



**UNIVERSIDADE CATÓLICA DE PERNAMBUCO - UNICAP  
PRÓ - REITORIA ACADÊMICA - PRAC  
COORDENAÇÃO GERAL DE PÓS - GRADUAÇÃO  
MESTRADO EM DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS AMBIENTAIS**

**MODELOS MATEMÁTICOS PARA DISPERSÃO DE POLUENTES:**

**Aplicação ao Estudo da Bacia Hidrográfica Subterrânea  
do Aquífero Boa Viagem**

**Ormiro Joaquim de Carvalho Filho**

**ORIENTADOR: Prof. Dr. Emerson Lima**

**Recife**

**2009**

CARVALHO FILHO, Ormiro Joaquim de. MODELOS MATEMÁTICOS PARA DISPERSÃO DE POLUENTES:  
Aplicação ao Estudo da Bacia Hidrográfica Subterrânea do Aquífero Boa Viagem.

**Ormiro Joaquim de Carvalho Filho**

**ORIENTADOR: Prof. Dr. Emerson Lima**

**MODELOS MATEMÁTICOS PARA DISPERSÃO DE POLUENTES:  
Aplicação ao Estudo da Bacia Hidrográfica Subterrânea  
do Aquífero Boa Viagem**

**Dissertação submetida ao Corpo Docente do  
Mestrado da Universidade Católica de  
Pernambuco - UNICAP, orientado pelo Prof.  
Dr. Emerson Lima, como parte dos requisitos  
necessários à obtenção do grau de Mestre em  
Desenvolvimento de Processos Ambientais.**

**Área de Concentração: Desenvolvimento em  
Processos Ambientais**

**ORIENTADOR: Prof. Dr. Emerson Lima**

**RECIFE  
2009**

C331m

Carvalho Filho, Ormiro Joaquim de

Modelos matemáticos para dispersão de poluentes : aplicação ao estudo da Bacia Hidrográfica Subterrânea do Aquífero Boa Viagem / Ormiro Joaquim de Carvalho Filho ; orientador Emerson Lima, 2009. 96 f. : il.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Católica de Pernambuco - UNICAP. Pró-reitoria Acadêmica. Coordenação Geral de Pós-graduação. Curso de Mestrado em Desenvolvimento de Processos Ambientais, 2009.

1. Hidrologia - Boa Viagem (Recife, PE). 2. Aquífero - Poluição - Boa Viagem (Recife, PE). 2. Simulação (Computadores) - Modelos matemáticos. Águas Subterrâneas - Poluição - Boa Viagem Recife, PE).

CDU 556.3(81)

## **COMISSÃO EXAMINADORA**

**Aprovada por:**

**Prof. Dr. Emerson Lima**  
**(Orientador – Dr. – UNICAP)**

---

**Prof. Dr. Antônio Mendes da Silva Filho**  
**(Examinador interno – Dr. – UNICAP)**

---

**Prof. Dr. Sílvio de Barros Melo**  
**(Examinador externo – Dr. – UFPE)**

---

**Dedico** este trabalho à minha mãe e ao meu pai que, mesmo ausente, deixaram-me o ensinamento de que devemos correr atrás dos nossos sonhos.

A minha esposa e as três filhas, que tantas vezes ficaram sem a minha presença.

Aos meus irmãos que me incentivam sempre.

## **AGRADECIMENTOS**

Ao Nosso Deus pela oportunidade de existir e estudar os seus feitos.

Aos meus pais, a minha esposa e filhas e irmãos que sempre me apoiaram e colaboraram para o sucesso desse estudo.

A meu orientador Prof. Dr. Emerson Lima, pelas valiosas lições, profissionalismo, dedicação e amizade, fundamental no desenvolvimento da dissertação.

Ao Prof. Dr. Francisco Madeiro pela colaboração nas análises em sala de aula, esclarecimentos e orientações referentes aos trabalhos realizados.

Aos Profs. Dr. Valdemir Alexandre dos Santos, Eliane Cardoso de Vasconcelos, Galba Maria de Campos Takaki e Clarissa Daisy Costa Albuquerque pelo incentivo no mestrado.

Aos meus colegas de mestrado Ridelson, Francisco, Cynthia e Adamares pela colaboração durante o curso.

A todos que direta ou indiretamente contribuíram para o desenvolvimento deste trabalho.

## SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS.....	5
SUMÁRIO.....	6
LISTA DE FIGURAS.....	8
LISTA DE GRÁFICOS.....	9
LISTA DE TABELAS.....	10
LISTA DE ABREVIATURAS.....	11
RESUMO.....	12
ABSTRACT.....	13
CAPÍTULO I	
1.1 Introdução.....	15
1.2 Objetivos.....	19
1.2.1 Objetivo Geral.....	19
1.2.2 Objetivos Específicos.....	19
1.3 Caracterização da Área Estudada.....	19
1.3.1 Crescimento Demográfico: Ocupação Urbana e Demanda Hídrica.....	20
1.3.2 Caracterização Fisiogeográfica.....	23
1.4 Caracterização Hidrogeológica do Aquífero Boa Viagem.....	29
1.4.1 Conhecimentos Anteriores.....	29
1.4.2 Características Dimensionais e Composicionais.....	30
1.4.3 Vulnerabilidade do Aquífero Boa Viagem.....	32
1.5 Revisão Bibliográfica.....	33
1.5.1 Aplicação da Modelagem Matemática em Águas Subterrâneas.....	34
1.6 Referências Bibliográficas.....	39
CAPÍTULO II	
RESUMO.....	45
ABSTRACT.....	46
Introdução.....	47
2.1 Materiais e Métodos.....	47
2.1.1 Definição de Equações Diferenciais.....	47
2.1.2 Resolvendo Equações Diferenciais.....	50
2.1.3 Equação do Decaimento Radioativo.....	51
2.1.4 Movimento Oscilatório.....	54
2.2 Métodos Numéricos para Equações Diferenciais.....	58

2.2.1	Métodos de Euler.....	58
2.2.2	Métodos de Runge-Kutta.....	60
2.3	Equações Diferenciais Parciais.....	64
2.3.1	Tipos de Equações Diferenciais Parciais de 2ª Ordem - EDP`s.....	65
2.3.2	Definição dos Tipos de Equações Diferenciais Parciais de 2ª Ordem.....	65
2.3.3	Diferenças Finitas na Resolução de Equações Diferenciais Parciais.....	68
2.3.4	Diferenças Finitas na Resolução de Equações de Difusão de Poluentes.....	72
2.3.5	Modelo Simplificado de Aquífero Subterrâneo.....	73
2.3.6	Simulação Numérica.....	74
2.4	Resultados e Discussão.....	84
2.4.1	Conclusões.....	88
2.5	Referências Bibliográficas.....	89
2.6	Anexos.....	90

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Distribuição da água no planeta.....	16
Figura 2	Região Metropolitana do Recife.....	20
Figura 3	Perfil mostrando o processo de contaminação das águas subterrâneas pelos líquidos percolados nos resíduos.....	21
Figura 4	Classificação quanto à criticidade – Cenário 2025.....	22
Figura 5	Demanda total de Água em Pernambuco.....	23
Figura 6	Mapa Geológico do Recife e Adjacências.....	28
Figura 7	Esboço Litoestrutural do município do Recife .....	28
Figura 8	Localização do Aquífero Boa Viagem.....	31
Figura 9	Mapa de Vulnerabilidade Natural das Águas Subterrâneas no Aquífero Boa Viagem, no Município de Recife.....	33
CAPÍTULO II		
Figura 1	Detalhe do arranjo experimental nas situações simuladas numericamente.....	75
Figura 2	Contaminação ao longo do tempo.....	75
Figura 3	Ilustração do comportamento ao longo do tempo de um evento de contaminação em dois pontos antípodas.....	77
Figura 4	Primeira situação de descarte.....	80
Figura 5	Ilustração do comportamento ao longo do tempo de um evento de contaminação em dois pontos antípodas.....	82
Figura 6	Caixa de vidro para a simulação do experimento.....	85
Figura 7	Localização dos pontos no aquífero artesanal – 1 .....	86
Figura 8	Localização dos pontos no aquífero artesanal - 2.....	86
Figura 9	Passo inicial, onde colocamos o “poluente”.....	87
Figura 10	Passo onde o “poluente” se dispersa no ambiente.....	87
Figura 11	Vista por baixo da lâmina d’água.....	87
Figura 12	Introdução do poluente em uma das extremidades.....	87
Figura 13	Visualização da pluma provocada pelo poluente.....	87
Figura 14	Vista lateral da dispersão do “poluente” por toda a extensão do recipiente	88

## LISTA DE GRÁFICOS

CAPÍTULO I		
Gráfico 1	Distribuição da Água no Planeta Terra.....	17
Gráfico 2	Normais Climatológicas do período 1961 – 1990 de precipitação, insolação, evaporação, umidade e temperatura na Estação Metereológica de Recife – PE .....	24
CAPÍTULO II		
Gráfico 1	Linha contínua indicando o valor exato da solução. Os pontos marcados foram às aproximações calculadas pelo Scilab.....	54
Gráfico 2	A linha contínua indica o valor exato da solução do PVI de 2ª Ordem.....	57
Gráfico 3	Demonstração da aplicação do método explícito de Euler e simulações que ilustram deficiências.....	60
Gráfico 4	Demonstração da aplicação do método explícito de Runge-Kutta de 4ª ordem e simulações ilustrando sua precisão.....	63
Gráfico 5	Diferenças Finitas na Resolução de Equações Diferenciais Parciais.....	71
Gráfico 6	Concentração ao longo do tempo em cada ponto de observação, visualizado no ponto (15,10) próximo ao ponto de contaminação.....	76
Gráfico 7	Comportamento no caso de dois pontos antípodas de contaminação para cada ponto observacional ao longo do tempo.....	78
Gráfico 8	Concentração ao longo do tempo em cada ponto de observação.....	81
Gráfico 9	Comportamento no caso de dois pontos antípodas de contaminação para cada ponto observacional ao longo do tempo em aquíferos anisotrópicos.....	83

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Projeção da População na Área Metropolitana do Recife.....	22
Tabela 2	Dados Climatológicos Médios Mensais.....	23
Tabela 3	Características de poços situados nas principais bacias sedimentares do Estado.....	26

## **LISTA DE ABREVIATURAS**

ANA	Agência Nacional de Águas
RMR	Região Metropolitana do Recife
CPRM	Companhia de Pesquisa de Recursos Minerais
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística

## **RESUMO**

A exploração crescente e desordenada de águas subterrâneas tem sido fonte de diversos problemas de contaminação e posterior degradação de tais sistemas. Técnicas que permitam uma previsão efetiva e precisa dos efeitos ao longo do tempo oriundos da introdução de poluentes em pontos determinados de um sistema são, desta forma, fundamentais para elaboração de políticas públicas de exploração sustentável dos mesmos, bem como para elaboração de metodologias de remediação e recuperação de áreas já degradadas. Portanto, o objetivo desta dissertação é gerar um sistema simplificado de gestão hídrica subterrânea, possibilitando o zoneamento dos pontos de captura de água na bacia hidrográfica subterrânea de Boa Viagem, determinar a evolução geográfica e temporal eventual de poluentes domésticos. Além da evolução temporal da dispersão, degradação ou acúmulo de poluentes, possibilitando ao gestor do recurso hídrico criar cenários de prevenção ou recuperação da degradação. A modelagem matemática aqui proposta será aplicada na dispersão de poluentes que possam contaminar o aquífero de Boa Viagem presente na bacia hidrográfica do Recife e região metropolitana.

Palavras-chave: água subterrânea, modelagem matemática e contaminação.

## **ABSTRACT**

The increasing uncontrolled groundwater exploitation has been the source of many contamination and subsequent degradation problems of such systems. Techniques that allow an effective and accurate prediction of the effects over time arising from the introduction of pollutants at certain points of a system are essential for developing public policies for their sustainable exploitation, as well as for developing remediation methods and recovery of degraded areas. Therefore, the objective of this dissertation is to create a streamlined system for managing underground water, allowing the zoning of the capture points from Boa Viagem underground area, find out the geographical and temporal evolution of possible indoor pollutants. In the temporal evolution of the dispersion, degradation or accumulation of pollutants, allowing the manager of water resources to create scenarios for the prevention or recovery from degradation. The mathematical model proposed here will be applied to contribute to the knowledge of pollutants dispersion that may contaminate the Boa Viagem aquifer in this basin in Recife and the metropolitan area.

Key Words: groundwater, mathematical modeling e contamination

# CAPÍTULO I

## 1.1 INTRODUÇÃO

As últimas décadas têm sido marcadas pela crescente preocupação de alguns países com a degradação dos recursos hídricos, e em particular os subterrâneos, como o **5º Fórum Mundial da Água**, sob o lema "**Superando a escassez da água, rumo à sustentabilidade**", que contou com a participação de cerca de 200 (duzentos) ministros e 300 (trezentos) representantes de organizações, no dia 15 de março de 2009, em Istambul, capital da Turquia (Disponível em: <[www.worldwaterforum5.org](http://www.worldwaterforum5.org)>, Acesso em: 04 abr. 2009). Entretanto, é cada vez mais clara a consciência dos responsáveis pela gestão das águas subterrâneas no que diz respeito a manter, proteger ou remediar aquíferos. Uma ação que está sendo realizada neste sentido, consiste em tentar obter um melhor conhecimento da mecânica da dispersão de substâncias (poluentes ou não) nestes mananciais subterrâneos bem como entender a dinâmica do fluxo de água nos mesmos. Desta forma, o conhecimento e aprendizado de novas técnicas de modelagem matemática/hidrológico destes sistemas, pode ser visto como uma ferramenta para a sua proteção.

O modelo hidrológico é neste contexto uma ferramenta extremamente útil que permite através da equacionalização dos processos, representar, entender e simular o comportamento de uma bacia hidrográfica subterrânea (TUCCI, 1998 apud RENNÓ e SOARES, 2000; CID, 2003). Entretanto, é impossível ou inviável traduzir todas as relações existentes entre os diferentes componentes da bacia hidrográfica subterrânea em termos matemáticos. Assim, na maioria dos casos, a modelagem hidrológica torna-se somente uma representação aproximada da realidade.

Whitehead e Robison (1993) apud Rennó e Soares (2000) a realização de estudos hidrológicos em bacias hidrográficas subterrâneas visam compreenderem o funcionamento do balanço hídrico, isto é, os processos que controlam o movimento da água e os impactos de mudanças do uso da terra sobre a quantidade e qualidade da água.

Uma das principais dificuldades enfrentadas por gerenciadores de recursos hídricos de uma bacia hidrográfica está no entendimento do comportamento do fluxo hídrico subterrâneo, especialmente quando a água subterrânea é vista como uma importante parcela que influencia no conjunto dos recursos hídricos da bacia como um todo. A caracterização do aquífero, tais como os tipos, seus parâmetros físicos, as possíveis conexões hidráulicas entre águas subterrâneas e superficiais, o conhecimento espacial dos pacotes sedimentares que compõem os aquíferos, das áreas de recarga e dos níveis freáticos, são informações valiosas para o conhecimento do comportamento do fluxo subterrâneo.

Muitas vezes aparecem discussões nos noticiários sobre a diminuição do fornecimento de água no mundo, mas isso não é inteiramente verdade. A quantidade de água não está diminuindo; é a demanda por ela que está aumentando gradualmente e a sua disponibilidade para uso imediato, i.e, com pouco ou nenhum tratamento, que vem gradativamente diminuindo devido a processos degradativos. Alguns cientistas acreditam que a população mundial, que atualmente passa dos 6 bilhões de pessoas, irá dobrar até 2050. Além disso, a quantidade de água que é limpa e potável está diminuindo cada vez mais por causa da poluição.

Para muitas pessoas em países industrializados, conseguir água é tão fácil quanto abrir uma torneira, e também é barato, de certa forma. A água doce, porém, não é distribuída de maneira igual no mundo inteiro. Mais da metade das fontes de água do mundo está em apenas nove países: Estados Unidos, Canadá, Colômbia, Brasil, República Democrática do Congo, Rússia, Índia, China e Indonésia (CONSELHO EMPRESARIAL MUNDIAL PARA O DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL, 2009). As áreas urbanas, obviamente, precisam de água para suprir necessidades que vão além do básico, para ser ingerida e usada na higiene o que implica, em muitos casos, que haverá uma demanda excessiva por este recurso nos próximos anos.



Figura 1 – Distribuição da água no planeta

A figura 1 representa bem a distribuição da água “doce”, de seus 3% disponíveis, encontraremos 77% em geleiras, 22% em aquíferos e 1% em rios e lagos.

A utilização da água subterrânea, no Brasil, continua sendo feita de forma empírica, improvisada e não controlada, resultando em frequentes problemas de interferência entre poços, redução dos fluxos de base dos rios, impactos em áreas encharcadas ou pantanais e redução das descargas de fontes ou nascentes. Além disso, os poços construídos, operados e abandonados sem controle Federais, Estaduais ou Municipais se transformam em

verdadeiros focos de poluição das águas subterrâneas que são extraídas, sobretudo, daqueles localizados no meio urbano (REVISTA ÁGUAS SUBTERRÂNEAS, 2002).

Para Rebouças (2002) apud Reinke (2008) o maior incentivo à adoção da água subterrânea para o abastecimento urbano é a redução do custo de produção em relação às fontes superficiais deterioradas. Consequentemente, sua utilização para fins de abastecimento doméstico e/ou industrial vem crescendo em escala acentuada, sendo que, muitas vezes, os estudos prévios à exploração são negligenciados. Como por exemplo, cita-se a alocação de poços, onde se deve levar em consideração dados geológicos preexistentes da área ou região, além de um reconhecimento de campo, baseado em uma análise da geologia de superfície e sub-superfície, por métodos geofísicos ou sondagem mecânica, que visem evitar prejuízos irreversíveis ao aquífero.

A demanda por recursos hídricos oriundos do desordenado crescimento urbano observado nas últimas décadas gera uma pressão crescente pelo uso de fontes alternativas para o fornecimento de água potável à população (AGÊNCIA NACIONAL DE ÁGUAS – ANA, 2006). A seguir apresentamos o gráfico 1 – Distribuição da Água no Planeta Terra, no qual observamos que, do total de água disponível em nosso planeta, mais de 95% está na forma de águas oceânicas cuja exploração na forma de água potável ainda não é economicamente viável. Outros 4% estão dispostos na forma de geleiras e apenas 1% é imediatamente disponível ao consumo. Deste 1% que é acessível à exploração, mais de 96% está na forma de águas subterrâneas de forma que a exploração deste manancial tem crescido ao longo das últimas décadas (BAGTZOGLU; ATMADA, 2005).

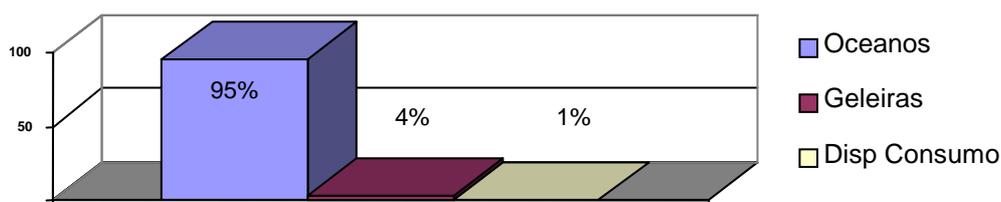


Gráfico 1 – Distribuição da Água no Planeta Terra.

Ainda, com relação ao parágrafo anterior, é evidente a necessidade de um controle da exploração deste manancial não apenas no sentido de evitar exploração excessiva, mas, sobretudo, de evitar que a exploração inadequada seja fonte de contaminação tornando-o desta forma indisponível ao consumo.

Infelizmente, a expansão urbana das metrópoles tem gerado graves desequilíbrios ambientais que afetam a qualidade de vida da população, agravando problemas de abastecimento de água, poluição, enchentes, escorregamentos de encostas, assentamento

de lixões, todos demandando para sua solução o conhecimento adequado das características do meio físico.

A forma de realizar controle dos aquíferos consiste na amostragem e análise físico-química e biológica das amostras no sentido de elaborar cartas espaços-temporais da presença e concentração de diversos tipos de poluentes a fim de identificar possíveis locais de contaminação e formas de recuperação das áreas contaminadas (RACHDAWONG, 1997), mas, devido à quantidade crescente de locais de exploração o ao frequente desconhecimento público da própria localização da exploração, a maior parte da exploração de aquíferos urbanos por usuários residenciais é feita de forma não-regulamentada (COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL – SÃO PAULO, 2004) tornando impossível um acompanhamento e controle efetivo destes poluentes.

Uma alternativa ao controle clássico por amostragem e análise, consiste no uso de modelos quantitativos da previsão do comportamento temporal da concentração de poluentes introduzidos em locais conhecidos nos demais pontos do aquífero o que permite, dentre outros aspectos, a previsão do impacto ambiental que seria provocado pela exploração inadequada em um determinado ponto, por exemplo, a licença ambiental de uma construção civil que faça uso de poços de captação subterrânea em áreas críticas, i.e, cuja eventual contaminação teria efeitos deletérios em grande parte do sistema subterrâneo, seria condicionada a uma proposta de implantação de procedimentos de segurança que visem evitar tal contaminação, mais ainda, tais pontos críticos podem ser alvo de um monitoramento mais intenso por parte das agências fiscalizadoras do que aqueles pontos cuja uma eventual contaminação teria pouco efeito no restante do sistema.

Para desenvolver uma proposta diretamente ligada a recursos hídricos, foi escolhida como área de estudo de caso, parte do Aquífero Boa Viagem, localizado na Região Metropolitana do Recife – RMR no estado de Pernambuco.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma: Nesta introdução, foi descrito o problema, sua importância e relevância do trabalho que será desenvolvido, os elementos gerais relativos ao tema da dissertação.

No próximo capítulo, caracterizaremos a área estudada nesta pesquisa, bem como formularemos o problema da modelagem da dispersão de poluentes em sistemas subterrâneos do ponto de vista matemático. No Capítulo 3, será feita uma revisão bibliográfica do estado-da-arte relativa à modelagem matemática de sistemas aquíferos, em particular, naqueles semelhantes a área abordada nesta pesquisa finalizando com uma breve conclusão dos principais artigos escolhidos. Finalmente, no Capítulo “Resultados e

Discussão” serão apresentados os resultados das simulações realizadas, as conclusões obtidas deste estudo e perspectivas de trabalhos futuros nesta área.

## **1.2 OBJETIVOS**

### **1.2.1. Objetivo Geral**

Esta dissertação objetiva estabelecer um modelo matemático capaz de prever o zoneamento geográfico dos pontos de captação de água em uma bacia hidrográfica subterrânea, a concentração de um poluente que varia levando-se em consideração variações do regime de escoamento, mudanças sazonais, profundidade e vazão, ações de contenção de escoamento, recuperação de áreas degradadas e variações temporais de demanda.

### **1.2.2 Objetivos Específicos**

- Identificar a dispersão de poluentes em águas subterrâneas e a variação do regime de escoamento, mudanças sazonais, profundidade e vazão, ações de contenção de escoamento da qualidade e condições de recarga das águas subterrâneas no Aquífero Boa Viagem;
- Compreender os processos hidrológicos envolvidos no balanço de água de bacias hidrográficas subterrâneas, fornecendo dados e informações importantes para a gestão dos recursos hídricos subterrâneos na área.
- Utilizar o modelo para simulação da concentração de poluentes em situações diversas, identificando formas de controle para os níveis aceitáveis;
- Gerar um programa de computador (software) para automação e simulações dos problemas observados.

## **1.3 CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA ESTUDADA**

Neste capítulo, apresentamos aspectos sociais e de uso da água e fisiogeográfico da área do aquífero Boa Viagem, abordando de forma sumária, porém, com objetivo de melhor compreensão do trabalho realizado.

Para a Companhia de Pesquisa de Recursos Minerais - CPRM (2003), a RMR perfaz uma área de 2.742,4km<sup>2</sup>, o que equivale a 2,82% do estado de Pernambuco, detalhado na cor vermelha da figura 2. Embora totalizando um pequeno percentual do estado, a população que a região abriga, de 3.350.654 habitantes, corresponde à aproximadamente 40% do total do estado (IBGE, 2007).



A contaminação das águas subterrâneas ocorre através da percolação de águas pluviais e outros líquidos gerados pela própria degradação dos resíduos, que por infiltração no solo atingem o nível d'água. O líquido derivado desse processo de percolação através dos resíduos é denominado de chorume. Esse líquido pode infiltrar no solo e atingir a zona saturada, dando origem a uma pluma de contaminação que acompanha o fluxo das águas subterrâneas e se espalha por uma área muito maior que a ocupada pelos resíduos. Esse processo é apresentado no esquema da Figura 3 (ELIS, 2005).

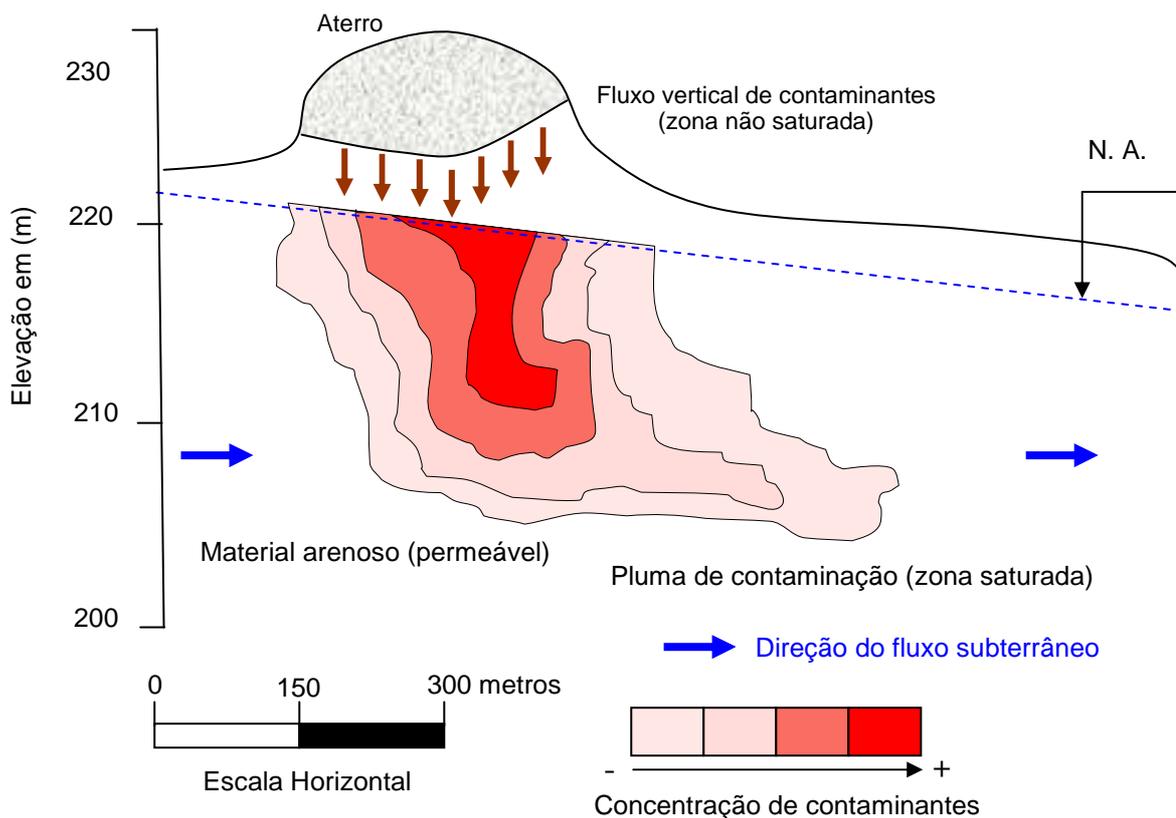


Figura 3 – Perfil mostrando o processo de contaminação das águas subterrâneas pelos líquidos percolados nos resíduos (Fonte: ELIS, 2005).

