



MODELO MATEMÁTICO DE ESTUDOS DE CONTAMINAÇÃO DE SISTEMAS AQUÁTICOS

DOI: 10.37702/2175-957X.COBENGE.2025.6069

Autores: ANA CLARA JULIATO COUTINHO, ELAINE CRISTINA CATAPANI POLETTI

Resumo: Este trabalho consiste no estudo de modelo matemático aplicado ao estudo de carga hidráulica de aquíferos subterrâneos com abordagem de métodos numéricos para construção de solução aproximada. O modelo a ser considerado baseia-se na combinação da Lei de Darcy, que descreve o fluxo de água através de meio poroso, com a equação da continuidade aplicada a estudos relacionados à velocidade de fluido em uma área de escoamento. A solução numérica do problema será abordada em etapas, iniciando-se representação matemática do problema e dedução das equações, estudos dos Métodos de Diferenças Finitas para a solução das equações, discretização do problema, e finalmente, a elaboração dos códigos para simulações computacionais.

Palavras-chave: Poluição de Recursos Hídricos, Métodos Numéricos, Modelagem Matemática

MODELO MATEMÁTICO DE ESTUDOS DE CONTAMINAÇÃO DE SISTEMAS AQUÁTICOS

1 INTRODUÇÃO

Os modelos matemáticos constituem ferramentas fundamentais para a representação e análise de sistemas complexos, permitindo a previsão de eventos e o estudo de estratégias de ação de preservação e mitigação de sistemas em diversas áreas do conhecimento. No âmbito dos recursos hídricos, a modelagem matemática desempenha um papel importante de compreensão de processos hidrodinâmicos e de avaliação de impactos ambientais, fornecendo subsídios para a gestão sustentável desses sistemas.

No tocante às águas subterrâneas, a modelagem matemática possibilita análises sobre condutividade hidráulica, alterações e potenciais impactos decorrentes de intervenções, inclusive antrópicas e acidentes ambientais, com previsão de eventos críticos, como contaminações e rebaixamentos do lençol freático. Essa abordagem viabiliza simulações e permite estudos e reflexos de medidas preventivas e mitigadoras.

A contaminação das águas subterrâneas representa uma grande preocupação e está associada à diversas fontes, como vazamentos e falhas na infraestrutura de armazenamento, atividades agrícolas, industriais e domésticas. O uso indiscriminado de agrotóxicos e fertilizantes no setor agrícola, bem como o descarte inadequado de resíduos industriais e domésticos, pode comprometer significativamente a qualidade desse recurso hídrico.

