

**MODELOS MATEMÁTICOS ASSOCIADOS À QUALIDADE DA ÁGUA  
(CLEANWATER)**

NELSON HEIN<sup>\*</sup>

Departamento de Matemática  
Universidade Regional de Blumenau  
Rua Antônio da Veiga, 140 CEP: 89010-971 Blumenau – SC – Brasil.  
[hein@furb.br](mailto:hein@furb.br)

CÉSAR EDUARDO KOCK<sup>\*\*</sup>

Departamento de Matemática  
Universidade Regional de Blumenau  
Rua Antônio da Veiga, 140 CEP: 89010-971 Blumenau – SC – Brasil.  
[cesarek@terra.com.br](mailto:cesarek@terra.com.br)

**Resumo:**

Diversas pessoas, independente de suas formações, podem se identificar facilmente com casos de poluição da água, mesmo que com pouquíssimo conhecimento científico sobre o assunto. Sendo que os fatos que ocorrem no mundo da água subterrânea não podem ser diretamente observados, este trabalho vem a apresentar modelos matemáticos considerados ferramentas chave utilizados por pesquisadores. Baseados em alguns pontos de amostragem, onde poços são perfurados ou a água subterrânea é diretamente observada ou exemplificada, são criados modelos matemáticos a fim de obter deduções sobre a direção na qual a água subterrânea está escoando, a razão em que está se movendo, e a localização em que a água pode estar contaminada. Este artigo fornece uma introdução de como os modelos matemáticos podem ser usados para o entendimento de problemas ambientais.

PALAVRAS CHAVE: Modelos matemáticos, Meio ambiente, Água.

**Abstract**

*The range of people generally being asked to understand and deal with ground-water contamination problems includes not only scientists and engineers, but also lawyers, real estate agents, bankers, town officials and others. Since much of what goes on in the realm of ground water is beneath the surface of the earth, where it cannot be seen or directly observed, mathematical models have come to be a key tool for ground-water investigators to*

---

<sup>\*</sup> Orientador da pesquisa

<sup>\*\*</sup> Bolsista do Programa Institucional Bolsas de Iniciação Científica – PIBIC/CNPq

*use. Based on a few sampling points where wells are drilled, are created mathematical models to make deductions about the direction in which the ground water is flowing, the rate at which it is moving, and the locations at which it may have picked up contamination. This subject therefore provides a perfect introduction to how mathematical models can be used to help to understand environmental problems.*

## **1. Introdução**

O objetivo deste trabalho é demonstrar o desenvolvimento de modelos matemáticos associados à qualidade da água, modelando matematicamente a dinâmica da poluição das águas e simulando situações modeladas matematicamente da dinâmica das águas, resultando em um desenvolvimento de tecnologias inovadoras para produção industrial limpa.

## **2. Princípios físicos e exemplos de situações**

As primeiras idéias a serem levadas em conta são princípios físicos e equações matemáticas que permitem a investigação de casos de contaminação de água do solo, verificando os tipos de informação que cada uma destas equações pode nos fornecer.

Uma excelente maneira para realizar estas verificações é se colocar no papel de alguém que deva lidar com tal problema de contaminação da água do solo. Imagina-se, normalmente, que as primeiras reações são de certa forma irracionais, por serem baseadas inteiramente em um conhecimento limitado sobre o assunto abordado. Porém, com o passar de pouquíssimo tempo se percebe que esta expectativa não se consolida, pois a faixa de pessoas geralmente questionada quanto ao entendimento e quanto a lidar com problemas de contaminação da água do solo, não inclui apenas especialistas. Diversas pessoas, independente de suas formações, podem se identificar facilmente com casos de poluição da água, mesmo que com pouquíssimo conhecimento científico sobre o assunto.

Através da abordagem e discussão de situações fictícias é possível se ter uma melhor visualização de possíveis problemas a serem enfrentados em casos de poluição da água. A seguir, são demonstrados dois exemplos de situações fictícias:

**1ª Situação:** Um tanque de gasolina subterrâneo sendo desenterrado em um posto local. Cidadãos desejam saber se há algum risco de saúde (como uma possível contaminação da água em suas propriedades).

Ao ser questionado, o operador do posto responde que um “pequeno vazamento” foi

encontrado em um dos tanques e então, para não correr riscos, o fornecedor de gasolina decidiu substituir todos os tanques por novas marcas. A lógica diz que se houve vazamento, o solo circundante teria sido contaminado por determinada extensão e uma vez que a contaminação atinja o aquífero (*adj* que contém água), esta deve se mover junto ao movimento geral da água do solo.

Para realização de um estudo são necessários dados quantitativos como: quantidade de gasolina que vazou, por quanto tempo vazou, a direção em que a água do solo está se dirigindo e a velocidade em que está ocorrendo. Adiante, será necessária alguma amostra do solo a fim de determinar a extensão da contaminação, sendo que amostras de águas subterrâneas nestes casos são normalmente feitas por meio de fontes (poços) de monitoramento (perfurações no solo).

Não há possibilidade de que se faça perfurações por todo o local, devido ao custo e ao impacto ambiental causado pela própria operação. Porém, caso a fonte de monitoramento seja colocada no local errado, pode-se não notar o trajeto de migração da contaminação, e levar a uma falsa conclusão de que não há problema ambiental. É necessário, inicialmente, formar um conceito preliminar do que pode estar ocorrendo no subsolo. Pode-se seguir insistindo em uma primeira circunferência de amostras, no princípio das quais se refinará uma estrutura conceitual para verificar se uma segunda área com amostras mais refinadas será necessária. Neste ponto, alguns cálculos bastante esboçados são úteis. Este tipo de situação ocorre por diversos locais a todo instante e é a linha principal de trabalho para muitas empresas de engenharia civil e ambiental. Enquanto os engenheiros e hidrologistas fazem muitas das análises, as pessoas que fundamentalmente necessitam entender os resultados e tomar as decisões normalmente não são engenheiros. Podem ser funcionários públicos, vizinhos, ou proprietários de negócios.