Da análise realizada na tabela 1 e figura 4, a seguir, apresentamos a projeção do crescimento populacional e a demanda de água, em particular na Região Metropolitana do Recife, a situação crítica do abastecimento de água por municípios, e entre eles se destaca a cidade do Recife, que apresenta balanço hídrico negativo ou capacidade do sistema insuficiente para atender a demanda tendencial, estimada para os horizontes de planejamento – 2005, 2015 e 2025; ainda, para a Agência Nacional da Água (2005), o horizonte de planejamento de 2025, apenas 8% das sedes municipais de Pernambuco apresentará abastecimento satisfatório e 92% apresentarão situação crítica. A maior concentração destas sedes municipais com abastecimento crítico localiza-se no Agreste

Pernambucano e na Zona da Mata Norte, onde está localizada a Região Metropolitana do Recife (ATLAS NORDESTE – ANA, 2005).

**TABELA 1 – PROJEÇÕES**

Ano	População Urbana (hab.)	Demanda urbana (L/s)	
		Cenário tendencial	Cenário otimista
2005	1.480.685	5.706,8	5.706,8
2015	1.556.325	5.998,3	5.548,0
2025	1.608.611	6.199,9	5.324,8

Fonte: Projeções da população urbana da cidade do Recife (ATLAS NORDESTE - ANA, 2005).

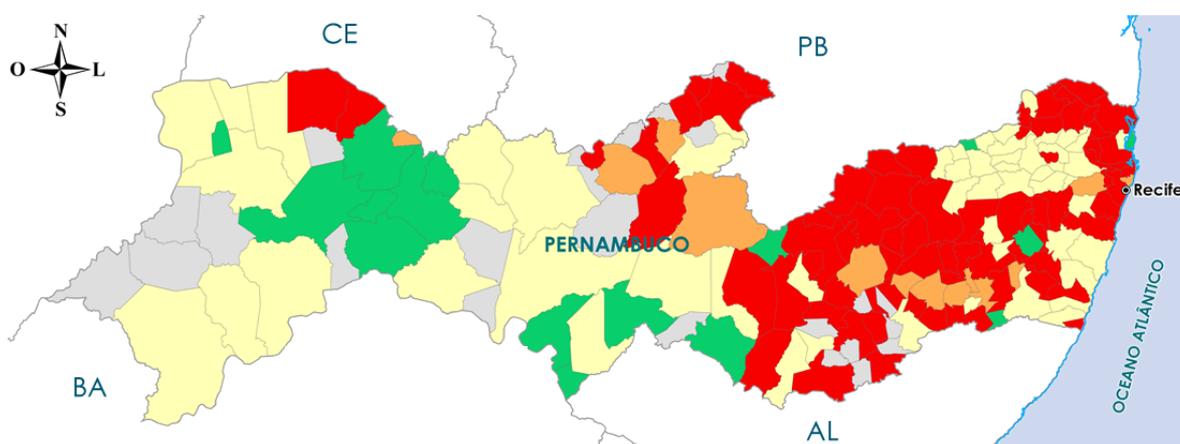


Figura 4 – Classificação quanto à criticidade – Cenário 2025 (ATLAS NORDESTE – ANA, 2005)

Para o Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística - IBGE (2007), a população considerada totalmente urbana no município do Recife chegou a 1.533.580. Segundo Manoel Filho (2004) apud Correia (2007) se for mantida a tendência observada nos últimos anos, o número da atual população deverá dobrar no ano 2050. Isso representa um cenário preocupante que implica em um grande desafio na gestão dos recursos hídricos, e em particular dos aquíferos, no planejamento da possibilidade de uso dos mesmos, como parte da solução do problema de abastecimento d'água.

A água hoje na RMR, como em todas as regiões do Estado de Pernambuco, é um bem natural escasso, em função do seu uso para fins diversos, gerando impactos ambientais que afetam desde a saúde da população até o desenvolvimento regional.

Na figura 5, observamos que a RMR é uma das regiões que apresenta uma maior demanda de recursos hídricos, superior a 2,0 m<sup>3</sup>/s.

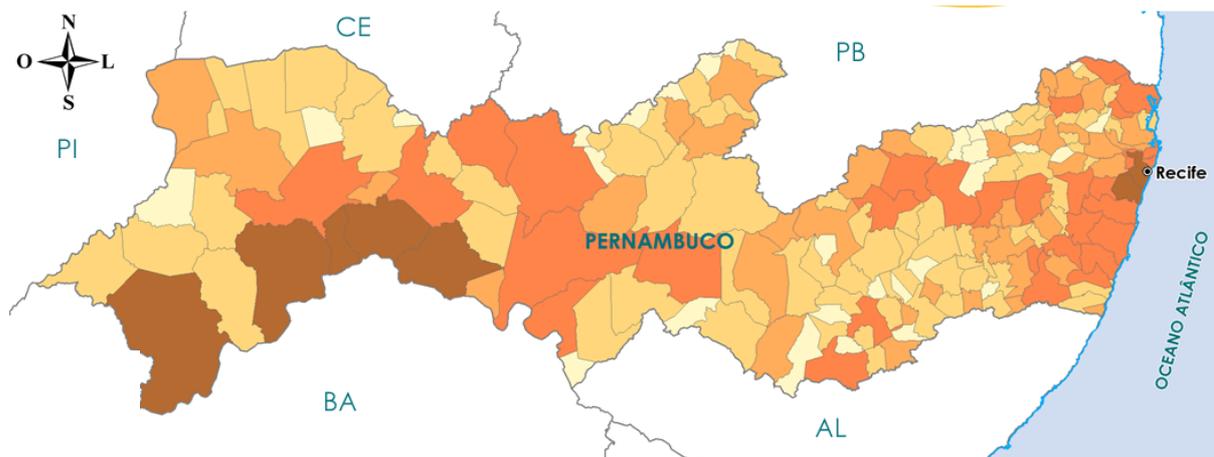


Figura 5 – Demanda total de Água em Pernambuco (ATLAS NORDESTE – ANA, 2005)

### 1.3.2 Caracterização Fisiogeográfica

A RMR encontra-se localizada na zona fisiográfica do Litoral do estado de Pernambuco. Trata-se de uma região litorânea, quente e úmida com estiagem pouco pronunciada. De acordo com a classificação de KÖPPEN (1948) que se baseia nos valores médios de temperatura do ar, da quantidade de precipitação e na distribuição correlacionada destes dois elementos pelos meses do ano, o clima é do tipo **Mas**, quente, úmido e com taxa de precipitação pluviométrica anual abundante com média de 2.458mm (CORREIA, 2007).

#### - Elementos Climáticos

Apresentamos valores de alguns elementos climatológicos da RMR, onde destacamos na tabela 2 a seguir:

Tabela 2 – Médias Mensais de Normais Climatológicas de 1961 a 1990, na Estação Meteorológica de Recife/PE (CORREIA, 2007).

MESES	DADOS CLIMATOLÓGICOS MÉDIOS MENSAIS					
	Precipitação (mm)	Evaporação (mm)		Temperatura (°C)	Umidade (%)	Insolação (h)
		Potencial	Real			
JAN	103,4	131,9	103,4	26,6	73,0	246,3
FEV	144,2	114,2	114,2	26,6	77,0	210,8
MAR	264,9	97,8	97,8	26,5	80,0	203,9
ABR	326,4	155,2	155,2	25,9	84,0	185,2
MAI	328,9	70,2	70,2	25,2	85,0	186,6
JUN	389,6	76,4	76,4	24,5	85,0	168,3
JUL	385,6	90,9	90,9	24,0	85,0	169,8
AGO	213,5	113,9	113,9	23,9	85,0	108,1
SET	112,5	113,3	113,3	24,6	78,0	216,6
OUT	66,1	138,4	66,1	25,5	76,0	247,3
NOV	47,8	144,1	47,8	25,9	74,0	265,8
DEZ	65,0	143,4	65,0	26,3	75,0	255,2

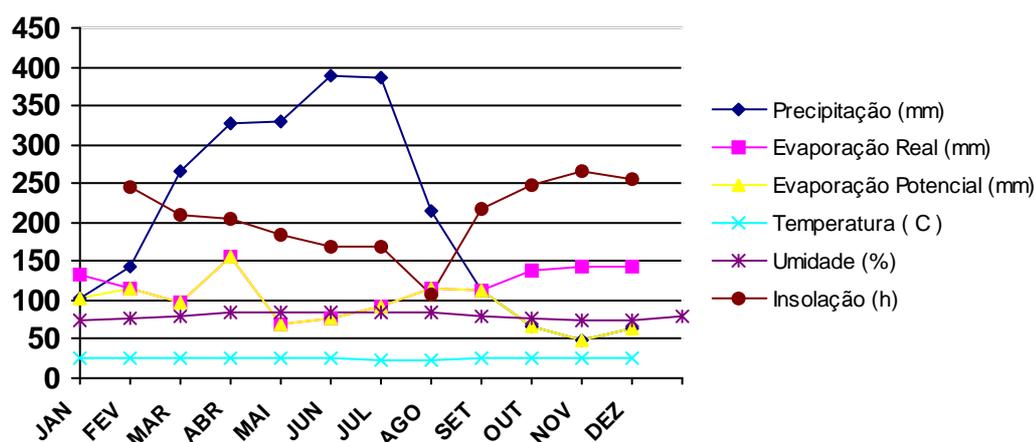


Gráfico 2 – Normais Climatológicas do período 1961 – 1990 de precipitação, insolação, evaporação, umidade e temperatura na Estação Meteorológica de Recife – PE (Fonte: CORREIA, 2007).

A precipitação pluviométrica abundante com média anual de 2.458mm, com distribuição temporal das médias mensais marcada por dois períodos distintos: um chuvoso, que se estende de março a agosto, com precipitações máximas nos meses de junho e julho; um de estiagem, que ocorre entre os meses de setembro a fevereiro, com mínimas nos meses de novembro e dezembro.

Quanto à evaporação, a média anual é inferior à pluviométrica, ou seja, 1.390mm evaporados contra 2.458mm, indicando excedente hídrico, ou seja, um balanço hídrico positivo de 1.068mm, razão porque os recursos de superfície são relativamente abundantes e de boa qualidade físico-química, na região estudada, quando não poluídos pelo homem. A intensidade de evaporação cresce com a radiação solar, a temperatura do ar e a velocidade dos ventos, diminuindo com o aumento da umidade relativa do ar.

Com relação à umidade relativa do ar que é alta nesta região, atinge um valor médio em torno de 79,8%, com máxima de 85% no período do mês de maio a agosto, e mínima de 73% em janeiro.

A insolação média anual é em torno de 2.464 h com máxima de 266 h no mês de novembro e mínima de 108 h no mês de agosto. A insolação é diretamente proporcional à temperatura na região estudada, mostrando valores baixos de insolação nos meses chuvosos (inverno) quando ocorre valor menor de temperatura, enquanto no período seco (verão), os valores de insolação e temperatura são elevados. A justificativa para esses valores de uma elevada taxa de insolação média anual é consequência do posicionamento geográfico a Região Metropolitana do Recife que se encontra relativamente próximo da faixa equatorial. A direção predominante dos ventos é sudeste.

### **- Solo**

A Região Metropolitana do Recife, segundo Mabsoone, 1991, Oliveira, 2003 e Correia 2007, ocorrem solos tipo Gley indiscriminados, tem-se portanto:

Solos tipo areia quartzosa Sobre a Formação Barreiras e os Terraços Holocênicos e Pleistocênicos

Solos tipo Gley indiscriminados nas áreas de planícies, incluindo: *solos orgânicos de mangue*, poucos desenvolvidos com elevado teor salinos, sedimentos finos com matéria orgânica que alimentam a fauna e a flora; *solos aluviais*, pouco desenvolvidos e poucos permeáveis, o que os torna sujeito a inundações e *areias quartzosas marinhas*, muito permeáveis e distribuídas pela baixada litorânea nas proximidades da orla marítima.

### **- Vegetação**

A cobertura vegetal da RMR é representada de forma proeminente por canaviais. As culturas de subsistência (milho, feijão, etc.) estão presentes em áreas menores, frequentemente isoladas em meio aos canaviais ou concentradas em algumas faixas maiores próximas às pequenas concentrações urbanas. Além da cana-de-açúcar e das culturas de subsistência, podem ser encontrados ainda coqueirais, cultivados principalmente nas áreas mais próximas ao litoral.

A cobertura vegetal original está restrita a umas poucas áreas, além do pouco que restou da Mata Atlântica, podendo ser encontrados restos da vegetação nativa representados pelos tipos designados como: capoeira, capoeirinha, vegetação higrófito e vegetação de mangue (FIDEM, 1979).

As áreas de ocorrência de Mata Atlântica perfaziam pouco mais de 20.759ha (13,12% da cobertura vegetal) da RMR em 1974, sendo que na época do descobrimento do Brasil, esse tipo de vegetação se distribuía ao longo de todo o litoral pernambucano e era rica em espécies como o pau-brasil (*Caesalpinia echinata*). Hoje, essa árvore é encontrada quase que unicamente na reserva biológica de Tapacurá, no município de São Lourenço da Mata. Além do paubrasil, outros tipos vegetais característicos da Mata Atlântica são: o visgueiro (*Parkia Pendula*), manganjuba (*Slonga Obtusifolia*), manguba (*Pseudobombax sp.*) e a urucuba (*Viola Gardneri*).

A denominação de capoeira é utilizada para definir um tipo de vegetação de porte menor que a da Mata Atlântica (com altura variando entre 2m e 5m). São tipos característicos dessa unidade a mangabeira (*Hancornia Spenciosa*), lixeira (*Curatella Americana*) e a *Echinolaena inflexa*.

A capoeirinha é uma vegetação de pequeno porte (basicamente gramíneas e arbustos finos), com alguns tipos arbóreos que não ultrapassam os 2m de altura.

A vegetação de mangue é composta por tipos de médio e pequeno porte, representada pelo mangue vermelho (*Rhisophona Mangle L.*), pelo mangue canoé (*Avicennia Nitida Jacq.*), mangue de botão (*Canocarpus erectus L.*) e o mangue manso (*Lagmicularia Racenosa Gaerin F.*), adaptada as condições de solos salinos e diariamente atingidos pelas oscilações das marés.

A vegetação higrófitas pode ser encontrada basicamente nas várzeas dos rios e reservatórios de açudes e barragens, sendo a espécie vegetal mais comum os aguapés (também conhecidos como baronesas).

### - Recursos Hídricos Subterrâneos

O estado de Pernambuco apresenta dois domínios hidrogeológicos: Poroso e Fraturado. O Domínio Fraturado ocupa mais de 80% da área do estado, sendo representado pelo sistema aquífero Cristalino, que apresenta baixa vocação hidrogeológica. Os principais sistemas aquíferos pertencem ao Domínio Poroso e estão localizados nas bacias sedimentares costeiras de Pernambuco-Paraíba e Cabo-Ipojuca, e nas bacias sedimentares do Jatobá e Araripe. Existem ainda algumas pequenas bacias sedimentares como São José do Belmonte, Mirandiba, Betânia, Fátima, Araras, Carnaubeiras e Cedro (ABAS, 2003). A tabela 3, a seguir, apresenta uma síntese da produtividade dos poços nas principais bacias sedimentares (ATLAS NORDESTE – ANA, 2005).

Bacia Sedimentar	Vazão média (m <sup>3</sup> / h)	Profundidade média (m)	Nível estático médio (m)	Nível Dinâmico médio (m)	Número de poços
Araripe	3,2	61,0	17,4	36,0	351
Cabo-Ipojuca	4,9	50,8	6,1	20,5	395
Pernambuco-Paraíba	19,7	71,2	8,9	27,3	214
Jatobá	6,9	104,4	21,1	36,3	760

Fonte: ATLAS NORDESTE, 2005 – Abastecimento Urbano de Água

A bacia sedimentar Pernambuco-Paraíba apresenta o melhor potencial entre as bacias sedimentares. Tem largura média da ordem de 25km, cerca de 250km de comprimento e espessura em torno de 400m no domínio continental. O principal sistema aquífero é o Beberibe, que é confinado pelos calcários da Formação Gramame, e apresenta espessura média na zona costeira de 200m. O sistema aquífero Barreiras também tem bom potencial hídrico. O Beberibe é o principal manancial subterrâneo na cidade de Recife,

sendo explorado por cerca de 4.000 poços. O crescimento desordenado do número de poços na região tem provocado significativos rebaixamentos do nível de água e problemas de salinização das águas.

A bacia vulcano-sedimentar do Cabo-Ipojuca ocupa toda a faixa costeira sul do estado de Pernambuco e possui uma forma alongada na direção N40E, com uma largura média de 10km na porção emersa. Inicia-se na cidade do Recife, estendendo-se para sul até o município de Sirinhaém, numa extensão de 35km. Os sistemas aquíferos de maior potencialidade são Cabo e Algodóais.

A bacia sedimentar do Jatobá localiza-se na porção centro-sul do estado, tem direção ENE-WSW, possui uma extensão de 155km, com largura máxima de 50km e área total de 6.200km<sup>2</sup>. Os principais sistemas aquíferos são Tacaratu e Inajá, que apresentam espessura da ordem de 600m. Outros aquíferos de bom potencial são: São Sebastião, Brotas e Marizal.

As principais restrições com relação à qualidade das águas, no Estado, ocorrem no sistema aquífero Cristalino, em função da elevada salinidade, sendo frequentemente necessária a instalação de dessalinizadores. Os sistemas aquíferos fraturados-cársticos Gramame, Santana e Estiva apresentam problemas de dureza, devido à interação da água com as rochas calcárias. Na cidade de Recife, o Beberibe apresenta problemas localizados de salinização das águas em decorrência dos superbombeamentos em algumas áreas.

#### **- Caracterização Geológica**

Segundo a Companhia de Pesquisa de Recursos Minerais – CPRM (2003) e Correia (2007) a RMR é constituída geologicamente pelas rochas de embasamento cristalino e pelas rochas sedimentares sobrepostas, pertencentes às Bacias Sedimentares do Cabo e Pernambuco-Paraíba, além dos sedimentos de cobertura da Formação Barreiras e sedimentos recentes da Planície do Recife. Essas bacias situam-se ao longo da costa, havendo grandes concentrações populacionais, com o registro de um significativo número de poços tubulares<sup>1</sup> em operação.

Os sedimentos de cobertura são representados por sedimentos recentes, de praia e de aluvião (Quartenário), e por sedimentos da Formação Barreiras (Tércio-Quartenário). O perfil geológico esquemático apresentado na figura 7, teve como base o mapa da CPRM (1994b) adaptado, incluindo as proposições de Costa et al (1994), Lima Filho (1998) e Correia (2007).

---

<sup>1</sup> Quando se caracteriza por um tubo de até uns 50 cm de diâmetro e profundidade ilimitada (CPRM - Serviço Geológico do Brasil, 2003).



Figura 6 - Mapa Geológico do Recife e Adjacências (Fonte: CORREIA, 2007).

Observando a figura 6 acima, que a localização da área de estudo, Aquífero de Boa Viagem, ocupa toda a área compreendida pelos sedimentos recentes, representada na figura pela cor amarelo claro.

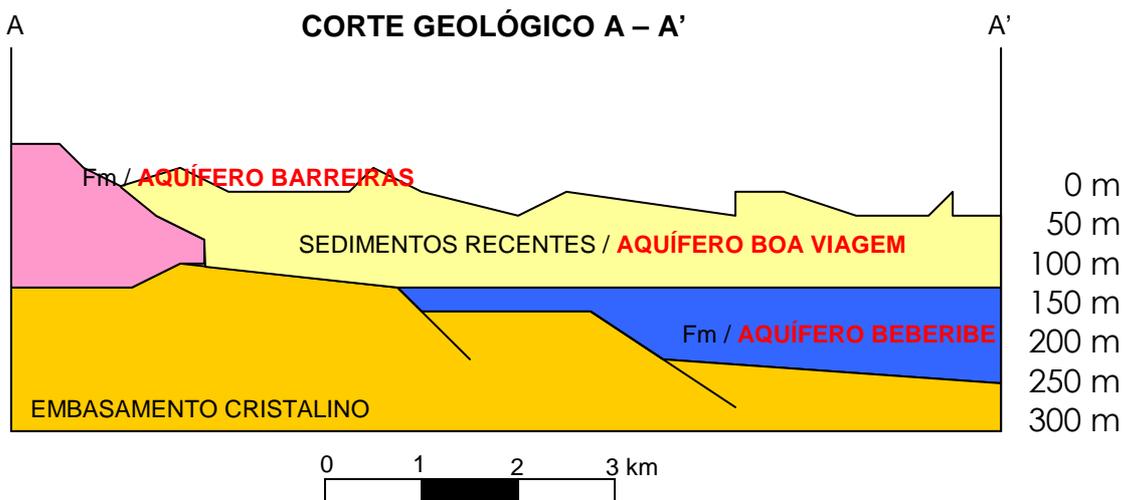


Figura 7 – Esboço Litoestrutural do município do Recife (Fonte: Costa et al, 1994 apud Correia, 2007) modificado.

### **- Geomorfologia**

Na RMR, parte norte há a ocorrência das rochas do embasamento cristalino, dos sedimentos da Bacia Sedimentar PE-PB, da Formação Barreiras e da Planície do Recife, além de uma pequena ocorrência dos sedimentos da Bacia Vulcano-Sedimentar do Cabo, na zona Sul da Planície do Recife. Enquanto que, na parte Sul, há a ocorrência das rochas do embasamento cristalino, dos sedimentos da Bacia Vulcano-Sedimentar do Cabo e da Formação Barreiras.

As unidades geológicas exploradas como aquífero na RMR, descritas a seguir, são, de acordo com o nível de importância:

- Formação Beberibe (Bacia Sedimentar PE-PB);
- Formação Cabo (Bacia Sedimentar do Cabo);
- Formação Boa Viagem (Planície do Recife);
- Formação Barreiras;
- Formação Algodoads (Bacia Sedimentar do Cabo);
- Formações Gramame/Maria Farinha (Bacia Sedimentar PE-PB);

## **1.4 CARACTERIZAÇÕES HIDROGEOLÓGICA DO AQUÍFERO BOA VIAGEM**

### **1.4.1 Conhecimentos Anteriores**

Segundo a Agência Nacional de Águas – ANA (2006), um aquífero é um reservatório subterrâneo do qual é possível extrair uma quantidade apreciável de água. Os aquíferos são divididos em livres<sup>2</sup>, que se encontram a menor profundidade, ou confinados<sup>3</sup> (artesianos) cuja maior profundidade apenas permite sua exploração mediante a perfuração de poços tubulares ou artesianos nos quais, ao contrário dos poços escavados para aquíferos livres aonde a água é captada pelo uso de baldes, cata-ventos ou bombas de baixa potência, a água é extraída pelo uso de bombas de alta potência o que confere a estes uma imposição de diâmetros reduzidos e vazão limitada.

Além da exploração por poços tubulares, há ainda forte exploração deste manancial, principalmente na zona urbana e ao longo do litoral, por poços rasos, cacimbas, poços amazonas e cacimbões, com funções diversas, tais como: abastecimento de granjas, casas de campo e de praia.

---

<sup>2</sup> Quando o aquífero sofre apenas as pressões atmosféricas (CPRM - Serviço Geológico do Brasil, 2003).

<sup>3</sup> Quando o aquífero está confinado por formações impermeáveis sobrepostas, existindo daí pressões superiores à atmosférica (CPRM - Serviço Geológico do Brasil, 2003).

A importância econômica deste aquífero para o abastecimento urbano e industrial é citada por vários autores (CORREIA, 2007; COSTA FILHO et al, 1998; SANTOS et al, 1994; BATISTA, 1984) e diversas ações governamentais visando evitar problemas de exploração do mesmo acima de sua capacidade de reposição vêm sendo tomadas (CPRM, 2003; COMPESA/ACQUA-PLAN, 1982).

Segundo o Serviço Geológico do Brasil – CPRM, (2008) diversos foram os estudos hídricos subterrâneos executados na RMR desde a década de 60, principalmente na Parte Norte. Foram iniciados, em 1966, pelos concluintes do Curso de Geologia da Universidade Federal de Pernambuco, Mont’Alverne e Silva, registrados nos seus relatórios de graduação. Desde então, diversos outros foram processados no âmbito da hidrogeologia (Costa *et al.*, 1998).

#### **1.4.2 Características Dimensionais e Composicionais**

O aquífero de Boa Viagem (ou aquífero Boa Viagem), aquífero do tipo intersticial, está localizado na faixa costeira do estado de Pernambuco, na planície do Recife, limitante pelo município do Recife e o zoneamento do aquífero Boa Viagem, entre as coordenadas UTM 283000 a 294000 mE e 9100000 a 9114000 mN aflorando em quase toda a superfície da Planície do Recife, compreendendo uma área de 112,5Km<sup>2</sup>. Segundo Costa et al (1994) Apud Correia (2007) o aquífero Boa Viagem é formado por sedimentos de aluviões, dunas, sedimentos de praia, mangues e por misturas de areias argilosas, argilas, limos e vasas, de origem continental ou marinha (COSTA FILHO, 1997), aflorando em quase toda a superfície da Planície do Recife, ora recobrando os sedimentos do aquífero Beberibe e Cabo e ora sobre o embasamento cristalino na região mais a oeste. Na região oeste da área estudada, o aquífero Boa Viagem é mais explorado por poços tubulares cujas espessuras médias oscilam em torno de 50m, como é o caso dos bairros do Curado, Cidade Universitária, Várzea, Engenho do Meio, Caxangá e Dois Irmãos. Na região de Boa Viagem, esse aquífero chega a atingir até 80m de espessura máxima a uma profundidade de sub-superfície de topo em média de 20m. A figura 8 mostra a distribuição geográfica do aquífero zoneando-o por profundidade na região metropolitana da cidade de Recife-PE.

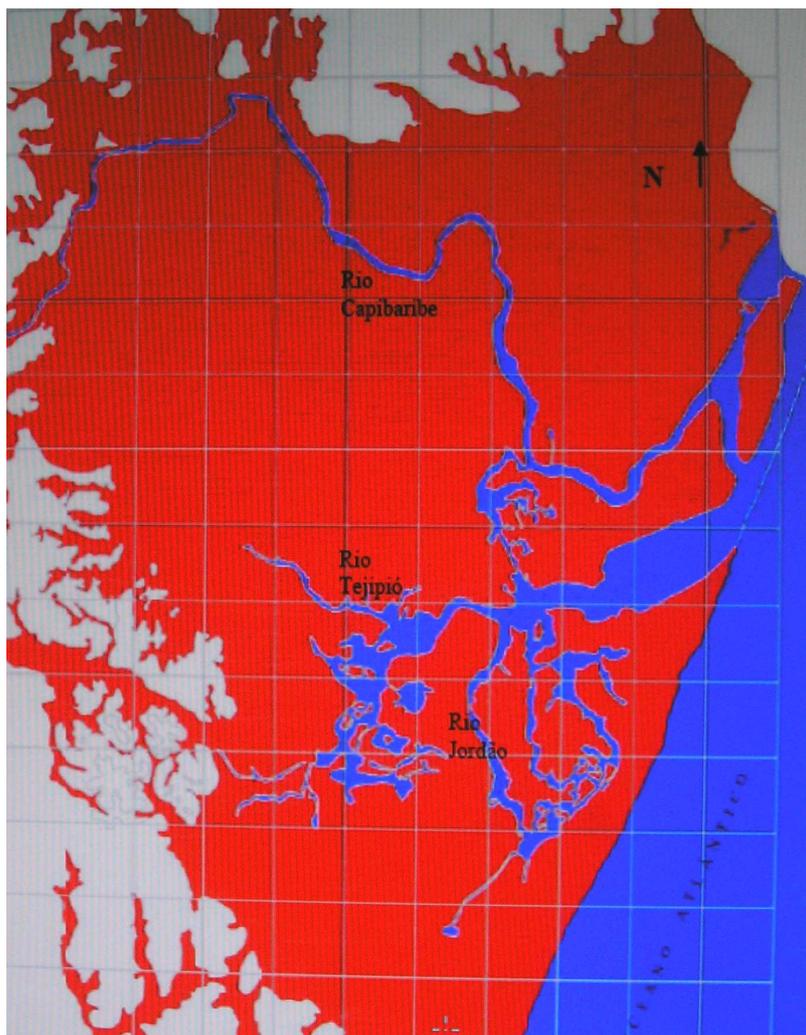


Figura 8 - Localização do Aquífero de Boa Viagem (Fonte: CORREIA, 2007).

