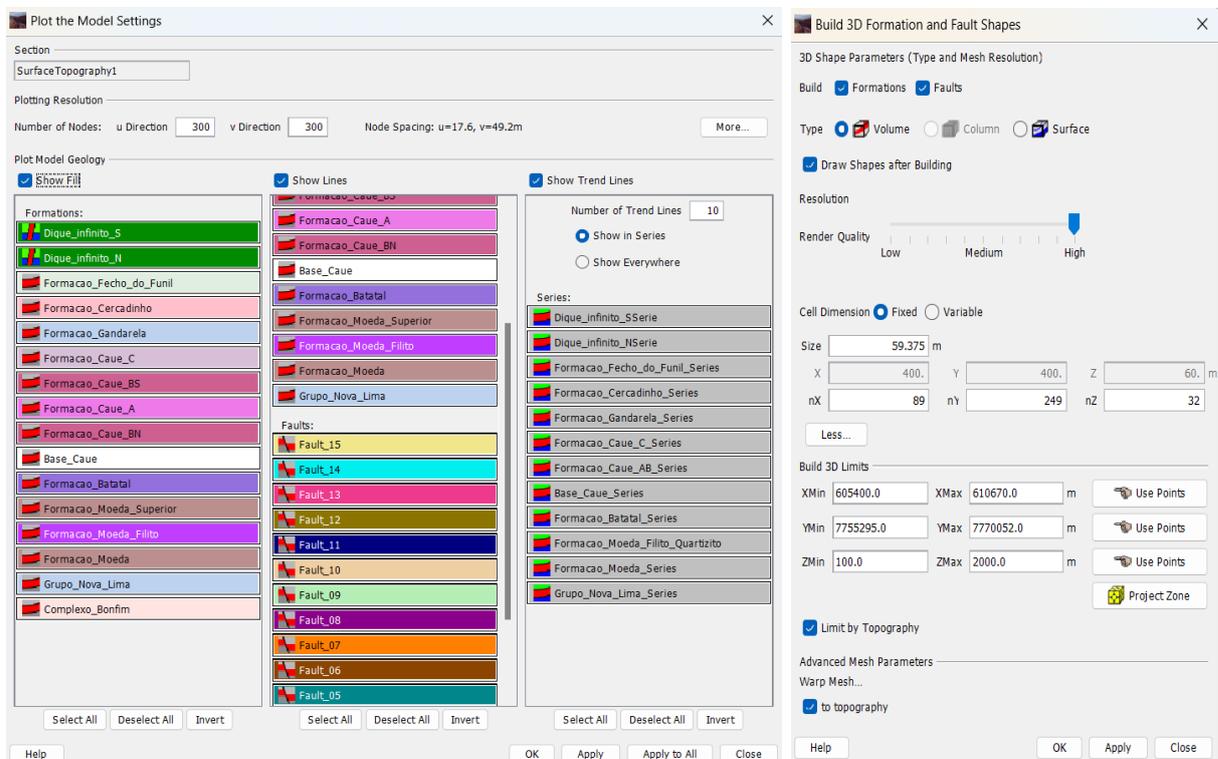


Fonte: Elaborado pela autora.

Após a discretização das seções, a etapa subsequente consistiu em executar o modelo e realizar a verificação dos resultados. Esta verificação foi realizada por meio de uma comparação visual entre os contatos das formações litológicas, definidas pelos dados de entrada, e os contatos geológicos modelados. Durante a fase de cálculo iterativo e reavaliação, os parâmetros ajustáveis foram modificados sistematicamente, com o objetivo de refinar o modelo para que ele refletisse com a maior precisão possível as informações geológicas disponíveis.

Na elaboração do modelo tridimensional, elementos como o número de nós na resolução de plotagem e o tamanho das células são parâmetros fundamentais (Figura 24). Estes elementos têm uma influência significativa na renderização e na qualidade visual do modelo, influenciando diretamente a qualidade da malha numérica. Entretanto, é importante ressaltar que incrementos nesses parâmetros elevam a demanda computacional e prolongam de forma significativa o tempo necessário para processar e executar o modelo.

Figura 24 - Visualização da interface gráfica do GeoModeller®, exibindo os parâmetros utilizados para a construção do modelo tridimensional.



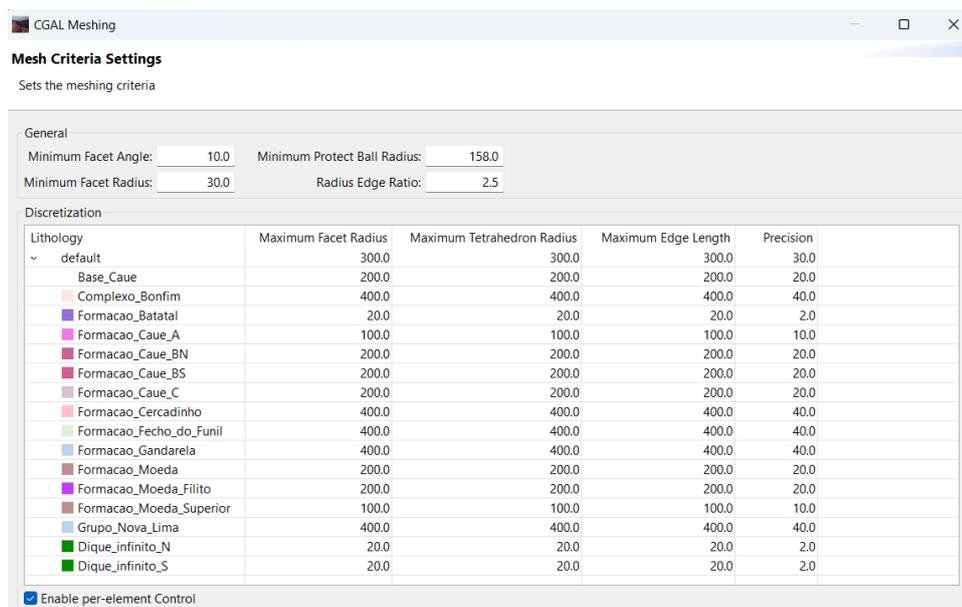
Fonte: Elaborado pela autora.

Após completar o modelo geológico 3D, utilizou-se o algoritmo computacional CGAL (Computational Geometry Algorithms Library), integrado ao GeoModeller®, para gerar a malha de elementos finitos totalmente não estruturada. Devido à flexibilidade deste tipo de malha, foi possível representar com maior precisão a geologia complexa da área de estudo, caracterizada por camadas geológicas inclinadas e a presença de falhas e dobramentos.

O tipo de arquivo de saída selecionado foi o .GMOD, facilitando a exportação direta para o programa FEFLOW®. A Figura 25 apresenta as configurações detalhadas da discretização da malha, com parâmetros ajustados para corresponder às características específicas de cada formação geológica. O ajuste correto destes parâmetros é fundamental, pois eles determinam tanto a qualidade dos tetraedros quanto o tempo necessário para a geração da malha, onde uma qualidade superior implica maior tempo de processamento.

Para a Formação Batatal e os diques, que atuam como barreiras ao fluxo, implementou-se um refinamento mais detalhado da malha. Em contrapartida, em áreas de menor importância, optou-se por tetraedros maiores, maximizando a eficiência computacional e minimizando o tempo de execução da malha.

Figura 25 - Especificações das configurações de discretização da malha utilizando o algoritmo CGAL. Foi possível ajustar a dimensão dos tetraedros, permitindo maior detalhamento em áreas de interesse.



Fonte: Elaborado pela autora.

3.4 MODELO HIDROGEOLÓGICO CONCEITUAL

A elaboração de um modelo conceitual deve ser o ponto de partida na construção de qualquer modelo hidrogeológico, ele representa uma simplificação esquemática da realidade, integrando dados espaciais para auxiliar a interpretação da dinâmica dos aquíferos. Para este estudo, adotou-se o modelo hidrogeológico conceitual desenvolvido pela empresa Water Service and Technology, que será brevemente descrito a seguir.

As unidades geológicas da região estudada possuem propriedades hidrodinâmicas distintas, configurando diferentes unidades hidrogeológicas. A Tabela 2 apresenta um resumo dessas unidades, destacando os tipos de litologias, as classificações quanto à capacidade de armazenamento de água e observações relevantes a este estudo.

Tabela 2 - Resumo das unidades hidrogeológicas da área de estudo.

Unidade Hidrogeológica	Litologia principal	Classificação	Observações
Embasamento	Gnaisse, granito e xisto	Aquicluda/Aquitarda	Apresenta fraturamento e zonas intemperizadas.
Formação Moeda - Quartzito	Quartzito	Aquífero	Compõem dois aquíferos distintos, separados pelo Filito Moeda. Predominantemente fissural, livre e heterogêneo. Presença de nascentes com baixas vazões.
Formação Moeda - Filito	Filito	Aquitarda	Unidade confinante que separa os dois aquíferos do Quartzito Moeda.
Formação Batatal	Filito	Aquitarda	Considerada a principal unidade confinante da região. Presença de nascentes associadas às zonas de fraturamento.
Formação Cauê	Itabirito	Aquífero	Principal aquífero da área de estudo. Características: predominantemente livre, poroso (fraturado em profundidade), heterogêneo e anisotrópico. Ocorrência de inúmeras nascentes, especialmente no contato com a Formação Batatal.
Formação Gandarela	Dolomito	Aquífero	Aquífero tipo cárstico-fissural, com camada argilosa sobreposta. Apresenta elevada heterogeneidade, podendo se comportar localmente como aquitarda. Nascentes com baixas vazões.
Formação Cercadinho Formação Fecho do Funil	Filito / Dolomito	Aquitarda / Aquífero	Unidades predominantes na parte central do Sinclinal Moeda. Se comportam mais como aquitardas, devido a predominância dos filitos.

Fonte: Schlumberger, 2017.

Dentre essas unidades, destaca-se a Formação Cauê, que constitui o principal aquífero da região. É caracterizado pela sua heterogeneidade e alta anisotropia, associada às bandas intercaladas de itabirito com diferentes níveis de lixiviação, as quais estão interrelacionadas aos parâmetros hidrogeológicos do aquífero.

O Aquífero Cauê se configura, de forma geral, como um aquífero livre, delimitado pelos dolomitos da Formação Gandarela e pelos filitos da Formação Batatal. A descarga está relacionada principalmente aos fraturamentos e falhas, ao contato com a Formação Batatal e aos efeitos de processos erosivos. Segundo estudos de Mourão (2007), as nascentes associadas a essa formação frequentemente apresentam vazões elevadas, atingindo valores superiores a 100 m³/h.

A Formação Gandarela, devido às suas distintas litologias, também constitui um aquífero heterogêneo. Existe uma possível conexão de fluxo entre esta formação e o Aquífero Cauê, possivelmente devido às intercalações com rochas de alta condutividade hidráulica ou relacionada aos lineamentos geológicos. As zonas de recarga para esses dois principais aquíferos abrangem a extensão total de suas áreas de afloramento, sendo limitadas ao sul e ao norte pelos diques, que constituem barreiras físicas ao fluxo subterrâneo, gerando uma compartimentação dos sistemas aquíferos.

Os valores de condutividade hidráulica, armazenamento e descarga específica foram determinados por meio de ensaios de bombeamento. A Tabela 3 apresenta o intervalo de valores de condutividade hidráulica referentes às principais unidades hidrogeológicas da área de estudo, que serão utilizados como parâmetros de entrada no modelo numérico de fluxo.

Tabela 3 - Intervalos dos valores de condutividade hidráulica e respectivas litologias das principais unidades da área de estudo.

Unidade	Litologia principal	Intervalo de valores de Condutividade Hidráulica (m/s)
Formação Moeda	Quartzito	$5,8 \times 10^{-7}$ a $3,5 \times 10^{-6}$
Formação Batatal	Filito	$1,2 \times 10^{-13}$ a $1,2 \times 10^{-8}$
Formação Cauê A	Itabirito silicoso/anfibolítico	$3,0 \times 10^{-7}$ a $8,8 \times 10^{-4}$
Formação Cauê B	Itabirito anfibolítico	$3,0 \times 10^{-7}$ a $8,8 \times 10^{-4}$
Formação Cauê C	Itabirito silicoso	$3,0 \times 10^{-6}$ a $1,0 \times 10^{-4}$
Formação Gandarela	Dolomito	$5,0 \times 10^{-6}$ a $1,3 \times 10^{-4}$
Diques máficos	Diabásio	$3,1 \times 10^{-12}$ a $1,4 \times 10^{-10}$

Fonte: Schlumberger, 2017.