**2ª Situação:** Uma residência com fonte de água potável própria, porém localizada em uma cidade que também tem suprimento público de água, ao qual metade dos residentes estão conectados. Devido a recentes desenvolvimentos na cidade, foi decidido aumentar a fonte de suprimento existente na cidade através de uma fonte adicional.

A localização da residência é relativamente próxima a um aterro anteriormente utilizado pela cidade. O departamento de engenharia municipal assegurou, na época do fechamento do aterro, que os contaminantes não estariam sujeitos a migração, pois este estava bem isolado. Porém, alguns questionamentos podem ser efetuados, com base em estudos sobre o movimento da água, como por exemplo: a possibilidade da nova fonte da cidade atrair água do solo para todas as direções vizinhas, a possibilidade da fonte ter como alguns de seus

caminhos (esboçados pela água) a casa e/ou o antigo aterro, a probabilidade de que esta fonte diminua o nível de água da casa (expondo o abastecimento de água), e ainda pior, a possibilidade de percorrer água contaminada do território do aterro em direção a casa e a nova fonte.

As condições estão mudando como resultado da nova fonte da cidade. Estas mudanças podem ocorrer devido ao recuo de água na fonte, através da sucção (bombeamento), que tem uma tendência de inclinar o nível freático na adjacência da fonte, e assim tracionar a água de um vasto raio. Pode-se exigir da cidade uma investigação do impacto da nova fonte no suprimento de água e da migração dos potenciais contaminantes abaixo do aterro municipal fechado. Nesta situação está sendo solicitado a eles que façam um prognóstico sobre o comportamento futuro da água do solo no aquífero, até mesmo antes da fonte ser construída e operada. Como fazer tais prognósticos? Coletam-se os dados relevantes da área, e se utilizam modelos matemáticos!

### 3. Verificação de experimentos prévios

Diversos experimentos foram realizados por pesquisadores nesta área, e alguns pontos básicos referentes a tais pesquisas devem ser considerados. Generalizando, os principais fatores referentes ao fluxo do sistema de água do solo usualmente concentram-se em dois aspectos básicos:

a. Quantidade de água subterrânea fluindo através de uma porção de um aquífero: sendo possível estimar quão rápido algum poluente está infiltrando na água do solo, torna-se possível também estimar sua concentração no aquífero. Isto implicará em uma melhor idéia do grau de risco, assim como dos níveis a serem detectados em qualquer amostra. Este tópico normalmente depende de uma equação conhecida como Lei de Darcy, muito simples, como segue:

$$Q=KiA \quad (1)$$

Porém, é necessário um tempo maior para que as variáveis sejam definidas, de forma individual, precisamente.

b. Velocidade da movimentação da água: fornecerá uma idéia de quão longe a contaminação pode ter se expandido ou quanto tempo se tem para agir, a fim de retê-la a uma expansão muito pequena. Este tópico normalmente depende de uma equação conhecida como Equação da Velocidade Intersticial que também aparenta ser simples:

$$v = \frac{Ki}{\eta} \quad (2)$$

Serão agora verificados os detalhes da Lei Darcy e a Equação da Velocidade Intersticial.

#### 4. Lei de Darcy

No desenvolvimento de qualquer tipo de modelo matemático, é preciso imaginar quais as variáveis físicas chaves que estão controlando a situação de interesse. O interesse desta parte do presente artigo é o fluxo da água do solo através de algum tipo de meio geológico poroso. Por volta de 1850, um engenheiro francês chamado Henri Darcy, estava interessado essencialmente na mesma questão, por estar tentando montar um sistema para filtrar água na cidade de Dijon, França, fazendo com que esta água atravessasse uma camada de areia limpa – tais filtros de areia são comumente utilizados ainda hoje. As dúvidas de Darcy estavam relacionadas a quantidade de água que poderia se mover e a que razão, através de que tamanho de filtro de areia. Para responder estas questões, ele montou alguns experimentos simples.

A Figura 1 demonstra um experimento no qual a água pode ser impulsionada pelo peso de uma coluna de água através de uma amostra geológica, como areia, cascalho, areia fina ou até mesmo algum tipo de rocha porosa ou fraturada. Se a amostra geológica é de algum material através do qual a água passa praticamente sem esforços, então não será necessária a aplicação de muita força (peso) para impulsionar a água através deste. Por outro lado, se a amostra não permite o fluxo fácil de água, como areia fina ou barro, então a mesma quantidade de força irá resultar em uma razão de fluxo de água muito menor através da amostra. Nesta última situação, poderá se esperar que por um grande aumento da força, haverá a possibilidade de se trazer a razão de fluxo da forma como no caso anterior.

Podem ser variados dois fatores, de três formas: inicialmente variar a força aplicada, em um segundo experimento é possível variar o comprimento da amostra no trajeto do fluxo, e em um terceiro caso há a possibilidade de efetuar uma variação mais complexa do caso base, com duas alterações, tanto na pressão de entrada ou força aplicada (determinada pela altura da coluna), quanto na resistência da trajetória (determinada pelo comprimento da amostra). Experimentos semelhantes a estes foram realizados por Darcy, o qual sempre questionava o que poderia ocorrer a cada alteração executada. Ao se unir, em linguagem matemática, as observações dos experimentos, será atingida a Lei de Darcy! Na terminologia da

proporcionalidade matemática, é possível fazer as seguintes afirmações:

1. A razão de fluxo é proporcional à pressão motriz da rede, representada por:

$$\Delta h = h_1 - h_2 \quad (3).$$

2. A razão de fluxo é inversamente proporcional ao comprimento  $L$  da amostra.

3. A razão de fluxo é proporcional à área da seção transversal  $A$  do trajeto do fluxo.

4. A “constante de proporcionalidade” das relações, naturalmente depende do meio geológico específico em estudo.

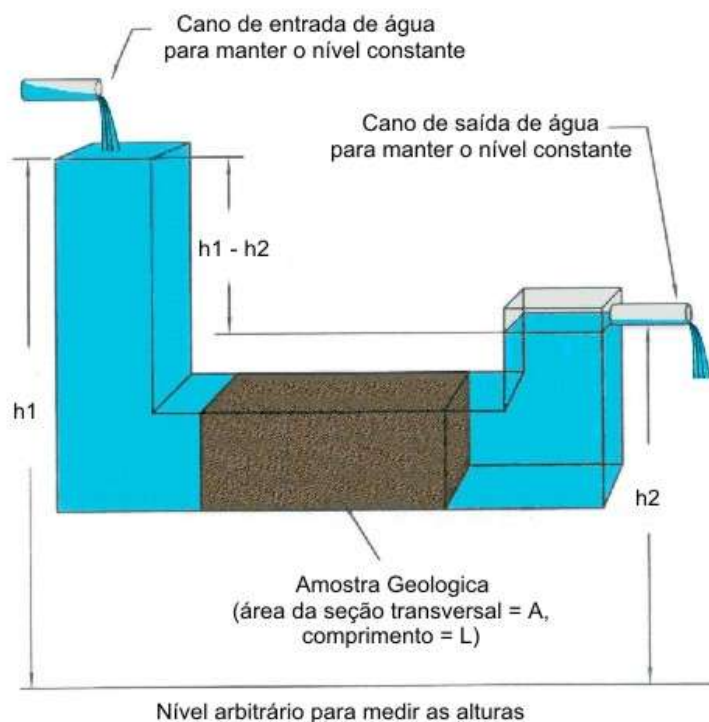


Figura 1 – Experimento original de Darcy

Reunindo estes princípios na forma de uma equação matemática:

$$Q = K \times \Delta h \times \frac{1}{L} \times A \quad (4)$$

Onde  $Q$  é a razão de fluxo total através da amostra (volume/tempo), e  $K$  a constante de proporcionalidade correspondente, ou seja, a condutividade hidráulica (onde as propriedades do material geológico entram).

A equação para  $Q$  é muito próxima à forma de Lei de Darcy que foi iniciada anteriormente. Em particular, utilizando a definição

$$i = \frac{\Delta h}{L}, \quad (5)$$

a seguinte equação realmente reduz a forma de critério da Lei de Darcy,

$$Q = KiA. \quad (1)$$

A quantidade  $i$  é chamada de gradiente hidráulico. Representa o efeito combinado da diferença de pressão entre os dois finais do meio geológico, e do comprimento do trajeto do fluxo através do meio.

## 5. Equação da velocidade intersticial

Conforme Darcy desenvolveu experimentos para verificar as variáveis físicas chaves que estavam controlando a situação de interesse, é interessante que se esboçe determinados experimentos com a finalidade de uma melhor visualização da velocidade intersticial.

Um experimento em especial tem grande importância: focar a atenção para apenas um pé quadrado da seção transversal do aquífero, considerando um trajeto livre. A velocidade ao longo deste trajeto é a velocidade intersticial ou, simplesmente, velocidade da água do solo. Esta velocidade é a medida na qual geralmente há interesse, porque esta representará o quão longe da sua fonte algum contaminante dissolvido poderá ter migrado, em um dado espaço de tempo.

Para determinar a velocidade atual do fluido em um aquífero, é necessário observar o fluxo volumétrico do fluido através de uma unidade de área da seção transversal (um pé quadrado neste experimento) e então dividir este número pela porosidade do aquífero. Para colocar isto em termos matemáticos, é necessário calcular inicialmente o fluxo volumétrico do fluido  $q$  através de uma unidade de área da seção transversal do aquífero. Isto é obtido pela colocação  $A = 1$  na Lei de Darcy:

$$q = Ki(1) \quad (6)$$

$$= Ki \quad (7)$$

Então, dividir pela porosidade  $\eta$  para obter a Equação da Velocidade Intersticial:

$$v = \frac{Ki}{\eta} \quad (8)$$

Onde  $v$  é a velocidade efetiva do fluido ao longo do eixo do trajeto do fluxo,  $K$  a condutividade hidráulica comum,  $i$  representa o gradiente hidráulico comum e,  $\eta$  representa a porosidade do meio.

Este fluxo do fluido, através da unidade de área da seção transversal, tem um nome específico: é conhecido como curso e é denotado pela letra  $q$ . Assim, é gerada a equação da velocidade intersticial na forma:

$$v = \frac{q}{\eta} \quad (9)$$

Observa-se que para calcular a velocidade do fluido, não há necessidade de se saber a espessura da camada do aquífero ou sua extensão lateral. É necessário conhecer duas das propriedades inerentes do material – condutividade hidráulica  $K$  e porosidade  $\eta$  – assim como o gradiente hidráulico  $i$  sobre a porção do aquífero em estudo.

## 6. Uso dos diagramas superficiais de contorno

Quando um hidrologista começa a investigar o regime da água do solo em um aquífero subterrâneo, este precisa de um caminho prático para possuir pistas de cada dado que possa ser utilizável em relação à superfície hidráulica daquele aquífero. Afinal, a superfície hidráulica pode ser o parâmetro mais fundamental ditando o fluxo da água do solo, por que ela determina ambas as direções do fluxo e a diferença de pressão que está determinando este fluxo.