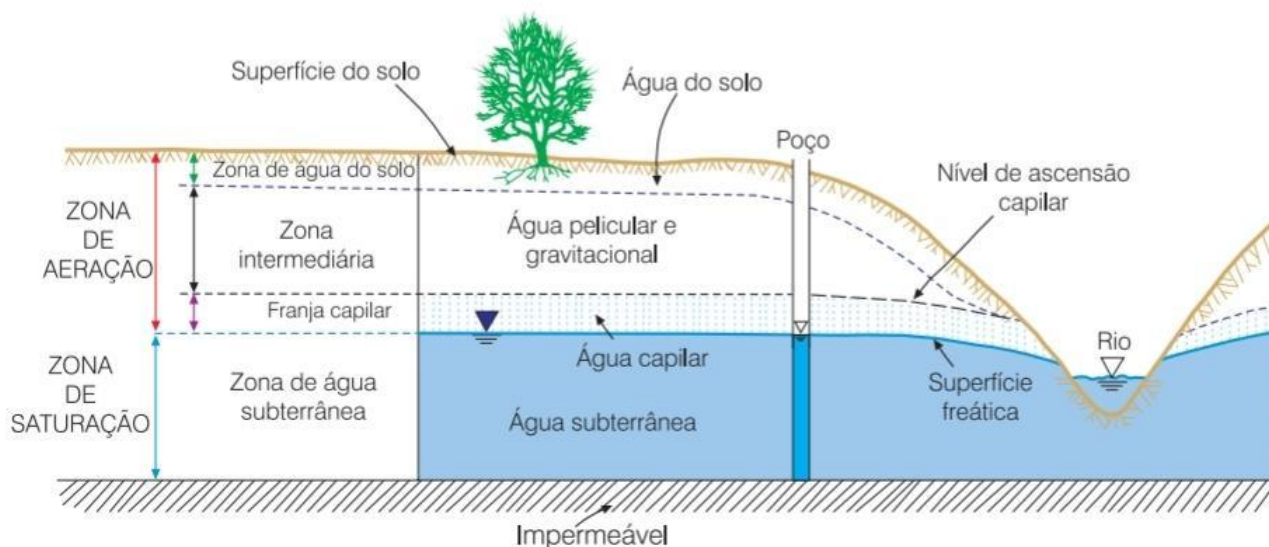
Dado que mais da metade da população mundial depende das águas subterrâneas para o abastecimento de água potável, torna-se essencial adotar uma abordagem de gestão fundamentada em estudos científicos. A degradação desses sistemas não apenas compromete a qualidade da água consumida pela população, mas também impacta o desenvolvimento socioeconômico de diversas regiões, podendo gerar danos ambientais de grande escala. Nesse sentido, estudos voltados à carga hidráulica e à qualidade da água subterrânea são essenciais para embasar políticas públicas e ações voltadas à preservação desse recurso estratégico. É nesse contexto que se insere o presente trabalho, cujo objetivo é estudar as águas subterrâneas por meio da modelagem matemática, com a busca por soluções analítica e numérica, possibilitando análises e discussões sobre carga hidráulica e fatores ambientais que influenciam a qualidade e a disponibilidade do recurso, motivadas por simulações computacionais e geração de cenários hipotéticos de estudo.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A água, essencial para a manutenção da vida, circula entre a atmosfera, a crosta terrestre e os oceanos através do ciclo hidrológico. Após a precipitação, uma parte da água é absorvida pela superfície terrestre, uma parte escoia superficialmente até alimentar lagos e rios e outra parte, por fim, é utilizada por plantas e animais para subsistência, mesmo que em menor quantidade (FEITOSA et al., 2008).

Da parte que é absorvida pela superfície terrestre, uma porção se acumulará formando reservas de água, denominadas águas subterrâneas, conforme Figura 1.

Figura 1 – Divisão das zonas abaixo da superfície terrestre.



Fonte: Feitosa et al., 2008

Dentre os tipos de armazenamento de água, destacam-se os aquífugos, que são composições geológicas impermeáveis, incapazes de armazenar e permitir o fluxo da água; os aquícludes, formados por rochas que foram anteriormente submetidas à compactação, possuem porosidade efetiva e condutividade hidráulica muito baixas; os aquitardos, que possuem pouca capacidade de armazenamento e circulação lenta de água e, finalmente, os aquíferos, objeto de estudo nesta pesquisa, que são formações geológicas subterrâneas que armazenam e permitem o fluxo de água (WENDLAND, 2023).

Os aquíferos possuem alta condutividade hidráulica e alta porosidade, resultando em uma grande capacidade de armazenamento e circulação de água (WENDLAND, 2023).

Dentre algumas das características presentes em um aquífero, destacam-se a porosidade, a condutividade hidráulica e o teor de umidade. A porosidade é dada pela relação entre o volume total de um solo e pelo seu volume de vazios, considerando que, no volume total, é contabilizado o volume sólido e de vazios; a condutividade hidráulica que é uma importante propriedade que rege o movimento da água, ou de qualquer outro fluido no solo, e está relacionada à facilidade com que um líquido flui em um solo, por meio de seus vazios e o teor de umidade relacionado ao volume de água presente no solo (FREEZE; CHERRY, 1079).

Características de diâmetro médio do solo, esfericidade e arredondamento dos grãos, distribuição e a natureza do seu empacotamento influenciam a condutividade hidráulica do meio. Para areias e cascalhos, a condutividade hidráulica é maior do que para argilas e rochas (FREEZE; CHERRY, 1079).