Diferentes métodos foram utilizados para calcular as taxas de recarga dos aquíferos da região, os quais incluem: Balanço hídrico e fração do escoamento de base, método de Rorabaugh, método Green-ampt, variação do nível d'água em piezômetros e método do balanço hídrico. Os resultados referentes às taxas de recarga dos dois principais aquíferos da área de estudo podem ser observados na Tabela 4. Quanto aos dados de precipitação, estes correspondem à precipitação média registrada entre os anos 2012/2013 e 2016/2017, obtidos pelos registros disponíveis das estações pluviométricas instaladas na área de estudo.

Tabela 4 - Valores de precipitação e taxas de recarga referentes aos dois principais aquíferos investigados.

Aquífero	Precipitação (mm/ano)	Recarga (%)
Cauê	1312	39
Gandarela	1312	21

Fonte: Schlumberger, 2017.

Os pontos de observação são uma parte fundamental do modelo numérico, já que servem para avaliar o ajuste do modelo durante o processo de calibração e validação. Neste estudo, foram utilizados os dados de nível d' água estático coletados dos seis piezômetros existentes da área, conforme detalhado na Tabela 5.

Tabela 5 - Dados referentes ao nível d' água dos piezômetros que foram utilizados na calibração do modelo.

Piezômetro	Nível d' água
PZ-03	1335.3
PZ-04	1320.3
PZ-06	1334.2
PZ-07	1327.1
P-08	1328.7
P-10	1327.3

Fonte: Schlumberger, 2017.

É importante ressaltar que o foco central da empresa WST foi desenvolver o modelo conceitual dos dois principais aquíferos da região, Cauê e Gandarela. Neste contexto, a Formação Batatal, que atua como uma barreira de fluxo de água, foi estabelecida como o limite ocidental da área de interesse. Paralelamente, os diques ao norte e ao sul, considerados também como barreiras de fluxo, e a Formação Cercadinho, classificada como um aquitarde, foram definidos como os limites norte, sul e leste do domínio. O limite inferior do modelo, por sua vez, é representado pelas rochas do embasamento cristalino.

3.5 MODELAGEM HIDROGEOLÓGICA NUMÉRICA

Para a construção do modelo matemático, é necessário traduzir o modelo conceitual da área para a linguagem do código escolhido. Assim, a discretização da

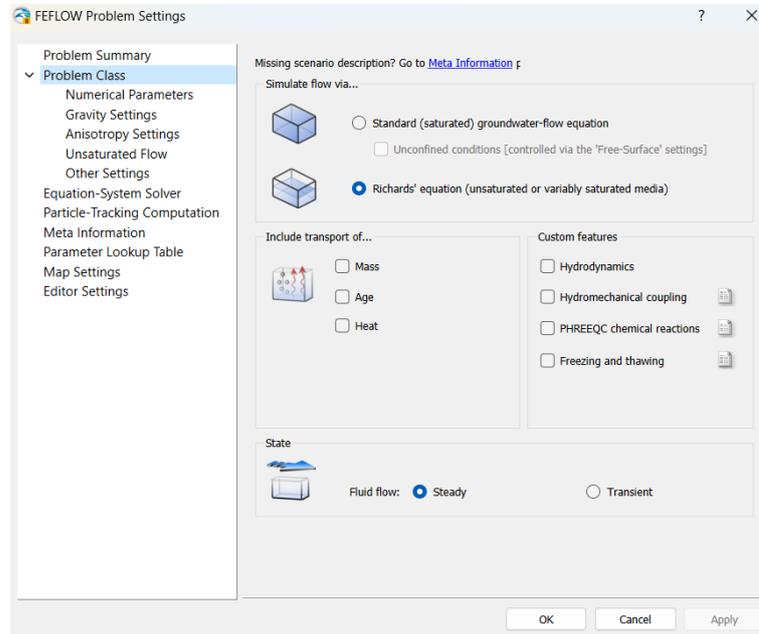
malha, a delimitação das condições de contorno e das condições iniciais devem ser adequadamente introduzidas, de modo que o *software* selecionado, represente as condições reais do sistema hidrogeológico após a calibração do modelo. Neste trabalho optou-se por utilizar o FEFLOW[®] 8.0, código baseado no método dos elementos finitos para a resolução de equações diferenciais do fluxo subterrâneo.

A malha não estruturada, desenvolvida no GeoModeller[®] por meio da ferramenta CGAL, foi transferida diretamente para o FEFLOW[®] sem a necessidade de qualquer etapa intermediária de conversão. Desta forma, o domínio do modelo numérico conservou exatamente as mesmas dimensões do modelo geológico implícito, medindo 5,27 Km de largura e 14,75 Km de comprimento.

Uma vez importada a malha, a informação geológica foi adicionada ao FEFLOW[®] por meio de um processo de preenchimento dos pontos centrais dos elementos tetraédricos, utilizando a funcionalidade “Fill Centroids” disponível no GeoModeller[®].

Posteriormente, foram definidas as propriedades do modelo, conforme mostrado na Figura 26, onde o fluxo de água foi calculado utilizando a equação de Richards. Para solucionar esta equação, adotou-se o modelo empírico de Van Genuchten modificado, com os parâmetros α , n , m e δ sendo obtidos a partir da literatura (Mallants *et al.*, 2003). A modelagem de fluxo ocorreu em regime permanente, representando as condições observadas em setembro de 2017, ao final do período de estiagem.

Figura 26 - Definição das propriedades do problema, onde optou-se por representar o modelo em regime permanente e pela aplicação da equação de Richards para calcular o fluxo de água.



Fonte: Elaborado pela autora.

As condições de contorno controlam a entrada e saída de água do modelo numérico e devem ser definidas em concordância com a dinâmica do sistema, estabelecida no modelo conceitual (Anderson *et al.*, 2015). Para esse modelo, as seguintes condições de contorno foram consideradas:

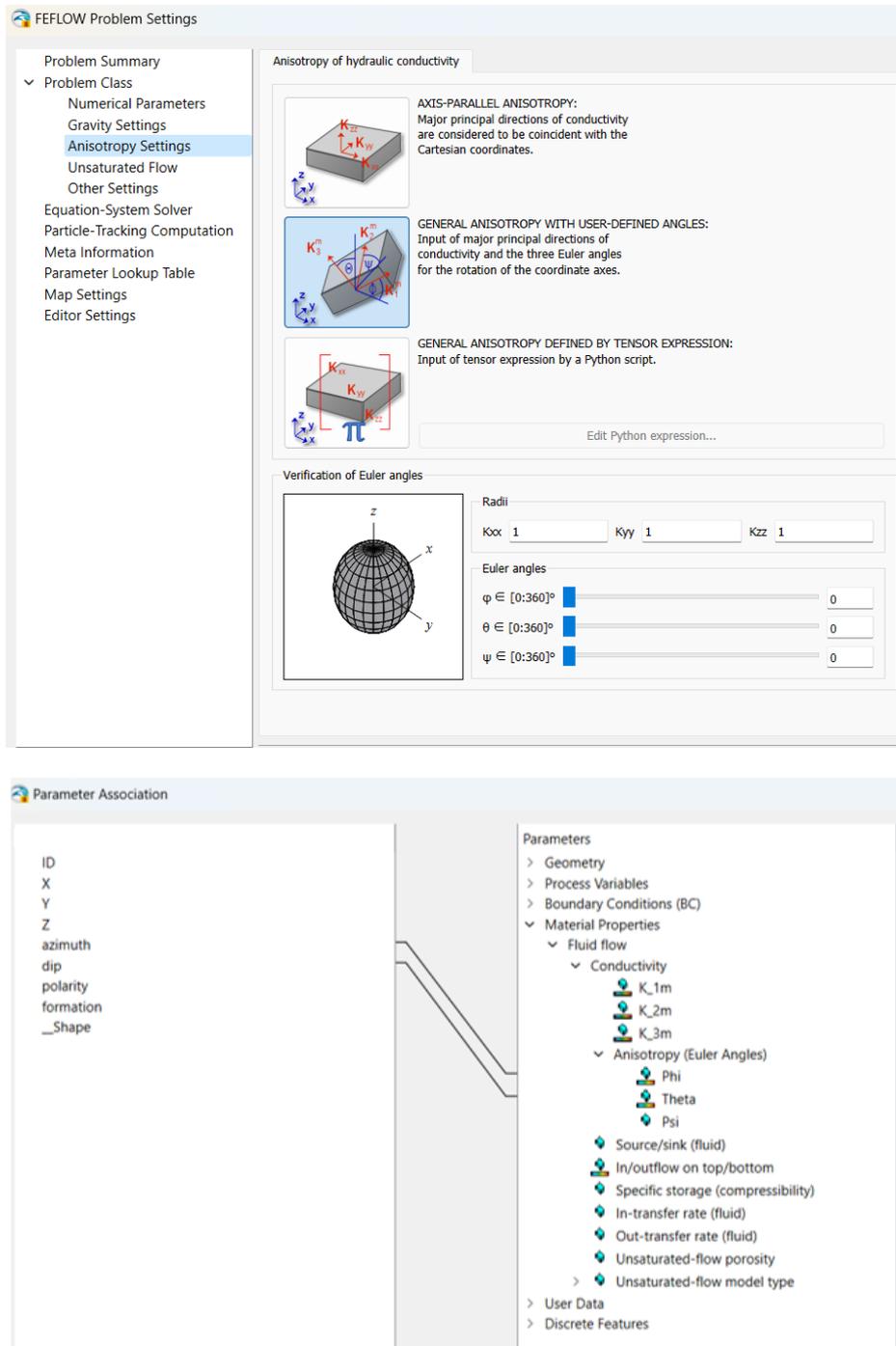
- Referente aos limites físicos da área modelada, houve uma divergência em relação ao que foi estipulado pelo modelo conceitual. Isso ocorreu porque um dos objetivos deste estudo era avaliar a efetividade da malha não estruturada no FEFLOW®. Assim, decidiu-se por estabelecer um domínio mais amplo, alinhado às dimensões do modelo geológico implícito. Como resultado, os limites do domínio foram configurados como condição de contorno de fluxo específico - Neumann, implicando fluxo nulo. É importante ressaltar que essas condições não representam limites físicos reais, como por exemplo, divisores de águas, rios regionais, limites de bacias hidrográficas ou barreiras de fluxo.

- Nas nascentes e na rede de drenagem, foram atribuídas as condições de contorno do tipo *Seepage Face*, que simulam a remoção de água do aquífero e representam a descarga de água do sistema subterrâneo para a superfície. Esta condição permite que a água seja descarregada para a superfície quando a carga hidráulica é maior que a elevação da superfície do solo.
- Nos corpos d'água da área, como a Lagoa dos Ingleses e a Represa Água Limpa, foram impostas condições de contorno de carga específica - Dirichlet. Este tipo de condição tem como objetivo fixar a carga hidráulica em nós da malha numérica nas cotas atribuídas.

A recarga foi associada ao parâmetro *In/Outflow on Top/Bottom*, representando a fração da precipitação pluviométrica que infiltra no subsolo, contribuindo para a recarga dos aquíferos e manutenção dos níveis de água subterrâneos. Seguindo o modelo conceitual, foram estabelecidas as seguintes taxas de recarga: 39% da precipitação na área dos afloramentos da Formação Cauê, caracterizando-a como a zona de maior recarga do modelo, 21% da precipitação na área da Formação Gandarela. Para as demais unidades foram estabelecidos valores próximos a 5% da precipitação, conforme especificado pela empresa WST.

Os valores de entrada de condutividade hidráulica, para cada unidade hidrogeológica, foram definidos conforme o modelo conceitual. Para representar a anisotropia dos aquíferos, foi utilizada a opção "*General anisotropy with computed angles*", onde os ângulos de Euler foram associados aos dados estruturais do modelo. Este arquivo de dados foi importado do programa GeoModeller®, onde os valores de direção das camadas geológicas (*azimuth*) foram associados ao ângulo Phi Φ , enquanto os valores de mergulho das camadas (*dip*) foram associados ao ângulo Theta θ (Figura 27).

Figura 27 - Configuração da anisotropia, onde os ângulos de Euler foram associados aos dados estruturais importados do programa GeoModeller®.



Fonte: Elaborado pela autora.

Feições discretas foram incorporadas ao modelo para representar as fraturas e falhas mapeadas que influenciam no fluxo subterrâneo. Estas estruturas atuam como planos localizados de elevada condutividade hidráulica e estão associadas à ocorrência de nascentes ao longo da Serra da Moeda. Tal incorporação ocorreu por

meio da importação de um arquivo *shapefile* gerado no GeoModeller®, que posteriormente foi integrado à funcionalidade “*discrete features*” do FEFLOW®.