Exceto pelos casos onde o nível freático pode estar em equilíbrio com um corpo d'água superficial, o método geral de determinar o valor superficial da água do solo em um aquífero, é perfurar um número de fontes teste das quais se pode medir as profundidades do nível freático, e usar esta informação para determinar a elevação do nível freático. Uma vez que os dados de um número de fontes teste são coletados, a principal informação correspondente é normalmente colocada junto a um mapa de contorno da tabela, o qual é muito similar a um mapa topográfico. Em um mapa topográfico, as linhas de contorno mostram pontos de elevação iguais; em um mapa de contorno do nível freático, as linhas de contorno mostram pontos onde os valores superficiais são os mesmos.

Estes mapas normalmente são baseados em uma grande quantidade de interpolações e extrapolações. Mesmo perfurando apenas um número determinado de fontes em um aquífero, com a base dos valores obtidos nestas fontes é possível esboçar linhas para estimar onde estão os valores constantes de maior importância. Um fator chave é o seguinte: a água do solo a qualquer ponto, quase sempre tende a fluir na direção que é perpendicular a linha superficial de contorno naquele ponto. A água do solo “quase sempre” segue um caminho de declínio, isto porque ocasionalmente algo pode entrar no caminho para desviar a água para uma direção diferente dos declives. Portanto, é assumido como uma regra geral que o fluxo da água do solo será perpendicular ao contorno superficial. Esta é uma boa suposição para quase toda situação comum.

Um ponto importante em relação ao método de cálculos que utiliza estes mapas de contorno é a questão da divisão do trajeto do fluxo em segmentos individuais. Os mapas devem ser divididos em segmentos, e não calculados de forma direta, ou seja, por um procedimento abreviado. Embora seja muito complexo explorar as razões aqui, o fato é que este procedimento abreviado funcionará bem quando o gradiente hidráulico for totalmente uniforme ao longo do caminho do fluxo, mas irá divergir dos valores corretos nos casos onde o gradiente for significativamente diferente em diferentes partes do caminho do fluxo (isto tudo assume que os outros parâmetros hidrológicos – porosidade e condutividade hidráulica – são constantes em todas as partes).

### **7. Determinando direções de fluxo aproximadas utilizando dados de três fontes**

Dois fatores são necessários para os cálculos: o gradiente hidráulico,  $i$ , e a linha superficial de contorno hidráulico, representando locais de superfícies hidráulicas constantes. Este último é usado em combinação com o princípio geral de que a direção do fluxo é sempre perpendicular à linha de contorno, para que se possa esboçar a linha de fluxo atual.

Através dos passos lógicos descritos abaixo, é possível olhar para determinados dados e estimar aproximadamente para qual direção a água do solo está fluindo e aproximadamente que gradiente hidráulico pode ter naquela direção:

1. Identificar a fonte que tenha um valor superficial que é intermediário entre os outros dois.
2. Considerando que a superfície desta fonte seja intermediária entre as superfícies das outras fontes, deve haver também um ponto entre as outras fontes que tenha o mesmo valor superficial que esta.
3. Achar a localização do ponto intermediário entre a fonte intermediária e fonte mais baixa. Origem a um novo ponto, P.
4. Construir a melhor estimativa das linhas superficiais de contorno com relação ao valor superficial da fonte intermediária. Assim, haverá dois pontos que pertencem à linha principal de contorno: a localização original e o novo ponto P. Há muitos caminhos possíveis que a linha superficial de contorno poderia tomar para conectar estes dois pontos, mas na ausência de quaisquer informações adicionais, a prática padrão é esboçar o tipo mais simples de linha conectando estes dois pontos, a qual será uma linha reta.
5. Estimar a direção de fluxo geral da água do solo baseado na linha de contorno calculada anteriormente. Desde que a direção de fluxo seja perpendicular à linha de contorno, o fluxo deve ser na direção geral sugerida pela linha de fluxo provinda do novo ponto Q. Este ponto

está no cruzamento entre a linha que vai do ponto P até a fonte intermediária e a linha que vai da fonte mais baixa até esta mesma linha, formando um ângulo de 90° com a mesma.

6. Calcular o gradiente hidráulico correspondente na direção do fluxo. A fim de calcular o gradiente hidráulico atual é necessário ter dois pontos ao longo de uma linha de fluxo na qual os valores das superfícies hidráulicas sejam conhecidos. As únicas informações adicionais necessárias a fim de calcular o gradiente hidráulico são a distância entre estes dois pontos ou, equivalentemente, a extensão do segmento perpendicular da fonte mais baixa até a linha de contorno Q. Há duas maneiras de determinar isto, uma começando simplesmente a estimar a partir de uma figura esboçada do local, usando uma escala provida nesta mesma, e a outra utilizando trigonometria. Através do valor obtido, o gradiente é estimado pela fórmula:

$$i = \frac{\Delta h}{L} \quad (10)$$

Em resumo, a seqüência de passos acima é utilizada para atingir os dados das fontes a fim de calcular a direção geral da linha superficial de contorno hidráulico, a linha de fluxo correspondente, e o gradiente hidráulico atual.

É altamente caro perfurar fontes, por tal atividade requerer equipamentos pesados e operadores experientes para realizá-la. Assim, é freqüentemente desejável minimizar o número de fontes perfuradas. Por estas razões, hidrologistas defendem os cálculos simples como os descritos acima para maximizar a informação que eles podem obter de um número muito limitado de fontes.

## **8. O FORMULÁRIO CONTÍNUO DA LEI DE DARCY PARA FLUXO UNIDIMENSIONAL**

A segunda parte desta pesquisa estudou uma breve introdução de aspectos adicionais da modelagem da água subterrânea, partindo de pontos elementares progredindo gradativamente a níveis mais avançados, sendo utilizados desde cálculos básicos até cálculos multivariáveis. Foi então desenvolvida uma interpretação mais geral do gradiente hidráulico, simplesmente como sendo uma derivada da “função superficial”. Possuindo a derivada da chamada função superficial, foi necessário retornar e analisar de forma mais apurada o conceito de superfície hidráulica. Foi percebida a necessidade de estender nossa definição original de superfície hidráulica – a qualquer ponto no aquífero – como sendo a altura na qual a água se elevará, na fonte que penetra o aquífero, em determinado ponto. Também foi percebido que o valor superficial não depende da profundidade do ponto onde é coletada a

amostra do aquífero, mas apenas de onde as fontes estão localizadas ao longo do trajeto horizontal do fluxo.