Os aquíferos também podem ser classificados como livres ou confinados e a pressão à qual o aquífero está submetido é de extrema importância para essa distinção. Em aquíferos confinados, a pressão exercida no topo do aquífero é maior que a pressão atmosférica, enquanto os aquíferos livres encontram-se sob pressão igual à atmosférica.

Em aquíferos livres, o limite superior é a superfície de saturação.

Quando classificados como confinados, os aquíferos podem se subdividir, ainda, em confinados drenantes e não drenantes, com base na permeabilidade de suas camadas limítrofes.

Os aquíferos confinados não drenantes possuem as camadas superior e inferior impermeáveis. Podem ser chamadas, também, de jorrantes. Os aquíferos confinados drenantes possuem ao menos uma das camadas permeável ou semipermeável, permitindo, assim, o fluxo de água através das camadas superior e/ou inferior.

A depender do tipo de aquífero a ser analisado, diferentes condições são empregadas para a criação do modelo matemático que o descreva com maior precisão. No caso deste trabalho, volta-se a atenção para aquíferos confinados.

Como sabido, a qualidade das águas subterrâneas tem sido cada vez mais ameaçada pelo aumento da poluição, comprometendo sua disponibilidade e afetando o equilíbrio dos ecossistemas naturais. Segundo a literatura, essas águas representam uma fração significativa das reservas de água doce acessíveis para consumo no planeta, desempenhando um papel fundamental no abastecimento de áreas urbanas e rurais, além de contribuírem para a manutenção dos fluxos de rios e lagos (DAO et al., 2024).

Embora estejam relativamente protegidos por camadas geológicas, tais sistemas não estão isentos de contaminação. Entretanto, sua poluição, muitas vezes, passa despercebida devido à ausência de sinais visíveis, dificultando a detecção precoce e a implementação de medidas de controle (HIRATA et al., 2019).

Muitas formas de contaminação desses sistemas estão associadas ao descarte inadequado de resíduos sólidos, especialmente em aterros sanitários mal gerenciados e depósitos clandestinos de lixo. Esses locais favorecem a infiltração de substâncias nocivas no solo por meio do processo de percolação, comprometendo a qualidade das águas subterrâneas (ALVES, 2023).

Processos naturais de recarga e descarga também provocam interferências que afetam sua qualidade e disponibilidade. Para garantir a eficácia das estratégias de mitigação e remediação da contaminação, é essencial a realização de avaliações e monitoramentos contínuos, fornecendo subsídios científicos para a tomada de decisão e, nesse contexto, a modelagem matemática e as simulações computacionais são importantes ferramentas de análise e simulação de cenários, bem como apoio de planejamento de estratégias de preservação dos recursos hídricos.

3 METODOLOGIA

Com os objetivos do trabalho relacionados ao estudo de conservação das águas subterrâneas, de modelagem matemática dos fenômenos ambientais, este trabalho se desenvolveu com a formulação do modelo matemático que estuda a taxa de variação da carga hidráulica, em função do espaço e do tempo, de aquíferos confinados.

Realizados os procedimentos de modelamento matemático, buscou-se pela resolução analítica da equação e sua formulação numérica para implementação computacional e geração de cenários.

Para tanto, estudos teóricos acerca das águas subterrâneas, bem como de modelamentos matemáticos foram necessários.

A resolução analítica da equação foi possível a partir de estudos sobre equações diferenciais parciais, com aplicação do método de separação de variáveis e a formulação de aproximação numérica, a partir de estudos sobre o Método de Diferenças Finitas.

A implementação computacional foi realizada em ambiente Matlab e tornou possível o desenvolvimento de simulações computacionais que fomentaram análises e discussões sobre o modelo.

4 MODELAGEM MATEMÁTICA

O estudo de carga hidráulica de aquíferos subterrâneos confinados, de fluxo laminar, através de abordagem de modelo matemático, se dá através da combinação da Lei de Darcy com a Equação da Continuidade.