O aquífero Boa Viagem, reconhecido por COSTA (1994), representado por sedimentos areno-argilosos recentes, aparece recobrimdo os dois outros aquíferos de idade cretácea, ou ainda diretamente sobre o embasamento cristalino, ocorrendo principalmente na planície do Recife, onde ocupa toda a área superficial e se estende até 8m de profundidade. Apesar de ser esse aquífero bem identificado e poder ser facilmente delimitado em vários poços profundos através da descrição litológica, não ocorre um horizonte guia contínuo ao longo de toda a superfície, que estabeleça uma separação nítida entre esse aquífero e os dois outros que estão sotopostos (Beberibe ao norte e Cabo ao sul).

Características da água do aquífero:

- essencialmente mistas com a presença de águas cálcicas;
- apresenta Ph um pouco alcalino, com baixo risco quanto à corrosão e à incrustação;

- alta concentração de sódio e de cloreto e altos valores de condutividade elétrica;
- a água é, em geral, de boa qualidade para irrigação, com baixo risco de sódio e alto risco de salinidade;

### 1.4.3 Vulnerabilidade do Aquífero Boa Viagem

Segundo CORREIA (2007) Apud LOBO FERREIRA e CABRAL (1991) o conceito de vulnerabilidade à poluição de águas subterrâneas foi definido em uma conferência internacional sobre “Vulnerability of Soil and Grandwater to Pollutants”, realizada no ano de 1987, na Holanda (Duijvenbooden e Waegeningh, 1987), como:

*A sensibilidade da qualidade das águas subterrâneas a uma carga poluente é função apenas das características intrínsecas do aquífero.*

A vulnerabilidade da RMR foi constatada em um levantamento realizado em 1998, quando indicaram como fontes potenciais de poluição nada menos que 145 postos de combustível, 20 lixões e 14 cemitérios, dentre os quais aproximadamente a metade, 42%, localizados na cidade do Recife (Costa ET AL, 1998, Apud Correia, 2007).

Dentre os poluentes mais prováveis estão os esgotos domésticos, oriundos de fossas, e também por hidrocarbonetos monoaromáticos, produtos da indústria de petróleo, vindos dos postos de combustíveis e de lubrificantes.

Através de um trabalho recente de dissertação foi possível determinar a vulnerabilidade da região onde está localizado o aquífero Boa Viagem, através dos métodos GOD ( G – Groundwater occurrence, O – Lthology of the Overlying Layers, D – Depth of groundwater) e DRASTIC, no qual obteve resultados expressivos em termos qualitativos, em índice de vulnerabilidade extremo, alto, médio, baixo e nulo.

Dessa foi possível determinar a partir do método GOD as classes de vulnerabilidade do Aquífero Boa Viagem, conforme figura abaixo.

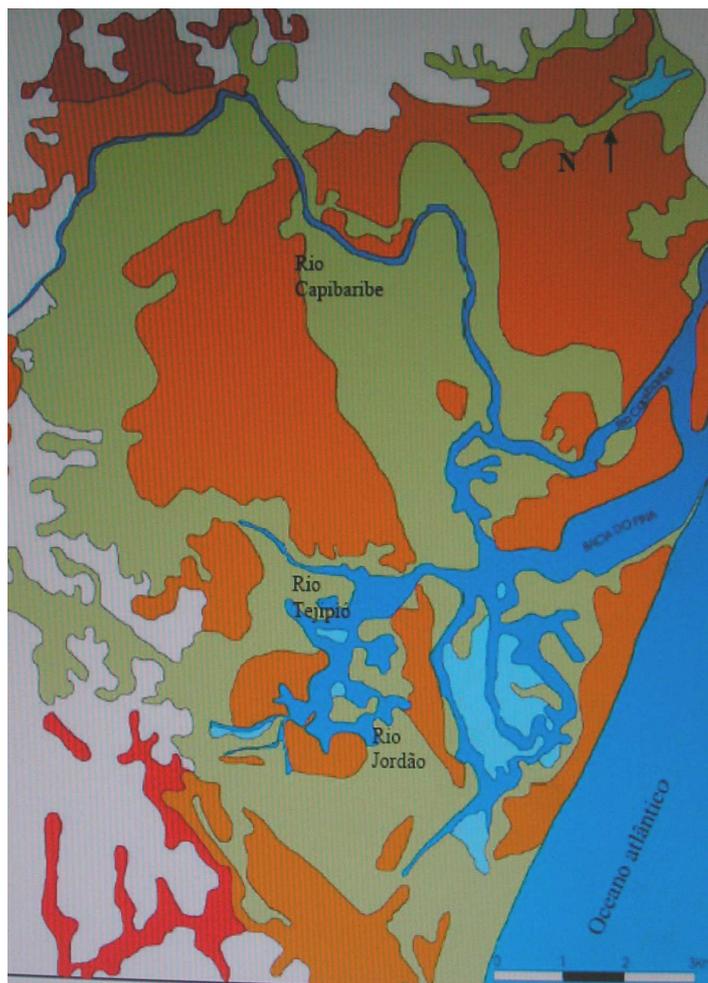


Figura 9 - Mapa de vulnerabilidade natural das águas subterrâneas no aquífero Boa Viagem no município de Recife (Fonte: CORREIA, 2007).

**ÍNDICE GOD**

	<0,1 Desprezível
	0,1 - 0,3 Baixa
	0,3 - 0,5 Moderada
	0,5 - 0,7 Elevada
	0,7 - 1,0 Extrema

**ÍNDICE GOD**

	< 0,1 Desprezível
	0,1 - 0,3 Baixa
	0,3 - 0,5 Moderada
	0,5 - 0,7 Elevada
	0,7 - 1,0 Extrema

## 1.5 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Segundo John Molson, professor da Universidade de Laval, em Québec - Canadá, um dos pioneiros da modelagem matemática em águas subterrâneas, autor de várias publicações e de diversos softwares de modelagem, argumenta que a prática de modelagem de águas subterrâneas sofreu mudanças significativas nas últimas décadas.

Nos anos 60 e 70, o campo ainda estava na sua infância e se você fosse um “modelador”, basicamente desenvolvia o seu próprio programa. Essa situação se manteve até os anos 80, que viu o rápido desenvolvimento de pacotes prontos de software, incluindo o *Modflow*<sup>4</sup>. Porém o usuário ainda tinha de preparar seus próprios arquivos de entrada e saída (Entrevista cedida a Revista Subterrânea, 2008).

Segundo Wagener e Kollat (2007), a avaliação detalhada dos modelos matemáticos, a consideração da incerteza na modelagem hidrológica e ambiental de sistemas é de fundamental importância, e até por vezes procurados por decisores.

Para Santos et al (2006), as atividades ligadas ao processo desenvolvimentista provocam sérios impactos ao meio ambiente, especialmente em área urbanizadas. Os estudos focados na preservação ambiental, na atualidade, preocupam-se cada vez mais com a proteção dos recursos hídricos, em especial os subterrâneos.

No contexto da hidrologia e hidrogeologia há muitos trabalhos desenvolvidos, principalmente, na modelagem e determinação de parâmetros de sistemas superficiais; no entanto, apresentamos alguns trabalhos de aplicação da modelagem matemática em águas subterrâneas.

### **1.5.1 Aplicação da Modelagem Matemática em Águas Subterrâneas**

A necessidade de considerar aspectos técnicos, econômicos, ambientais, jurídicos e as questões sociais no planejamento e gestão dos recursos hídricos e a tomada de decisão, obrigam o uso dos modelos complexos de recursos hídricos que ligam o hidrológico, o econômico e as relações institucionais com água (PULIDO-VELAZQUEZ et al, 2009). A fim de analisar problemas como dispersão de poluentes, a escassez e os conflitos entre usos de uma perspectiva global, os sistemas hídricos são muitas vezes analisados em escala de bacias hidrográficas, e isto exige modelos matemáticos que simulam simultaneamente componentes da superfície e subterrânea e suas interações.

a. O aquífero “Mancha Ocidental”, localizado na área central da Espanha, trouxe importantes benefícios sociais e econômicos para a região, principalmente devido à pronta disponibilidade de águas subterrâneas na demanda e à segurança do aquífero

---

<sup>4</sup> *MODFLOW* é um modelo numérico de águas subterrâneas tridimensional baseado na metodologia de diferenças finitas, contendo diversos módulos para representar poços, drenos, rios, evapotranspiração, infiltração, etc. *MODFLOW* simula condições estacionárias e transientes de fluxo para aquíferos livres confinados ou semi-confinados. As condutividades hidráulicas, coeficientes de armazenamento e transmissividades atribuídos às diversas camadas podem ter distribuição isotrópica ou anisotrópica.

durante as secas, no entanto, a utilização das águas subterrâneas ocorreu principalmente de forma descontrolada, enquanto as autoridades da Espanha estavam centradas na construção de infra-estruturas e gestão das águas superficiais, com o tempo esta situação veio se agravar, gerando um conflito entre agricultores e os representantes do governo, gestores de águas (MARTÍNEZ-SANTOS; LLAMAS; MARTÍNEZ-ALFARO, 2008).

Estes autores propuseram um modelo matemático destinado a identificar as vulnerabilidades do aquífero, reproduzindo o sistema físico, para simular a evolução do aquífero dentro de uma série de cenários capaz de criar dinamicamente seu comportamento, no qual objetivaram quatro outras razões que justifiquem o modelo matemático; em **primeiro lugar**, o processo de desenvolver o modelo incorpora avanços em termos de compreensão da área do sistema aquífero, especialmente devido à disponibilidade de significativas melhoras geológicas e hidrogeológicas, em **segundo lugar**, um modelo numérico que permite simular uma ampla gama de condições, fornecendo resultados que não são apenas imparciais, mas igualmente significativos para os interessados tanto no tempo e no espaço; em **terceiro lugar**, as abordagens participativas representam em si uma oportunidade muito necessária para a interação das partes interessadas, especialmente tendo em conta os conflitos que existem entre os princípios coletivos e à falta de uma tradição participativa, e em **quarto lugar**, um modelo capaz de proporcionar uma pioneira ferramenta de aprendizagem social sobre as águas subterrâneas (MARTÍNEZ-SANTOS; LLAMAS; MARTÍNEZ-ALFARO, 2008).

b. Borthwick; Marchant; Copeland (2000) propuseram um modelo que foi aplicado à baía de Sepetiba, Brasil, um complexo com várias ilhas costeiras. Descreveram uma rede hierarquizada adaptativa baseado em um esquema numérico de previsão de água localizada, suportando o transporte de poluente em duas dimensões.

A Modelagem matemática de águas-custeadas com transporte de poluente é geralmente baseada na regulação do fluxo das equações (massa e dinâmica de conservação) juntamente com uma espécie de equação de transporte que combina linearmente com advecção, difusão e fonte/dreno. Diversas técnicas de solução numérica foram elaboradas para descrever e resolver as equações de transporte. Uma abordagem importante são as partículas *Lagrangeano* com monitoramento contínuo de massa do qual o poluente é descrito em um determinado conjunto de *masslets*, em seguida, difundido por outras partículas (em manter, tanto quanto possível, com a solução matemática a pura difusão da equação).

c. Atualmente águas subterrâneas representam mais de 20% do uso da água por dia nos Estados Unidos. Como a contaminação das reservas subterrâneas também

continua a aumentar a partir de uma variedade de poluentes, a reabilitação torna-se necessária. Se o método envolve reparação ou limpeza, uma fundamental compreensão dos padrões de fluxo das águas subterrâneas é necessária. Atualmente isso pode ser adquirido através de modelos preditivos, devido aos avanços nas investigações das águas subterrâneas. O método *Superblock - Analytical Element Method (AEM)* é capaz de captar as tendências tanto em grande e em pequena escala de variações de fluxo complexo e heterogêneo. Estas tendências e as variações não são capturadas pelas atuais soluções numéricas, caracterizado por *diferenças finitas* e *elementos finitos* de formulações. O *Superblock AEM*, como acontece com muitos *solvers* subterrâneos, tem um grande número de parâmetros de entrada e produz grandes quantidades de produção 3D. Além disso, o software pode ser utilizado em qualquer sistema operacional ou mesmo acessado através de uma interface web (ALIVARAPU e WINER, 2008).

d. Visser et al (2009) combinou duas abordagens de análise da qualidade de dados subterrâneos: modelagem geoquímica de concentração e detecção em relação ao tempo de viagem do poluente. Os dados foram agregados com base na profundidade e só foi possível porque o componente vertical de fluxo de água subterrânea foi praticamente constante. A variação do tempo de viagem foi o resultado do controle de poços sendo colocados afastados utilizando uma estratégia de amostragem aleatória estratificada para representar toda a água subterrânea com um número limitado de poços. As concentrações de nitrato de potássio foram relacionadas com o tempo de recarga que mostraram tendências que pareciam ter sido alterados por processos geoquímicos, como pirita oxidação ou de troca catiônica.

A distinção entre conservadores, direta e indireta reativas é importante para interpretar corretamente as tendências da qualidade de dados das águas subterrâneas em relação a mudanças históricas na recarga de concentrações de origem antropogênica. Estas tendências representam uma ameaça para as águas subterrâneas de qualidade oculta, porque esses poluentes não foram introduzidos no sistema através de recarga, mas são liberados dentro do subterrâneo. A parametrização desses modelos e as reconstruções de recarga de concentrações são tarefas desafiadoras, mas a simulação do transporte de poluentes reativos subterrâneos através do aquífero é essencial para previsões do futuro e a qualidade das águas subterrâneas (VISSER et al, 2009).

e. Na segunda metade do século 20 a indústria e a agricultura chegam no Elba, na parte montanhosa da República Checa, causando muita poluição na água e uma elevada carga suspensa. Um reservatório com um volume total de 9.200.000m<sup>3</sup> foi construído em 1914 para fechar a parte montanhosa da bacia e para prevenir as

inundações, que possam pôr em perigo as cidades à jusante. Cerca de 20% do seu volume foi agora preenchida com sedimentos poluídos. Estes poderiam potencialmente ser transportados para jusante e liquidados na planície de inundação, e poderia, assim, também influenciar a qualidade das águas subterrâneas (RUDIŠ et al, 2009).

Para encontrar onde os sedimentos foram localizados e para calcular a quantidade de sedimento, o fluxo dinâmico, foi utilizado o modelo *FAST 2D*, para calcular a quantidade de sedimentos na planície aluvial; o movimento da poluição abaixo do terreno foi então descrito usando o modelo *MT3DMS*. O principal resultado é uma simulação de predição de concentração de zinco (como um representante geral dos metais pesados), em diferentes camadas aquíferas após 10 e 20 anos (RUDIŠ et al, 2009).

O método de simulação aqui apresentado é um instrumento adequado relativamente rápido para se obter informações sobre o efeito de um futuro episódio catastrófico de inundação sobre o transporte e sedimentação de sedimentos poluídos e os seus efeitos sobre as águas subterrâneas de qualidade (RUDIŠ et al, 2009).

f. No trabalho de Pulido-Velazquez et al, 2009, um modelo matemático foi criado para avaliar a gestão dos recursos hídricos que considera simultaneamente de superfície e subterrânea, bem como a componente hidráulica e sua interação. Dois requisitos foram necessários: o comportamento estocástico hidrológico da superfície em longo prazo e um modelo do aquífero.

O Método *Eigenvalue* foi utilizado para solucionar o problema de fluxo de águas subterrâneas oferecendo em tempo contínuo uma solução formulada usando uma equação.

Este trabalho descreve uma metodologia para simular condições subterrâneas de fronteira de fluxo não-linear utilizando um estado definido a partir de uma equação linear *Eigenvalue Modelo*, e dá uma descrição pormenorizada da formulação de *diferenças finitas*. A aplicação desta metodologia computacional conserva as vantagens do *Eigenvalue Method*.

g. Uma abordagem interessante para a determinação de parâmetros de aquíferos foi apresentada por Roselló et al (2009). Os autores analisaram o estado atual da vulnerabilidade da sociedade e seu ambiente de risco, bem como a criação de um esquema conceitual em relação aos aspectos que compõem o conceito de vulnerabilidade do ambiente humano. Atendendo a este regime, uma lista de indicadores de vulnerabilidade é útil em uma ampla gama de riscos a partir de diferentes fontes. A seguir, proporam uma estimativa da vulnerabilidade em meios humanos para um determinado risco, tais como o risco de contaminação de aquíferos.

Do ponto de vista de gestão de risco, tornam-se possível a localização de fontes de perigo, sobretudo as zonas mais vulneráveis. A combinação deste resultado (perigo + vulnerabilidade intrínseca), com o mapeamento da vulnerabilidade do ambiente humano, faz com que seja possível evitar as consequências de contaminação em uma população e seus bens. Através dos mapas de risco e da vulnerabilidade das populações e seus bens, permitiram distinguir e localizar, em uma área do aquífero (com um reconhecido nível de risco e intrínseca vulnerabilidade), os grupos da população, as atividades ou ativos que, devido à sua especial vulnerabilidade à contaminação da água, estão em maior risco de ser afetados por uma eventual contaminação. Este papel, portanto, é especialmente útil, no contexto de uma decisão de apoio, específica para a concepção de medidas preventivas, tais como a diversificação das fontes de abastecimento de água em uma região, a intensificação de informativos de medidas destinadas a grupos de dada população ou atividades susceptíveis a ser afetados, bem como a habilitação de relevante cobertura. Os resultados são igualmente válidos para a concepção de medidas paliativas para ser aplicada no caso de uma catástrofe (por exemplo, procura e identificação de fontes alternativas de abastecimento), bem como a compensação de medidas pós-catástrofe (ROSELLÓ et al, 2009).

h. Santos et al (2006) apresentou a utilização do *Visual Modflow* para tratamento de aquífero livre e raso. O modelo desenvolvido se mostrou viável. Porém, os resultados indicaram a necessidade de uma área considerável ( $>2.000 \text{ m}^2$ ) para a implantação desses sistemas.

Foram realizadas análises de vulnerabilidade natural à poluição do aquífero freático. Contaram para a análise o *índice DRASTIC*, que apresenta como principais características: simplicidade, baixo custo, fácil aplicação e é amplamente utilizado em estudos de vulnerabilidade. Os resultados obtidos mostraram-se eficaz, a aplicabilidade deve-se à quantidade de parâmetros diretos e indiretos utilizados em sua determinação, envolvendo maior variedade de fatores que outros índices de vulnerabilidade natural à poluição.

i. Wagener e Kollat (2007) utilizaram o *Monte Carlo Analysis Toolbox (MCAT)* para a avaliação de modelos hidrológico e ambiental. A ferramenta apresenta vantagens de funcionar off-line, ou seja, não tem que ser ligado ao modelo de avaliação. O MCAT contém ferramentas para avaliação de desempenho, identificação de hipóteses no que diz respeito à estrutura do modelo utilizado. O MCAT, até agora, tem sido aplicado com sucesso para avaliar modelos em uma investigação em estudos hidrológicos e ambientais, além de ser utilizado em cursos (sistemas de modelagem e hidrologia) e workshops.

j. RIDOLFI & SORDO (1997) estudaram a convecção e o comportamento dispersivo de poluentes passivos de um aquífero artesiano, no qual um campo de fluxo causado por uma parte, penetrando, é sobreposto em cima de um caudal de águas subterrâneas uniforme. O objetivo foi fornecer os meios para descrever matematicamente a evolução de um poluente em um aquífero, a partir da fonte. O objetivo é auxiliar no planejamento correto de poços parcialmente penetrantes, tanto os de remediação de aquíferos e as destinadas para outros usos que são elas próprias em risco da poluição. É dentro deste contexto que o presente trabalho deve ser considerado, em que um esquema matemático é proposto - imediatamente em um computador - que permite o estudo da convecção e dispersiva dos fenômenos de transporte, no caso de um poço artesiano parcialmente penetrante em um aquífero que é em si também o local de um fluxo de água subterrânea de base uniforme.

## 1.6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANA - Agência Nacional de águas. Atlas Nordeste - **Abastecimento urbano de água**. Brasília, DF, 2006. Disponível em:<  
[http://atlas\\_nordeste.ana.gov.br/atlas\\_nordeste/pe.aspx](http://atlas_nordeste.ana.gov.br/atlas_nordeste/pe.aspx)>. Acesso em: 01 Abr 2009.

ÁGUA SUBTERRÂNEA MINIMIZAÇÃO DAS CONSEQUÊNCIAS DA SECA NO NORDESTE. Associação Brasileira de Águas Subterrâneas - ABAS, jun / 2003, 40 p.

AGÊNCIA NACIONAL DE ÁGUAS – ANA. Atlas Nordeste – Abastecimento Urbano de Água. Brasília, 2005, 82p.

BORTHWICK, A.G.L.; MARCHANT, R.D.; COPELAND, G.J.M. Adaptive hierarchical grid model of water-borne pollutant dispersion. **Advances in Water Resources**, v. 23, p. 849 – 865, 2000.

BAGTZOGLU, Amvrossios C.; ATMADA, Juliana. Mathematical Methods for hidrologic inversion: the case of pollution source identification. **Haudb Eniron Cherm**, v. 5, part F, vol 3, p. 65-96, 2005.

BATISTA, R. P. **Estudo Hidrogeológico da Planície do Recife-PE**. 1984. Dissertação Mestrado – Universidade Federal de Pernambuco - UFPE, Recife, 1984.

CARVALHO FILHO, Ormiro Joaquim de. **MODELOS MATEMÁTICOS PARA DISPERSÃO DE POLUENTES: Aplicação ao Estudo da Bacia Hidrográfica Subterrânea do Aquífero Boa Viagem.**

CORREIA, Eliseu Romero Campelo. **Caracterização da Vulnerabilidade Natural do Aquífero Boa Viagem no Município de Recife – Método GOD.** Recife, 2006, 89p. Dissertação (Mestrado em Geociências, área de concentração em Hidrogeologia) – Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2006.

COMPESA/ACQUA-PLAN, 1982. Plano Diretor de Recursos Hídricos – Região Metropolitana do Recife, v. III – **Recursos Hídricos Subterrâneos.** Recife-PE.

CORREIA, Eliseu Romero Campelo. **Caracterização da Vulnerabilidade Natural do Aquífero Boa Viagem no Município de Recife – Método GOD.** Recife, 2006, 89p. Dissertação (Mestrado em Geociências, área de concentração em Hidrogeologia) – Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2006.

COSTA, W. D., SANTOS, A. C., COSTA FILHO, W. D. O Controle Estrutural na Formação dos Aquíferos na Planície do Recife. In: 8º Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas. Recife, ABAS. 38-43, 1994.

COSTA FILHO, W. D. et al. Estudo Hidrológico da Região Metropolitana do Recife. **Projeto HIDROREC – Convênio IDRC-UFPE/FADE.** Recife, v. 2, 1998.

CPRM – SERVIÇO GEOLÓGICO DO BRASIL, 2003. **Sistema de Informação Geoambientais da Região Metropolitana do Recife.** Coordenador: Pedro Augusto dos Santos Pfaltzgraff. Recife, 119p.

CID, Maria Isabel Herreros. **Desarrollo de Modelos Numéricos Aplicados a Hidráulica Ambiental.** Tesis Doctoral. Universidad Complutense de Madrid. Madrid/Espana, 2003, 46p.

CONGRESSO INTERNACIONAL SOBRE DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL, 3. 2009, Auditório do Teatro da Universidade Católica (TUCA), em São Paulo. Conselho Empresarial Brasileiro para o Desenvolvimento Sustentável (CEBDS). Disponível em:<  
<http://www.cebds.org.br/cebds/>>

ELIS, Vagner Roberto. Geofísica Aplicada na Detecção e Mapeamento de Contaminação de Águas Subterrâneas. Departamento de Geofísica – IAG / USP, São Paulo, 2005.

CARVALHO FILHO, Ormíro Joaquim de. MODELOS MATEMÁTICOS PARA DISPERSÃO DE POLUENTES: Aplicação ao Estudo da Bacia Hidrográfica Subterrânea do Aquífero Boa Viagem.

ESPINDULA, Jeane Correia. **Caracterização Bacteriológica e Físico-Química das Águas do Aquífero Freático do Cemitério da Várzea-Recife**. Recife/PE, 120p, 2004.

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA – IBGE, 2001, Censo Demográfico, Brasília.

KALIVARAPU, Vijay e WINER, Eliot. A multi-fidelity software framework for interactive modeling of advective and diffusive contaminant transport in groundwater, **Environmental Modelling & Software**, v. 23, p. 1370-1383, 2008.

KÖPPEN, W. The Climates of North América. R. Handbuch der Klimatologie, Berlim, 1948.

LIMA FILHO, M. F. Análise Estratigráfica e Estrutural da Bacia Pernambuco. São Paulo: IG/USP. 168p. Tese de Doutorado, 1998.

LEAL, Onofre. Sistema de Informações para Gestão Territorial da Região Metropolitana do Recife - Projeto SINGRE; **Vulnerabilidade das Águas Subterrâneas da Região Metropolitana do Recife**. Recife: CPRM/FIDEM, 1994, 29p.

MARTÍNEZ-SANTOS, Pedro, LLAMAS, M. Ramón, MARTÍNEZ-ALFARO, Pedro E. Vulnerability assessment of groundwater resources: A modelling-based approach to the Mancha Occidental aquifer, Spain, **Environmental Modelling & Software**, v. 23, p. 1145-1162, 2008.

MOLSON, John. Modelos Matemáticos e Hidrogeologia. **Águas Subterrâneas**, ano 2, Nr 7, Setembro – Outubro, p. 15 – 16, 2008.

MUNEM, Mustafa A; FOULIS, David J.. **Calculo**. 1. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1982. 605p.

MABSOONE, J. M. & SILVA, J. C. Aspectos geomorfológicos. IN: Estudos geológicos. UFPE – Depto GEOLOGIA. Série B – Estudos e Pesquisas. v. 10, p. 117 a 132, 1991.

CARVALHO FILHO, Ormiro Joaquim de. **MODELOS MATEMÁTICOS PARA DISPERSÃO DE POLUENTES: Aplicação ao Estudo da Bacia Hidrográfica Subterrânea do Aquífero Boa Viagem.**

PIRES, Paulo Sérgio da Motta. **Introdução ao Scilab Versão 3.0.** Departamento de Engenharia de Computação e Automação. Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal-RN, 2004, 129p. Disponível em: <http://www.dca.ufrn.br/~pmotta/sciport-3.0.pdf>.

RACHDAWONG, P. Christensen. Determination of PCB sources by a principal component method with nonnegative constraints. **Environ Sci Technol**, v. 31, p. 2686 –2691, 1997.

RIDOLFI, Luca & SORDO, Sebastiano. Hydrodynamic dispersion in an artesian aquifer during flow to a partially penetrating well, **Journal of Hydrology**, v. 201, 1997, p. 183-210.

RENNÓ, Camilo Daleles e SOARES, João Vianeí. **Modelos Hidrológicos para Gestão Ambiental.** Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – INPE. 2000.

RIDOLFI, Luca & SORDO, Sebastiano. Hydrodynamic dispersion in an artesian aquifer during flow to a partially penetrating well, **Journal of Hydrology**, v. 201, 1997, p. 183-210.

ROSELLÓ, M.J. Perles; MARTINEZ, J.M. Vías; NAVARRO, B. Andreo. Vulnerability of human environment to risk: Case of groundwater contamination risk. **Environment International**, v. 35, p. 325-335, 2009.

RUDIŠ, Miroslav et al. Assessment of the deposition of polluted sediments transferred by a catastrophic flood and related changes in groundwater quality. **Journal of Hydrology**, v. 369, p. 326-335, 2009.

REBOUÇAS, Aldo da Cunha. A Política Nacional de Recursos Hídricos e as Águas Subterrâneas. **Revista Águas Subterrâneas**, v. 16, maio/2002, p. 95 a 107.

REINKE, Meriéle. **Título:** Utilização de redes neurais artificiais aplicadas a mapeamentos hidrológicos. São Leopoldo – RS, 2008, 97 p, Tese Mestrado, Universidade do Vale do Rio dos Sinos – UNISINOS.

RENNÓ, Camilo Daleles e SOARES, João Vianeí. **Modelos Hidrológicos para Gestão Ambiental.** Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – INPE. 2000.