A fim de fazer uma estimativa exata do gradiente hidráulico em um determinado ponto  $x$ , é necessário ter um segundo ponto disponível a uma distância ( $\Delta x$ ) relativamente pequena em relação ao ponto  $x$ . Neste caminho, qualquer mudança nas condições mais afastadas através do aquífero não interferirá no valor calculado para  $x$ . Utilizando notações dos cálculos elementares, podemos converter a situação mencionada para

$$\Delta h = \text{variação superficial}$$

Variação superficial = superfície do primeiro ponto – superfície do segundo ponto

$$\begin{aligned} \Delta h &= h(x) - h(x + \Delta x) \\ \Delta h &= -[h(x + \Delta x) - h(x)] \end{aligned} \quad (11)$$

$$\text{e então} \quad i = \frac{-[h(x + \Delta x) - h(x)]}{\Delta x} \quad (12)$$

Observe que o símbolo  $\Delta h$  está sendo utilizado como o negativo da forma na qual é comumente utilizado em cálculos elementares, a fim de representar a perda (variação) superficial. Note que se obtém um valor mais exato do gradiente hidráulico no ponto  $x$  específico se utilizarmos valores relativamente pequenos de  $\Delta x$ . Aliás, o valor preciso do gradiente no ponto pode ser representado como o limite desta expressão com  $\Delta x$  tendendo a 0; isto é,

$$\begin{aligned} i &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{-[h(x + \Delta x) - h(x)]}{\Delta x} \\ i &= - \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{h(x + \Delta x) - h(x)}{\Delta x} \\ i &= - \frac{dh}{dx}. \end{aligned} \quad (13)$$

Então o valor exato do gradiente hidráulico nesta estrutura contínua é dado pelo negativo da derivada da função superficial! Isto leva a seguinte forma da lei de Darcy:

$$q = Ki = -K \frac{dh}{dx} \quad (14)$$

Esta também tem duas conseqüentes fórmulas baseadas no mesmo princípio básico discutido na primeira parte da pesquisa. Em particular, a razão de fluxo volumétrico total através da seção transversal da área  $A$  será agora dada por

$$Q = qA = -K \frac{dh}{dx} A \quad (15) \quad (\text{a qual é análoga a antiga fórmula } Q = KiA),$$

e a equação da velocidade intersticial virá a ser:

$$v = \frac{-K \frac{dh}{dx}}{\eta} \quad (16) \quad \left( \text{a qual é análoga à antiga equação } v = \frac{Ki}{\eta} \right).$$

## 9. APLICANDO A VERSÃO CONTÍNUA UNIDIMENSIONAL DA LEI DE DARCY

Quando um hidrologista sai inicialmente a campo com o intuito de tentar entender o fluxo do sistema em um aquífero subterrâneo, este estará procurando por qualquer parâmetro mensurável ou outros parâmetros que possam ser razoavelmente bem estimados. Mas possuir estes valores é raro, porque requer consideráveis gastos com tempo e dinheiro para que sejam coletados. Portanto, é comum que dados sejam coletados de uma forma interativa, ou seja, iniciando com um relativamente pequeno banco de dados, tentando desenvolver um conhecimento conceitual da situação subterrânea baseado nesta pequena amostra, através de um modelo matemático para desenvolver um certo número de prognósticos de parâmetros mensuráveis não incluídos no banco de dados inicial, e então comparar estes valores prognosticados com os dados de uma nova série de pesquisa de campo. É comum proceder várias séries de interação deste tipo antes de alcançar um alto nível de confiança quanto aos valores de interpretação da estrutura subterrânea e do regime de fluxo. Deve-se iniciar considerando um caso relativamente simples do regime de fluxo essencialmente unidimensional. Com a base nas discussões realizadas através de exemplos numéricos, podemos fazer duas observações:

- 1) Há diversas restrições em qualquer função que represente a distribuição hidráulica superficial, especialmente na situação onde a condutividade hidráulica é assumida como sendo constante.
- 2) Há uma interação entre suposições que um hidrologista possa fazer sobre condutividade hidráulica, e prognósticos que podem resultar respectivos valores superficiais.

Sob a suposição da condutividade hidráulica, a função hidráulica superficial  $h$  (dada a superfície hidráulica a qualquer ponto no aquífero) deve satisfazer a famosa equação de

Laplace,  $\frac{d^2 h}{dx^2} = 0$  (13). Esta equação pode não parecer muito impressionante, mas

representou em determinado momento o passo mais importante no desenvolvimento de equações similares as de Laplace para problemas bi e tridimensionais. Para uma simplificação de “derivadas parciais”, freqüentemente foram utilizadas abreviações  $h_x$  e  $h_{xx}$  para a primeira e segunda derivadas de  $h$  em relação a  $x$ .