A Lei de Darcy, descoberta por Henry Darcy em 1856, é utilizada para descrever o fluxo de fluido através de meios porosos, incluindo águas subterrâneas (WENDLAND, 2023), (WOESSNER; POETER, 2020) e é dada pela Equação (1):

$$Q = -K \frac{dh}{dl} A \quad (1)$$

onde:

- Q representa a vazão volumétrica (m^3/s);
- K indica a condutividade hidráulica, é a constante de proporcionalidade que reflete a facilidade com que a água flui através de um material (m/s);
- $\frac{dh}{dl}$ é a taxa de variação de carga hidráulica em função do trecho, e
- A representa a área da seção transversal do fluxo perpendicular à direção do fluxo (m^2).

Esta lei descreve como a altura manométrica, os gradientes hidráulicos e a condutividade hidráulica estão ligados para quantificar e descrever o fluxo das águas subterrâneas.

No tocante à Equação da Continuidade, ela é utilizada para garantir que as vazões de entrada e saída do aquífero sejam iguais (FREEZE; CHERRY, 1979). Assim, dado um volume de controle $V = \Delta x \Delta y \Delta z$, o balanço de massa é dado *pelo que entra menos o que sai mais (ou menos) o ganho (ou a perda)*.

Matematicamente sua forma mais geral é dada pela Equação (2):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla(\rho q) \pm \rho Q \quad (2)$$

onde:

- ρ é a densidade do fluido (kg/m^3);
- $q = -K \frac{dh}{dl}$ que descreve como a altura manométrica, os gradientes hidráulicos e a condutividade hidráulica estão ligados para quantificar e descrever o fluxo das águas subterrâneas;
- $\nabla(\rho q)$ representa divergência do fluxo e massa.

O modelo matemático que, estuda a taxa de variação da carga hidráulica h em função do tempo t em aquíferos confinados, é governado pela equação da difusão da carga hidráulica, também chamada de equação da água subterrânea, dado pela Equação (3):

$$S \frac{\partial h}{\partial t} = T \nabla^2 h \quad (3)$$

onde:

- $h(x, y, z, t)$ representa a carga hidráulica (altura piezométrica);
- S indica o armazenamento específico (sem unidade);
- T é transmissividade do aquífero (m^2/s);
- $\nabla^2 h$ é o operador Laplaciano em coordenadas espaciais;
- $t > 0$ (em s) indica o tempo e $0 < x < L$ (em m) o domínio espacial.

Considerando a formulação da equação para estudo da carga hidráulica propagada em aquífero confinado ao longo da direção x devido à difusão hidráulica, com S e T constantes, condições de contorno de Dirichlet homogêneas, e condição inicial $h(x, 0) =$

$\delta(x), 0 < x < L$, a solução analítica do problema é dada pela Equação (4) (BOYCE; DIPRIMA; MEADE, 2020):

$$h(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \frac{T}{S} t} \quad (4)$$

com: $B_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$.

Com vistas à resolução aproximada do problema e implementação computacional, buscou-se, através do Método de Diferenças Finitas, a discretização do modelo em suas variáveis espacial, x , e temporal, t (FONTANA, 2019).

Através da aplicação do método explícito avançado para a variável temporal t , a aproximação da derivada temporal $\frac{\partial h}{\partial t}$ no ponto i , entre os tempos $t^{(n)}$ e $t^{(n+1)}$ é dada na Equação (5):

$$\frac{\partial h}{\partial t} \approx \frac{h_i^{(n+1)} - h_i^{(n)}}{\Delta t} \quad (5)$$

onde:

- $h_i^{(n+1)}$ indica o valor aproximado da função h no ponto i no tempo $(n + 1)$;
- $h_i^{(n)}$ indica o valor aproximado da função h no ponto i no tempo (n) ;
- Δt representa o incremento no tempo entre os instantes (n) e $(n + 1)$.

Considerando a ordem do esquema explícito do método numérico para a variável temporal (primeira ordem), o erro de truncamento local é $O(\Delta t)$.

Para a variável espacial x , com passo $\Delta x = x_{i+1} - x_i$, a aproximação de $\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$ se dá na forma da Equação (6):

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \approx \frac{h_{i+1}^{(n)} - 2h_i^{(n)} + h_{i-1}^{(n)}}{(\Delta x)^2} \quad (6)$$

O erro de truncamento local do método de diferenças centradas para a variável espacial é da ordem de $O(\Delta x^2)$.