CARVALHO FILHO, Ormiro Joaquim de. **MODELOS MATEMÁTICOS PARA DISPERSÃO DE POLUENTES: Aplicação ao Estudo da Bacia Hidrográfica Subterrânea do Aquífero Boa Viagem.**

SANTOS, Jeane G. et al. Modelagem matemática para aplicação de sistemas de wetlands no tratamento de aquíferos livres e rasos contaminados. **Águas Subterrâneas**, v. 20, n.1, p. 115-130, 2006.

SANTOS, Maurício Moreira dos et al. Avaliação da vulnerabilidade natural à poluição utilizando-se o índice DRASTIC em área selecionada na cidade de Londrina (PR). **Águas Subterrâneas**, v. 20, n. 1, p. 29-46, 2006.

SWOKOWSKI, Earl William. **Cálculo com geometria analítica**. 2. Ed, São Paulo, MAKRON Books do Brasil, 1994, 744p.

SÃO PAULO (Estado). Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental. **Relatório de qualidade das águas subterrâneas do Estado de São Paulo**, 2001-2003. São Paulo: CETESB, 2004.

THEODOROPOULOU, M. A., KAROUTSOS, V., TSAKIROGLOU, C. C. A new visualization technique for the study of solute dispersion in model porous media, **Journal of Hydrology**, v. 274, 2003, p. 176-197.

VELAZQUEZ, David Pulido; SAHUQUILLO, Andrés; ANDREU, Joaquín. Treatment on non-linear boundary conditions in groundwater modeling with Eigenvalue Methods. **Journal of Hydrology**, v. 368, p. 194-204, 2009.

VISSER, Ate et al. Trends in pollutant concentrations in relation to time of recharge and reactive transport at the groundwater body scale. **Journal of Hydrology**, v. 369, p. 427-439, 2009.

WAGENER, Thorsten; KOLLAT, Joshua. Numerical and Visual Evaluation of Hydrological and Environmental Models Using the Monte Carlo Analysis Toolbox. **Environmental Modelling & Software**, V. 22, p. 1021-1033, 2007.

**5º Fórum Mundial da Água: “Superando a escassez da água, rumo à sustentabilidade.** Istanbul – Turquia, 2009. Disponível em:< [www.worldwaterforum5.org](http://www.worldwaterforum5.org)>. Acesso em: 29 Mar 2009.

# **CAPÍTULO II**

## **MODELAGEM MATEMÁTICA DE SISTEMAS FÍSICOS UTILIZANDO EQUAÇÕES DIFERENCIAIS**

## Resumo

Existem diversas fontes de contaminação de águas subterrâneas, como áreas de disposição de resíduos sólidos (urbanos e industriais), lagoas de tratamento de efluentes industriais, disposição de esgoto, disposição de resíduos radioativos, atividades agrícolas, vazamentos de petróleo e derivados, rejeitos de atividades mineradoras, entre outras. Dentre as principais fontes de poluição de águas subterrâneas merecem destaque os depósitos de resíduos urbanos. A avaliação confiável dos perigos ou riscos resultantes dos problemas de contaminação das águas subterrâneas e o desenho de técnicas eficientes e eficazes para atenuar estes problemas requerem a capacidade de prever o comportamento de contaminantes no fluxo de água. Para escolher uma estratégia adequada de reabilitação, o conhecimento do contaminante, da fonte, do tempo e da história torna-se pertinente na descontaminação. Com mais e mais áreas contaminadas sendo detectadas atualmente, é quase impossível de realizar uma exaustiva perfuração, testes e análises químicas de impressão digital, especialmente no caso da poluição sendo gerada pela construção e reparação de materiais. Neste capítulo, analisamos os métodos matemáticos que servem como ferramenta na detecção e mapeamento dos poluentes em sistemas subterrâneos e resumimos os resultados obtidos em simulações numéricas de diversas situações de contaminação de um modelo simplificado de aquífero validando qualitativamente tais simulações mediante comparação com um arranjo experimental também correspondente aquele modelo simplificado.

Palavras-Chave: águas subterrâneas, poluição, métodos matemáticos.

## **Abstract**

There are different sources of groundwater contamination, such as disposal areas for solid waste (municipal and industrial), ponds treatment of industrial effluents, sewage disposal, radioactive wastes, agricultural activities, oil spills and oil, waste activities mining, and others. Among the major sources of groundwater pollution noteworthy deposits of waste. A reliable assessment of the dangers or risks posed by problems of groundwater contamination and the design of efficient and effective techniques to mitigate these problems require the ability to predict the behavior of contaminants in the water flow. To choose an appropriate strategy for rehabilitation, the knowledge of the contaminant source, time and history becomes relevant in decontamination. With more and more contaminated areas are currently being detected, it is almost impossible to conduct a comprehensive drilling, testing and chemical analysis of fingerprint, especially in the case of pollution being generated by the construction and repair materials. In this chapter, we have analyzed the mathematical methods which served as a tool in the detection and mapping of pollutants in underground systems and summarized the results obtained in numerical simulations of several instances of contamination of a simplified model of the aquifer qualitatively validating these simulations by comparison with an experimental arrangement also that corresponding simplified model.

Keywords: groundwater, pollution, mathematical methods.

## INTRODUÇÃO

Apresentaremos como ferramenta de análise em sistemas subterrâneos um modelo matemático que objetiva a distribuição espacial e temporal da concentração de poluentes em águas subterrâneas. Antes apresentaremos definições das equações diferenciais e sua aplicabilidade associada ao transporte de nutrientes presentes em água residual.

Um conjunto simplificado de equações será resolvido analiticamente para testar os resultados numéricos. Soluções numéricas em uma e duas dimensões são obtidas pelos métodos do decaimento radioativo, Métodos de Euler, Métodos de Runge-Kutta, espaciais e temporais locais de interesse.

## 2.1 MATERIAIS E MÉTODOS

### 2.1.1 Definição de Equações Diferenciais

São equações que apresentam derivadas ou diferenciais de uma função desconhecida (a incógnita da equação). Estas equações são comuns no uso da modelagem de desenvolvimento ao longo do tempo de um sistema físico mediante o uso de equações, por exemplo, no ensino médio aprendemos que se um veículo move-se em linha reta a velocidade constante  $V_0$  a partir de um ponto inicial  $S_0$  então podemos encontrar sua posição após o tempo decorrido  $t$  (contado a partir do instante que o veículo inicia seu movimento no ponto  $S_0$ ) pela equação  $S = S_0 + V_0 t$ .

Quanto à sua aplicabilidade, aprendemos que este caso é apenas um caso particular de uma situação mais geral no qual o veículo se move em velocidade uniformemente variada, i.e, com aceleração constante  $a$  em linha reta (no caso anterior,  $a = 0$ ) que é dada por  $S = S_0 + V_0 t + a \frac{t^2}{2}$ .

Observamos que, mesmo tal generalização não é muito realista, pois na prática, todos os veículos passam por momentos de aceleração, desaceleração, velocidade constante e os valores de aceleração e velocidade podem variar entre um momento e outro.

Para compreender casos mais gerais, Sir Isaac Newton (1643-1727) propôs em 1687 a seguinte abordagem:

Considere que o corpo move-se a velocidade  $V = V(t)$  conhecida durante todo o tempo do percurso. Se o intervalo de tempo  $\Delta t$  entre duas medições de velocidade (digamos nos tempos  $t_1$  e  $t_2$ ) for muito pequeno então a velocidade ficará praticamente constante e igual a  $V = V(t_1)$  e podemos escrever  $S_1 = S_0 + V t_1$  e  $S_2 = S_0 + V t_2$  obtendo que

o *intervalo percorrido* pelo corpo será de, aproximadamente,  $\Delta S = S_2 - S_1 \cong V\Delta t$  o que implica que  $V \cong \frac{\Delta S}{\Delta t}$ . A taxa de variação relativa entre duas grandezas (neste caso, distância percorrida e tempo) quando as respectivas grandezas são tomadas arbitrariamente próximas é o conceito de derivada conforme estudado por Newton. No caso anterior, Newton estabeleceu que  $V(t) = \frac{dS}{dt}$  (1).

Onde, nesta última expressão,  $\frac{dS}{dt}$  substitui a razão  $\frac{\Delta S}{\Delta t}$  quando tanto S quanto t são tomados próximos um do outro tanto quanto se queira. Note que o símbolo de aproximação  $\cong$  na expressão do quociente é substituído por uma igualdade.

Mais formalmente, se  $f : (a, b) \rightarrow R$  é função contínua definida no intervalo aberto (a, b) no qual  $a < b$  então definimos  $\frac{df}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$  desde que o limite do lado direito exista<sup>5</sup>.

Equações como (1), que relacionam uma função (naquele exemplo,  $V=V(t)$ ) com a derivada de outra função (naquele exemplo,  $S=S(t)$ ) são chamadas de equações diferenciais. A **ordem** de uma equação diferencial é o grau da mais alta derivada envolvida na equação. Vejamos alguns exemplos:

a)  $\frac{dy}{dt} = -h\sqrt{y}$  (equação de Torricelli mede como o nível y(t) de um reservatório

varia conforme o tempo se o mesmo perde água a uma taxa de vazão h exclusivamente sob a ação da gravidade).

b)  $\frac{dT}{dt} = -k(T - T_0)$  (Lei do resfriamento de Newton mede como a temperatura

T(t) de um corpo varia com o decorrer do tempo se o mesmo está resfriando em um ambiente de temperatura constante igual a  $T_0$  e a condutividade térmica do material é igual a  $k > 0$ ).

c)  $m \frac{d^2x}{dt^2} + c \frac{dx}{dt} + kx = F(t)$  (Movimento massa-mola mede como a deformação

x(t) de uma mola com constante de Hooke igual a k varia quando ela é ligada a uma massa m e é sujeita a um amortecimento cuja constante é c e a uma força que varia ao longo do tempo segundo a função F(t)).

---

<sup>5</sup> Nos cursos universitários de cálculo tal conceito, suas propriedades e aplicações são estudadas com muito mais detalhamento.

As duas primeira equações são de 1ª ordem (apenas uma derivada, assim como a do exemplo (1) ) e a última de 2ª ordem. Se substituirmos as aparições da derivada por potências de uma variável fictícia  $z$  (ou seja,  $y = z^{(0)}$ ,  $\frac{dy}{dt} = z^{(1)}$ ,  $\frac{d^2y}{dt^2} = z^{(2)}, \dots$ ) e considerarmos a variável  $t$  como constante numa equação diferencial e o resultado for um **polinômio** na variável  $z$ , então diremos que a equação é **linear**, nos demais casos, a equação é chamada de não linear. Em uma equação linear, se o termo independente do polinômio for constante então a equação é dita linear e homogênea. Nos exemplos anteriores:

a)  $\frac{dy}{dt} = -h\sqrt{y}$ . Faça  $y = z^{(0)}$  e  $\frac{dy}{dt} = z^{(1)}$  obtendo  $z^{(1)} - h\sqrt{z^{(0)}} = 0$  de forma

que a equação **não é linear**. Note que não há termo independente de  $z$  logo a equação é **homogênea**.

b)  $\frac{dT}{dt} = -k(T - T_0)$ . Faça  $T = z^{(0)}$  e  $\frac{dT}{dt} = z^{(1)}$  obtendo  $z^{(1)} + kz^{(0)} - kT_0 = 0$

que é a equação de um polinômio em  $z$ . O termo independente de  $z$  é  $-kT_0$  que só é nulo se  $T_0=0$ , portanto, exceto neste caso, a equação é **linear e também homogênea**.

c)  $m\frac{d^2x}{dt^2} + c\frac{dx}{dt} + kx = F(t)$ .

Fazendo  $x = z^{(0)}$ ,  $\frac{dx}{dt} = z^{(1)}$  e  $\frac{d^2x}{dt^2} = z^{(2)}$  obteremos

$mz^{(2)} + cz^{(1)} + kz^{(0)} - F(t) = 0$ . O termo independente de  $z$  é  $-F(t)$  que só é nulo se o sistema massa-mola não sofrer influência externa (por exemplo, uma massa ligada a uma mola sob ação da gravidade, mas sem atrito). Neste caso, a equação é **linear e homogênea**. Se o sistema sofrer ação externa, a equação será **linear e não homogênea**.

A importância destes conceitos reside no fato de que *somente existem técnicas que resolvem analiticamente uma equação diferencial se a equação for linear, homogênea e de baixa ordem*. Em quaisquer outros casos (por exemplo, mesmo na equação de Torricelli) ou precisamos lançar mão de alguma mudança de variáveis ou técnica avançada de solução por funções especiais (o que também funciona apenas em grupos restritos de equações diferenciais) ou então devemos lançar mão de alguma **técnica ou método numérico** de solução.

Para exemplificar o que entendemos por **solução** de uma equação diferencial e quais as técnicas numéricas envolvidas na obtenção de **soluções aproximadas** vamos

resolver detalhadamente duas equações diferenciais clássicas: A equação do decaimento exponencial (presente em processos radioativos) e a equação pendular (presente em processos periódicos ou oscilatórios).

### 2.1.2 Resolvendo Equações Diferenciais

Voltando ao exemplo do movimento do móvel: A equação (1) fornece uma maneira de, dada a **função**  $V(t)$  que representa como o corpo muda a velocidade ao longo do tempo, encontrar a equação de como sua distância ao ponto  $S_0$  muda. Vejamos os casos:

Caso 1, Velocidade constante: Este caso equivale a fazer  $V(t)=V_0$  e já sabemos que a solução é  $S = S_0 + V_0 t$ . Se, no entanto *não soubéssemos* *disto* poderíamos fazer:  $V(t) = \frac{dS}{dt} \Rightarrow S(t) = \int V(t)dt = \int V_0 dt = V_0 t + K$ , onde utilizamos o teorema fundamental do cálculo para passar da derivada para a integral.

Integrais são, de modo geral, inversas das derivadas onde o termo “de modo geral” foi utilizado por que quando uma função possui inversa ela (a inversa) é **única** o que não é o caso da integral. Funções diferentes podem ter a mesma integral, porém sabemos que, neste caso, elas diferem (as integrais) uma da outra por um valor constante e indeterminado (o termo  $K$  da equação acima presente em todas as integrais primitivas dadas no apêndice).

O que ocorreu neste exemplo foi absolutamente geral – ocorrem em todas as equações diferenciais – a solução é dada por uma **função** e não por um número (o que é natural, pois estamos calculando como a distância  $S$  *varia* ao longo do tempo) e esta função possui um termo *indeterminado* que somente é conhecido com base no estudo do problema original. Neste caso, no tempo  $t=0$  *sabemos* que  $S(0)=S_0$ . Substituindo este conhecimento na equação  $S(t) = V_0 t + K$  teremos  $S_0 = S(0) = V_0 \times 0 + K \Rightarrow K = S_0$  o que conclui no resultado que conhecíamos  $S = S_0 + V_0 t$ .

Caso 2, Velocidade variando de forma constante: Equivale a fazer  $V = V_0 + at$ .

Substituindo na expressão da solução  $S(t) = \int V_0 + at dt = V_0 t + a \frac{t^2}{2} + K$  e fazendo  $S(0)=S_0$

como no caso anterior obteremos o resultado conhecido  $S = S_0 + V_0 t + a \frac{t^2}{2}$ .

*Caso Geral:* Note que, uma vez de posse da **expressão integral** da solução, neste caso,  $S(t) = \int V(t)dt$  podemos calcular a solução **qualquer que seja** a expressão de  $V(t)$ . Por exemplo, se  $V(t) = V_0 + at + bt^2$  (um caso no qual a própria aceleração varia e que não é estudado no ensino pré-universitário) encontraríamos a expressão  $S(t) = \int V_0 + at + bt^2 dt = V_0t + a\frac{t^2}{2} + b\frac{t^3}{3} + K$  e usando a **condição inicial**  $S(0)=S_0$  obteríamos a solução geral  $S(t) = S_0 + V_0t + a\frac{t^2}{2} + b\frac{t^3}{3}$ .

Observe que podemos repetir este procedimento *qualquer que seja a expressão de  $V(t)$  desde que saibamos calcular a integral  $\int V(t)dt$* .

Mesmo quando a solução não é tabelada (ou mesmo conhecida) podemos sempre encontrar uma **aproximação numérica** da solução, mediante técnicas numéricas de integração, tais como a técnica de Simpson, por exemplo.

Os casos nos quais sabemos encontrar uma “fórmula” para solução (mediante técnicas matemáticas avançadas ou mediante funções tabeladas) são chamados de **casos analíticos** e, infelizmente, é a minoria na prática. Os casos não-analíticos são resolvidos de forma aproximada por método numérico. Antes de descrever as técnicas numéricas mais simples para resolução de equações diferenciais (nas quais sabemos ou não uma expressão integral) vejamos mais dois casos interessantes que ilustram outros aspectos das equações diferenciais:

### 2.1.3 Equação do Decaimento Radioativo

Sabemos da física de partículas que, decorrido o chamado tempo-de-meia-vida de um isótopo radioativo, sua massa ativa cai à metade. Assim, a massa ativa em um dado instante é proporcional à massa ativa no instante imediatamente anterior, o que é descrito pela chamada *lei de decaimento*  $\frac{dM(t)}{dt} = \lambda M(t)$  (2).

Não podemos repetir o procedimento que usamos no caso do veículo em movimento, pois a expressão resultante seria  $M(t) = \lambda \int M(t) dt$  e a função  $M(t)$  que queremos calcular encontra-se de forma insolúvel tanto no lado esquerdo quanto no lado direito da igualdade.

Casos como este são bem comuns, mesmo entre os casos analíticos. Observe, no entanto, que a equação é linear e homogênea e, nos cursos de cálculo avançado, mostra-se que, se a equação linear e de primeira ordem for escrita como<sup>6</sup>

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (2)$$

Então sua solução<sup>7</sup> é dada pela expressão

$$y(x) = \exp\left(-\int_{x_0}^x P(t)dt\right) \left\{ \int_{x_0}^x Q(t) \exp\left(\int_{x_0}^t P(s)ds\right) dt + y_0 \right\} \quad (3)$$

Por mais complexa que possa parecer a expressão (3) permite uma vez conhecida a expressão de P(x) e Q(x) calcular a expressão de y(x). As integrais (definidas) que aparecem nesta expressão são particularmente úteis, pois permitem um fácil cálculo numérico por ferramentas tais como o Scilab. O caso do decaimento radioativo, porém, é simples o suficiente para efetuarmos as integrações envolvidas na expressão (3). Vejamos:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \text{ equivale para o decaimento radioativo, a } \begin{cases} \frac{dM}{dt} = \lambda M \\ M(t_0) = M_0 \end{cases} \text{ onde a variável}$$

x é substituída pela variável t, a função y pela função M(t) e M<sub>0</sub> é a massa inicial do isótopo radioativo. Comparando as expressões, conclui-se ainda que  $\begin{matrix} P(x) = P(t) = \lambda \\ Q(x) = Q(t) = 0 \end{matrix}$ . Substituindo

agora na expressão (3)

$$M(t) = \exp\left(\int_{t_0}^t -\lambda d\xi\right) \left\{ \int_{t_0}^t 0 \times \exp\left(\int_{t_0}^s -\lambda ds\right) dt + M_0 \right\} = \exp(-\lambda(t-t_0)) \{M_0\} = M_0 \exp(\lambda(t_0-t))$$

assim :

$$M(t) = M_0 \exp(\lambda(t_0-t))$$

onde o fato de  $Q(t) = 0$  anulou a integral entre os { } e, na primeira integral, a variável t foi substituída por  $\xi$  para não confundir-se com a variável tempo (t).

O Scilab possui a expressão (3) (implementada como o método interno **ode** (um pequeno manual do Scilab é dado no apêndice). O código no Scilab que calcula a

<sup>6</sup> Esta forma é chamada de forma geral do problema de valor inicial (PVI) para equações lineares de 1ª ordem (homogêneas ou não)

<sup>7</sup> Nos cursos de cálculo avançado, é estudado o chamado Teorema da Existência e Unicidade o qual garante que, em condições muito gerais, só há uma solução de uma dada EDO satisfazendo as condições iniciais, ou seja, se encontrarmos, por alguma técnica qualquer, uma solução, pode ter certeza de que não há outras a procurar.

expressão (3) (3a partir da equação diferencial dada pela expressão 
$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (2)$$

segue como exemplo:

```
function [ydot]=PVI_linear_1aOrdem(x,y)
    ydot=funcaoQ(x)-y.*funcaoP(x);
endfunction;

function [sol]=Solucao_PVI(x0,y0,x,npontos)
    //Solucao do PVI com condição inicial y(x0)=y(0) de x0 a x calculada em n
    pontos
    sol=ode(y0,x0,PontosX,PVI_linear_1aOrdem)
endfunction;
```

Código do Scilab para calculo da expressão (4) dados os códigos das funções P(x) e Q(x)

Para verificar a precisão das aproximações numéricas envolvidas, fazamos  $M_0 = 1$ ,  $\lambda = 0.1$ ,  $t_0 = 0$  e  $t = 5$  na solução exata  $M(t) = M_0 \exp(\lambda(t_0 - t))$  e na solução aproximada pelo Scilab com o método ode. O código completo da expressão, neste caso, é:

```
x = 5; //aqui x faz o papel da variável t
lambda = 0.01;
x0 = 10; //xo=Mo no decaimento exponencial
x = 5; //aqui x faz o papel da variável t
npontos=10;

function [valor]=funcaoP(x)
    valor=-lambda;
endfunction;

function [valor]=funcaoQ(x)
    valor=0;
endfunction;

function [ydot]=PVI_linear_1aOrdem(x,y)
    ydot=funcaoQ(x)-y.*funcaoP(x);
endfunction;

function [sol]=Solucao_PVI(x0,y0,x,npontos)
    //Solucao do PVI com condição inicial y(x0)=y(0) de x0 a x calculada em n
    pontos
    PontosX=linspace(x0,x,npontos);
    sol=ode(y0,x0,PontosX,PVI_linear_1aOrdem)
endfunction;
```

E, realizando os cálculos e visualizando (usando a função **plot** do scilab) as duas soluções:

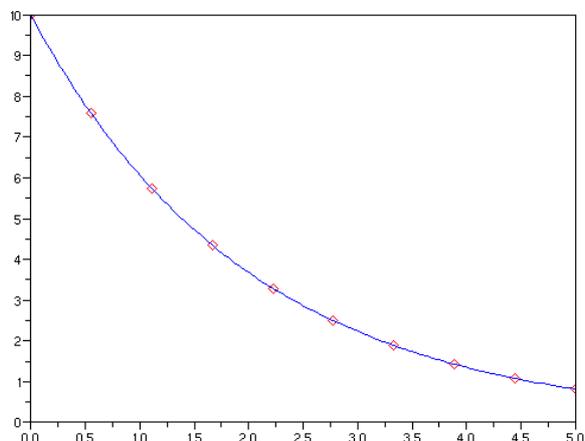


Gráfico 1: A linha contínua indica o valor exato da solução. Os pontos marcados foram às aproximações calculadas pelo Scilab. O erro entre ambas, no pior caso, foi menor que  $10^{-4}$  %.

## 2.1.4 Movimento Oscilatório

Fenômenos oscilatórios estão associados às soluções da chamada equação

pendular  $\frac{d^2 y}{dx^2} = \lambda y$  (5)

Equações como a equação pendular faz parte de uma classe mais ampla de equações diferenciais chamadas de equações diferenciais lineares de 2ª ordem cuja formulação geral é

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 y}{dx^2} + p(x) \frac{dy}{dx} + q(x)y = f(x) \\ y(x_0) = y_0 \\ y'(x_0) = y'_0 \end{array} \right. \quad (4)$$

Quando  $f(x)$  é identicamente nulo chamamos a equação de homogênea e quando  $p(x) = p$  e  $q(x) = q$  ( $p$  e  $q$  constantes) chamamos de equação linear a coeficientes constantes. Note que o problema de valor inicial, neste caso, precisa de **duas** condições iniciais (uma sobre o valor inicial da função e outra sobre o valor inicial de sua derivada simbolizada pela notação  $\frac{dy}{dx} = y'(x)$ )

Existe toda uma teoria específica ao caso de equações lineares a coeficientes constantes (homogêneas ou não em qualquer ordem), mas não há como no

caso 1ª ordem, uma fórmula analítica para o caso geral. Um método comumente utilizado para aproveitar parte da teoria do caso de 1ª ordem é fazer a adição de uma nova variável

$$z = \frac{dy}{dx} \text{ que permite escrever a equação}$$

$$\begin{cases} \frac{d^2 y}{dx^2} + p(x) \frac{dy}{dx} + q(x)y = f(x) \\ y(x_0) = y_0 \\ y'(x_0) = y'_0 \end{cases} \quad (4)$$

como o sistema de equações de primeira ordem:

$$(5) \quad \begin{cases} z = \frac{dy}{dx} \\ \frac{dz}{dx} + p(x)z = f(x) - q(x)y \end{cases}$$

À custa do aumento do número de variáveis. Observe que podemos reescrever (5) na notação vetorial como

$$\frac{d\vec{z}}{dx} = A(x)\vec{z} + F(x) \text{ onde } \vec{z} = \begin{pmatrix} z_1(x) \\ z_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y(x) \\ z(x) \end{pmatrix}, A(x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -q(x) & -p(x) \end{pmatrix} \text{ e } F(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ f(x) \end{pmatrix}$$

$$\text{e as condições iniciais são } \vec{z}(x_0) = \begin{pmatrix} y_0 \\ y'_0 \end{pmatrix}$$

O que pode, facilmente, ser estendido para qualquer número de variáveis.