Sabe-se que em um tubo, por exemplo, tudo entra por um lado, deve sair na mesma quantidade pelo outro lado. Além disso, sendo a água um fluido essencialmente incompressível, dizer que a quantidade de massa da rede incorporando ao volume incremental deve ser 0 é equivalente a dizer que a quantidade de volume do fluido incorporando ao volume incremental deve ser 0. Considerando o fluxo do fluido através da face esquerda e da face direita obtemos a seguinte equação:

$$\begin{aligned} 0 &= \text{fluxo através da face esquerda} + \text{fluxo através da face direita} \\ 0 &= K(-h_x(x))(1 \cdot 1) + K(h_x(x+\Delta x))(1 \cdot 1) \end{aligned} \quad (14)$$

Aqui foi utilizada novamente a notação subscrita para diferenciação. É possível verificar que o sinal negativo pertence a primeira equação de  $h_x$ , pois na face esquerda do volume incremental o  $h_x$  é originalmente negativo (desde que  $h$  seja decrescente para direita), mas o fluxo do fluido no volume incremental deve ser positivo. Similarmente, um sinal de mais é utilizado com o valor de  $h_x$  na face direita, correspondendo aos pontos onde a coordenada  $x$  é  $x+\Delta x$ . Os valores sendo multiplicados (1.1) correspondem às direções  $y$  e  $z$ . Efetuando algumas manipulações algébricas nesta última equação se obtém a equação de Laplace:

$$0 = -h_x(x) + h_x(x+\Delta x) \quad (\text{divide por } K) \quad (15)$$

$$0 = \frac{h_x(x+\Delta x) - h_x(x)}{\Delta x} \quad (\text{divide por } \Delta x) \quad (16)$$

$$0 = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{h_x(x+\Delta x) - h_x(x)}{\Delta x} \quad (\text{calcular limites de ambos os lados}) \quad (17)$$

$$0 = h_{xx}(x) \quad (\text{definição da derivada de } h_x) \quad (18)$$

Sendo  $x$  um ponto arbitrário no trajeto do fluxo, esta equação deve abranger todos os valores de  $x$  e deste modo podem ser escritos na forma simples:  $h_{xx}=0$ . (18)

Esta é a equação unidimensional de Laplace! A este ponto se sabe que qualquer intervalo de condutividade hidráulica constante, a função superficial deve satisfazer a equação

de Laplace. Conseqüentemente ela deve ser uma linha estreita neste intervalo.

## 10. FATORES DE RETARDAÇÃO

Essencialmente todas as discussões sobre a modelagem da água subterrânea até este ponto foram orientadas para o movimento da própria água subterrânea, onde uma suposição implícita tem sido feita de que todo material dissolvido na água subterrânea será simplesmente “arrastado” a uma mesma taxa. Porém, há determinadas situações em que é importante prestar uma maior atenção aos processos físicos que podem ter impacto no movimento do contaminante de uma maneira que irá diferir do movimento próprio da água. Um processo que pode afetar o transporte do contaminante é difusão, significando que o material dissolvido pode tender a difundir ou espalhar-se em todas as direções a qual é transportado, tendo como resultado a diminuição da concentração máxima, porém com contaminante dissolvido por uma área muito maior.

Um segundo processo que pode afetar o movimento do material dissolvido é chamado de “retardação”, o qual se refere ao fato de que sob determinadas circunstâncias o material dissolvido pode se submeter à determinadas interações físicas ou químicas com o meio geológico circunvizinho, sendo que o efeito na rede pode ser um retardo do avanço desta “frente contaminante”, ou seja, abaixo da velocidade natural do fluido. (Uma “frente contaminante” se refere à região relativamente compacta onde a concentração do contaminante varia de 0 a valores de pico ou de estado estacionário). Um parâmetro  $R$  é utilizado para caracterizar este efeito de retardação, referenciando pelo qual a velocidade adiante efetiva da frente contaminante é reduzida abaixo da velocidade natural do fluido. Por exemplo, se o fator de retardação  $R$  é 10, esta é uma forma matemática de expressar que a frente contaminante está se movendo a uma taxa aproximadamente 10 vezes mais lenta do que este fluido está se movendo.

A fim de tornar estes aspectos mais precisos foi considerado o parâmetro experimental que é normalmente mensurado no laboratório, conhecido como coeficiente de distribuição ( $K_d$ ). Este mede a distribuição ou ponto de equilíbrio entre o soluto dissolvido e o soluto que é adsorvido pela matriz sólida. A seguinte equação define este parâmetro:

$$K_d = \frac{\text{massa de soluto adsorvida na fase s\u00f3lida por unidade de massa de substrato}}{\text{concentra\u00e7\u00e3o de soluto na solu\u00e7\u00e3o}} \quad (19)$$

Entretanto, a express\u00e3o pode ser muito mais razo\u00e1vel se for rescrita na forma

$$\begin{aligned} &\text{massa de soluto adsorvida na fase s\u00f3lida por unidade de massa de substrato} \\ &= K_d \times \text{concentra\u00e7\u00e3o de soluto na solu\u00e7\u00e3o} \end{aligned} \quad (20)$$

sendo que esta indica simplesmente que a massa adsorvida (por unidade de substrato) \u00e9 simplesmente proporcional a concentra\u00e7\u00e3o da solu\u00e7\u00e3o. Dobrando a concentra\u00e7\u00e3o da solu\u00e7\u00e3o, ser\u00e1 adsorvido duas vezes mais pela mesma quantidade de substrato. O valor de  $K_d$  \u00e9 apenas a constante de proporcionalidade! O fator de retarda\u00e7\u00e3o  $R$  pode ser calculado uma vez que o coeficiente de distribui\u00e7\u00e3o  $K_d$  tenha sido mensurado. O relacionamento entre estes par\u00e2metros

\u00e9 o seguinte:  $R = 1 + \frac{\rho_b}{\eta} \times K_d$  (21), onde  $h$  \u00e9 a porosidade usual e  $\rho_b$  \u00e9 a magnitude da densidade do solo ou da rocha.