O processo de calibração desse modelo foi realizado por meio de retroanálise manual, um método iterativo de tentativa e erro, conforme descrito por Anderson & Woessner, 1992. Durante essa etapa, as cargas hidráulicas simuladas pelo *software* foram comparadas com as cargas medidas observadas em campo. A fim de aproximar os valores simulados aos valores observados, realizou-se o ajuste parâmetros de condutividade hidráulica (K_1 , K_2 e K_3) e das taxas de recarga. Um dos objetivos da calibração, de acordo com Anderson *et al.*, (2015), é minimizar os resíduos do modelo buscando atingir um valor de erro médio quadrático normalizado (Normalized Root Mean Square Error NRMS) abaixo de 10%.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

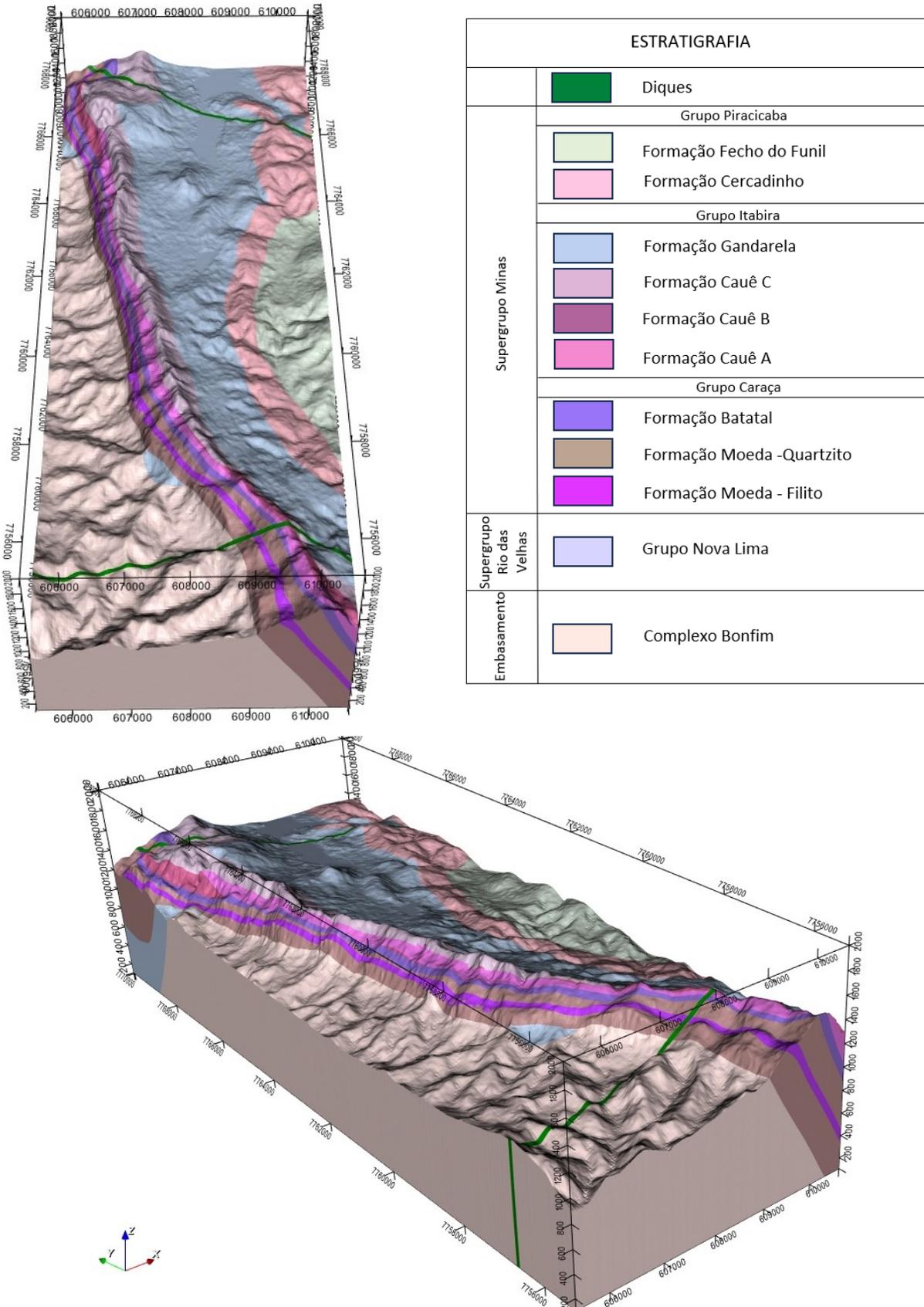
4.1 MODELO GEOLÓGICO IMPLÍCITO

Ao considerar que o conhecimento da geologia de uma região é o ponto de partida para a compreensão da distribuição espacial dos aquíferos, a modelagem geológica implícita representa uma estratégia poderosa no desenvolvimento de modelos numéricos de fluxo. Esta abordagem, que vai além da simples representação tridimensional do subsolo, é uma ferramenta que pode auxiliar na compreensão da distribuição, profundidade e conexões entre diferentes aquíferos. Adicionalmente, o modelo pode indicar possíveis influências de estruturas, como falhas, e contribuir para a elaboração de um modelo conceitual robusto.

Neste estudo, o modelo geológico implícito gerado foi resultado da integração de dados de superfície e compreendeu 12 diferentes unidades litológicas distintas: Complexo Bonfim, Grupo Nova Lima, Formação Moeda, Formação Moeda Filito, Formação Batatal, Formação Cauê A, Formação Cauê B, Formação Cauê, Formação Gandarela, Formação Cercadinho, Formação Fecho do Funil e Diques.

Além da visualização da distribuição espacial do sólido geológico, o modelo também permitiu o reconhecimento de áreas não mapeadas, proporcionando uma melhor compreensão da geometria do arcabouço geológico da área (Figura 28).

Figura 28 - Ilustração do modelo geológico tridimensional, gerado no software GeoModeller® e respectiva coluna estratigráfica.



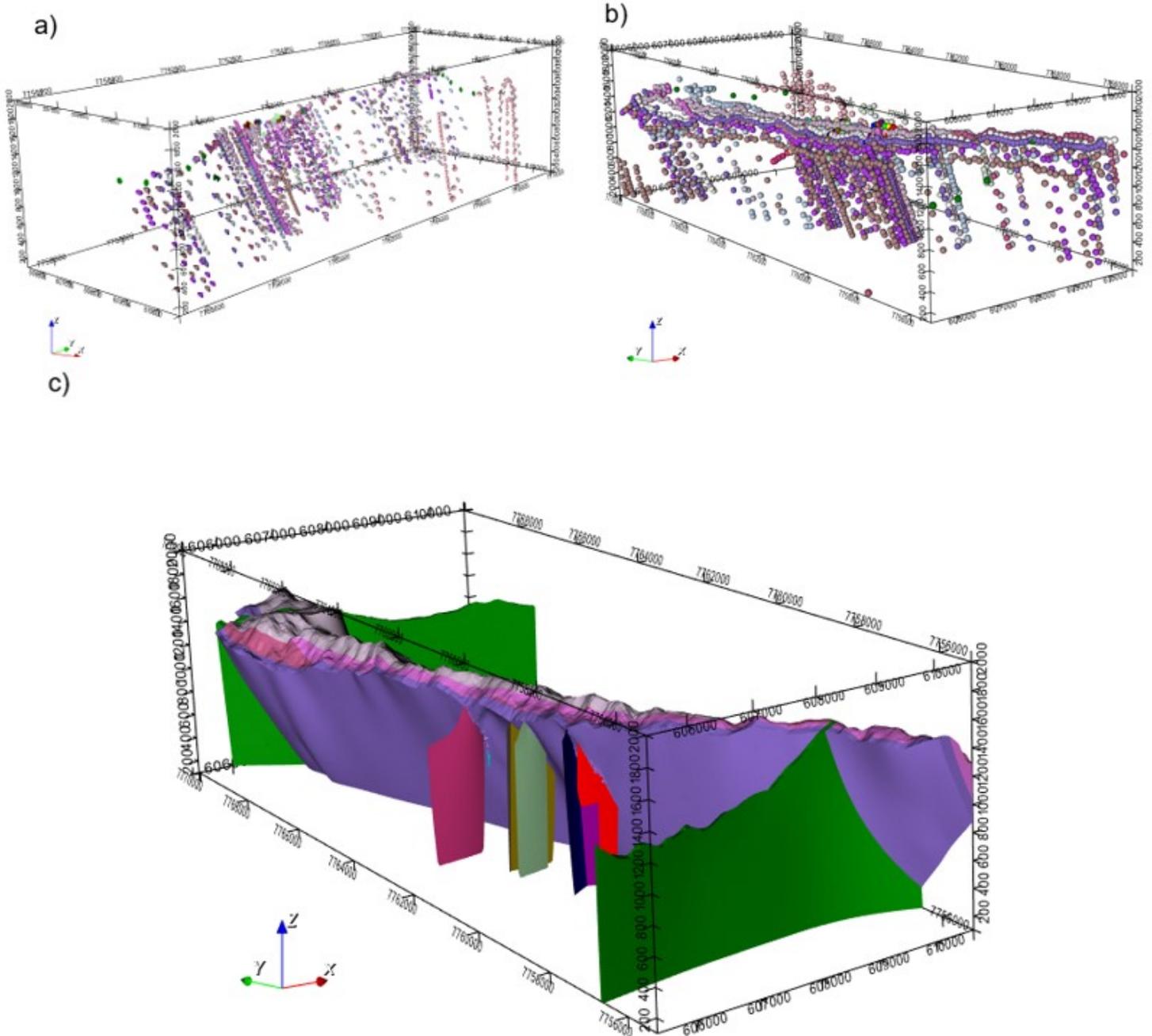
Fonte: Elaborado pela autora.

Após a digitalização dos dados geológicos obtidos de mapas de superfície e seções transversais, foi possível realizar a visualização tridimensional destes dados por meio da construção do modelo. Esta representação em 3D, além de incorporar os dados estruturais, também inclui os dados dos contatos geológicos, facilitando a observação detalhada dos sólidos, tanto de forma integrada quanto individualizada. Um exemplo notável é a representação detalhada da Formação Cauê, que configura como o principal aquífero da região, em conjunto com a Formação Batatal, que atua como unidade confinante. Suas relações com as falhas e os diques também podem ser observadas (Figura 29, letra c).

Este modelo pode ser particularmente importante para auxiliar em questões chave que ainda persistem sobre a área de estudo, como por exemplo: a Formação Batatal funciona como uma barreira física que impede o fluxo de água, compartimentando os sistemas aquíferos, ou permite a conexão hidráulica entre o aquífero Cauê e o aquífero Moeda através das fraturas? Essa dúvida foi objeto de análise em pesquisas anteriores, incluindo os estudos de Mourão (2007), Lazarim *et al.* (1999), e Ventura e Bacellar (2011), dentre outros.

A visualização tridimensional das falhas pode também auxiliar na compreensão da dinâmica do fluxo de água subterrânea em determinadas áreas. E.g., Hassen *et al.* (2016), desenvolveram um modelo geológico 3D do Kasserine Aquifer System na Tunísia, para representar a geologia em escala regional e, pela primeira vez na história, realizaram uma estimativa dos recursos hídricos subterrâneos da região. A partir do modelo foi possível realizar uma análise da importância hidráulica das falhas principais, avaliando as suas influências no fluxo das águas subterrâneas. Com isso observou-se a possível dupla natureza das falhas, onde algumas atuam tanto como barreiras de fluxo horizontal das águas subterrâneas, quanto simultaneamente como condutos para fluxo vertical.

Figura 29 - Visualização tridimensional dos dados do modelo geológico: a) Dados referentes às atitudes das camadas geológicas, representando direção e mergulho. b) Dados dos contatos geológicos ao longo da área. c) Representação individualizada da Formação Cauê (tons de rosa escuro e claro), Formação Batatal (cor roxa), diques (cor verde) e falhas mapeadas na área de estudo.



Fonte: Elaborado pela autora.

A partir da geometria tridimensional do modelo, foi possível calcular os volumes dos sólidos referentes à cada formação geológica. A Formação Cauê, que constitui o aquífero mais importante da área, apresentou um volume total (incluindo as unidades A, B e C) de 15 Gm³. Já a Formação Gandarela, que também configura como um aquífero, teve um volume calculado de 23 Gm³. Os volumes das demais formações estão disponíveis na Figura 30.

Os dados volumétricos dos sólidos geológicos podem ser utilizados em uma variedade de projetos, que vão desde empreendimentos de mineração até estudos de reservas hídricas subterrâneas. Por exemplo, Conde *et al.* (2014), geraram um modelo geológico 3D do aquífero Jarama, na Espanha, e utilizaram o cálculo do volume da unidade litológica, combinado com outros dados complementares, para estimar a capacidade de armazenamento de água do aquífero. Além disso, o modelo representou uma ferramenta crucial para realizar a gestão adequada dos recursos hídricos subterrâneos da região.