Substituindo a Equação (5) e a Equação (6), de aproximação de $\frac{\partial h}{\partial t}$ e $\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$, na equação diferencial proposta, Equação (3), tem-se a Equação (7), denominada solução aproximada do modelo:

$$h_i^{(n+1)} = h_i^{(n)} + \Delta t \cdot \frac{T}{S} \cdot \left(\frac{h_{i+1}^{(n)} - 2h_i^{(n)} + h_{i-1}^{(n)}}{\Delta x^2} \right) \quad (7)$$

onde:

- $h_{i+1}^{(n)}$ representa o valor aproximado da função h no ponto $i + 1$ no tempo (n) ;
- $h_{i-1}^{(n)}$ representa o valor aproximado da função h no ponto $i - 1$ no tempo (n) .

O critério de estabilidade do método é $\alpha = \frac{T\Delta t}{S(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2}$.

As soluções analítica e numérica foram implementadas computacionalmente em ambiente Matlab, de acordo o algoritmo descrito no Quadro 1.

Quadro 1. Algoritmo

1. Definir os parâmetros físicos do modelo;
2. Definir malha espacial e temporal indicando vetor de posições: x e t ; o número de pontos no espaço: N_x e tempo N_t e o espaçamento domínio dx e tempo dt , obedecendo o critério de estabilidade;
3. Definir condição inicial (pulso no centro) dada pela função Delta de Dirac;
4. Para solução numérica via diferenças finitas explícitas: inicializar matriz h_{num} , aplicar condição inicial, fazer a iteração no tempo e atualizações;
5. Para solução analítica via série de Fourier: inicializar matriz h_{analit} , calculando para cada tempo n e termo m da série o autovalor e o coeficiente de Fourier, atualizando a solução analítica;
6. Plotar $h_{num}(x, t_{final})$ e $h_{analit}(x, t_{final})$ no mesmo gráfico

Os gráficos da solução analítica e numérica seguem apresentados na Figura 2, onde adotou-se, hipoteticamente, comprimento $L=1$ m, coeficiente de transmissividade do aquífero $T=0,001$ m²/s, armazenamento específico $S=0,0001$, $N_x=100$, $N_t=500$, condição inicial: função delta de Dirac $h(x,0)=f(x)=\delta(x-x_0)$ e condições de contorno de Dirichlet homogêneas.

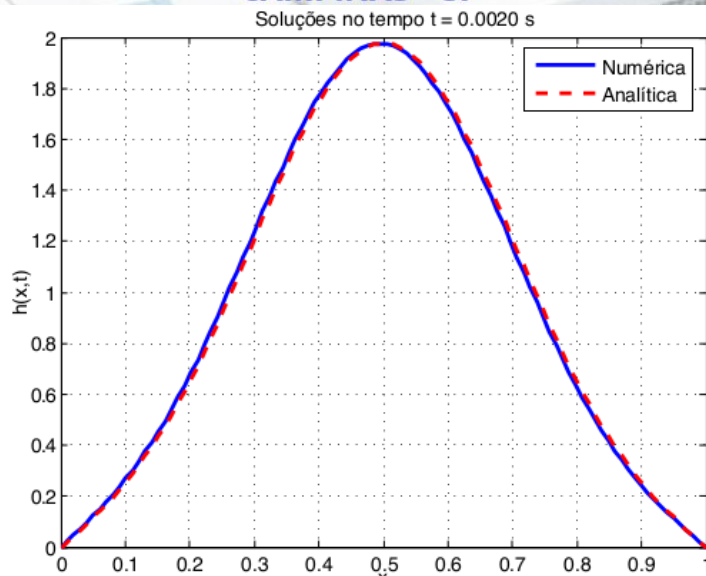
Como pode ser observado no gráfico, Figura 2, as soluções apresentam uma evolução difusiva, com pulso inicial na região central, se espalhando ao longo do tempo, com a altura do pico diminuindo e a largura aumentando, mantendo a conservação da massa.