## 11. DETERMINANDO AS LINHAS DE CONTORNO SUPERFICIAIS E AS DIREC\u00d7\u00d5ES DE FLUXO GERAIS UTILIZANDO DADOS DE MODERADAS OU DIVERSAS FONTES

Anteriormente foi verificada a utiliza\u00e7\u00e3o de dados de tr\u00eas fontes para estimar as linhas de contorno e direc\u00d7\u00f5es de fluxo. Existem diversos programas computacionais que realizam estes tipos de opera\u00e7\u00f5es. \u00c9 necess\u00e1ria a entrada de dados como a localiza\u00e7\u00e3o das fontes e seus valores superficiais, e ent\u00e3o tal programa gera algumas linhas de contorno estimadas. Por\u00e9m, p\u00f4e-se em quest\u00e3o a exatid\u00e3o de tais programas, devido a um desconhecimento do procedimento utilizados pelos mesmos para gerar tais resultados. Mesmo que se tenha um racioc\u00ednio l\u00f3gico para tudo que se fa\u00e7a, isto n\u00e3o significa que seja poss\u00edvel provar que se est\u00e1 correto. Algumas pessoas acham que n\u00e3o h\u00e1 lugar para opini\u00f5es ou julgamentos na matem\u00e1tica, mas em algumas importantes \u00e1reas aplicadas isto n\u00e3o ser\u00e1 v\u00e1lido, pois um bom suprimento de experi\u00eancias e intui\u00e7\u00f5es f\u00edsicas pode at\u00e9 guiar pesquisadores a resultados preciosos.

## **12. EXPLORAÇÃO DA RELAÇÃO ENTRE LINHAS DE CONTORNO HIDRÁULICO SUPERFICIAL E LINHAS DE FLUXO DA ÁGUA SUBTERRÂNEA**

Nesta parte foi iniciado o desenvolvimento da estrutura matemática bidimensional para elevar o conhecimento em relação ao fluxo da água subterrânea do método gráfico utilizado anteriormente para versões bidimensionais mais precisas da Lei de Darcy e da Equação de Laplace. Será análoga a forma contínua unidimensional da lei de Darcy. Relembrando a aproximação básica apresentada para determinar a direção e a razão do movimento da água subterrânea: identificar as linhas de contorno hidráulico superficial, assumir que as direções de fluxo são sempre perpendiculares a estas linhas de contorno, esboçar na linha de fluxo iniciando a qualquer ponto de interesse (como o ponto onde a contaminação entra no aquífero), e analisar distâncias e gradientes hidráulicos ao longo da linha de fluxo. Sempre foi suposto que a água subterrânea flui em uma direção perpendicular as linhas de contorno de superfícies hidráulicas. A proposta deste tópico foi investigar mais a fundo esta suposição e entender quando isto se aplica e quando não se aplica. O fator chave em um meio isotrópico é o fato de que a água se move na mesma direção que a força externa aplicada a ela pela variação da superfície hidráulica. Entretanto, algumas vezes a movimentação não ocorre na direção exata na qual se tenta empurrá-las através de uma força externa. Sabe-se também que alguns meios geológicos podem favorecer o fluxo da água subterrânea em certas direções e impedir este fluxo em outras. Torna-se necessário considerar as seguintes observações:

- a) A lei de Darcy por si não se aplica a um meio anisotrópico, mas a equação matriz análoga à lei de Darcy se aplica onde a condutividade hidráulica é representada por uma matriz de vários valores.
- b) A direção de fluxo do fluido nem sempre será perpendicular às linhas de contorno hidráulico superficiais.

## **13. A VERSÃO CONTÍNUA DA LEI DE DARCY EM DUAS E TRÊS DIMENSÕES PARA MEIOS ISOTRÓPICOS E ANISOTRÓPICOS**

Verificou-se anteriormente que a lei de Darcy tomou a seguinte forma:

$$q = -K \frac{dh}{dx} \quad (22) \quad \text{ou} \quad q = -Kh_x \quad (23)$$

O caso mais comum encontrado é o fluxo essencialmente horizontal, mas que pode se mover nas duas direções horizontais. Para uma consistente notação, é necessário utilizar  $x$  e  $y$  para representar as duas dimensões do campo do fluxo, que podem ser duas dimensões horizontais ou uma dimensão horizontal e uma vertical. Deste modo é possível escrevê-la como  $h(x, y)$  ou simplesmente  $h$ . Sendo esta uma função de duas variáveis, esta pode ter derivadas parciais. A derivada parcial em relação à  $x$  é referente ao índice de variação de  $h$  em relação à  $x$  com  $y$  sem apresentar variação; isto pode ser denotado por  $h_x$  ou  $\frac{\partial h}{\partial x}$ . Similarmente ocorre com  $y$ . Tomando as duas derivadas parciais de  $h$  e unindo-as em forma de vetor, isto é,  $(h_x, h_y)$ , sendo conhecido como vetor gradiente de  $h$ , denotado por  $\nabla h$ . Assim,

$$\nabla h = (h_x, h_y) . \quad (24)$$

este possui uma magnitude e uma direção. Isto é demonstrado em cálculos multivariáveis nos quais esta direção tende a ser perpendicular a linha de contorno em qualquer ponto. A magnitude ou “Modelo Euclidiano” do gradiente vetor, é

$$\|\nabla h\| = \sqrt{h_x^2 + h_y^2} \quad (25)$$

sendo que tende a ser o mesmo valor da “derivada direcional” de  $h$  obtida pela direção do vetor gradiente. Neste ponto é combinada esta estrutura matemática com o princípio físico básico de Darcy e o trabalho realizado na seção prévia a fim de desenvolver versões bidimensionais da Lei de Darcy para duas situações distintas: um meio isotrópico e um meio anisotrópico.