Figura 30 - Valores de volume dos diferentes sólidos geológicos, correspondendo às litologias da área de estudo.

Volume	
Lithology	Volume (m ³)
Dique_infinito_S	4.092512E8
Dique_infinito_N	4.79732E8
Formacao_Fecho_do_Funil	3.04722E9
Formacao_Cercadinho	8.243449E9
Formacao_Gandarela	2.33255E10
Formacao_Caue_C	1.090495E10
Formacao_Caue_BS	5.158604E8
Formacao_Caue_A	2.289422E9
Formacao_Caue_BN	1.236524E9
Formacao_Batatal	2.644539E9
Formacao_Moeda_Superior	3.434461E9
Formacao_Moeda_Filito	2.07182E9
Formacao_Moeda	5.270548E9
Grupo_Nova_Lima	6.781668E8
Complexo_Bonfim	2.533103E10

Fonte: Elaborado pela autora.

Além da representação 3D dos sólidos geológicos e do cálculo do volume das unidades, o modelo também permite a criação de seções geológicas transversais em

qualquer ponto da área estudada. Um exemplo prático dessa aplicabilidade é o trabalho de Magnabosco *et al.* (2020), que desenvolveu um modelo geológico implícito e empregou seções verticais para mapear a geometria das unidades hidroestratigráficas e definir os limites de uma bacia hidrogeológica na região de Sete Lagoas, em Minas Gerais.

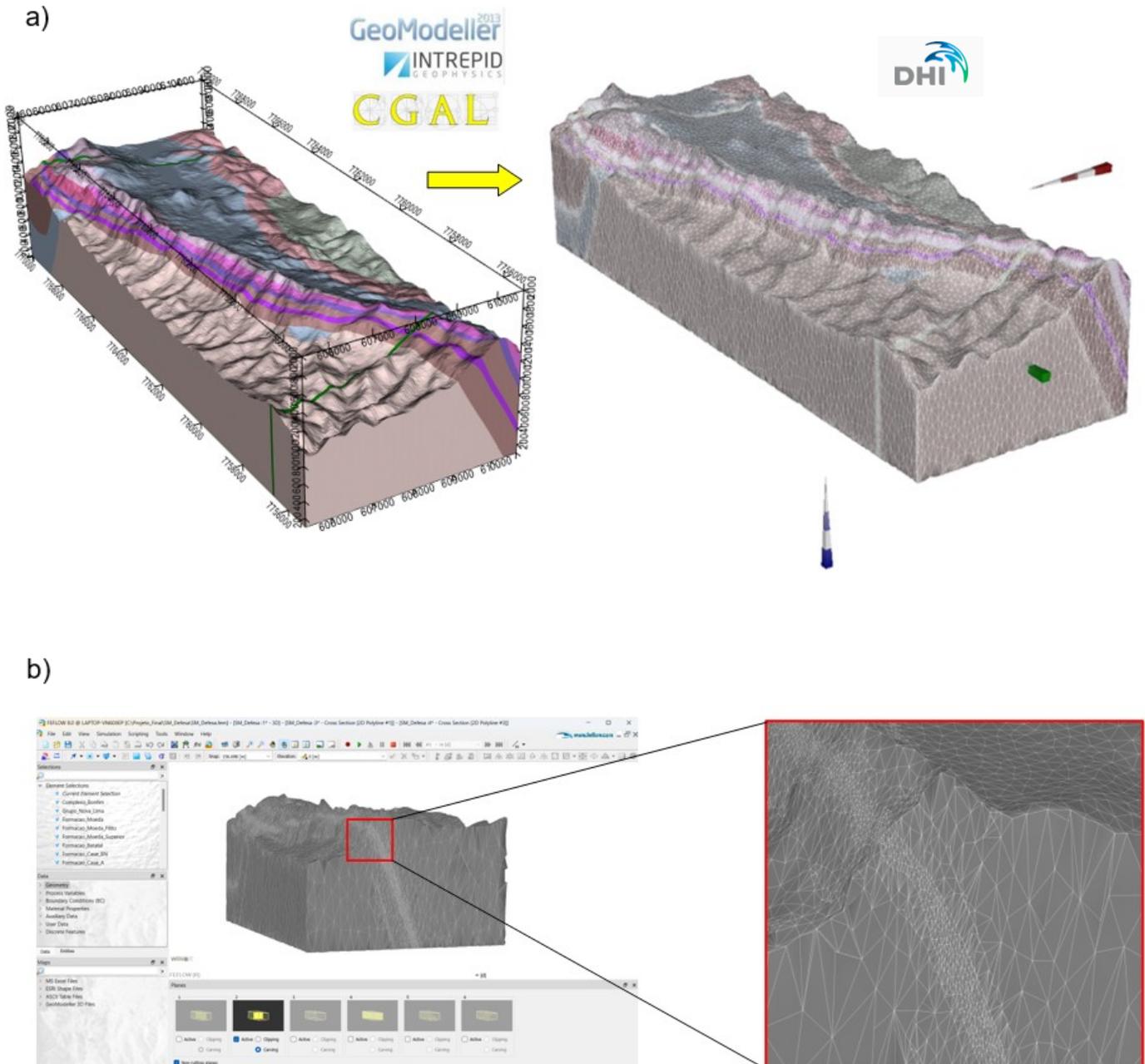
É importante ressaltar que a qualidade do modelo geológico implícito está diretamente relacionada à quantidade de dados utilizados e à sua distribuição espacial. Em regiões com uma densidade maior de dados, o modelo tende a se aproximar mais da realidade geológica, oferecendo uma representação mais precisa. Por outro lado, em áreas com escassez de dados, o modelo se baseia mais na interpretação do modelador, o que pode reduzir sua confiabilidade.

4.2 MALHA TETRAÉDRICA NÃO ESTRUTURADA

Utilizando a ferramenta CGAL, uma biblioteca avançada de estruturas de dados e algoritmos geométricos, integrada ao GeoModeller®, foi possível desenvolver a malha de elementos finitos totalmente não estruturada. Este processo, seguido de inúmeras etapas de refinamento, resultou em um arquivo que foi exportado diretamente para o programa FEFLOW® (Figura 31). Uma das grandes vantagens dessa importação direta é a preservação de todas as características do modelo geológico, que são fundamentais para a modelagem numérica de fluxo.

Especificamente para a Formação Batatal e para os diques, que possuem características confinantes, limitando o movimento da água subterrânea, realizou-se um refinamento mais detalhado da malha. Em contrapartida, em áreas de menor importância hidrogeológica, optou-se por elementos tetraédricos maiores, visando tornar os cálculos do modelo mais eficiente, já que uma malha menos detalhada requer menos poder computacional para ser processada.

Figura 31 - a) Visualização do modelo geológico implícito junto à malha numérica de elementos finitos, evidenciando a incorporação dos dados geológicos por meio da funcionalidade de preenchimento dos centroides dos elementos. b) Imagem da interface do FEFLOW®, exibindo a malha numérica em um corte transversal, com destaque para a discretização da Formação Batatal.



Fonte: Elaborado pela autora.

Uma das maiores vantagens das malhas não estruturadas é a sua flexibilidade para representar a heterogeneidade geológica e hidrogeológica em áreas de geologia

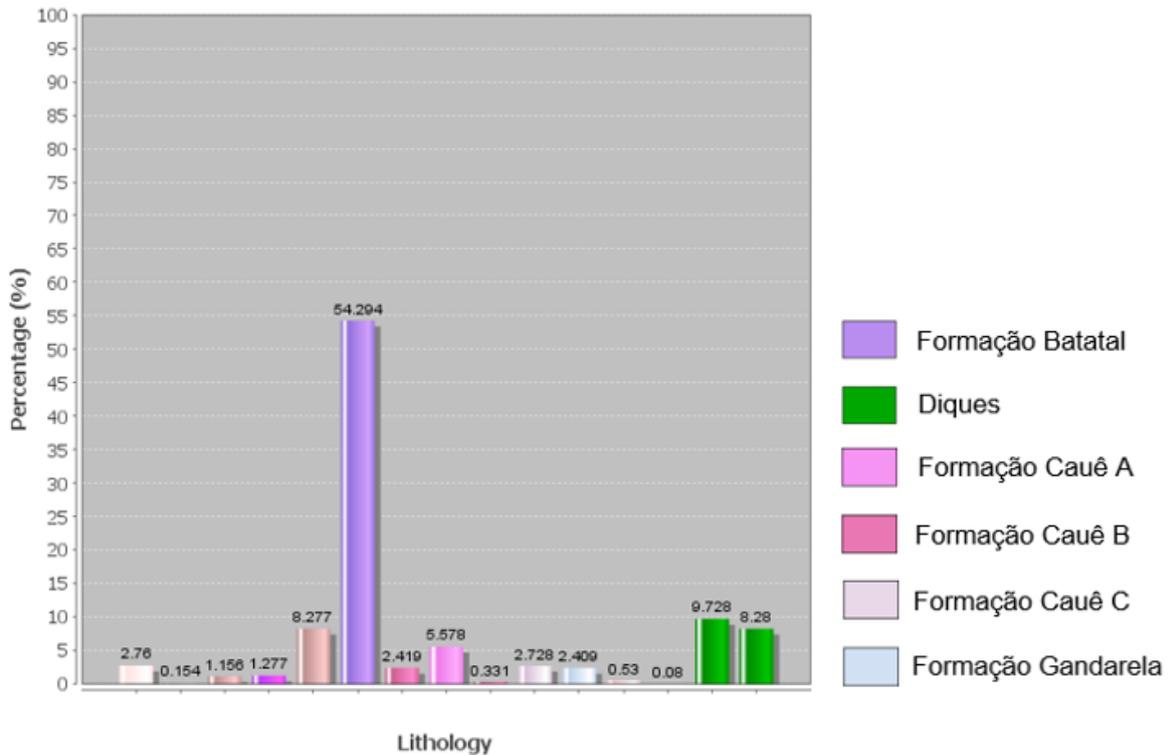
complexa, como por exemplo a Serra da Moeda. Os elementos tetraédricos são particularmente eficazes, pois podem se ajustar a volumes de formas irregulares, permitindo uma modelagem mais precisa da geometria da região.

O uso de malhas não estruturadas em modelos numéricos de fluxo de águas subterrâneas é relativamente recente e existem poucos estudos comparando suas vantagens em relação aos modelos desenvolvidos com malhas estruturadas. Um exemplo pioneiro é o trabalho de Dufour *et al.* (2020), que realizaram uma comparação desses dois tipos de malha em um projeto de modelagem numérica de fluxo. Seus resultados revelaram os benefícios significativos da malha não estruturada de elementos finitos, que proporcionou uma maior precisão no detalhamento de uma cava a céu aberto e uma representação mais fiel da complexidade geológica. Além disso, a malha não estruturada permitiu manter a eficiência do processo de fluxo tridimensional em uma escala regional, utilizando um número menor de nós, o que resultou na redução do tempo necessário para as simulações.

É fundamental enfatizar que a precisão de um modelo numérico de fluxo está diretamente ligada à qualidade com que a malha representa as unidades geológicas. Ao se utilizar a ferramenta CGAL, é possível realizar uma vasta gama de testes e ajustes na discretização da malha, o que a torna extremamente eficaz para criar malhas não estruturadas de alta qualidade. Um exemplo nesse contexto foi o estudo de Wang *et al.* (2020), que desenvolveram um método para a criação de malhas tetraédricas de alta qualidade, especificamente para modelos geológicos usados em análises de estabilidade de maciços rochosos. Esse método, implementado por meio da biblioteca de algoritmos CGAL, converteu um modelo geológico inicialmente baseado em malhas triangulares em uma malha tetraédrica não estruturada de excepcional qualidade.

Neste estudo, após a discretização da malha, foi possível fazer a quantificação exata dos tetraedros de cada unidade litológica (Figura 32). A Formação Batatal e os diques, foram as unidades com maior detalhamento na discretização, com a Formação Batatal representando cerca de 55% dos tetraedros do modelo e os diques aproximadamente 18%. A Formação Cauê, incluindo as unidades A, B e C, constituiu cerca de 12%, a Formação Gandarela abrangeu 2.5%, e as unidades restantes totalizam aproximadamente 12.5% dos tetraedros.

Figura 32 - Gráfico de distribuição percentual de tetraedros por unidade litológica.