Verifica-se, também, a forma geral das curvas, que se mantém semelhante entre as soluções, com pequena diferença, conforme esperado.

No tocante à solução analítica, representada em linha vermelha tracejada na Figura 2, tem-se a solução exata do modelo, indicada na Equação (3) e é importante ressaltar que seu desenvolvimento requer a abordagem de conceitos complexos de matemática, vinculados à resolução de equações diferenciais parciais.

Em linha contínua azul, na Figura 2, encontra-se representada a solução aproximada do modelo, que é bem adequada para simulações computacionais e útil em casos em que não existe a solução analítica. Entretanto, ressalta-se que tal solução está sujeita a erros numéricos e dependente do tamanho da malha: quanto menor o tamanho do passo dx , no domínio, e dt , no tempo, melhor a aproximação, mas os cálculos computacionais são mais lentos.

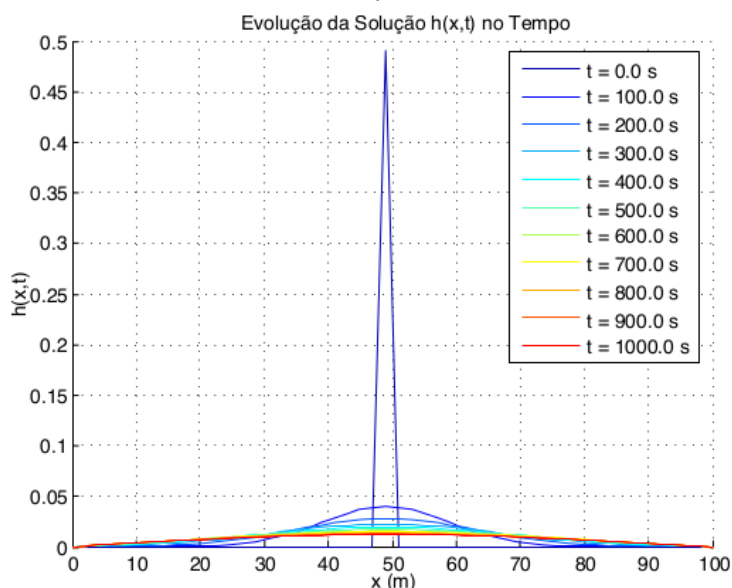
Figura 2 – Soluções analítica e numérica da Equação (3) implementada em ambiente Matlab.



Fonte: Da autora

Com vistas à simulação de um cenário um pouco mais próximo do real, tomou-se a simulação apresentada pela solução numérica, Figura 3, com as mesmas condições iniciais e de contorno adotadas inicialmente, assumindo como parâmetros o comprimento $L=100$ m, o coeficiente de transmissividade do aquífero $T=0,00005$ m²/s (referente a aquífero de aproximadamente 50m de espessura, em meio caracterizado por pouca porosidade e condutividade hidráulica baixa, de 0,000001m/s) e o armazenamento específico $S=0,0001$ (referente a aquíferos confinados), que representam as três principais características dos aquíferos confinados.

Figura 3 – Evolução de solução numérica ao longo do tempo.



Fonte: Do autor

Desta forma, verifica-se, na Figura 3, como o pulso localizado na região central do domínio físico se alarga e se achata, representando o efeito da difusão. Também se verifica no gráfico a simetria em torno da região central, como esperado em virtude das condições de contorno homogêneas e do pulso centrado.

Importante ressaltar que a equação de difusão conserva a massa total, pois não há fonte ou sumidouro. Portanto, é esperado que a área sob a curva se conserve também.

A cada curva plotada (para cada valor de t), verifica-se um perfil de onda mais larga e mais baixa, indicando o espalhamento da massa.

5 CONCLUSÃO

Estudos de modelagem matemática aplicados às águas subterrâneas são ferramentas relevantes que favorecem compreensões e previsões de impactos ambientais. Ao combinar teoria, simulação e prática, tais abordagens fomentam discussões e subsidiam análises a favor da conservação dos recursos hídricos.

A partir do estudo realizado, foi possível representar fenômenos ambientais complexos, como fluxo subterrâneo e o transporte de poluentes de aquíferos, baseado na equação diferencial parcial da difusão, com estudos teóricos e resoluções analíticas.