Ainda que não haja uma fórmula específica para resolver equações diferenciais lineares ou não de 2ª ordem, no caso específico da equação. A solução analítica é conhecida e igual a:

$$y(x) = \begin{cases} C_1 \exp(\sqrt{\lambda x}) + C_2 \exp(-\sqrt{\lambda x}), & \text{se } \lambda > 0 \\ C_1 + C_2 x, & \text{se } \lambda = 0 \\ C_1 \cos \sqrt{(|\lambda| x)} + C_2 \sin \sqrt{(|\lambda| x)}, & \text{se } \lambda < 0 \end{cases}$$

Onde:

$$\bullet \quad \begin{cases} C_1 = \frac{2y_0' \sqrt{\lambda x_0} + \lambda y_0 \exp(2\sqrt{\lambda x_0})}{\lambda(\exp(\sqrt{\lambda x_0}) + \exp(3\sqrt{\lambda x_0}))} \\ C_2 = \frac{y_0(\exp(2\sqrt{\lambda x_0})) - 2y_0' \sqrt{\lambda x_0} \exp(\sqrt{\lambda x_0})}{1 + \lambda \exp(2\sqrt{\lambda x_0})} \end{cases} \text{ se } \lambda > 0$$

$$\bullet \quad \begin{cases} C_1 = y_0 - x_0 y_0' \\ C_2 = y_0' \end{cases} \text{ se } \lambda = 0$$

$$\bullet \quad \begin{cases} C_1 = \frac{2\sqrt{x_0} y_0' \sin(\sqrt{|\lambda| x_0}) - y_0 \sqrt{|\lambda|} \cos(\sqrt{|\lambda| x_0})}{\sqrt{|\lambda|} (\sin(\sqrt{|\lambda| x_0}) + \cos(\sqrt{|\lambda| x_0}))} \\ C_2 = \frac{2\sqrt{x_0} y_0' \cos(\sqrt{|\lambda| x_0}) + y_0 \sqrt{|\lambda|} \sin(\sqrt{|\lambda| x_0})}{\sqrt{|\lambda|} (\sin(\sqrt{|\lambda| x_0}) + \cos(\sqrt{|\lambda| x_0}))} \end{cases} \quad \text{se } \lambda < 0$$

As constantes no Scilab, a mesma função **ode** pode aproximar numericamente a solução quando a equação diferencial é escrita na forma vetorial. Os exemplos que seguem, verificam a precisão da aproximação nos seguintes casos:  $\lambda = -1$ ,  $\lambda = 0$  e  $\lambda = 1$  com as condições iniciais  $x_0 = 0$ ,  $y_0 = 0$ ,  $y_0' = 1$ . O script do Scilab para cada caso é apresentado abaixo bem como o gráfico da solução encontrada versus a solução real.

```
//CODIGO PARA CALCULO DA SOLUCAO DO PVI DE 2ª ORDEM
lambda = -1;
x0 = 0;
y0 = 0;
y1 = 1;
x = 5; //aqui x faz o papel da variável t
npontos=100;

function [valor]=funcaop(x)
    valor=0;
endfunction;

function [valor]=funcaoq(x)
    valor=-lambda;
endfunction;

function [valor]=funcaof(x)
    valor=0;
endfunction;

function [valor]=funcaoF(x)
    valor=[0;funcaof(x)];
endfunction;

function [valor]=funcaoA(x)
    valor=[0,1;-funcaoq(x),-funcaop(x)];
endfunction

function [ydot]=PVI_linear_2aOrdem(x,Z)
    ydot=funcaoA(x)*Z+funcaoF(x);
endfunction;

function [PontosX,sol]=Solucao_Aproximada_PVI()
//Solucao do PVI com condição inicial y(x0)=y(0), y'(x0)=y1 de x0 a x calculada
em n pontos
    PontosX=linspace(x0,x,npontos);
```

```

Yo=[y0;y1];
sol=ode(Yo,x0,PontosX,PVI_linear_2aOrdem)
endfunction;

function [PontosX,sol]=Solucao_Exata_PVI()
PontosX=linspace(x0,x,npontos);
if lambda<0 then
A=zeros(2,2);
A(1,1)=cos(sqrt(-lambda)*x0);
A(1,2)=sin(sqrt(-lambda)*x0);
A(2,1)=-sqrt(-lambda)*sin(sqrt(-lambda)*x0);
A(2,2)=sqrt(-lambda)*cos(sqrt(-lambda)*x0);;
CC=inv(A)*[y0;y1]; C1=CC(1);C2=CC(2);
sol=C1*cos(sqrt(-lambda)*PontosX)+C2*sin(sqrt(-lambda)*PontosX);
elseif lambda>0 then
A=zeros(2,2);
A(1,1)=exp(sqrt(lambda)*x0);
A(1,2)=exp(-sqrt(lambda)*x0);
A(2,1)=sqrt(lambda)*exp(sqrt(lambda)*x0);
A(2,2)=-sqrt(lambda)*exp(-sqrt(lambda)*x0);
CC=inv(A)*[y0;y1]; C1=CC(1);C2=CC(2);
sol=C1*exp(sqrt(lambda)*PontosX)+C2*exp(-sqrt(lambda)*PontosX);
else
A=zeros(2,2);
A(1,1)=1;
A(1,2)=x0;
A(2,1)=0;
A(2,2)=1;
CC=inv(A)*[y0;y1]; C1=CC(1);C2=CC(2);
sol=C1+C2*PontosX;
end;
endfunction
    
```

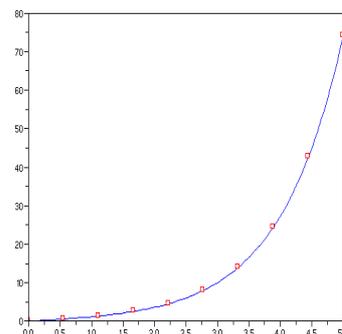
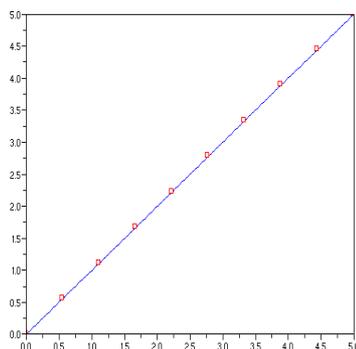
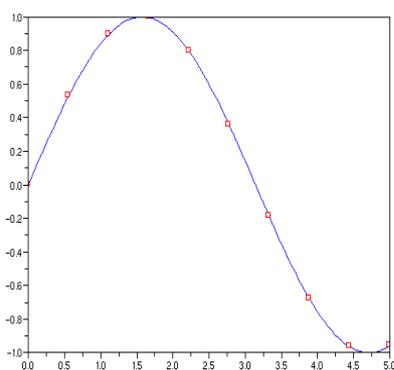


Gráfico 2: A linha contínua indica o valor exato da solução do PVI de 2ª Ordem. Para  $\lambda = -1$  (esquerda),  $\lambda = 0$  (centro) e  $\lambda = 1$  (direita). Os pontos marcados foram às aproximações calculadas pelo Scilab. O erro entre ambas, no pior caso, foi menor que  $10^{-3}\%$ .

## 2.2 MÉTODOS NUMÉRICOS PARA EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

Vimos que, em geral, não podemos resolver analiticamente mesmo as equações diferenciais mais simples ou, quando podemos obter tais soluções, em termos de precisão, isto não nos fornece resultados muito melhores que as técnicas de aproximação numérica.

Nesta seção, estudaremos a teoria geral dos métodos de aproximação utilizados, por exemplo, pelo Scilab para solução numérica de equações diferenciais. Tal teoria será utilizada nesta dissertação para aproximação das soluções da equação de dispersão de poluentes em meios líquidos.

A teoria aqui discutida se refere especificamente a Problemas de Valor Inicial da

forma 
$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) & (6) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$
 (por exemplo, com relação ao problema linear 
$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$
)

escreveríamos  $f(x, y) = Q(x) - P(x)y$  mas pode ser facilmente generalizada para o caso geral de equações de mais alta ordem pelo método discutido na seção *Movimento Oscilatório*, i.e., mediante a introdução de variáveis auxiliares.

### 2.2.1 Métodos de Euler

É a classe mais simples dentre os métodos numéricos de aproximação de soluções de equações diferenciais. Baseiam-se em substituir a derivada

$$\frac{dy}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{y(x+h) - y(x)}{h}$$
 pelo quociente do lado direito da equação anterior para algum

valor de passo ( $h$ ) pequeno. Ou seja, começando de  $y(x_0) = y_0$  calculamos

$$y(x_1) = y(x_0 + h) = y_0 + h \frac{dy}{dx} = y_0 + hf(x_0, y_0).$$
 Repetindo o processo, calculamos, a partir

$$\text{de } y(x_1) = y_1, \quad y(x_2) = y(x_1 + h) = y(x_1) + h \frac{dy}{dx} = y(x_1) + hf(x_1, y_1).$$
 O processo é repetido

calculando o valor da função solução  $y(x)$  para os pontos  $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$  onde  $x_j = x_0 + jh$

mediante a seguinte equação de recorrência:  $y(x_{j+1}) = y(x_j + h) = y(x_j) + hf(x_j, y_j)$

Mesmo para valores de  $h$  pequenos, tal técnica tende a acumular um erro da ordem de  $h^2$  o que significa que se dobrarmos o valor de  $h$  (menos pontos a serem calculados) multiplicaremos por 4 o erro acumulado. Tal comportamento é chamado de instabilidade numérica da solução.

Métodos como o anterior nos quais a equação de recorrência só utiliza pontos conhecidos (neste caso, os valores de  $x_j$  e  $y_j$ ) no lado direito da equação de recorrência são conhecidos como **Métodos Explícitos**. Métodos explícitos tendem a ser mais sensíveis a problemas de estabilidade e propagação de erros do que os métodos implícitos.

O método implícito de Euler consiste em substituir a equação de recorrência original por  $y_{j+1} = y_j + hf(x_{j+1}, y_{j+1})$ .

Note que o valor desconhecido  $y_{j+1}$  aparece em ambos os lados da equação o que fornece um **sistema de equações na incógnita**  $y_{j+1}$  cuja solução é valor de  $y$  no ponto desejado. Ainda que o método implícito também apresente erro da ordem de  $h^2$  ele é, ao contrário do método explícito, estável, ou seja, erros de precisão ou arredondamento não se propagam ao longo dos cálculos.

O código Scilab relativo ao método explícito de Euler e simulações que ilustram deficiências de tal método segue abaixo:

```
//CÓDIGO DO MÉTODO EXPLÍCITO DE EULER
x0=0;
y0=1;
h=0.5;
npontos=8;

function [z]=funcaoF(x,y)
//Modifique aqui para diferentes equações diferenciais
z=-2*x^3+12*x^2-20*x+8.5;
endfunction

function [PontosX,sol]=Euler_Explicito()
sol=zeros(1,npontos+1);
PontosX=h*(0:npontos);
sol(1)=y0;
for i=2:(npontos+1),
sol(i)=sol(i-1)+funcaoF(PontosX(i),sol(i-1));
end;
endfunction;

function [PontosX,sol]=Valor_Scilab()
PontosX=h*(0:npontos);
sol=ode(y0,x0,PontosX,funcaoF);
endfunction;
scf();
[pxa,sola]= Euler_Explicito();
[pxe,sole]= Valor_Scilab();
plot(pxe,sole,'b'); //solução exata
plot(pxa,sola,'r'); //solução aproximada
```

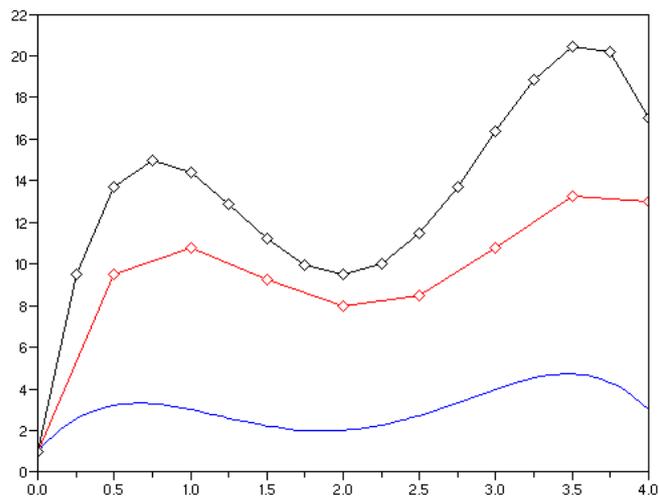


Gráfico 3: Em azul, solução exata<sup>8</sup> do PVI  $\frac{dy}{dx} = -2x^3 + 12x^2 - 20x + 8.5$  com  $y(0) = 1$ . Em vermelho, valor calculado para  $h = 0.5$ . Em preto, valor calculado para  $h = 0.25$ . Observe que diminuir o passo não implica necessariamente em melhoria na precisão da solução.

## 2.2.2 Métodos de Runge-Kutta

Os métodos mais comuns de aproximação numérica das soluções de equações diferenciais seguem a seguinte formulação geral

$$y_{j+1} = y_j + h \sum_{l=1}^s b_l k_l \quad (6)$$

$$k_l = f \left( x_j + c_l h, y_j + \sum_{m=1}^s a_{l,m} k_m \right)$$

O valor de  $s$  é dito ordem do método<sup>9</sup> e a tabela

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,s} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{s,1} & a_{s,s} & \cdots & a_{s,s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_s \end{pmatrix} \quad (7)$$

Cujos valores das entradas determinam os diferentes métodos, é chamada de *matriz de Butcher*.

<sup>8</sup> Na verdade, solução calculada pelo Scilab. A solução exata difere desta em menos de  $10^{-3}\%$ .

<sup>9</sup> Não confundir com a ordem da equação diferencial que, nesta formulação, é sempre igual a 1 (um).

$$\text{Métodos baseados em (7) e } \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,s} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{s,1} & a_{s,s} & \cdots & a_{s,s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_s \end{pmatrix} \quad (7) \quad \text{são}$$

chamados de **Métodos de Runge-Kutta** e incluem métodos como os de Euler (implícito e explícito) como subcasos. Vejamos os mais comuns:

• **Método de Euler Explícito**

De primeira ordem ( $s = 1$ ) com matriz de Butcher  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

• **Método de Euler Implícito**

De primeira ordem ( $s = 1$ ) com matriz de Butcher  $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

• **Método de Runge-Kutta Explícito de 3ª Ordem**

De terceira ordem ( $s = 3$ ) com matriz de Butcher  $\begin{pmatrix} 1/6 \\ 2/3 \\ 1/6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1 \end{pmatrix}$

• **Método de Runge-Kutta Explícito de 4ª Ordem**

De quarta ordem ( $s = 4$ ) com matriz de Butcher

$$\begin{pmatrix} 1/6 \\ 1/3 \\ 1/3 \\ 1/6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

É também chamado de **método clássico** e escrito geralmente da forma padrão:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2\right)$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3)$$

Sendo o método implementado pelo Scilab na função **ode**<sup>10</sup>.

<sup>10</sup> Na verdade, a função ode no Scilab utiliza o método implícito de Runge Kutta de ordem 4 com passo adaptativo que é o método mais preciso e com menor instabilidade numérica no caso geral.

Note que, em todos os métodos explícitos, temos a matriz central na matriz de Butcher triangular inferior. Métodos baseados em tabelas cuja matriz central não seja triangular inferior são geralmente chamados de **métodos de Lobato** ou métodos de Runge-Kutta implícitos. Um exemplo é o método de Euler implícito (também conhecido como método Euler reverso). Para problemas nos qual a função  $f(x, y)$  da equação diferencial são contínuas e suaves o mais comum é o chamado método de Lobato IIIA cuja matriz de Butcher é dada por:

$$\begin{Bmatrix} 1/6 \\ 2/3 \\ 1/6 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 5/24 & 1/3 & -1/24 \\ 1/6 & 2/3 & 1/6 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

Vale ressaltar que, em todos os métodos anteriores, o passo  $h$  é fixo. Existe uma classe de métodos numéricos chamada de **métodos de Predição e Correção** que modificam o passo  $h$  em cada iteração tornando-o maior em regiões de pouca instabilidade numérica e menor em regiões nas quais as instabilidades exijam maior precisão e menor margem de erro. Tais técnicas não serão discutidas aqui, mas seguem a mesma linha geral.

Segue código Scilab para o método explícito de Runge-Kutta de 4ª ordem e simulações ilustrando sua precisão.

```
x0=0;
y0=1;
h=0.5;
npontos=8;

function [z]=funcaoF(x,y)
//Modifique aqui para diferentes equações diferenciais
z=-2*x^3+12*x^2-20*x+8.5;
endfunction

function [PontosX,sol]=RK4()
sol=zeros(1,npontos+1);
PontosX=h*(0:npontos);
sol(1)=y0;
for i=2:(npontos+1),
    k1=funcaoF(PontosX(i-1),sol(i-1));
```

```

k2=funcaoF(PontosX(i-1)+h/2,sol(i-1)+h*k1/2);
k3=funcaoF(PontosX(i-1)+h/2,sol(i-1)+h*k2/2);
k4=funcaoF(PontosX(i-1)+h,sol(i-1)+k3*h);
sol(i)=sol(i-1)+(1/6)*(k1+2*k2+2*k3+k4)*h;
end;
endfunction;
function [PontosX,sol]=Valor_Scilab()
PontosX=h*(0:npontos);
sol=ode(y0,x0,PontosX,funcaoF);
endfunction;
scf();
[pxa,sola]= RK4();
[pxe,sole]= Valor_Scilab();
plot(pxe,sole,'b'); //solução exata
plot(pxa,sola,'r'); //solução aproximada
plot(pxa,sola,'rd');

```

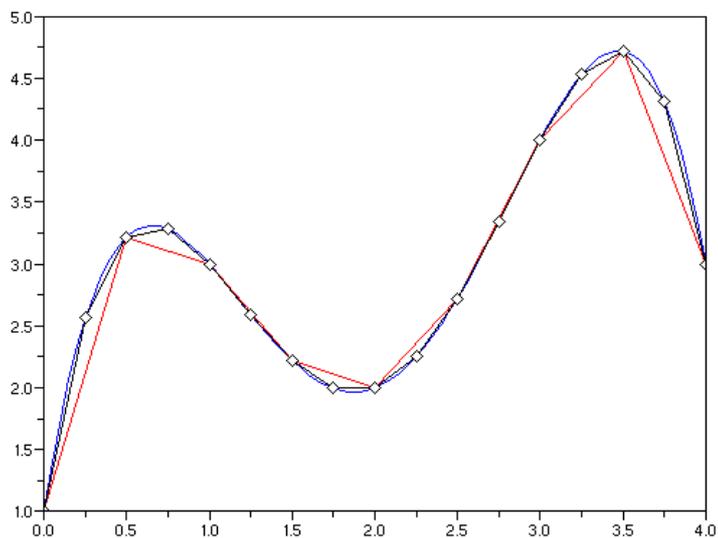


Gráfico 4: Em azul, solução exata do PVI  $\frac{dy}{dx} = -2x^3 + 12x^2 - 20x + 8.5$  com  $y(0) = 1$ . Em vermelho, valor calculado para  $h = 0.5$  com o método explícito de Runge-Kutta de 4ª Ordem. Em preto, valor calculado para  $h = 0.25$ . Observe praticamente não há diferença entre os valores calculados e exatos (erro menor que  $10^{-2}\%$ ).

## 2.3 Equações Diferenciais Parciais

As equações que vimos até agora foram todas em uma variável, ou seja, a solução era sempre da forma  $y = F(x)$ . Isto ocorria, pois as derivadas eram consideradas apenas naquela variável, por exemplo,

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} \frac{d^2 y}{dx^2} + p(x) \frac{dy}{dx} + q(x)y = f(x) \\ y(x_0) = y_0 \\ y'(x_0) = y'_0 \end{cases}$$

São PVI's nos quais a função  $y = y(x)$  é derivada na variável  $x$ , na primeira equação, uma vez e na segunda equação duas vezes.

Problemas práticos, entretanto, geralmente possuem uma quantidade muito maior de variáveis, na temática deste trabalho, por exemplo, queremos entender como a concentração (função) de um poluente se comporta ao longo do tempo (uma variável) em cada ponto de uma dada região do espaço (mais três variáveis espaciais), ou seja, manipularemos equações envolvendo funções em, pelo menos, 4 variáveis.

Outra diferença é que um problema envolvendo uma variável apenas tinha seu comportamento determinado de forma única (teorema da existência e unicidade), sob hipóteses bem simples, pelas condições iniciais, mais especificamente, se  $y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)})$  é uma equação diferencial de ordem  $n$  (neste caso

$y^{(k)} \equiv \frac{d^k y}{dx^k}$  significa que diferenciamos repetidamente a função  $y$ ,  $k$  vezes<sup>11</sup>) então todo seu comportamento depende das condições iniciais das variáveis no lado direito da equação, ou seja, depende dos valores de  $x_0, y_0 = y(x_0), y_1 = y'(x_1), \dots, y_{n-1} = y^{(n-1)}(x_{n-1})$  sendo, por esta razão, chamados de Problemas de Valor Inicial ou PVI.

Em equações envolvendo mais variáveis, contudo, isto em geral não é verdade, por exemplo, o comportamento da concentração de um poluente ao longo do tempo depende do valor desta concentração **em toda região** – e não apenas em alguns pontos - no tempo inicial e também de como, ao longo do tempo, o poluente é removido ou reinserido na região. Tais problemas são chamados de Problemas de Valores de Contorno, conforme veremos adiante.

---

<sup>11</sup> Não confundir com  $y^k = \underbrace{y \times y \times \dots \times y}_{k \text{ vezes}}$

Quando as equações diferenciais envolvem apenas **uma variável**, elas são denominadas **Equações Diferenciais Ordinárias** ou simplesmente **EDO's**. Os problemas tratados anteriormente são todos exemplos desta categoria. Quando existem diversas variáveis envolvidas, mas apenas uma delas é utilizada para derivação também denominamos a equação de ordinária.

Equações que envolvem derivações em **mais de uma variável** são chamadas de **Equações Diferenciais Parciais** ou **EDP's** e seu tratamento, analítico ou numérico, é bem mais complexo que o caso ordinário.

### 2.3.1 Tipos de EDP's

Para simplificar a teoria relativa à **EDP's**, é comum dividi-las em categorias. Cada categoria é trabalhada, do ponto de vista analítico ou numérico, por técnicas específicas as quais, não raro, não funcionam em **EDP's** das demais categorias, por exemplo, uma técnica numérica para uma **EDP** parabólica terá, em geral, muito pouca aplicação em uma **EDP** hiperbólica. Também, cada categoria possui um **problema padrão** (em geral simples) cujo comportamento se repete para os demais membros da mesma categoria de forma que este problema padrão é usado geralmente como exemplo de casos mais complexos de uma mesma categoria.

### 2.3.2 Definição dos Tipos de Equações Diferenciais Parciais de 2ª Ordem

Uma vez que para cada ordem de EDP's temos diferentes categorias e que este trabalho refere-se especificamente a EDP's de 2ª ordem, consideraremos doravante apenas EDP's desta ordem.

Inicialmente, consideraremos apenas uma variável espacial ( $x$ ) e uma variável temporal ( $t$ ) ou duas variáveis espaciais ( $x$  e  $y$ ) e nenhuma variável temporal. Nestes termos, uma **equação diferencial parcial de 2ª ordem** é uma equação do tipo:

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + C \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + D \frac{\partial u}{\partial x} + E \frac{\partial u}{\partial t} + Fu + G = 0 \quad \text{onde} \quad u = u(x, t),$$

$A = A(x, t)$ ,  $B = B(x, t)$ ,  $\dots$ ,  $G = G(x, t)$  são funções contínuas e com todas as derivadas parciais contínuas até 2ª ordem (chamamos de classe  $C^2$ ) em uma região

$X \subseteq R^2$  simplesmente conexa<sup>12</sup>. No caso de duas variáveis espaciais reescrevemos a equação anterior como  $A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D \frac{\partial u}{\partial x} + E \frac{\partial u}{\partial y} + Fu + G = 0$  e  $u = u(x, y)$ ,  $A = A(x, y)$ ,  $B = B(x, y)$ ,  $\dots$ ,  $G = G(x, y)$ .

Conforme a notação padrão,  $\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h, y) - f(x, y)}{h}$  - ou seja, a  $\frac{\partial f(x, y)}{\partial y} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x, y+h) - f(x, y)}{h}$

derivada com relação a uma dada variável é definida considerando as demais variáveis como constantes. As regras usuais de derivação continuam valendo, com as devidas adaptações, a este caso. Definições análogas ao caso de uma variável valem para derivadas de mais alta ordem.

O **discriminante** de uma EDP deste tipo é a função  $\Delta = (\Delta(x, t) \text{ ou } \Delta(x, y)) = B^2 - 4AC$  que pode assumir diferentes valores conforme variamos  $x, y$  e  $t$ .

Se, em toda região  $X \subseteq R^2$  tivermos  $\Delta < 0$  a equação diferencial é chamada de **Elíptica**. O problema padrão para equações elípticas é a **equação do potencial** ou **equação de Poisson** no plano (duas variáveis espaciais e independentes do tempo)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = F(x, y)$$

$$A = C = 1 \text{ e } B = 0 \Rightarrow$$

$$\Delta = 0^2 - 4 \times 1 \times 1 = -4 < 0$$

Equações elípticas geralmente estão associadas a problemas estacionários (ou seja, que não variam no tempo) como, por exemplo, a distribuição ponto a ponto de tensões em uma viga que suporta uma carga fixa.

No caso de, em toda região  $X \subseteq R^2$  o valor de  $\Delta = 0$ , diremos que a equação diferencial é **Parabólica**. O problema padrão para equações parabólicas é a **equação da difusão** ou **equação do calor** no plano (uma variável espacial e a solução variam ao longo do tempo)

<sup>12</sup> Chamamos uma região de simplesmente conexa se 1) Dois pontos quaisquer da região podem ser conectados por uma curva contínua contida na região; 2) Qualquer curva fechada simples contida na região possui seu interior também contido na região. A grosso modo, uma região é simplesmente conexa quando for composta de um único "pedaço" e sem "buracos" em seu interior.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + F(x, t)$$

$$A = a^2, B = C = 0 \Rightarrow$$

$$\Delta = 0^2 - 4 \times a^2 \times 0 = 0$$

Equações parabólicas geralmente estão associadas a problemas não-estacionários como, por exemplo, a propagação de calor em uma barra de metal (se aquecermos uma barra de metal, em cada ponto a temperatura vai variar ao longo do tempo) ou a difusão de poluentes em um rio (uma dada quantidade de poluente vai se dispersar de forma que sua concentração, em cada ponto do rio, será variável em função do tempo). O termo  $\alpha = a^2$  é uma constante positiva chamada de difusividade e mede a velocidade da mudança da solução  $u(x, t)$  ao longo do tempo, por exemplo, no problema da dispersão de poluentes em meios líquidos, valores elevados de  $\alpha$  indicam que o poluente rapidamente se dispersa enquanto que valores pequenos de  $\alpha$  indicam poluentes pouco solúveis e, portanto, com dispersão mais lenta.

Finalmente, quando  $\Delta > 0$  a equação é dita **hiperbólica**. O problema padrão hiperbólico é a equação de D'Alembert ou **equação da propagação de onda**

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + F(x, t)$$

$$A = 1, B = 0 \text{ e } C = -\frac{1}{c^2} \Rightarrow$$

$$\Delta = 0^2 - 4 \times 1 \times \left(-\frac{1}{c^2}\right) = \frac{4}{c^2} > 0$$

Equações cujo sinal de  $\Delta$  varie ao longo da região  $X$  são ditas **mistas** e são estudadas, geralmente, subdividindo a região para estudar cada tipo separadamente.

Neste trabalho, a equação modelo de difusão de poluente em três dimensões espaciais é a equação:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\text{div}(-\alpha \nabla C) + \text{div}(\vec{V}C) + \sigma C + F(\vec{x}, t) \quad \text{onde } C = C(\vec{x}, t) \text{ e } \vec{x} = (x, y, z).$$

Os **operadores diferenciais divergentes** e **gradiente** são definidos, respectivamente por

$$\text{div}(G(\vec{x}, t)) = \frac{\partial G_1}{\partial x} + \frac{\partial G_2}{\partial y} + \frac{\partial G_3}{\partial z}$$

$$\nabla(H(\vec{x}, t)) = \left( \frac{\partial H}{\partial x}, \frac{\partial H}{\partial y}, \frac{\partial H}{\partial z} \right) \quad \text{onde } G(\vec{x}, t) = (G_1(\vec{x}, t), G_2(\vec{x}, t), G_3(\vec{x}, t)) \text{ é}$$

um campo vetorial e  $H(\vec{x}, t)$  é função com valores reais ambas definidas em algum domínio simplesmente conexo  $X \subseteq R^4$ .

Considerando o caso de uma variável espacial apenas, teremos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + V \frac{\partial C}{\partial x} + C \left( \frac{\partial V}{\partial x} + \sigma \right) + F(\bar{x}, t)$$

$$A = \alpha, B = C = 0 \Rightarrow \Delta = 0 \text{ (equação parabólica)}$$

Por esta razão, nosso estudo será limitado às propriedades relativas às equações parabólicas.

### 2.3.3 Diferenças Finitas na Resolução de Equações Diferenciais Parciais

Para entender o método, vamos aplicá-lo a uma equação mais simples, a citar,

a equação  $\frac{\partial u}{\partial t} = k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ , que é a equação (parcial, parabólica de 2ª ordem) de condução do calor (assumiremos que  $k > 0$ ).

Inicialmente, fixemos uma grade de pontos a serem calculados em  $x$ , digamos  $x_0, x_1, \dots, x_m, x_{m+1}$ . Os pontos  $x_0$  e  $x_{m+1}$  são os extremos do intervalo. Por exemplo, se dividirmos o intervalo  $[0,10]$  em 6 pontos, suas coordenadas serão:  $x_0 = 0, x_1 = 2, x_2 = 4, x_3 = 6, x_4 = 8, x_5 = 10$  o valor de  $m$  será então 4 significando que teremos dois pontos de borda ( $x_0 = 0$  e  $x_5 = 10$ ) e 4 pontos intermediários.

Para cada um dos pontos intermediários, queremos acompanhar a evolução da temperatura ao longo do tempo em duas situações:

1. (condições de fronteira ou *Condições de Dirichlet*) Se a temperatura ao longo do tempo nos pontos  $x_0$  e  $x_{m+1}$  é conhecida.

- Por exemplo, em uma barra de metal de 10cm como acima, conhecido o valor da condutividade – digamos se a barra é de alumínio, este valor é de  $0,835 \text{ cm}^2/\text{s}$  e sabendo que a temperatura nas bordas -  $x_0 = 0$  e  $x_5 = 10$  - são mantidas constantes, respectivamente, em  $0^\circ \text{ C}$  e  $100^\circ \text{ C}$  e que a temperatura inicial da barra é de  $0^\circ \text{ C}$ , qual a evolução na temperatura a medida que o calor se propaga do ponto quente  $x_5 = 10$  ao ponto frio  $x_0 = 0$ .