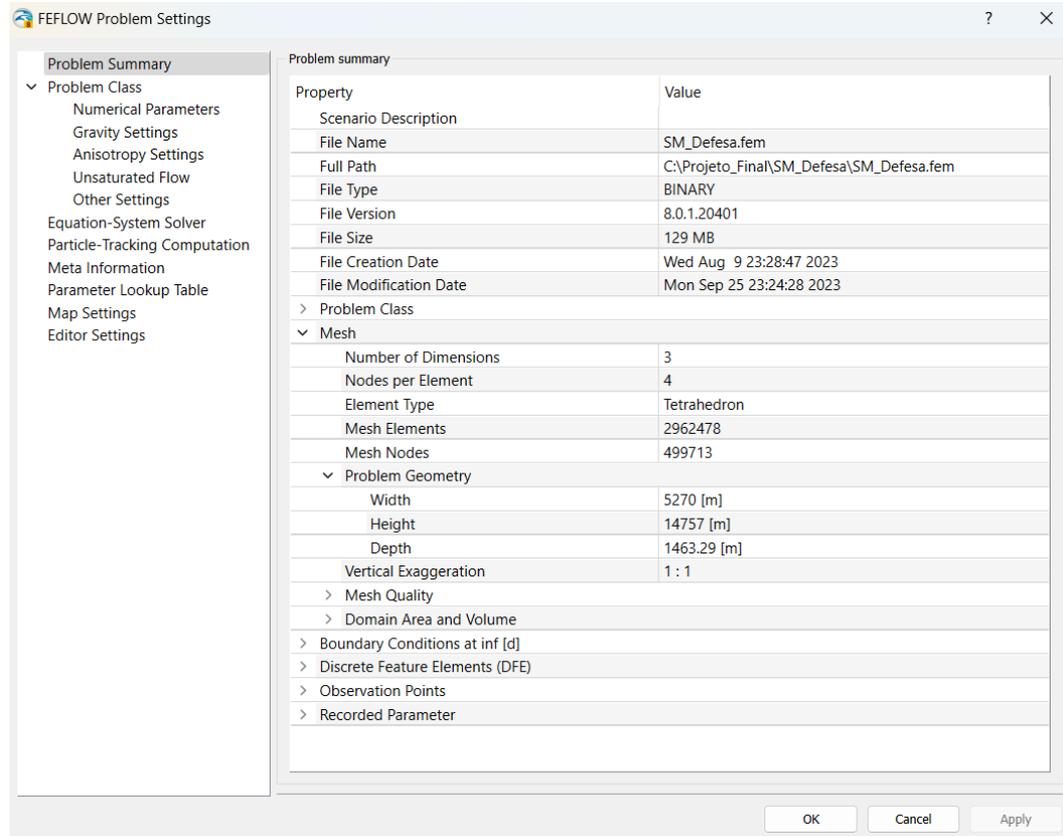


Fonte: Elaborado pela autora.

4.3 MODELO NUMÉRICO DE FLUXO

Ao importar a malha tetraédrica não estruturada para o FEFLOW®, obteve-se uma malha numérica composta por 2.962.478 elementos tetraédricos e 499.713 nós, como evidenciado na configuração do projeto (Figura 33). A extensão da domínio modelado é equivalente às dimensões do modelo geológico implícito, abrangendo uma área total de aproximadamente 78 Km².

Figura 33 - Interface das configurações do FEFLOW®, exibindo as informações detalhadas da malha numérica, incluindo o número de elementos, de nós e as dimensão do domínio.



Fonte: Elaborado pela autora.

4.3.1 Calibração do modelo

No processo de calibração do modelo numérico de fluxo adotaram-se valores iguais para as constantes K_1 e K_2 , enquanto a anisotropia foi representada somente em K_3 , sendo atribuído um valor 10 vezes menor. Adicionalmente, a anisotropia do sistema foi complementada pela integração dos dados de atitude das camadas na malha numérica. Os valores finais de condutividade hidráulica, obtidos após a calibração, variaram entre $1,0 \times 10^{-09}$ m/s e $1,0 \times 10^{-06}$ m/s, para os diques e a Formação Cauê B respectivamente (Tabela 6, Figura 34). Para as unidades A e C da Formação Cauê, os valores foram $1,5 \times 10^{-7}$ m/s e $1,2 \times 10^{-6}$ m/s respectivamente. A Formação Gandarela apresentou uma condutividade hidráulica de $5,5 \times 10^{-7}$ m/s.

Esses valores foram menores que os obtidos por Schlumberger (2017), Mourão (2007) e Magalhães (2023), porém similares aos obtidos por Mesquita *et al.* (2017).

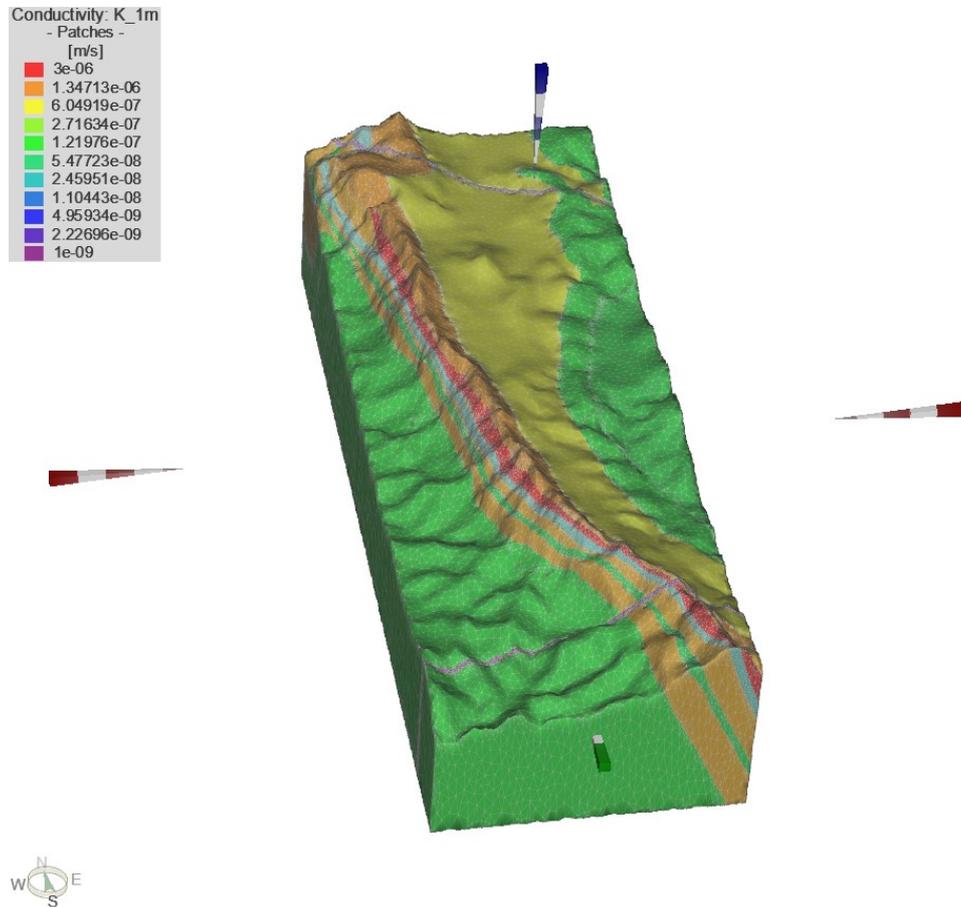
Deve-se levar em conta que as discrepâncias observadas entre os valores estimados de condutividade hidráulica neste trabalho e os observados na literatura podem estar associadas principalmente ao processo de calibração do modelo. Uma outra razão para essas variações é a heterogeneidade geológica da área de estudo, que pode resultar em diferenças nos valores de condutividade hidráulica mesmo em escala espacial reduzida. Segundo Mesquita *et al.* (2017), uma variação considerável nos parâmetros hidrodinâmicos dentro de uma mesma litologia pode indicar um alto grau de anisotropia e heterogeneidade, como observado no aquífero Cauê. Os autores também sugerem que tais variações indicam que o comportamento desse aquífero pode não ser uniformemente correspondente ao de um aquífero livre ao longo de toda sua extensão.

Tabela 6 - Valores de condutividade hidráulica obtidos após o processo de calibração.

Unidade	Litologia principal	Intervalo de valores de Condutividade Hidráulica após calibração (K) (m/s)
Complexo Bonfim	Gnaiss, granito e xisto	$1,0 \times 10^{-7}$
Formação Moeda	Quartzito	$1,0 \times 10^{-8}$
Formação Moeda	Filito	$8,0 \times 10^{-8}$
Formação Batatal	Filito	$2,7 \times 10^{-8}$
Formação Cauê A	Itabirito silicoso/ anfíbolítico	$1,5 \times 10^{-7}$
Formação Cauê B	Itabirito anfíbolítico	$1,0 \times 10^{-7}$
Formação Cauê C	Itabirito silicoso	$1,2 \times 10^{-8}$
Formação Gandarela	Dolomito	$5,5 \times 10^{-7}$
Diques máficos	Diabásio	$1,0 \times 10^{-9}$

Fonte: Elaborado pela autora.

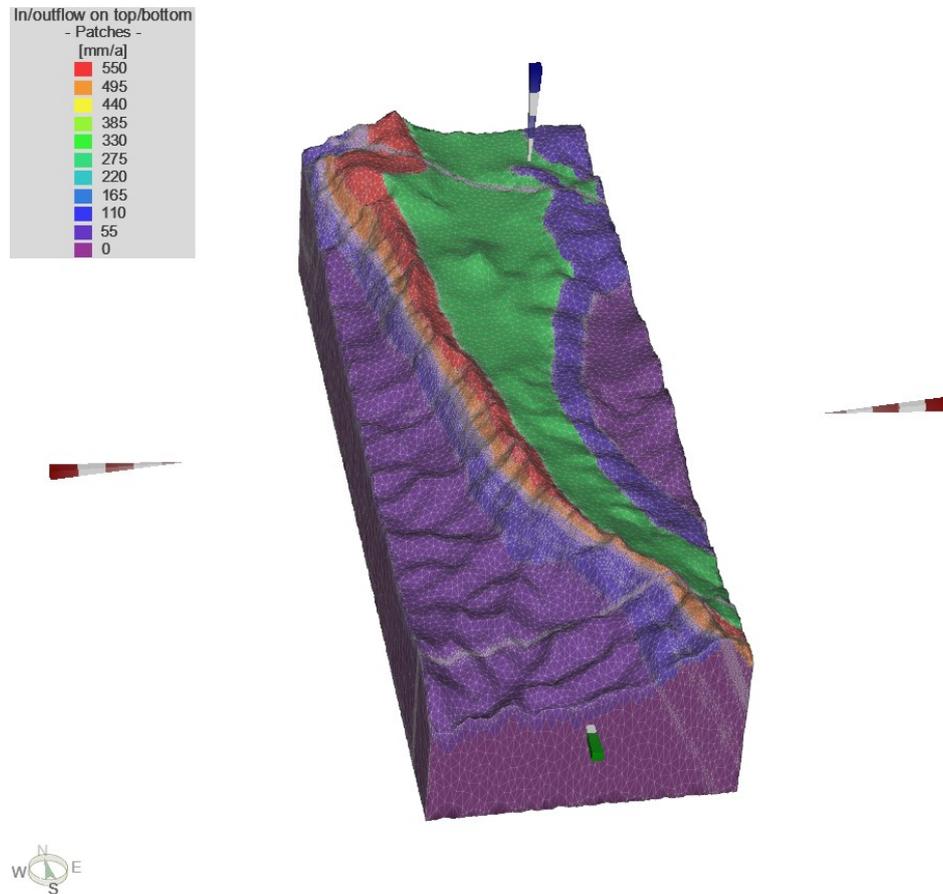
Figura 34 - Representação gráfica dos valores de condutividade hidráulica (m/s) resultantes do processo de calibração.



Fonte: Elaborado pela autora.

Quanto às taxas de recarga, com base na precipitação anual estabelecida de 1312 mm/ano, os valores obtidos após a calibração foram de: 41% para a Formação Cauê, considerando a média das unidades A, B e C, e de 22% para a Formação Gandarela. Para as outras unidades geológicas, os valores de recarga foram inferidos usando litologias similares como referência (Figura 35). Esses valores estão acima dos obtidos por Mourão (2007) e Magalhães (2023), possivelmente devido aos ajustes realizados na fase de calibração do modelo, onde buscou-se assegurar que os valores das cargas hidráulicas calculadas estivessem alinhados às medições realizadas em campo.

Figura 35 - Resultado dos valores de recarga obtidos após o processo de calibração.