A resolução numérica do problema possibilitou a construção de soluções aproximadas com simulações computacionais e favoreceu o teste de diferentes parâmetros, de fomento à análise do modelo, dentro de um contexto de estudo e discussões sobre impacto ambiental. Essas simulações também possibilitaram comparações entre a solução analítica e numérica. Também foi possível verificar, por meio dessas simulações, o comportamento da difusão, simétrica em torno do ponto de aplicação da fonte, como previsto pela natureza da equação e da condição inicial.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Universidade Estadual de Campinas e ao CNPq pelo suporte e confiança no projeto.

REFERÊNCIAS

ALVES, J. B.; DOS SANTOS, M. M.. Relações entre contaminação de aquíferos subterrâneos no semiárido e disposição inadequada de resíduos sólidos. **Brazilian Journal of Development**, Curitiba, v.9, n.5, p. 14810-14827, 2023.

BONGANHA, C. A.; RIBEIRO, M. L.; GUIGUER, N.. A utilização da modelagem matemática como ferramenta para a gestão integrada e sustentável de recursos hídricos subterrâneos: uma proposta para o município de Araraquara-SP. **Águas Subterrâneas**, [S.l.], n. 1, 2005. Disponível em: <https://aguassubterraneas.abas.org/asubterraneas/article/view/23189>. Acesso em: 17 jul. 2025.

BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C.; MEADE, D. B.. **Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno**. 11. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2020.

DAO, P. U. *et al.* The impacts of climate change on groundwater quality: A review. **Science of The Total Environment**, Hong Kong, v.912, art. 169241, 2024. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0048969723078713>. Acesso em: 4 abr. 2024.

FETTER, C. W.. **Applied hydrogeology**. 4. ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2001.

FEITOSA, F. A. C. *et al.* **Hidrogeologia: conceitos e aplicações**. 3. ed. Rio de Janeiro: CPRM. 2008.

FONTANA, É.. **Introdução ao Método de Diferenças Finitas com Aplicações em Engenharia Química**. Curitiba: Universidade Federal do Paraná UFPR, Departamento de Engenharia Química. 2019.

FREEZE, A.; CHERRY, J. A.. **Groundwater**. 1. ed. New Jersey: Prentice-Hall, 1979.

HIRATA, R. *et al.* **A revolução silenciosa das águas subterrâneas no Brasil: uma análise da importância do recurso e os riscos pela falta de saneamento**. São Paulo: Instituto Trata Brasil. 2019. Disponível em: <https://repositorio.usp.br/directbitstream/e7d9e125-7b22-4706-915b-a397f8a91784/2928658.pdf>. Acesso em: 20 mai. 2024.

MUSTAFA, J. S.; MAWLOOD, D. K.. Mathematical modelling for groundwater management for multilayers aquifers (Erbil basin). **Ain Shams Engineering Journal**, [S.l.], v. 15, 2024.

WENDLAND, E. C.. **Modelos Matemáticos e Métodos Numéricos em Águas Subterrâneas**. 2023. Monografia. Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023. Disponível em: <https://repositorio.usp.br/item/002509620>. Acesso em: 4 abr. 2024.

WOESSNER, W. W.; POETER, E. P.. **Hydrogeologic Properties of Earth Materials and Principles of Groundwater Flow**. Ontario: The groundwater project, 2020.

MATHEMATICAL MODEL FOR STUDIES OF CONTAMINATION IN AQUATIC SYSTEMS

Abstract: *This work aims to study a mathematical model focused on analyzing hydraulic heads in groundwater aquifers, using numerical methods to obtain approximate solutions. The proposed model is based on the combination of Darcy's Law, which describes water flow through porous media, and the continuity equation, applied to the analysis of fluid velocity in flow regions. Once the model is established, both an analytical solution and a numerical approach using the Finite Difference Method are proposed. Finally, the model is implemented computationally through the development of simulation codes, followed by an analysis of the obtained results.*

Keywords: *mathematical modeling, water resources pollution, aquifers and numerical methods.*