2. (condições de contorno na derivada ou *Condições de Neumann*) Se a variação da temperatura nos pontos  $x_0$  e  $x_{m+1}$  é conhecida.

- Por exemplo, nas condições anteriores, sabemos que a temperatura no ponto quente diminui 1° C a cada segundo e do ponto frio aumenta 0.5° C a cada segundo.

Para tanto, temos de especificar os pontos *no tempo* nos quais o cálculo da temperatura em *cada ponto no espaço* será feita. Um exemplo seria, no caso anterior, acompanhar a cada 0.1 segundo a temperatura ponto a ponto. Se fizermos este acompanhamento por 1 segundo teremos mapeado cada um dos 4 pontos intermediários em  $x$  em 10 pontos no tempo totalizando 40 pontos a calcular para temperatura.

Denote então por  $T_i^l$  a temperatura do ponto  $x_i$  no tempo  $l$  (por exemplo, para saber a temperatura em  $x = 4$  na metade do 1° segundo calcularíamos  $T_2^5$ , pois  $x_2 = 4$  e  $t = 0.5\text{seg}$  equivale a  $l = 5$ ). Usando as aproximações das derivadas:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l}{(\Delta x)^2}$$

Na equação  $\frac{\partial u}{\partial t} = k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$  Obteremos  $\frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t} = \frac{T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l}{(\Delta x)^2}$  O que implica que

$$T_i^{l+1} = T_i^l + \left( \frac{k\Delta t}{(\Delta x)^2} \right) (T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l) \quad (8)$$

Que permite – **conhecendo a temperatura em um instante  $t$  no tempo em um dado ponto e em seus vizinhos** – estudar a temperatura deste ponto no instante seguinte.

Note que tal abordagem é **explícita** sendo nada mais nada menos que uma

manifestação do método de Euler para o caso de EDP's. O termo  $\lambda = \left( \frac{k\Delta t}{(\Delta x)^2} \right)$  determina a

estabilidade das soluções e diversos autores recomendam que  $\lambda < \frac{1}{6}$  para evitar

propagação de erros e problemas de estabilidade e convergência das soluções<sup>13</sup>, ou seja, fixada a precisão desejada em  $x$ , a precisão que devemos utilizar em  $t$  fica fixada em

$\Delta t < \frac{\Delta x^2}{6k}$  ou se fixarmos que o acompanhamento deve ser feito em intervalos constantes de

valor  $\Delta t$  o acompanhamento em  $x$  deve ser feito em intervalos maiores que  $\Delta x > \sqrt{6k\Delta t}$ .

<sup>13</sup> Neste artigo, utilizamos  $\lambda = 1/10$

Tais restrições não estão presentes nas abordagens implícitas, esta liberdade de escolha da precisão no espaço ( $\Delta x$ ) de forma independente na precisão no tempo ( $\Delta t$ ) é obtida a custos de algoritmos bem mais complexos que fogem dos objetivos deste estudo.

Os scripts e figuras a seguir ilustram o uso da equação (9) ao problema exemplo citado anteriormente, isto é, *em uma barra de metal de 10cm como acima, conhecido o valor da condutividade – digamos se a barra é de alumínio, este valor é de  $0,835\text{cm}^2/\text{s}$  e sabendo que a temperatura nas bordas  $-x_0 = 0$  e  $x_5 = 10$  - são mantidas constantes, respectivamente, em  $0^\circ\text{C}$  e  $100^\circ\text{C}$  e que a temperatura inicial da barra é de  $0^\circ\text{C}$ , qual a evolução na temperatura a medida que o calor se propaga do ponto quente  $x_5 = 10$  ao ponto frio  $x_0 = 0$ .*

Para o qual sabemos que a solução analítica (exata<sup>14</sup>) é

$$T(x,t) = 100 \left[ \frac{x}{10} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{n\pi} (-1)^n \sin\left(\frac{n\pi}{10}\right) \exp\left(\frac{-n^2\pi^2 kt}{100}\right) \right]$$

```
L=10;
k=0.835;
ntermossomatorio=100;
xini=0; Tini=0;
xfim=L; Tfim=100;
npontosX=10; //m
X=linspace(xini,xfim,npontosX+2);
//XX=linspace(xini,xfim,100*npontosX);
TSimulada=zeros(X);
TSimulada(1)=Tini;
TSimulada(npontosX+2)=Tfim;
deltax=X(2)-X(1);
deltat=0.001;
lambda=k*deltat./(deltax^2);
deltatmax=deltax^2./(6*k);

function [Temp_t]=EDP_Calor(t)
Temp_t=(Tfim.*X)./(L*ones(X));
```

<sup>14</sup> Note que a solução exata não pode ser calculada, pois o somatório possui infinitos termos, no entanto, dado o fator exponencial negativo que multiplica cada termo, a contribuição da soma a partir do 20º termo é tão pequena que pode ser negligenciada sem prejuízo na precisão dos cálculos.

```

for n=1:ntermossomatorio,
    Temp_t=Temp_t+(2*Tfim./%pi).*((-1)^n./n).*sin((n*%pi./L).*X).*exp((-k*t*(n*%pi./L)^2));
end;
endfunction;

function [Tprox]=DFE_EDP_Calor(Tant)
Tprox(1)=Tant(1);
Tprox(length(X))=Tant(length(X));
//borda esquerda
Tprox(2)=Tant(1)+lambda*(Tant(2)-2*Tant(1)+Tini);
//pontos interiores
for i=2:(length(X)-2),
    Tprox(i)=Tant(i)+lambda*(Tant(i+1)-2*Tant(i)+Tant(i-1));
end;
//borda direita
Tprox(length(X)-1)=Tant(length(X)-1)+lambda*(Tfim-2*Tant(length(X)-1)+Tant(length(X)-2));
endfunction;
    
```

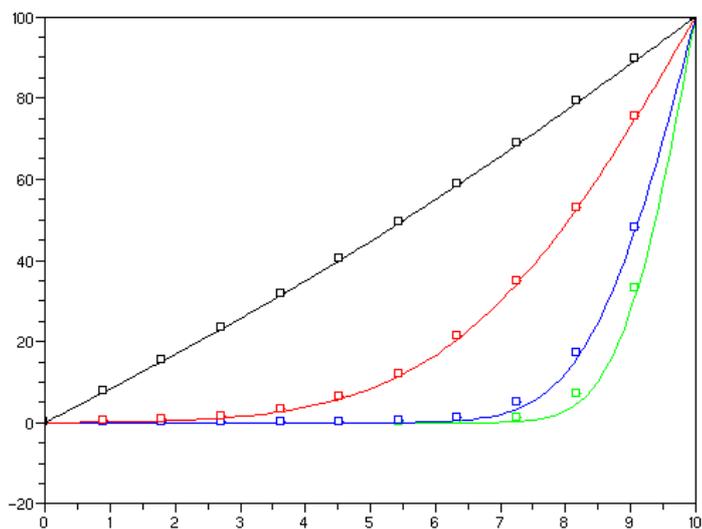


Gráfico 5: Soluções da equação (9) para t=0.5 segundos (curva verde), t=1.0 segundo (curva azul), t=5 segundos (curva vermelha) e t=30 segundos (curva preta). Os pontos marcados são as soluções simuladas. Observe que há, sobretudo nos instantes iniciais, uma diferença entre o valor exato e simulado. A partir de t=30 segundos, todas as curvas solução são praticamente idênticas a curva preta indicando que o sistema atingiu um estado estacionário. A diferença média para as curvas acima foi menor que 0.1% e a maior diferença encontrada (curva verde) foram de 0.8%.

### 2.3.4 Diferenças Finitas na Resolução da Equação de Difusão de Poluentes

Na seção anterior, discutimos o método das diferenças finitas na resolução da equação do calor – o exemplo padrão de equações parabólicas – em uma dimensão em um caso analítico. Voltando ao problema tema da dissertação, a citar, a equação modelo de difusão de poluente:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\text{div}(-\alpha \nabla C) + \text{div}(\vec{V}C) + \sigma C + F(\vec{x}, t) \text{ onde } C = C(\vec{x}, t) \text{ e } \vec{x} = (x, y, z).$$

Temos uma limitação ao método anterior que consiste em considerar que uma malha com grande quantidade de pontos em cada eixo coordenado (digamos 1000 pontos em cada eixo) implica em uma quantidade impraticável de pontos a calcular (para cada eixo coordenado com 100 pontos de malha, obteremos 1.000.000 de pontos a serem calculados para cada  $\Delta t$ ) de forma que algumas simplificações são necessárias para reduzir tal demanda computacional.

Inicialmente, observe que, tanto no problema da dispersão de poluentes em rios quanto na dispersão em aquíferos, as dimensões planas (largura e comprimento) são muito maiores que a terceira dimensão (profundidade) de forma que podemos ignorar a dimensão de profundidade e considerar o escoamento como laminar ou bidimensional.

Claramente, tal simplificação não é totalmente realista, mas – nos modelos simplificados que estamos estudando – ela não influi na precisão dos resultados obtidos, exceto, se considerássemos escoamentos turbulentos que, de qualquer forma, não são modelados pela equação acima.

Com esta simplificação, a equação acima é reescrita como

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \alpha \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) + \left( V_x \frac{\partial C}{\partial x} + V_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + C \left( \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \sigma \right) + F(x, y, t) \quad (9), \text{ onde:}$$

- $C = C(x, y, t)$  é a concentração em um ponto de coordenadas  $(x, y)$  no tempo  $t$
- $V_x$  e  $V_y$  são, respectivamente, as componentes da velocidade de escoamento da água nas direções coordenadas  $x$  e  $y$
- $\alpha$  é a difusibilidade do poluente no meio líquido (positiva)
- $\sigma$  é o fator de decaimento (se negativo) ou de criação (se positivo) do poluente no meio.
- $F(x, y, t)$  mede o quanto o poluente é inserido (se positivo) ou removido (se negativo) do meio líquido ponto a ponto em função do tempo.

Vamos agora estudar como o modelo descrito pela equação (9) pode ser utilizado para descrever o sistema em estudo, a citar, o modelo de aquífero subterrâneo.

### 2.3.5 Modelo Simplificado de Aquífero Subterrâneo

Considere, inicialmente, uma geometria simplificada para o aquífero subterrâneo consistindo de uma região retangular de comprimento  $X$  e largura  $Y$ . O aquífero é preenchido de água sem movimentação considerável e existe um conjunto finito fixo de  $k$  **pontos**  $S_1 = (px_1, py_1), S_2 = (px_2, py_2), \dots, S_k = (px_k, py_k)$  nos quais os **poluentes** são introduzidos no tempo  $t = 0$ . Antes da contaminação não havia quantidade apreciável de poluente e, após esta contaminação inicial, não há mais remoção ou introdução do mesmo de forma que  $F(x, y, t) \equiv 0, t > 0, \forall(x, y)$ . As condições iniciais são, portanto,

$$\begin{cases} C(px_i, py_i, 0) = C_i, i = 1, \dots, k \\ C(x, y, 0) = 0, (x, y) \neq (px_i, py_i) \end{cases} \text{ para valores } C_1, \dots, C_k \text{ conhecidos.}$$

Uma vez que não há fluxo de líquido no aquífero, também temos que  $V_x = V_y = 0$ .

Nosso problema consiste em, dado um **ponto** qualquer **de observação**  $(x, y) \in [0, X] \times [0, Y]$ , determinar, naquele ponto, como a concentração do poluente varia em função de  $t$ , ou seja, queremos determinar a função  $C(x, y, t), t \in [0, T_{\max}]$  onde  $T_{\max}$  é o tempo total de observação.

Estudaremos duas condições de contorno:

a) O poluente não atinge a fronteira com concentração apreciável, ou seja,  $C(0, y, t) = C(X, y, t) = C(x, 0, t) = C(x, X, t) = 0, \forall(x, y) \in [0, X] \times [0, Y], \forall t \in [0, T_{\max}]$

b) O poluente difunde através da fronteira<sup>15</sup> a uma taxa constante, ou seja,

$$\frac{\partial C}{\partial t}(0, y, t) = \frac{\partial C}{\partial t}(X, y, t) = \frac{\partial C}{\partial t}(x, 0, t) = \frac{\partial C}{\partial t}(x, X, t) = -f, \forall(x, y) \in [0, X] \times [0, Y], \forall t \in [0, T_{\max}]$$

A malha que usaremos será uma malha regular com elemento de dimensões

$l \times m$  que divide a região  $[0, X] \times [0, Y]$  em, respectivamente,  $nx = \frac{X}{l}$  e  $ny = \frac{Y}{m}$  pontos. Os

pontos de contaminação e de observação serão suposto pertencentes à malha e diferentes dos pontos de fronteira.

<sup>15</sup> Sendo, portanto, removido do sistema.

### 2.3.6 Simulações Numéricas

As simulações experimentais tiveram por objetivo fornecer parâmetros de comparação qualitativos que foram utilizados para calibração dos métodos numéricos implementados. Desta forma, procurou-se uma escolha da implementação que, mantendo a simplicidade computacional em tal ordem a permitir eventualmente a simulação de grandes trechos de um aquífero real, fornecesse uma precisão numérica que transmita confiabilidade em simulações para as quais não haja parâmetros de comparação.

Note que os dados reais, que seriam disponibilizados pela CPRH, não foram, até a presente data, disponibilizados de forma que esta foi a maneira encontrada de realizar tal calibração. Em trabalhos futuros, já de posse dos dados reais coletados por aquela agência, tal calibração será feita de forma mais próxima da situação real.

Também ressaltamos que os estudos sobre os aquíferos subterrâneos na região metropolitana do Recife ainda estão em fase preliminar e diversos estudos mais específicos, sobretudo no que se refere às propriedades geomecânicas e de circulação e regimes de fluxo, estão sendo tema de diversas dissertações e teses de mestrado em diferentes áreas de estudo em programas de mestrado e doutorado nas Universidades da região.

Finalmente, as técnicas implementadas neste trabalho, a citar, métodos de diferenças finitas, são inadequado para geometrias mais complexas dos aquíferos ainda que, em geometrias simples – como as estudadas neste trabalho – forneçam uma excelente solução de compromisso entre simplicidade computacional e precisão numérica. Desta forma, em estudos limitantes das regiões de fronteira do aquífero por geometrias simples (por exemplo, escolhendo-se trechos retangulares de estudo) as técnicas estudadas neste trabalho tendem a serem bastante precisas, mas computacionalmente inviáveis em geometrias mais complexas de forma que, em trabalhos futuros de continuidade desta dissertação em um trabalho de doutoramento – técnicas de elementos finitos e volumes finitos devem ser implementadas e comparadas com os resultados aqui obtidos.

As simulações realizadas tomaram por base diferentes situações de contaminação. Em cada situação, foi observado o comportamento espacial da “mancha” (pluma) de poluente ao longo do tempo. Também foi mantido registro da concentração ao longo do tempo do poluente em cada ponto de observação. Os resultados para cada situação são discutidos abaixo:

#### **- Aquífero Isotrópico**

Neste tipo de aquífero, as condições de difusibilidade não variam ao longo do mesmo. Primeira situação de descarte:



Nesta situação, a contaminação ocorre em um “poço” localizado em um dos cantos do aquífero conforme indicado na figura anterior. Para todos os resultados ao longo do tempo são ilustrados abaixo:

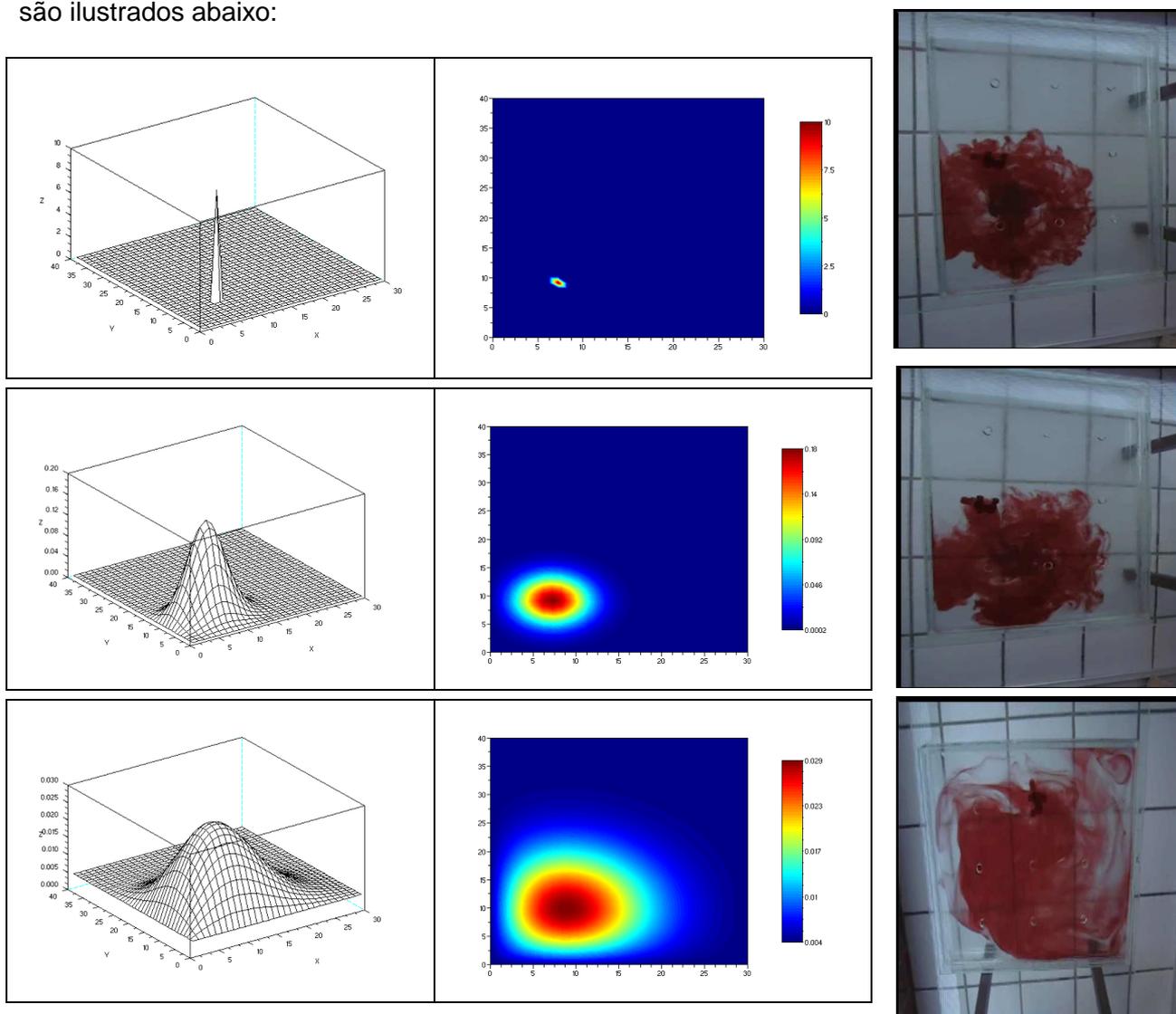


Figura 2: **Acima**, a situação inicial da contaminação (tempo zero): Note que a pluma está totalmente concentrada (concentração de 10 g/L) no ponto contaminado. À esquerda, observamos o gráfico da concentração da pluma no espaço e a direita um mapa de cores indicando a mesma situação.

**Centro:** Evolução da dispersão do contaminante no tempo  $t=1$  segundo. Note que a concentração máxima é agora de 0.2 g/L de poluente e o gráfico foi redimensionado de forma a melhor visualização da distribuição do mesmo. Observe que, em quase todo aquífero a presença do poluente já é observada. **Abaixo:** “Pluma” após 6 segundos. Todo o aquífero observa a presença do poluente.

Note que o comportamento qualitativo da pluma é bem semelhante aquele observado no arranjo experimental.

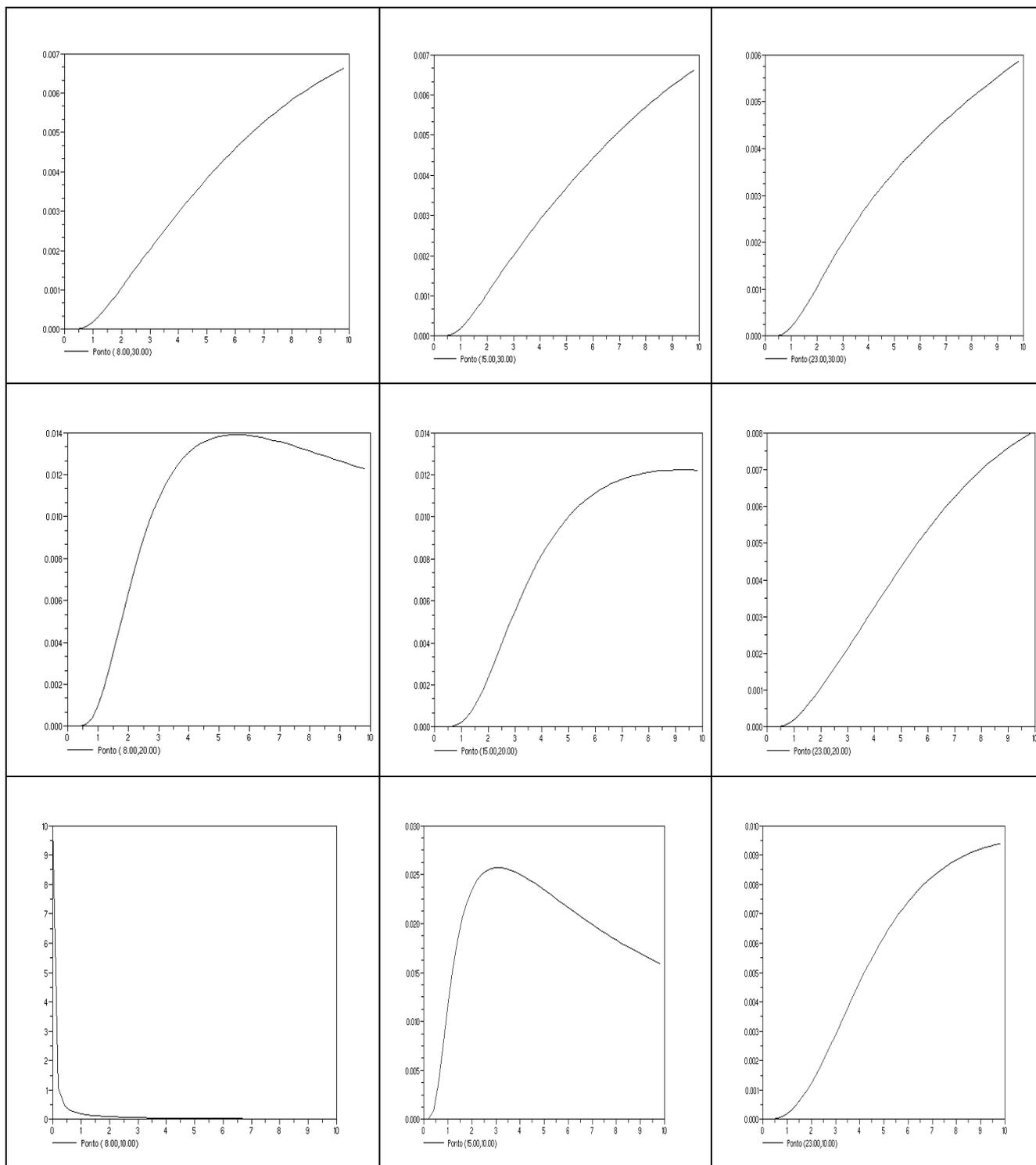


Gráfico 6: Concentração ao longo do tempo em cada ponto de observação. Note que a concentração no ponto de contaminação decresce ao longo do tempo de forma monótona. Nos demais pontos, a concentração cresce até um ponto máximo e decresce em seguida. Somente os 10 primeiros segundos foram simulados de forma que este comportamento padrão somente foi visualizado no ponto (15,10) próximo ao ponto de contaminação, mas também se repete para os demais pontos.

Outra situação simulada cujo arranjo experimental é ilustrado nos gráficos acima é a possibilidade de dois pontos antípodos de contaminação. Neste caso, as “plumas” se desenvolvem independentemente até o momento de colapso em uma pluma com formato semelhante ao um “8”. Note que o comportamento quantitativo é o mesmo da simulação experimental exceto – como esperado – nas proximidades dos pontos de fronteira. Os resultados são mostrados nos gráficos abaixo:

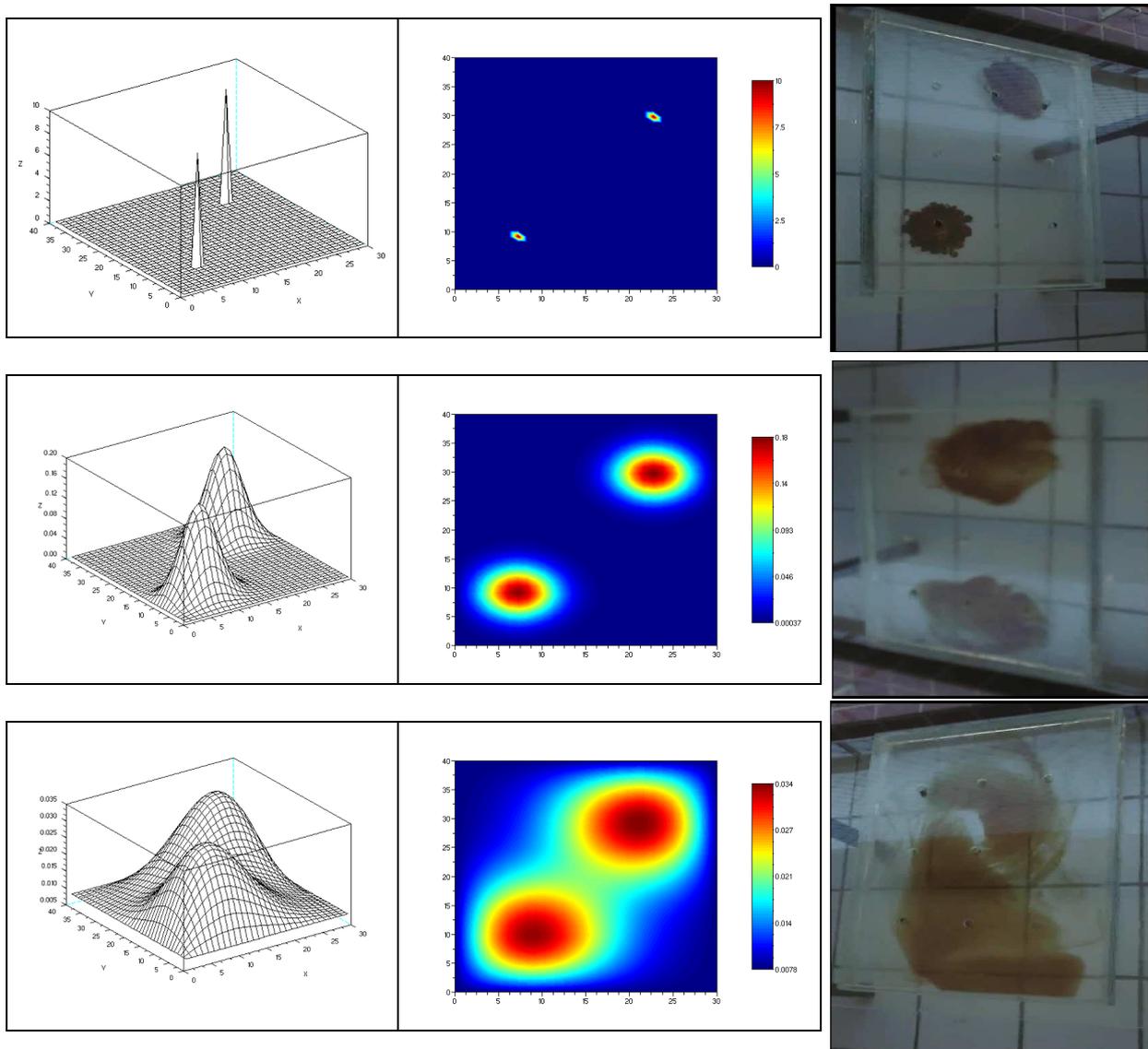


Figura 3: Ilustração do comportamento ao longo do tempo de um evento de contaminação em dois pontos antípodos. Observe que as manchas se desenvolvem independentemente de forma idêntica ao caso de um único ponto de contaminação exceto no momento a partir do qual ocorre o encontro.