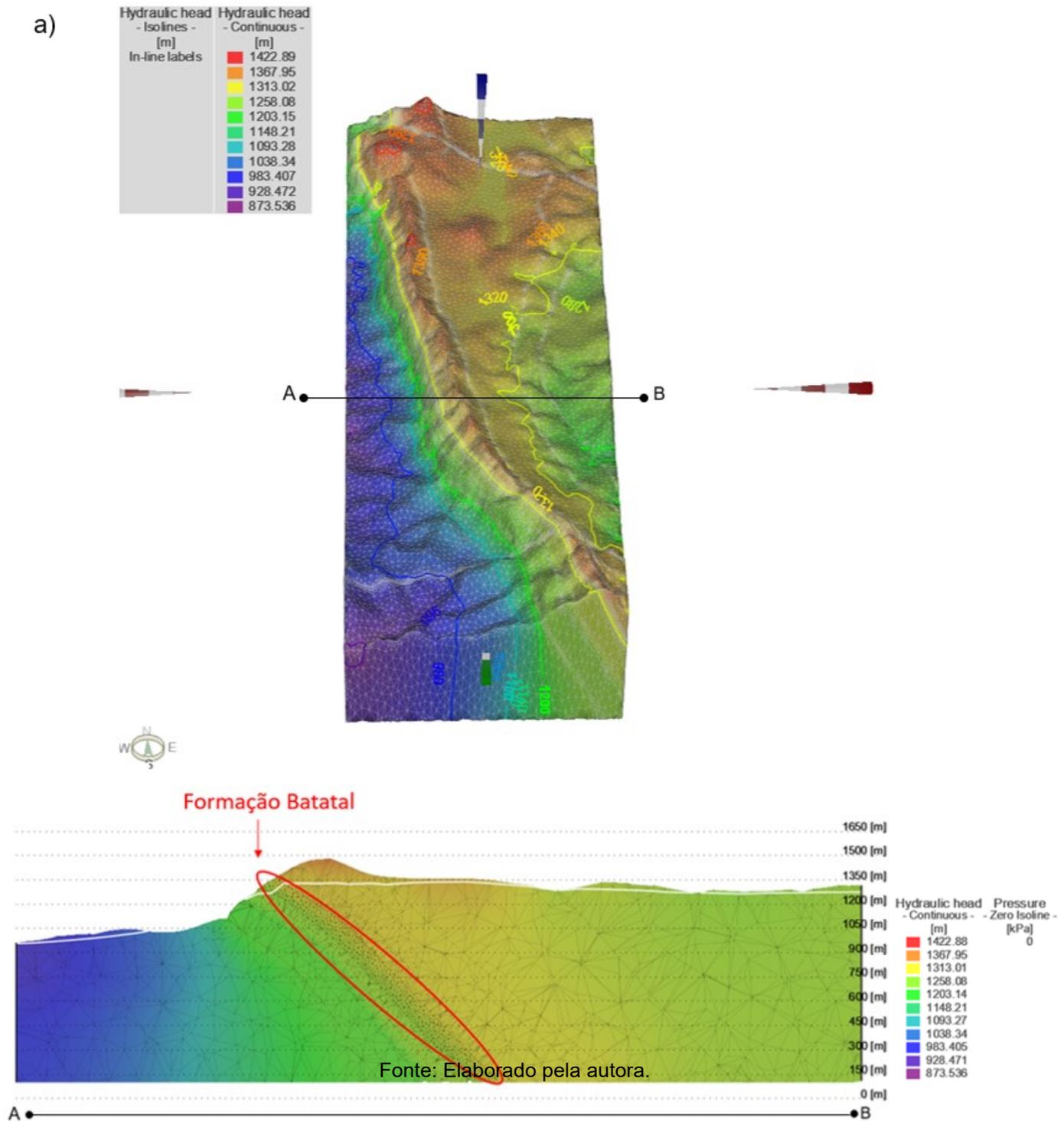


Fonte: Elaborado pela autora.

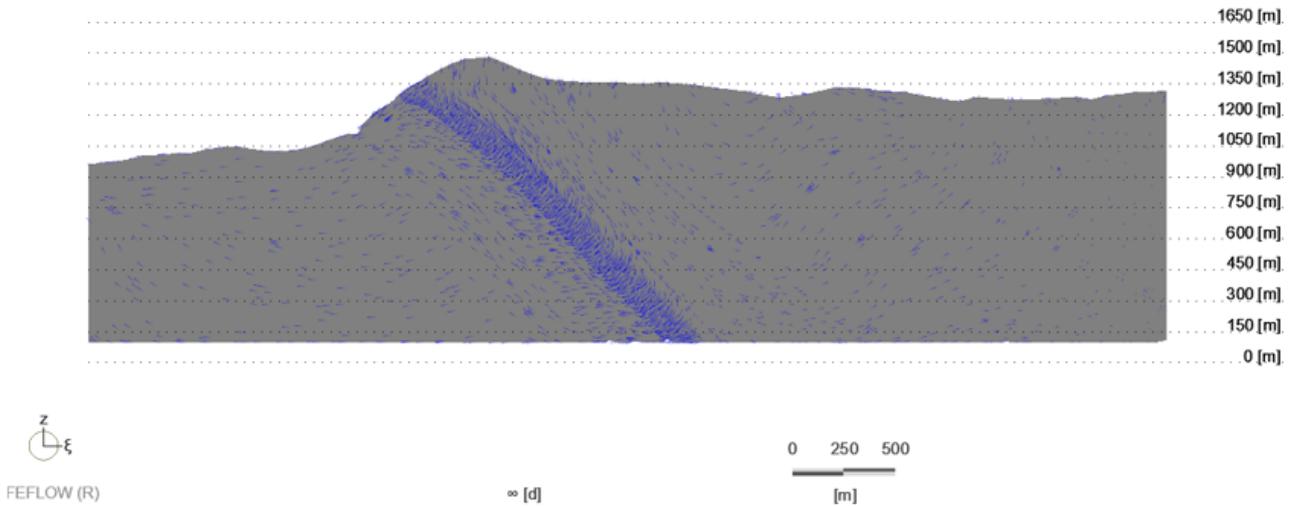
Um dos resultados obtidos na simulação do modelo foi a distribuição da carga hidráulica, a qual demonstrou concordância com a topografia da área. A carga hidráulica variou de um valor mínimo de aproximadamente 873 m, na zona oeste da área, e aproximadamente 1.422 m no topo da Serra da Moeda. A análise do lençol freático revelou um padrão alinhado às expectativas teóricas, particularmente em relação à Formação Batatal. Observou-se uma transição marcada, evidenciada por um degrau proeminente na representação gráfica, que sugere uma variação na condutividade hidráulica, associada à baixa permeabilidade dos filitos. Esse fenômeno também pode ser observado na mudança do padrão de fluxo da água, conforme ilustrado na Figura 36. Complementarmente, o afloramento do lençol freático na zona

oeste da área pode estar associado à presença de nascentes na Formação Moeda, um aspecto já previamente documentado no trabalho de Mourão (2007).

Figura 36 - Perfil transversal da área, representando: a) A distribuição da carga hidráulica simulada pelo domínio e o nível do lençol freático. b) Mapa da direção de fluxo das água subterrâneas.



b)



Fonte: Elaborado pela autora.

No regime de estado permanente, pressupõe-se que o volume de água que entra no modelo é igual ao que sai, obedecendo a lei da conservação de massa. Portanto, o modelo calibrado deve apresentar um balanço de fluxo nulo. Para este estudo, o balanço de fluxo total calculado foi de + 0.00095929 m³/dia. A principal fonte de entrada de água no modelo foi a recarga, com + 38.983 m³/dia, enquanto a saída, associada às condições de contorno de Dirichlet, foi de - 39.115 m³/dia. Além disso, foi registrada uma entrada adicional de + 128.69 m³/dia, vinculada às condições de contorno de Dirichlet, estando associada aos corpos d'água da área (Figura 37).

Figura 37 - Resultado do balanço hídrico do modelo após o processo de calibração.

Domain of Interest (DOI)	
Domain	
<input checked="" type="checkbox"/> Active	[m ³ /d] FLUID
Dirichlet BCs	
-39115	+128.69
Neumann BCs	
Cauchy BCs	
Wells	
Distributed Sink(-)/Source(+)	
	+38986
Storage Capture(-)/Release(+)	
Imbalance	
	+0.00095929

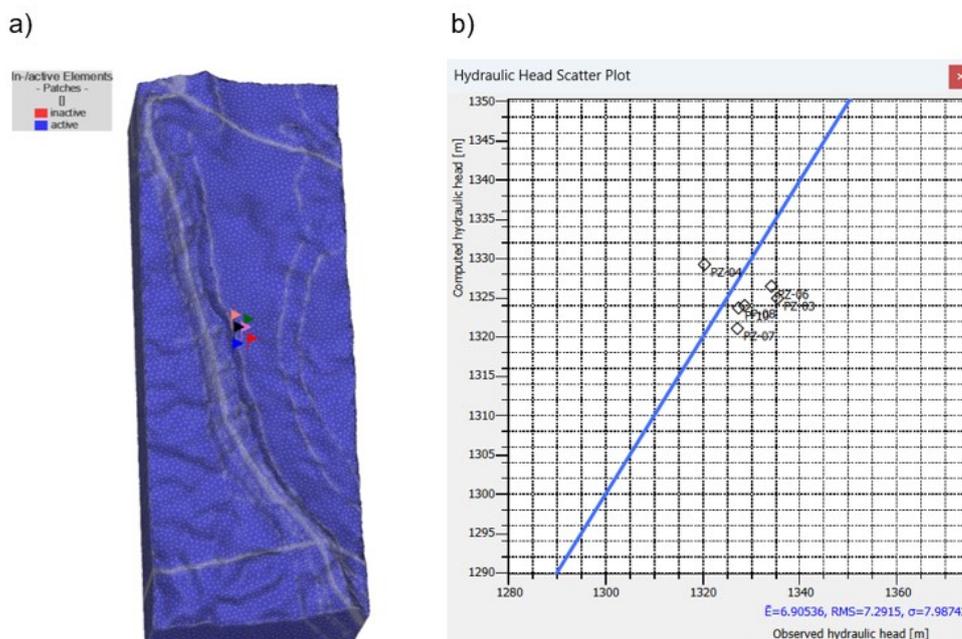
Fonte: Elaborado pela autora.

A verificação do ajuste de um modelo numérico de fluxo exige uma abordagem tanto quantitativa quanto qualitativa. Ambas as avaliações são necessárias, entretanto, independentemente da magnitude do erro registrada a partir da verificação quantitativa, é importante que o modelo mostre as tendências observadas no sistema estudado. A avaliação quantitativa se realiza mediante a avaliação de parâmetros estatísticos, como por exemplo o Root Mean Square Error (RMSE) e o Normalized Root Mean Squared (NMRS). Já a avaliação qualitativa se realiza comparando-se e verificando-se a consistência de mapas de contorno e perfis – representando, por exemplo, as direções de fluxo – do modelo conceitual com os resultados gerados pelo modelo numérico (SEA, 2012).

É importante enfatizar que o objetivo principal da calibração é assegurar a consistência entre os resultados do modelo numérico e do modelo conceitual, garantindo o alinhamento com o sistema hidrogeológico. Portanto, prioriza-se a representação qualitativa acurada das tendências delineadas pelo modelo conceitual, o que supera a importância da simples minimização do erro numérico.

Do ponto de vista quantitativo, obteve-se um Root Mean Square (RMS) de 7.29 metros (Figura 38), e a subsequente normalização deste valor gerou um Normalized Root Mean Square Error (NRMS) de 48%. Levando em conta que um NRMS abaixo de 10% é geralmente considerado um indicativo de uma calibração eficiente, o valor alcançado de 48% indica que o modelo, na sua forma atual, não está calibrado de maneira satisfatória em relação aos dados coletados.

Figura 38 - a) Visualização da distribuição dos pontos de observação utilizados na calibração. b) Gráfico de correlação dos valores observados de carga hidráulica versus os computados pelo modelo.



Fonte: Elaborado pela autora.

Diversos fatores potencialmente interrelacionados podem ter contribuído para a ineficácia da calibração do modelo numérico de fluxo apresentado neste estudo. A escassez de pontos de observação distribuídos de forma homogênea pela área pode resultar em uma representatividade reduzida, afetando a precisão do modelo, especialmente em zonas de complexidade geológica elevada, como é o caso da Serra da Moeda. Devido à heterogeneidade das litologias e à variação acentuada das declividades topográficas, a área de estudo constitui um exemplo típico de caso complexo para o desenvolvimento de modelos hidrogeológicos, conforme discutido em estudos como os de Magalhães (2023), Lazarim e Loureiro (1999), Bertachinni (1994), e Rubio (1998), dentre outros.

Outra razão é que o modelo pode estar superparametrizado, ou seja, existem muitos parâmetros que estão afetando a estabilidade do modelo, para os poucos pontos de observação existentes na área. Deve-se ter em conta que envolver um maior número de parâmetros no processo de calibração se traduz em um modelo mais suscetível a reproduzir os mesmos resultados sob diferentes combinações de parâmetros, acentuando assim o problema da não unicidade. Diante disso, uma cuidadosa seleção dos parâmetros a serem calibrados torna-se relevante, pois ao seguir o princípio da parcimônia, é possível reduzir o grau de não unicidade e alcançar resultados de calibração mais confiáveis (SEA, 2012).

A decisão de utilizar a equação de Richards para simular o fluxo de água neste estudo foi fundamentada na busca por uma modelagem que oferecesse uma representação mais realista dos processos de fluxo. Entretanto, essa escolha implicou na necessidade de integrar um número maior de parâmetros, acarretando uma demanda elevada por dados para uma calibração efetiva do modelo. A dependência de dados inferidos de tabelas generalizadas, em vez de medições diretas no campo, pode introduzir elementos de instabilidade e imprecisão no modelo. Uma alternativa poderia ser a simplificação do modelo hidrogeológico, empregando-se a Lei de Darcy na solução da equação de fluxo. Com essa abordagem seria possível diminuir a complexidade dos parâmetros envolvidos e potencialmente aumentar a eficiência computacional do modelo.

Além disso, apesar das vantagens inerentes à malha não estruturada, representar adequadamente os parâmetros da zona não saturada pode ser desafiador se a discretização dos tetraedros não for suficientemente refinada. Uma discretização

eficiente da malha é fundamental para simplificar análises, aumentar a precisão dos resultados, e assegurar a convergência e estabilidade numérica do modelo.

Um desafio adicional identificado na modelagem foi a presença de formações rochosas de baixa permeabilidade na zona não saturada. Estas litologias, quando combinadas com elevadas taxas de recarga, provocaram problemas de saturação no modelo. Uma alternativa para tentar mitigar este problema seria a implementação de uma camada superficial ao longo da superfície da malha, composta por tetraedros (representando um perfil de rocha intemperizada) com valores mais altos de condutividade hidráulica.

É crucial ressaltar que a calibração, embora necessária, não é suficiente por si só para garantir resultados precisos. As etapas de validação e acompanhamento subsequente são essenciais para diminuir o grau de incerteza e aumentar a confiabilidade das previsões do modelo. Conforme mencionado, a modelagem é uma simplificação da realidade, baseada em suposições que facilitam a compreensão de fenômenos complexos. Portanto, uma incerteza inerente acompanha o processo de modelagem, reforçando a importância de uma abordagem rigorosa e cuidadosa em todas as fases do desenvolvimento do modelo.

5 CONCLUSÃO

As águas subterrâneas representam um componente vital dos recursos hídricos globais e a sua importância é ampliada em contextos de escassez hídrica e variações climáticas, onde agem como importantes reservatórios de água. A gestão eficiente deste recurso requer uma compreensão aprofundada de suas dinâmicas e interações com o meio ambiente. Neste âmbito, a modelagem numérica de fluxo se revela uma ferramenta valiosa, possibilitando a síntese de dados de campo e a análise da variabilidade espacial e temporal das propriedades dos aquíferos.

A compreensão da geologia é fundamental na modelagem numérica de águas subterrâneas, com modelos geológicos proporcionando uma base sólida e robusta para a construção de modelos numéricos de fluxo. As características geológicas exercem uma influência significativa nas propriedades hidrogeológicas condicionando as cargas hidráulicas e conseqüentemente determinando as direções de fluxo

subsuperficial. Assim, a representação precisa da geologia é um passo crucial para se entender os controles geológicos que regem a dinâmica das águas subterrâneas.

Neste estudo, foi desenvolvido um modelo geológico implícito para a Serra da Moeda, Minas Gerais, utilizando o programa Geomodeler[®]. A modelagem geológica implícita permitiu a visualização tridimensional da geometria do arcabouço geológico proporcionando uma melhor compreensão dos aquíferos da área. Essa metodologia é particularmente valiosa em ambientes geológicos de alta complexidade, como na Serra da Moeda, inserida no setor oeste do Quadrilátero Ferrífero. É importante ressaltar que o programa não substitui a expertise de um geólogo, mas permite ao profissional usar sua experiência e conhecimento para elaborar um modelo geológico viável em um tempo reduzido.

Utilizando o algoritmo computacional CGAL, o modelo geológico foi convertido com êxito em uma malha de elementos finitos totalmente não estruturada, permitindo uma representação mais acurada da complexidade geológica da área, incluindo camadas geológicas inclinadas, falhas e dobramentos. As malhas não estruturadas oferecem a vantagem de representar com flexibilidade a heterogeneidade geológica e hidrogeológica em áreas de geologia complexa, permitindo um refinamento localizado sem aumentar a densidade da malha em todo o modelo.

A exportação direta da malha para o FEFLOW[®], sem etapas intermediárias de conversão, permitiu uma representação precisa das heterogeneidades que afetam o sistema hidrogeológico. Contudo, apesar dos esforços, os resultados do modelo numérico de fluxo, calibrado em regime permanente, não foram considerados plenamente representativos das condições reais, necessitando de ajustes além do escopo do presente trabalho. Para aprimorar o modelo e reduzir incertezas, é essencial a melhoria do banco de dados e a realização de testes de sensibilidade na calibração dos parâmetros de entrada, visando identificar aqueles que mais influenciam os resultados.

Para concluir, é importante enfatizar que a aquisição de dados adicionais, obtidos tanto em campo quanto em laboratório, pode melhorar significativamente a confiabilidade do modelo ajustado. Contudo, é crucial reconhecer que, mesmo com a obtenção de parâmetros em quantidade e qualidade adequadas, o modelo numérico sempre representará uma simplificação da realidade, e em muitos casos, uma maior complexidade dos dados não necessariamente resultará em um modelo mais preciso ou eficaz.

REFERÊNCIAS

- ALKMIM, F.F.; MARSHAK, S. Transamazonian Orogeny in the Southern São Francisco Craton Region, Minas Gerais, Brazil: evidence for Paleoproterozoic collision and collapse in the Quadrilátero Ferrífero. **Precambrian Research**, v. 90, 1998.
- ÁLVARES, C.A. *et al.* Köppen's Climate Classification Map for Brazil - Meteorologische Zeitschrift, 2014.
- ANDERSON, M. P.; WOESSNER, W. W. **Applied Groundwater Modeling: Simulation of Flow and Advective Transport**. San Diego: Academic Press, 1992.
- ANDERSON, M. P., WOESSNER, W. W.; RANDALL J. H. **Applied groundwater modeling: simulation of flow and advective transport**. Academic press, 2015.
- AQUANTY INC. **HydroGeoSphere**. A Three-Dimensional Numerical Model Describing Fully Integrated Subsurface and Surface Flow and Solute Transport - Waterloo, Ontario - 2015.
- BABINSKI, M., CHEMALE F. Jr, VAN SCHMUS, W. R. The PB/PB age of the Minas supergroup carbonate rocks, Quadrilátero Ferrífero, BRAZIL. - **Precambrian Research** 72.3-4 - 1995.
- BARLOW, M.; CLARKE, T. **Blue gold: the battle against corporate theft of the world's water**. Routledge, 2017.
- BARSI, M. *et al.* Seamlessly Integrated Modelling Approach: From Conceptual Geological to Numerical Models. **Proceedings of Mine Water Solutions**, Vancouver - Canada, 2022.
- BEATO, D. A. C, MONSORES A. L., BERTACHINI A. C. Potencial aquífero nos metassedimentos do Quadrilátero Ferrífero região da APA SUL RMBH MG. In: **CONGRESSO BRASILEIRO DE ÁGUAS SUBTERRÂNEAS**, Curitiba – 2006.
- BEATO, D. A. C.; Coord. Dutra, Georgete M. Estudo hidrogeológico da Bacia da Lagoa da Pampulha. Belo Horizonte: CPRM/PBH, 2001.
- BEAR, J. **Dynamics of fluids in porous media**, 1972 – Dover.
- BEAR, J. **Fundamentals of ground-water modeling**. Superfund Technology Support Center for Ground Water, Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, 1982.
- BEAR, J., VERRUIJT. A. **Modeling groundwater flow and pollution. Vol. 2**. Springer Science & Business Media, 1987.

BEAR, J.; CHENG, A. H. D. **Modeling groundwater flow and contaminant transport**. Springer Science & Business Media, 2010.

BEVEN, K. Hillslope Hydrographs by the finite element method. **Earth surface processes** - v. 2, p. 13-28, 1977.

BERTACHINI, A. C. – Hidrogeologia e desaguamento da Mina de Águas Claras. Anais do 8o Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas - ABAS. Recife - PE. 1994, pp. 274-283.

BLOOMENTHAL, J.; BAJAJ, C. **Introduction to implicit surfaces**. Morgan Kaufmann, 1997.

BONGANHA, C. A. *et al.* Conceitos e fundamentos da modelagem matemática para gerenciamento de recursos hídricos subterrâneos. **Revista Analytica**, Araraquara, 2007.

BORGHETTI, N. R. B.; BORGHETTI, J. R.; ROSA FILHO, E. F. Aquífero Guarani: a verdadeira integração dos Países do MERCOSUL. **Curitiba: Os Autores**, 2004.

BŘEZINA, J., *et al.* **FLOW123D version 1.8. 2, Documentation of File Gormats and Brief User Manual** - 2015.

BREDEHOEFT, J. Much contaminated ground water can't be cleaned up. *Groundwater* 30.6 – 1992.

CALCAGNO, P. *et al.* How 3D implicit geometric modelling helps to understand geology: the 3DGeoModeller methodology. In: **INT. ASSOC. FOR MATHEMATICAL GEOLOGY XITH INTERNATIONAL CONGRESS**, 11, Belgium, 2006.

CALCAGNO, P. *et al.* Geological modelling from field data and geological knowledge: Part I. modelling method coupling 3d potential-field interpolation and geological rules. **Physics of the Earth and Planetary Interiors, Elsevier**, v. 171, n. 1, 2008.

CALCAGNO, P. *et al.* GeoModeller user manual - 3D GeoModeller reference. Bureau de Recherches Geologiques et Minieres (BRGM), Orleans, France, and Desmond Fitzgerald & Associates Pty Ltd, Melbourne, Australia. Disponível em <http://www.intrepid-geophysics.com>. Setembro - 2018.

CALCAGNO, P. *et al.* A collection of 3D geomodels of the Los Humeros and Acoculco geothermal systems (Mexico). **Scientific Data**. 2022 - Jun.

CAVICCHIA, M. E. **Desenvolvimento de modelo numérico para gerenciamento de recursos hídricos subterrâneos na área do projeto piloto de Ribeirão Preto** - Tese de Doutorado - Universidade de São Paulo – 2007.

CHEMALE Jr F, Rosière C.A, Endo I. Evolução tectônica do Quadrilátero Ferrífero, Minas Gerais: um modelo. **Pesquisas**, 18(2): 104-127 – 1991.

CLEARY, R. W. Hidrologia de águas subterrâneas. In: RAMOS, F. *et al.* **Engenharia hidrológica**. Rio de Janeiro: ABRH; EDUFRJ, 1989.

CONDE F.C. *et al.* Building a 3D geomodel for water resources management: case study in the Regional Park of the lower courses of Manzanares and Jarama Rivers (Madrid, Spain). **Environmental Earth Sciences**. 2014 - Jan.

COWAN, E. J. *et al.* Practical implicit geological modelling. **Fifth International Mining Geology Conference**. Australian Institut of Mining and Metallurgy Bendigo - Victoria, 2003.

CONICELLI, B. P.; HIRATA, R. Novos paradigmas na gestão das águas subterrâneas. **Águas Subterrâneas**, 2016.

CUSTODIO, E.; LLAMAS, J. R. **Hidrologia subterrânea**. Editorial Omega. SA, Barcelona, España, 1983.

D’AFFONSECA F. M. *et al.* Combining implicit geological modeling, field surveys, and hydrogeological modeling to describe groundwater flow in a karst aquifer. **Hydrogeology Journal**. 2020 Sep - 15.

DE MESQUITA, D.C. *et al.* Estudo dos parâmetros hidrodinâmicos obtidos em ensaios de campo em itabiritos brandos da porção sudeste do quadrilátero ferrífero, MG. **Geonomos**, 2017.

DIERSCH, H. J. G., **FEFLOW Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media**, Springer Berlin Heidelberg, 2014.