Como as equações de modelagem envolvidas são parabólicas, não ocorre o fenômeno de superposição das soluções.

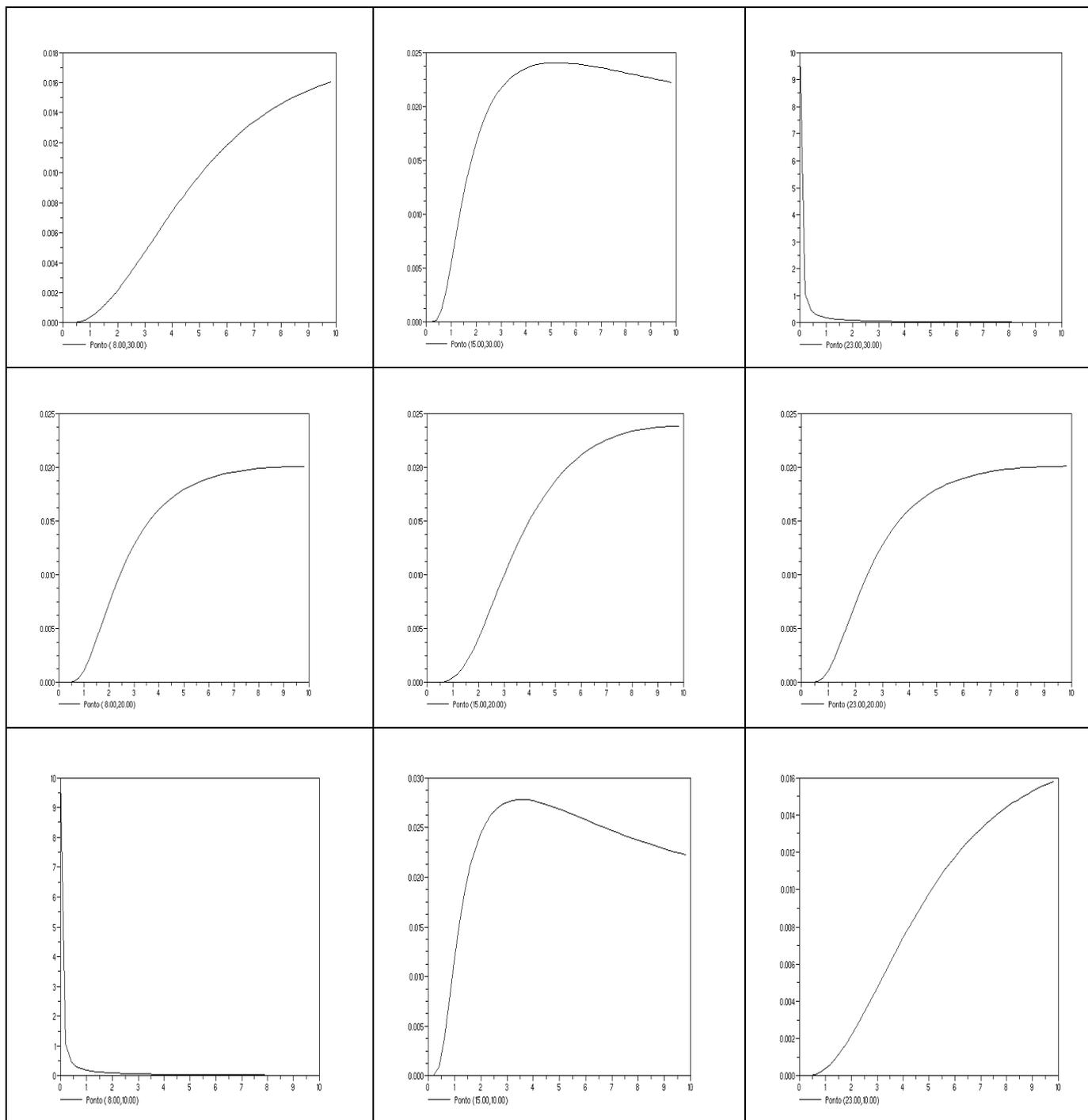


Gráfico 7: Comportamento no caso de dois pontos antípodos de contaminação para cada ponto observacional ao longo do tempo. De forma análoga ao caso de um ponto contaminante, a concentração ao longo do tempo nos pontos de descarte é monótona e decrescente sendo crescente até um ponto máximo e decrescente a partir deste ponto nos demais sítios. Observe também que o momento no qual o máximo é atingido ocorre mais rapidamente que no caso de uma contaminação.

### **- Aquífero Anisotrópico**

Para observar o comportamento do software de simulação no que se referem a sua precisão numérica, as situações de anisotropia do parâmetro de difusibilidade foram testadas. Neste caso, contudo, o arranjo experimental não pôde ser utilizado dado à homogeneidade do mesmo, ainda assim, houve correspondência próxima entre o comportamento esperado observado e aquele descrito na literatura.

As situações testadas envolveram anisotropia radial com difusibilidade máxima no centro decrescendo de forma proporcional a distância daquele ponto; difusibilidade mínima no centro crescendo de forma proporcional a distância daquele ponto e anisotropia com difusibilidade máxima em uma borda (esquerda) e mínima na borda oposta (direita) indicando uma tendência real que o poluente possui de afastar-se no aquífero em direção oposta ao oceano. Ao longo de cada secção reta a difusibilidade não varia.

Por questões de espaço, apenas alguns resultados ilustrando o comportamento na situação de anisotropia variando gradualmente da borda esquerda a borda direita do aquífero são ilustrados abaixo. Os demais resultados estão sendo organizados e devem ser brevemente encaminhados à publicação. Seguem tais resultados:

#### **- Primeira situação de descarte:**

De forma idêntica a anterior, nesta situação, a contaminação ocorre em um “poço” localizado em um dos cantos do aquífero conforme indicado nos gráficos anteriores. Os resultados ao longo do tempo são ilustrados abaixo:

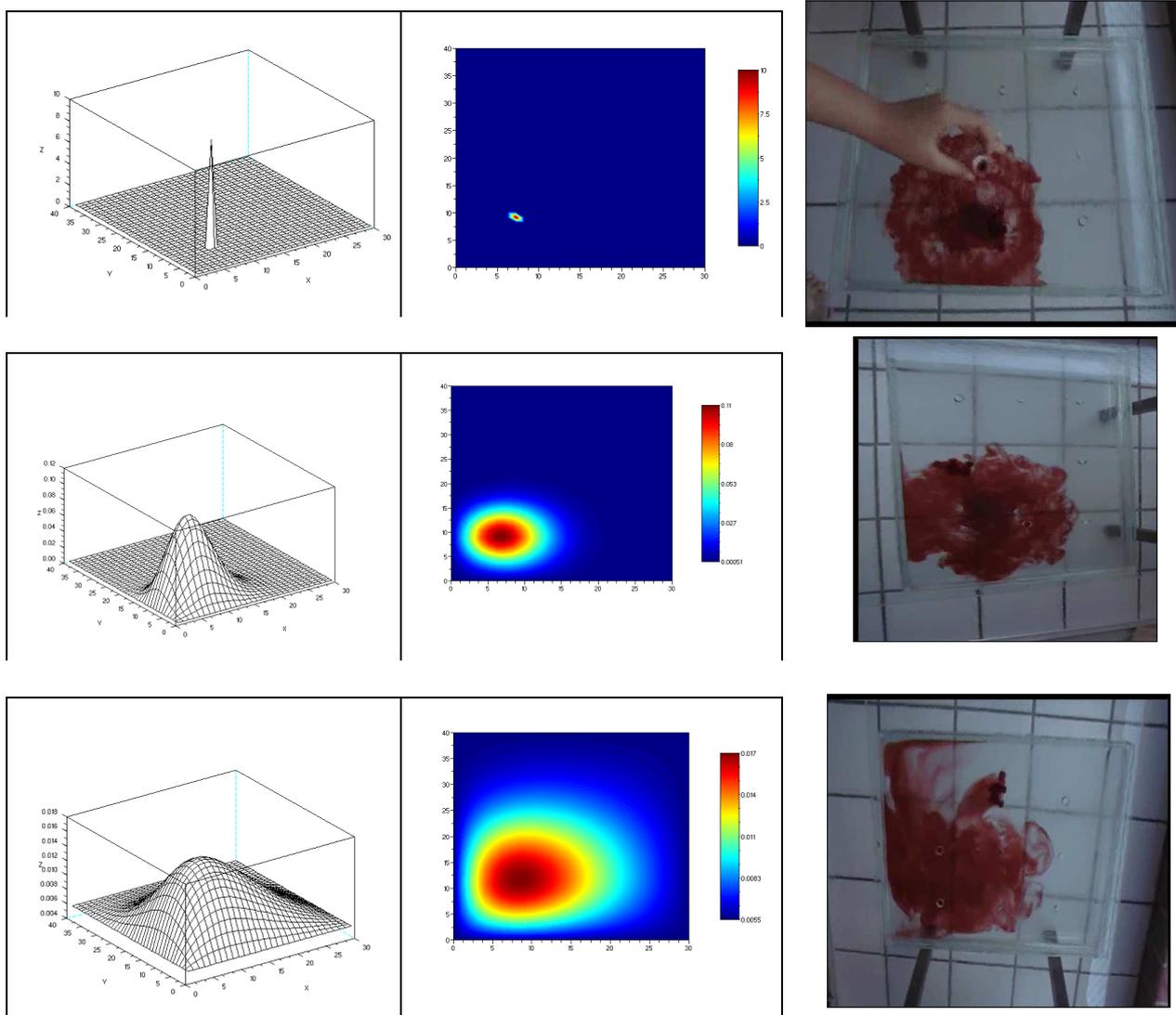


Figura 4: **Acima**, a situação inicial da contaminação (tempo zero): Note que a pluma está totalmente concentrada (concentração de 10 g/L) no ponto contaminado. À esquerda, observamos o gráfico da concentração da pluma no espaço e a direita um mapa de cores indicando a mesma situação.

**Centro**: Evolução da dispersão do contaminante no tempo  $t=1$  segundo. Note que a concentração máxima é agora de 0.2 g/L de poluente e o gráfico foi redimensionado de forma a melhor visualização da distribuição do mesmo. Observe que, em quase todo aquífero a presença do poluente já é observada. **Abaixo**: “Pluma” após 6 segundos. Todo o aquífero observa a presença do poluente. De forma distinta do caso isotrópico, note que a pluma perde sua simetria espalhando-se mais rapidamente para borda direita na qual a difusibilidade tem valor mais elevado.

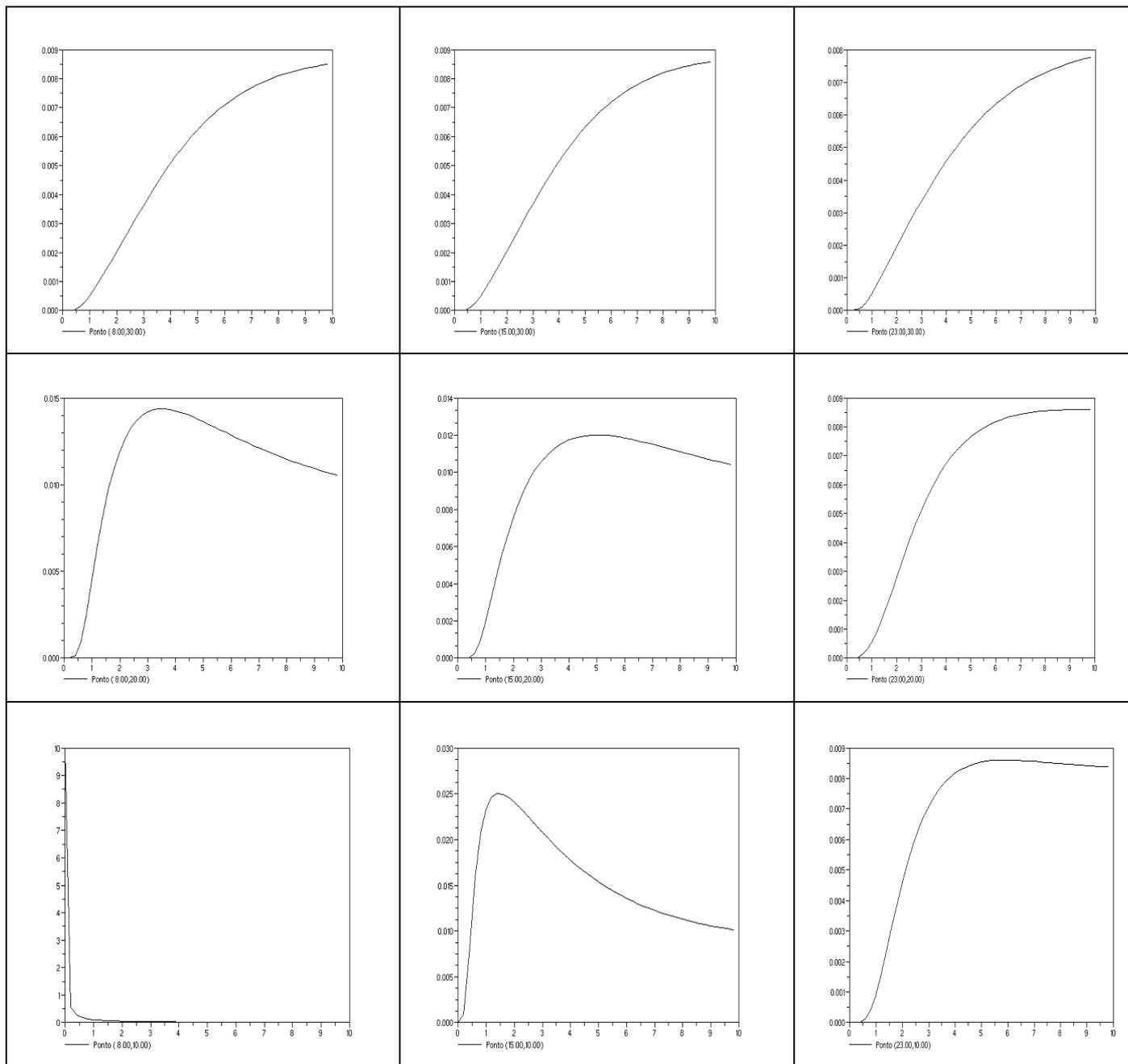


Gráfico 8: Concentração ao longo do tempo em cada ponto de observação. Observe uma dispersão mais rápida em cada ponto que no caso isotrópico indicando que, em casos reais, a resposta a contaminação é mais rápida na direção oposta ao oceano, ou seja, ao afastar-se do litoral, o ponto de observação recebe primeiro a carga de poluição, mas esta tende a diminuir mais rapidamente do que se o aquífero fosse isotrópico.

**Segunda situação de descarte:**

Mais uma vez, foi observado o colapso da pluma, porém tal situação ocorreu em momento anterior ao caso isotrópico e a pluma perde sua simetria propagando-se mais rapidamente na direção de maior difusibilidade. A figura em forma de “8” é então destruída e o comportamento passa a se assemelhar ao caso de descarte em um único ponto. Ressalta-

se que, para tempo suficientemente longo, a pluma tende, neste caso, a comportar-se de forma a difundir mais rapidamente a carga de poluente que no caso isotrópico o que também é observado em situações reais.

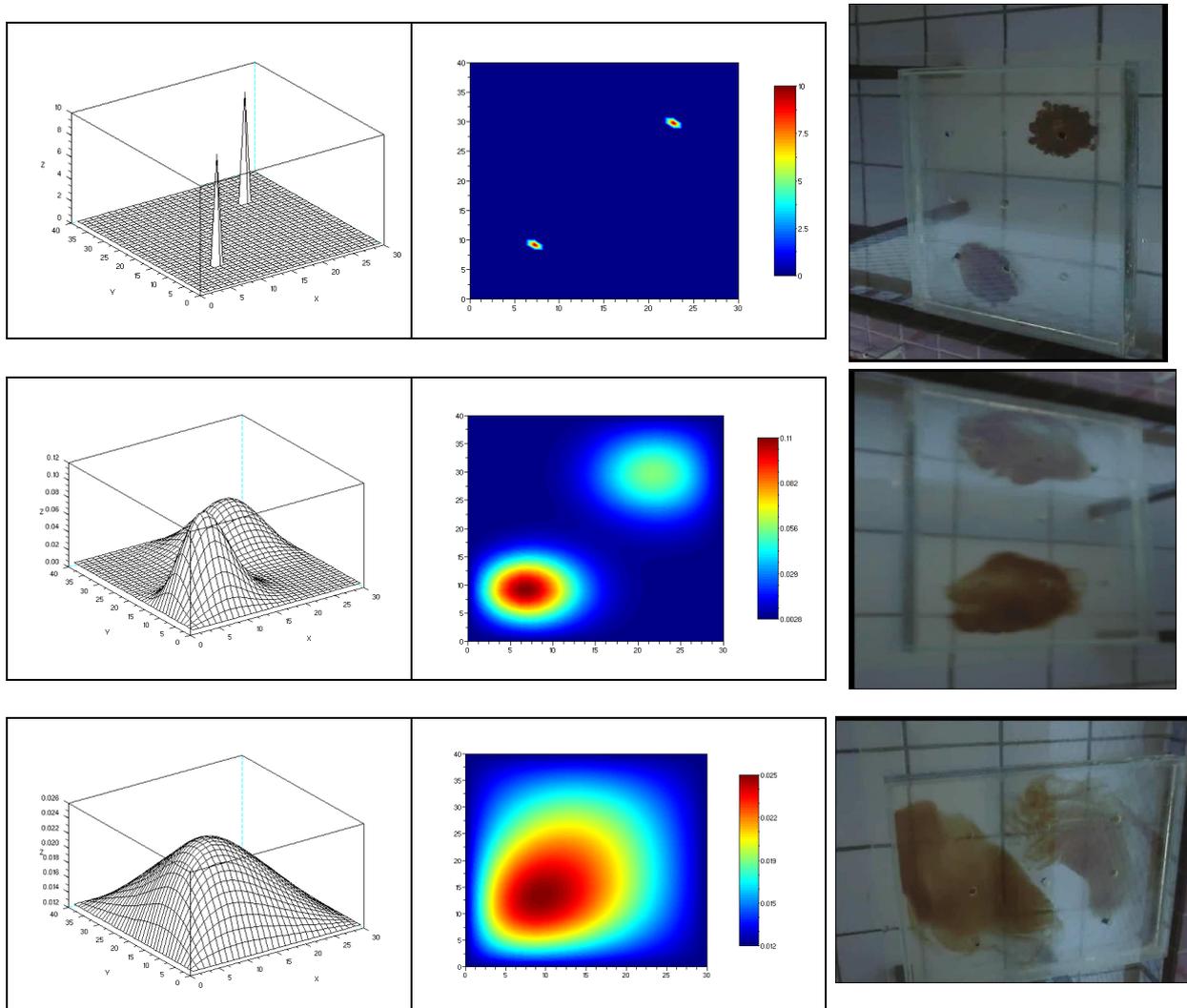


Figura 5: Ilustração do comportamento ao longo do tempo de um evento de contaminação em dois pontos antípodas. Observe que as manchas se desenvolvem independentemente de forma idêntica ao caso de um único ponto de contaminação exceto no momento a partir do qual ocorre o encontro. A ausência de simetria favorece o “desaparecimento” do comportamento individual de cada evento de contaminação ilustrando, de forma mais contundente, o fenômeno da não-superposição das soluções.

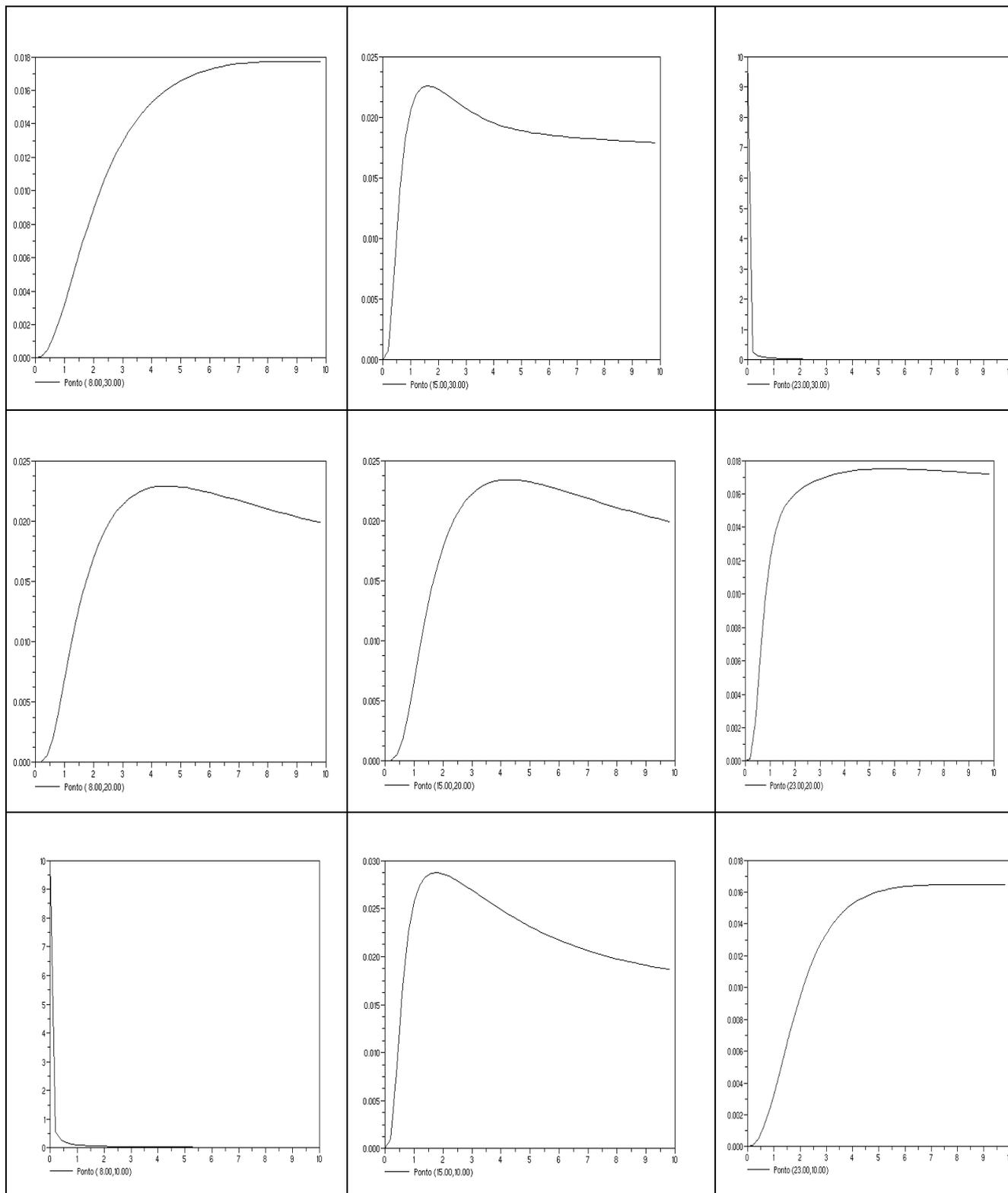


Gráfico 9: Comportamento no caso de dois pontos antípodos de contaminação para cada ponto observacional ao longo do tempo em aquíferos anisotrópicos.

Os resultados ilustrados acima possuem (ver anexo) grandes correspondentes qualitativos com os resultados observados no arranjo experimental, exceto para bordas do

aquífero. Também, os mesmos, correspondem ao comportamento de eventos reais descritos na literatura o que valida, como primeira aproximação, os métodos numéricos estudados neste trabalho para tais eventos.

Um conjunto mais amplo de simulações em geometrias mais próximas ao caso real, podem indicar pontos críticos nos quais a contaminação promova uma degradação mais extensa e/ou mais rápida dos demais pontos do aquífero de forma que este trabalho deve ser utilizado inicialmente como instrumento de prevenção de acidentes e análise de riscos.

## 2.4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### Simulação da Dispersão de Poluentes

Theodoropoulou et al (2003), utilizaram uma técnica para realizar experimentos de visualização da hidrodinâmica da dispersão de poluentes. Primeiramente, analisaram o aspecto da dispersão, e em um segundo momento, o ponto de vista de engenharia, o que permitiu obter modos simples de utilização de expressões matemáticas do potencial e o correspondente fluxo de campo. As análises desenvolvidas, a fim de verificar a exatidão das soluções propostas também foram apresentadas, foram obtidas em diagramas que descrevem as principais dimensões convectivas do ponto de captação do poço em relação às quantidades geométricas e hidráulicas que regem o fenômeno.

A análise do aspecto dispersivo pode ser descrito por meio do método do passeio aleatório. Este método fornece um esquema matemático tridimensional, facilmente executado em um computador, dispersiva especial para analisar o fenômeno em análise (THEODOROPOULOU et al, 2003).

#### - Objetivo:

Este estudo tem por objetivo descrever o comportamento da dispersão passiva dos poluentes em um aquífero artesanal, no qual o campo de fluxo tridimensional causado por um penetrante parcialmente é sobreposta a um fluxo subterrâneo.

Esperamos que o correto planejamento de poços parcialmente penetrantes, tanto as que se destinam a reabilitação de aquíferos e os destinados a outras utilizações que são elas próprias em risco a poluição.

A técnica experimental e do método de análise de seus resultados serão muito úteis para a validação do modelo, análise de sensibilidade dos coeficientes de dispersão no que diz respeito ao espaço poroso dos parâmetros, bem como a identificação da dispersão de líquido poluente nos regimes aquíferos subterrâneos.

### - Introdução

Com referência ao aspecto da convectiva parcialmente penetrante em poços, apenas um pequeno número de obras da literatura está preocupado com a busca de uma solução analítica. Por meio do método de imagens, Muskat (1946) obteve uma expressão do potencial, mas não definiu o fluxo de campo. Hantush (1961a, b, 1964) em vez de um campo de fluxo de solução, introduziu algumas hipóteses bastante simplificadas, sendo que a de maior velocidade tem o mesmo valor em todos os pontos sobre a parede. Para determinar uma expressão mais simples e aplicável ao fluxo de campo, mas o resultado, embora exato, permaneceu demasiado complicado para permitir a fácil análise da dispersão (RIDOLFI & SORDO, 1997).

### - Materiais:

Para a experiência utilizamos os seguintes materiais, conforme figura abaixo em destaque:

- 02 tiras de vidro de 30 x 3 cm
- 02 tiras de vidro de 40 x 3 cm
- 02 retângulos de 30 x 40 cm

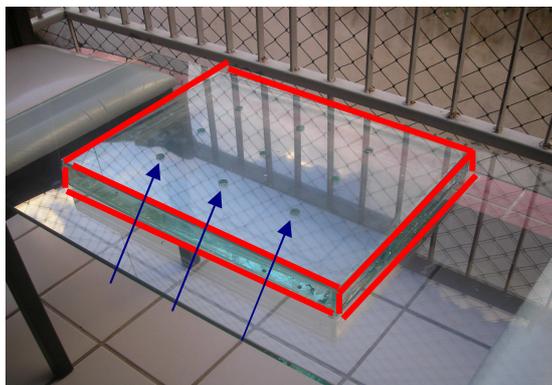


Figura 6 – Caixa de vidro para a simulação do experimento

Utilizamos 10ml de alguns corantes líquidos, para a experiência, como:

- Corante líquido a base de água na cor laranja, tipo xadrez;
- Corante artificial para alimentos, nas cores: vermelho, azul e marrom; e
- Óleo de cozinha juntamente com corante.

A figura tal mostra uma caixa de vidro montada, que suporta 1.800 cm<sup>3</sup> de água, com as peças acima discriminadas, utilizamos o silicone para fixar as partes, a chapa da parte superior é solta e possui alguns furos, como mostra as setas de cor azul da figura acima, simulando as possíveis entradas de poluentes para o aquífero.