DOMENICO, P.A.; SCHWARTZ, F.W. **Physical and Chemical Hydrogeology** United States of America: John Wiley & Sons, 1990.

DÖLL, P. *et al.* Impact of water withdrawals from groundwater and surface water on continental water storage variations. **Journal of Geodynamics**, v. 59, 2012.

DORR J.V.N. Physiographic, stratigraphic, and structural development of the Quadrilátero Ferrífero, Minas Gerais, USGS/DNPM. – 1969.

DUFOUR, R. M. *et al.* Pit dewatering optimisation of a 3D FEFLOW unstructured groundwater model at geologically complex Antamina mine site in Peru, Slope Stability - 2020.

EL IDRYSY, H., DE SMEDT, F. A groundwater model of the Trifa aquifer in Morocco. In MODFLOW and More 2003: **Understanding through Modeling, Conference Proceedings** – 2003.

FAMIGLIETTI, J. S. The global groundwater crisis. **Nature Climate Change**, v. 4, n. 11, p. 945, 2014.

FEITOSA, A. C. F. *et al.* **Hidrogeologia: Conceitos e aplicações**. 3ª Edição. Fortaleza: CPRM, 2008.

FETTER, C. W. **Applied Hydrogeology**. New York: Macmillan, 691 p - 1994.

FITTS, C. R. **Águas Subterrâneas**. 2ª Edição. Rio de Janeiro: Elsevier, 2015.

FREEZE, R. A., CHERRY, J. A. **Groundwater**, 604 pp, 1979.

FOSTER, S. *et al.* Groundwater quality protection: a guide for water service companies, municipal authorities, and environment agencies. **The World Bank**, 2002.

GLEESON, J. *et al.* Groundwater sustainability strategies. **Nature Geoscience**, v. 3, n. 6, p. 378, 2010.

HASSEN, I. *et al.* 3D geological modeling of the Kasserine Aquifer System, Central Tunisia: New insights into aquifer-geometry and interconnections for a better assessment of groundwater resources. **Journal of Hydrology**, v. 539, 2016.

HASSEN *et al.*, Accurate 3D Geological Modelling for a Better Assessment of Groundwater Resources: A Case Study from the Kasserine Aquifer System (KAS), Central Tunisia. **Fast Times**, volume 22, number 3 - 2017.

HELLER, L.; DE PÁDUA, V. L. **Abastecimento de água para consumo humano**. Editora UFMG, 2006.

HEATH, R.C. Basic ground-water hydrology: U.S. Geological Survey Water-**Supply Paper 2220**, 86 p - 1998.

HIRATA, R. *et al.*, Águas subterrâneas: reserva estratégica ou emergencial. In: C.E. Bicudo; J G Tundisi; M Scheuenstuhl. (Orgs.). **Águas do Brasil: análises estratégicas**. São Paulo: Instituto de Botânica, 2010, v. 1, p. 149-164.

HIRATA, R. *et al.* **As águas subterrâneas e sua importância ambiental e socioeconômica para o Brasil - 2019**.

IRITANI, M. A. **Modelação matemática tridimensional para a proteção das captações de água subterrânea**. Tese de Doutorado – Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1998.

KRESIC, N. **Hydrogeology 101, Introduction to Groundwater Science and Engineering**. Blue Ridge Press LLC, Warrenton, VA, USA, 2023.

KORKMAZ, S.; KESKIN M. Z. Numerical model of groundwater flow using MODFLOW: Application to western Bursa, Turkey. 11th World Congress on Water Resources and Environment: **Managing Water Resources for a Sustainable Future-EWRA 2019 - 2019**.

LAJAUNIE, C.; COURRIOUX, G.; MANUEL, L. Foliation fields and 3D cartography in geology: principles of a method based on potential interpolation. **Mathematical Geology**, v. 29, n. 4, 1997.

LAZARIM, H. A.; LOUREIRO, C. O. Rebaixamento das Águas Subterrâneas na Região em Torno da Jazida de Capão Xavier em Nova Lima, MG – Cenário Futuro. **II Conferência Latino Americana sobre Meio Ambiente – EcoLatina'99**, Encontro Técnico Sobre Meio Ambiente e Mineração. Belo Horizonte, MG. Outubro de 1999.

LI, PEYUE *et al.* Sources and consequences of groundwater contamination. **Archives of environmental contamination and toxicology**, v. 80, p. 1-10, 2021.

LORENSEN, W. E.; CLINE, H. E. Marchingcubes: A high resolution 3d surface construction algorithm - **SIGGRAPH Comput. Graph.** ACM, New York - NY, USA, v. 21, n. 4, p.163 –169, ago.1987.

LOBATO, L. M. *et al.* Projeto = Geologia do Quadrilátero Ferrífero - Integração e Correção Cartográfica em SIG - Belo Horizonte -Companhia de Desenvolvimento Econômico de Minas Gerais, 2005. Folha Ouro Preto. Escala 1:50.000 - 2005.

MACHADO N.; CARNEIRO M.A. U-Pb evidence of late Archean tectono-thermal activity in the southern São Francisco shield, Brazil. *Can. J. Earth Sci.* - 1992.

MAGALHÃES, C. C. de C. **Modelo hidrogeológico de fluxo do flanco leste do Sinclinal Moeda (Quadrilátero Ferrífero – MG): caracterização, impactos e perspectivas futuras para o aquífero Cauê.** Dissertação de Mestrado – Universidade Federal de Minas Gerais, 2023.

MAGNABOSCO, R. *et al.* An approach to map karst groundwater potentiality in an urban area, Sete Lagoas, Brazil, **Hydrological Sciences Journal**, 65:14, 2482-2498, 2020.

MALLANTS D., V. G, LABAT, S. Parameter values used in the performance assessment of the disposal of low-level radioactive waste at the nuclear zone Mol-Dessel–Volume 2: Annexes to the data collection forms for engineered barriers. SCK• CEN. 2003.

MARÍN-LECHADO *et al.* Modelo geológico del Acuífero de Medina del Campo a partir de inversión gravimétrica 3D. **10 Asamblea Hispano-Portuguesa de Geodesia y Geofísica – 2022.**

MAS P. *et al.* A 3D geomodel of the deep aquifers in the Orléans area of the southern Paris Basin (France). **Scientific Data.** 2022 - Dec.

MEGDAL, S. B. Invisible water: the importance of good groundwater governance and management. **Clean Water**, 2018.

MORRIS, B. L. *et al.* Groundwater and its susceptibility to degradation: a global assessment of the problem and options for management. **United Nations Environment Programme**, 2003.

MOURÃO, M. A. A. **Caracterização Hidrogeológica do Aquífero Cauê, Quadrilátero Ferrífero, MG**. Tese de Doutorado – Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental – UFMG - 2007.

NAPIER, B. **GeoVisionary: virtual fieldwork for real geologists**. V1 Magazine – Disponível em: <http://nora.nerc.ac.uk/13558/>, 2011. Acesso em: 10 outubro 2018.

NOCE, C.M. **Geocronologia dos eventos magmáticos, sedimentares e metamórficos na região do Quadrilátero Ferrífero, Minas Gerais**. Inst. de Geociências, Universidade de São Paulo, São Paulo, Tese de Doutorado, 1995,

PINDER, G. F.; GRAY, W. G. **Finite element simulation in surface and subsurface hydrology**. Elsevier, 2013.

RAPOSO, F. O. **Formações Ferríferas e Metassedimentos Químicos de Áreas Selecionadas do Quadrilátero Ferrífero e seu papel como possíveis fontes dos conglomerados da área**. 1996. 136 f. Dissertação de Mestrado – Departamento de Geologia, Instituto de Geociências, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 1996.

REBOUÇAS, A. C. *et al.* **Águas Doces no Brasil 3º ed.** São Paulo: **Escrituras**, 2006.

REMSON, I. *et al.* **Numerical Methods in Subsurface Hydrology**. **Wiley-Interscience, John Wiley & Sons, Inc.**, New York, 389 f, 1971.

RENGER F.E. Evolução sedimentar do Supergrupo Minas: 500 ma. de registro geológico no Quadrilátero Ferrífero, Minas Gerais, Brasil. **Geonomos**, 1994.

RENZ, ALEXANDER. **Modelling Groundwater Flow in Hard Rock Environments – DHI Workshop** – Prague, Czech Republic - 2019.

RICHARDS, L. A. **Capillary Conduction of liquids through porous mediums**. **Physics**, 1, 1931.

ROSIÈRE, C. A.; CHEMALE, J. R. F. Itabiritos e minérios de ferro de alto teor do Quadrilátero Ferrífero - uma visão geral e discussão. **Geonomos** – 2013.

RUBIO, R. F. COPASA/MBR - Projeto Capão Xavier - Estudo Hidrológico Ambiental. FRASA - Engenheiros Consultores, S.L. Relatório Interno – 1998.

SIDIROPOULOS P. *et al.* Optimal management of an overexploited aquifer under climate change: the Lake Karla case. **Water Resour Manag** – 2013.

SCANLON, B. R. *et al.* Global water resources and the role of groundwater in a resilient water future. **Nature Reviews Earth & Environment**, p. 1-15, 2023.

SCHLUMBERGER. **Estudo Hidrogeológico Coca-Cola FEMSA – Unidade Itabirito** – Relatório preliminar, 2017.

SCHUSTER, H. *et al.* Estudos hidrogeológicos do aquífero Urucuia no oeste baiano para obtenção de parâmetros nas outorgas de mananciais subterrâneos. **Águas Subterrâneas** - 2002.

SEA – **Servicio de Evaluación Ambiental. Guía para el uso de Modelos de Águas Subterrâneas en el SEIA**, 2012.

SEYF-LAYE, A. M., *et al.* Groundwater flow and contaminant transport modeling applications in urban area: scopes and limitations. **Environmental Science and Pollution Research** 19 – 2012.

SILVA, A. M. **Geologia e petroquímica dos enxames de diques máficos do Quadrilátero Ferrífero e Espinhaço Meridional, MG**. Dissertação de Mestrado - Instituto de Geociências, UNB, Brasília, 1992.

SILVA RG, GOMES CJS. Análise da deformação na porção centro sul do Sinclinal Moeda, Quadrilátero Ferrífero, Minas Gerais. Ouro Preto: Geo.br - 2001.

SILVA, A. B. Avaliação da utilização de modelos numéricos de simulação em meio aquífero fraturado. **Anais do 8o Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas** - ABAS. Recife - PE. pp. 298- 307 – 1994.

ŠIMŮNEK, J. *et al.* HYDRUS software package for simulating the two - and three-dimensional movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in variably Saturated Porous Media. **Technical Manual Version 2.0**, edited by R. University of California Riverside, CA – 2012.

SOUZA, P. C.; MÜLLER, G. Primeiras Estruturas Algais Comprovadas na Formação Gandarela. Quadrilátero Ferrífero: **Revista Escola de Minas Ouro Preto**, 2, 13-21 – 1984.

SOPHOCLEOUS, M. Global and regional water availability and demand: prospects for the future. **Natural Resources Research** 13 – 2004.

TODD, D. K. Edition I. **Groundwater hydrology. Hoboken**. Willey – 1959.

THORNTON, J. M. *et al.* A 3D geological model of a structurally complex Alpine region as a basis for interdisciplinary research. **Scientific data** 5.1 – 2018.

UNESCO - The United Nations Educational, Scientific, and Cultural Organization - Groundwater: Making the invisible visible in 2022 and beyond - UNESCO - 2022.

U.S. GEOLOGICAL SURVEY, National Water Information System data available on the World Wide Web (Water Data for the Nation), accessed November 23, 2023.

VAN DER GUN, J. Groundwater resources sustainability. **Global groundwater**. Elsevier, 2021.

VENTURA, L. C.; BACELLAR, L. A. P. Influência de filitos no padrão de fluxo e na estabilidade de taludes de cavas a céu aberto. **Geotecnia** – 2011.

WANG, H. F.; ANDERSON, M. P. **Introduction to groundwater modeling: Finite Difference and Finite Element Methods**. Academic Press, 1982.

WANG B., MEI G., XU N. Method for generating high-quality tetrahedral meshes of geological models by utilizing CGAL. **Methods X**. 2020 - Jan.

WINTER, T. C. *et al.* **GroundWater and Surface Water: A Single Resource** - US Geological Survey - 1998.

WITTEN, J., *et al.* A Guide to Wellhead Protection. Planning Advisory Service Report Number 457/458. Chicago, IL.: **American Planning Association Press** - 1995.

WOESSNER AND POETER, **Hydrogeologic properties of earth materials and principles of groundwater flow** - Guelph, Ontario, Canada - 2020.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. The finite element method: basic formulation and linear problems. **London: McGraw-Hill**, 1989.