### - Metodologias e Experimentos

Para a nossa experiência realizamos diversas simulações utilizamos vários corantes, na função do poluente, onde fotografamos e filmamos o comportamento do “poluente” e analisamos o comportamento durante o seu deslocamento.

Após a montagem da caixa de vidro, buscamos um ambiente com bastante luz e sem a presença do vento.

Pontos de inoculação,  $p_x$  e  $p_y$  tem de estar na malha, logo usam o sistema de coordenadas da malha.

$p_x = [23, 23, 23, 30, 30, 30, 38, 38, 38]$ ; 22.5 foi arredondado para 23 e 37.5 para 38.

$p_y = [30, 40, 50, 30, 40, 50, 30, 40, 50]$ ; aqui não foi necessário arredondamento.

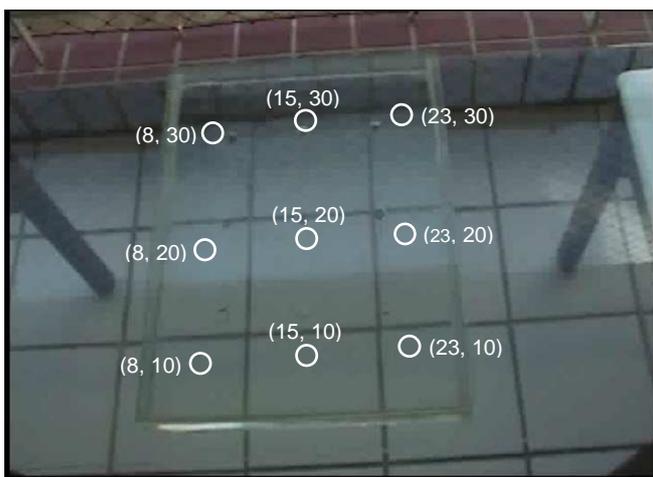


Figura 7 – Localização dos pontos no aquífero artesanal.

Pontos de inoculação,  $p_x$  e  $p_y$  tem de estar na malha, logo usam o sistema de coordenadas da malha.

$p_x = [8, 8, 8, 15, 15, 15, 23, 23, 23]$ ; 22.5 foi arredondado para 23 e 37.5 para 38.

$p_y = [10, 20, 30, 10, 20, 30, 10, 20, 30]$ ; aqui não foi necessário arredondamento.

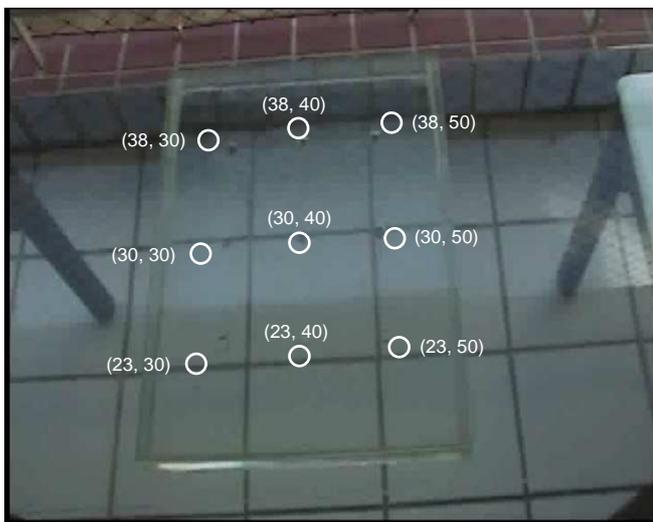


Figura 8 – Localização dos pontos no aquífero artesanal.

### 1ª Simulação

Introduzimos um corante alaranjado juntamente com óleo de cozinha, não miscível, em um poro do centro da chapa de vidro, figura tal, e após alguns minutos percebemos a mudança do comportamento, ou seja, percebemos que o “poluente” começa a criar uma pluma, em destaque, até atingir outras entradas.



Figura 9 – Passo inicial, onde colocamos o “poluente”

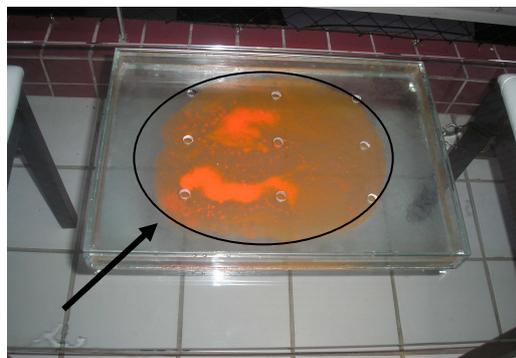


Figura 10 – Passo onde o “poluente” se dispersa no ambiente

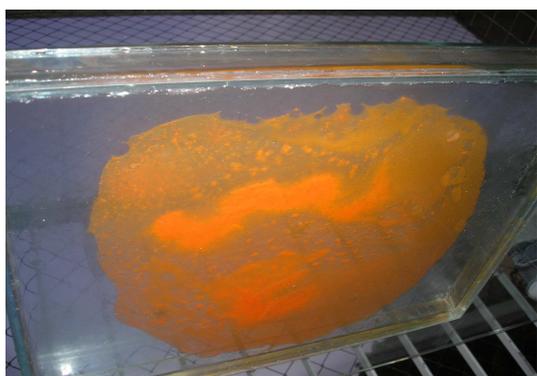


Figura 11 – vista por baixo da lâmina d'água

Na foto 9, ao lado, observamos a dispersão do “poluente”, vista por baixo, e notamos que este começa a tomar toda a extensão de forma homogênea. O material utilizado tem como principal característica a sua densidade, que é menor que a da água, por isso permanece sobre a água.

### 2ª Simulação

Neste experimento colocamos o “poluente” em uma das extremidades da caixa de vidro, foto 5, e logo percebemos que o poluente começa a criar uma pluma, em destaque na foto tal, e se estende por toda a área, chegando até a sua profundidade, o que difere da 1ª simulação.



Figura 12 – Introdução do poluente em uma das extremidades



Figura 13 – Visualização da pluma provocada pelo poluente



Figura 14 – vista lateral da dispersão do “poluente” por toda a extensão do recipiente

Na figura 12, acima, a imagem ilustra o “poluente” disperso por todo o recipiente, se misturando a água e atingindo todos os pontos de captação, visto que, o poluente foi introduzido em um dos poros da extremidade da chapa de vidro.

## 2.4.1 CONCLUSÕES

Nos últimos anos, o problema da defesa de obras realizadas nos aquíferos, aumentou a poluição drasticamente; verdade, hoje há um número crescente de projetos concebidos exclusivamente para a proteção ou reparação de aquíferos, no caso do aquífero de Boa Viagem, segundo o CPRH/PE, a região encontra-se saturada. É dentro deste contexto que o presente trabalho deve ser considerado, no qual é proposto um esquema matemático - imediatamente executado em um computador - que permite o estudo de convecção e dispersiva dos fenômenos de transporte.

No caso dos resultados obtidos relativos às simulações, nos levam a crer que em um aquífero, a dispersão do poluente ocorre, como observamos nos testes realizados, guardada as devidas proporções do aquífero e quantidade dos poluentes, o que, também, não devemos desprezar as características dos poluentes, que irão determinar a velocidade com que estes chegarão a outros pontos de captação no aquífero.

Acreditamos que esta situação tem uma simplificação de menor influência, sobre a correspondente solução analítica aproximada do fluxo de campo. Esta solução também nos forneceu esquemas que permitam a identificação imediata das dimensões da característica da zona de captação, importantes no estudo do fluxo convectivo do poluente.

Outros casos foram desenvolvidos que mostram o potencial do método no que diz respeito à possibilidade de acompanhar a evolução dos poluentes introduzidos em aquíferos.

Toda a abordagem aqui descrita pode ser facilmente transponível para o caso de muitos poços parcialmente penetrante, mesmo de diferentes geometrias individuais, por simplesmente sobrepondo as soluções correspondentes a cada uma delas. Mesmo que a investigação nesta pesquisa permaneça na esfera homogênea de meios de comunicação social, acreditamos que o esquema matemático proposto pode ser de uso prático em numerosos casos práticos, evitando a necessidade de uma complexa e laboriosa formulação numérica.

## 2.5 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

RIDOLFI, Luca & SORDO, Sebastiano. Hydrodynamic dispersion in an artesian aquifer during flow to a partially penetrating well, **Journal of Hydrology**, v. 201, 1997, p. 183-210.

THEODOROPOULOU, M. A., KAROUTSOS, V., TSAKIROGLOU, C. C. A new visualization technique for the study of solute dispersion in model porous media, **Journal of Hydrology**, v. 274, 2003, p. 176-197.

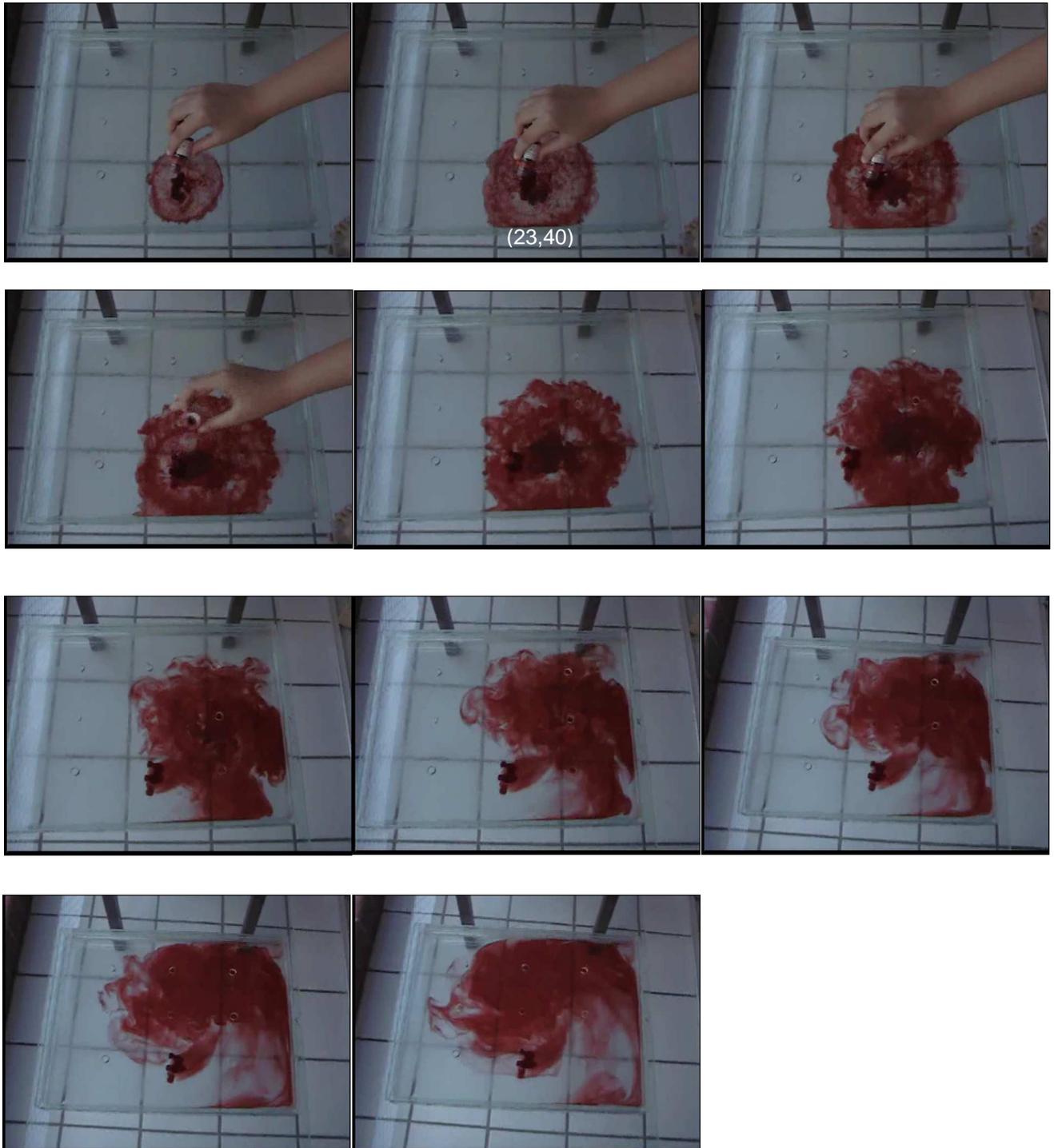
## 2.6 ANEXOS

- Fotos sequenciais do 1º experimento

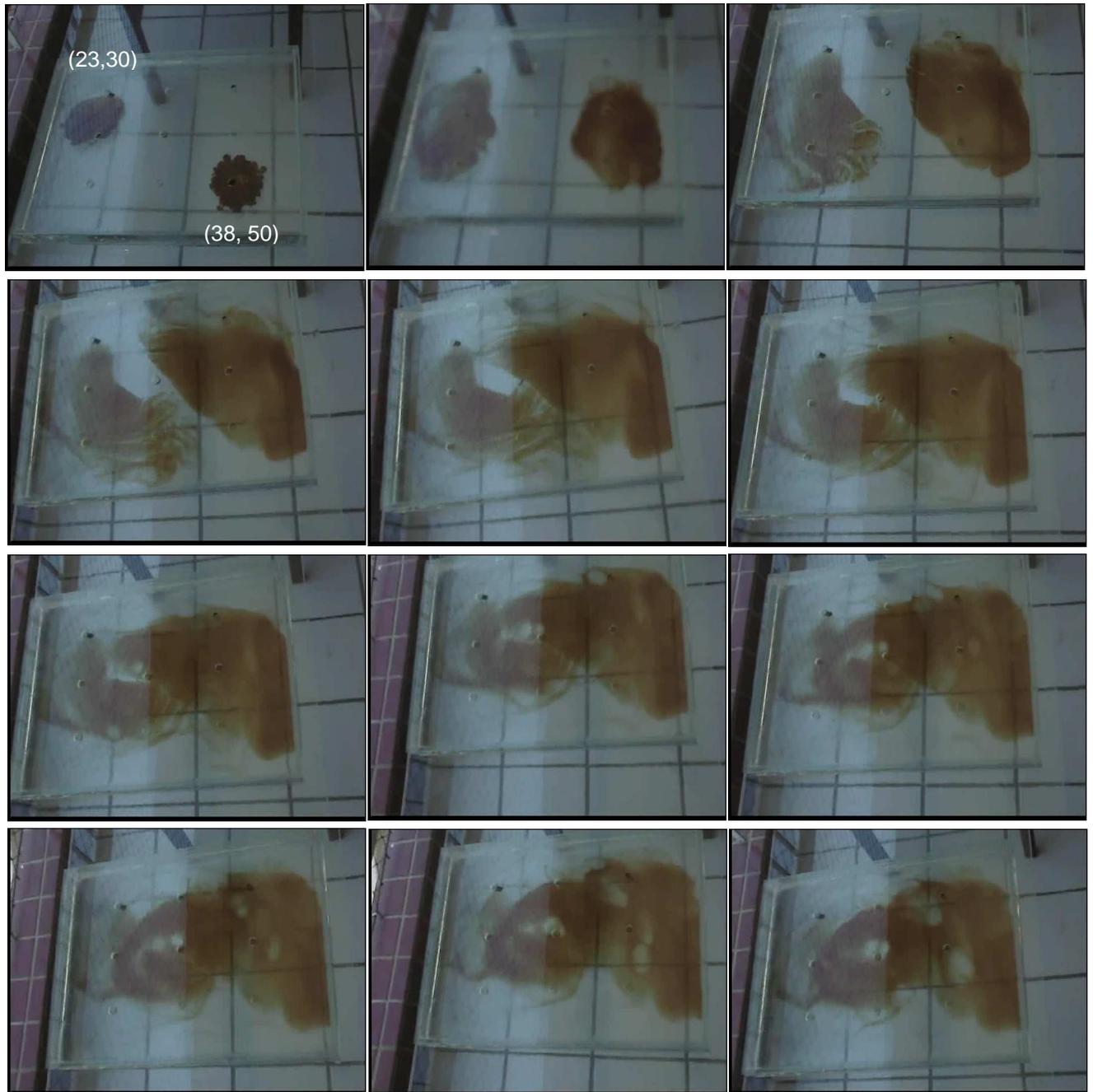
Escolhemos o centro da caixa para a introdução do poluente, verificamos que aos poucos o poluente dispersou, criando uma pluma por toda a área, chegando ao fundo da caixa, como podemos observar nas imagens.



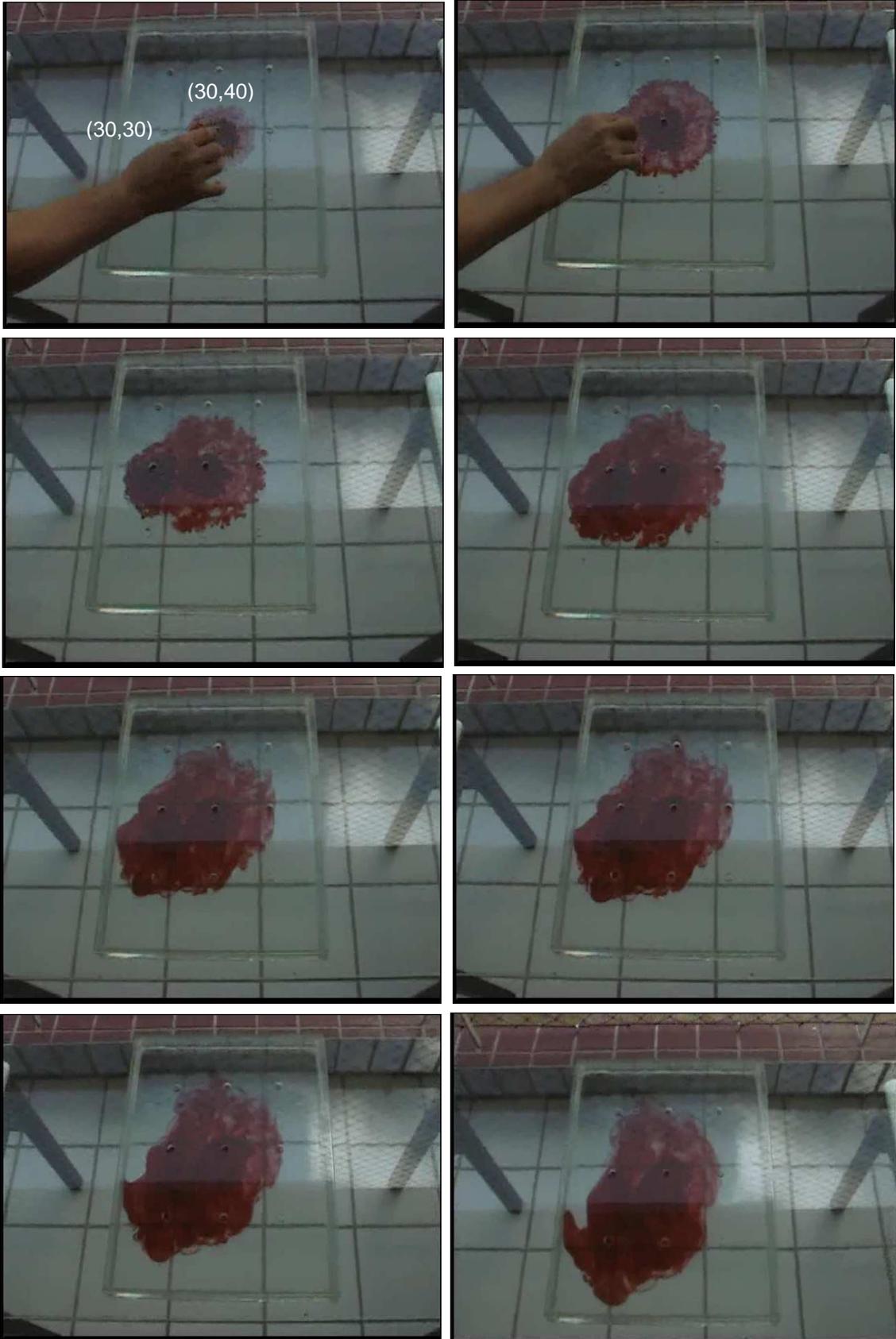
- Ilustração da dispersão de um “poluente” em um ponto de inoculação



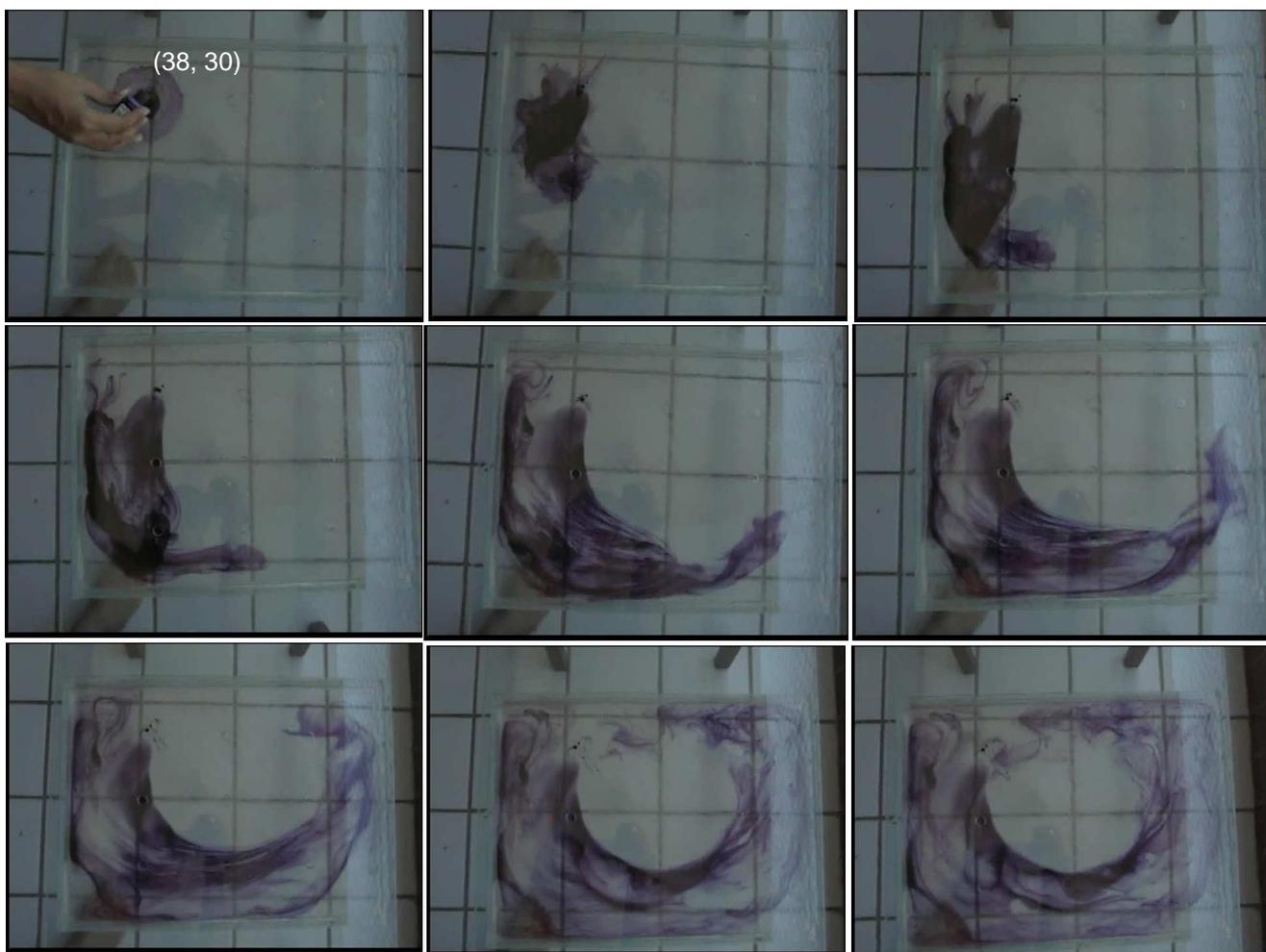
- Ilustração da dispersão de um “poluente” em dois pontos de inoculação



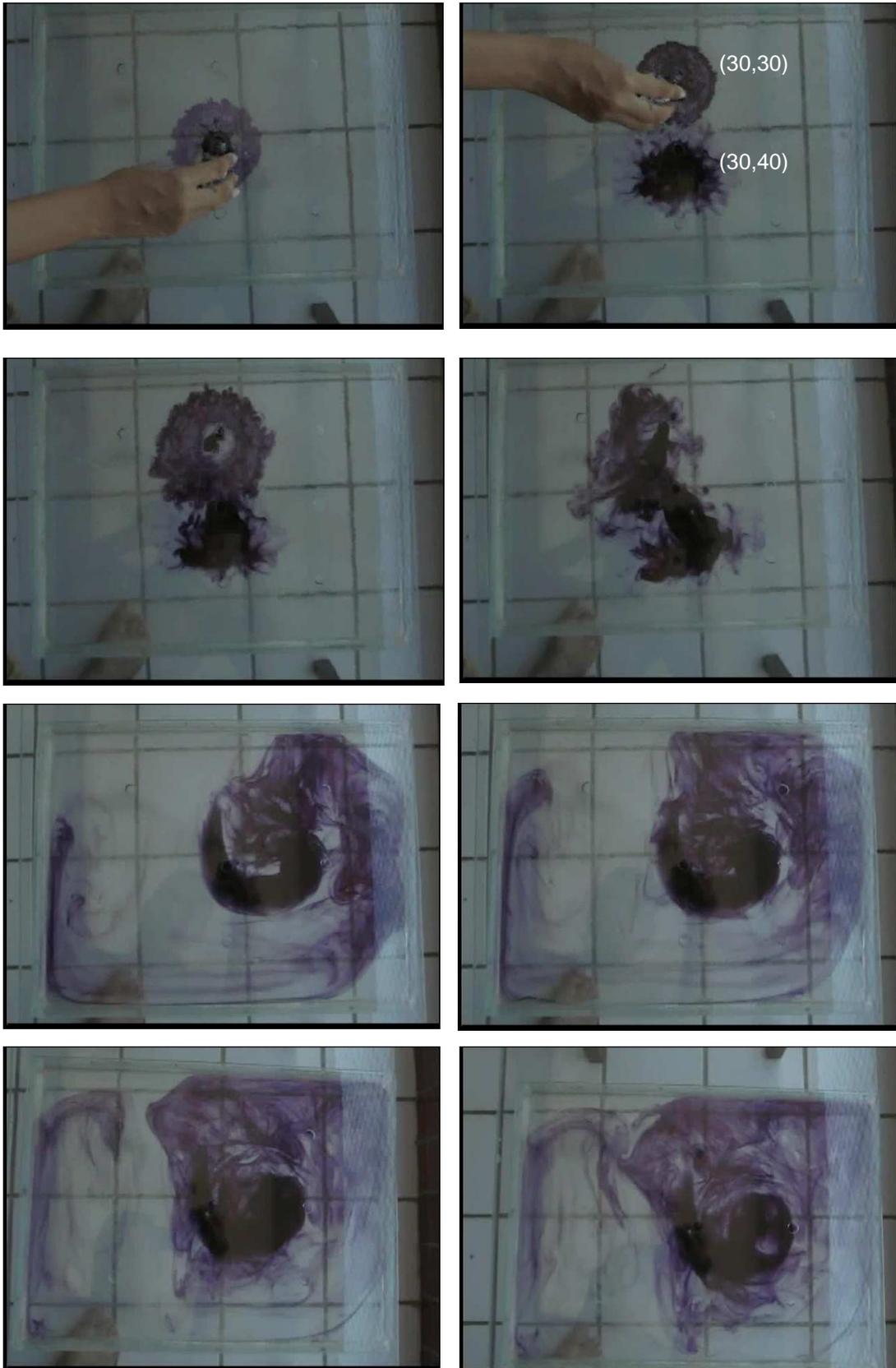
- Ilustração da dispersão de um “poluente” em um ponto de inoculação



- Ilustração da dispersão de um “poluente” em um ponto de inoculação



- Ilustração da dispersão de um “poluente” em um ponto de inoculação



- Ilustração da dispersão de um “poluente” em um ponto de inoculação