No caso isotrópico, o meio não exerce forças preferenciais para tentar mover o fluido a não ser na direção na qual este geralmente objetivar percorrer. Por esta razão, este irá se mover em uma direção perpendicular às linhas de contorno, a mesma direção linear do vetor gradiente e sua forma negativa. O vetor de fluxo  $q$  a qualquer ponto é uma grandeza escalar positiva múltipla do vetor gradiente negativo; ou seja,  $q = K(-\nabla h) = -K \nabla h$ . (26)

Para um dado meio, a razão de fluxo a qualquer ponto é proporcional à variação da superfície ao longo do trajeto deste fluxo a qualquer ponto, e esta constante de proporcionalidade,  $K$ , depende apenas do meio e não de um ponto em particular ou outros

fatores. Portanto, para sumarizar, a Lei de Darcy para meios isotrópicos bidimensionais tem a seguinte forma:  $q = -K \nabla h$  (26). Observemos agora as seguintes equações:

$$\begin{aligned} q_1 &= -K_1 h_x \\ q_2 &= -K_2 h_y \end{aligned} \quad (27) \quad \text{ou} \quad q = - \begin{pmatrix} K_1 & 0 \\ 0 & K_2 \end{pmatrix} \nabla h \quad (28)$$

Porém, o problema é um pouco mais complicado, sendo que se aproxima da solução sumarizando algumas observações básicas sobre a forma de relacionamento procurada entre a força motriz de entrada  $\nabla h$  e o vetor de saída  $q$ :

1. Quando o gradiente hidráulico é 0, o fluxo do fluido correspondente deverá ser 0.
2. O fluxo do fluido  $q$  deverá ser proporcional em magnitude ao vetor gradiente  $\nabla h$ .

Estas duas observações são satisfeitas por um princípio de transformação linear que irá mapear vetores bidimensionais  $\nabla h$  para dois vetores bidimensionais  $q$  de acordo com a equação matricial:

$$q = - \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{pmatrix} \nabla h \quad (\text{forma anisotrópica bidimensional da Lei de Darcy}) \quad (29)$$

$$q = -K \nabla h \quad (\text{forma mais compacta}) \quad (30)$$

$$\begin{aligned} q_1 &= -K_{11} h_x - K_{12} h_y \\ q_2 &= -K_{21} h_x - K_{22} h_y \end{aligned} \quad (\text{forma mais expandida}) \quad (31)$$

Nestas equações  $q_1$  e  $q_2$  são os componentes do vetor  $q$  representando o fluxo do fluido.

Considerando os fatores relacionados a tais equações, a Lei de Darcy leva a equação velocidade para a água subterrânea em casos bidimensionais, pelo menos para casos de meios isotrópicos. A equação da velocidade intersticial tomará a forma:  $v = \frac{-K \nabla h}{\eta}$  (32), e poderá ser utilizada em conexão com integrais lineares para calcular o tempo total de viagem através de um trajeto de fluxo.

## 14. Equações de Laplace e Problemas Inversos

No início deste tópico, foram consideradas as seguintes equações:

$$h_{xx} = 0 \quad (\text{caso unidimensional}) \quad (18)$$

$$h_{xx} + h_{yy} = 0 \quad (\text{caso bidimensional}) \quad (33)$$

$$h_{xx} + h_{yy} + h_{zz} = 0 \quad (\text{caso tridimensional}) \quad (34)$$

que aplicam ao caso de aquíferos isotrópicos com condutividade hidráulica constante.

A discussão foi continuada pela derivação da equação de Laplace para uma situação bidimensional. Esta situação geral é similar à discutida anteriormente em um caso unidimensional. Depois de efetuadas diversas observações, chegou-se a equação:

$$0 = \text{entrada face esquerda} + \text{entrada face direita} + \text{entrada fundo} + \text{entrada topo}$$

$$0 \approx q_1(x - \Delta x, y)(2\Delta y \cdot 1) - q_1(x + \Delta x, y)(2\Delta y \cdot 1) + q_2(x, y - \Delta y)(2\Delta x \cdot 1) - q_2(x, y + \Delta y)(2\Delta x \cdot 1)$$

$$(35)$$

Enquanto a equação unidimensional de Laplace pode ter parecido praticamente trivial por suas soluções serem linhas retas, a equação bidimensional de Laplace foi o tema de extensivas pesquisas por mais de dois séculos e é o tema de muitos estudos matemáticos avançados. As investigações de situações que partem de suposições de estado estacionário são boas com o alcance de alguns tipos de métodos utilizados para investigar situações de estado estacionário. Pode-se estabelecer uma condição análoga de balanço de massa, mas será necessário adicionar um termo ao cálculo para a medida proporcional ao qual o material está sendo criado, destruído, armazenado, ou retirado do local. No caso bidimensional, isto leva a uma nova equação diferencial parcial da forma:  $ah_t = h_{xx} + h_{yy}$  (36), onde  $a$  é uma constante. Note que isto reduz a equação de Laplace no caso de condições de estado estacionário, sendo que a derivada parcial em respeito a  $t$  será 0 neste caso.

Quanto aos cálculos multivariáveis foram trabalhadas três dimensões, sendo útil interpretar, em alguns casos, em duas dimensões. Um vetor campo neste ambiente é uma função que aponta para cada ponto no espaço tridimensional um vetor com três direções, frequentemente conceituado como uma seta baseada no ponto dado. Exemplos do contexto do fluxo do sistema incluem o vetor gradiente da superfície (para fluxo tridimensional) e o vetor de fluxo calculado a partir do vetor gradiente pela lei de Darcy. Para um vetor campo  $F(x, y, z) \equiv (f(x, y, z), g(x, y, z), h(x, y, z))$  (37), sua divergência é definida por:

$$\text{div } F = f_x + g_y + h_z \quad (38)$$

Pode parecer estranho inicialmente, mas é um conceito bastante útil. Representa a

razão na qual o campo está expandindo ou divergindo a cada ponto. A forma mais fácil de observar isto é através do chamado teorema da divergência, que é conhecido como teorema de

Green para casos bidimensionais. Este diz  $\iiint_R \text{div } F = \iint_S F \cdot \hat{i} n$ , (39) onde R é uma região, S

é seu limite, e n é a unidade aparente do vetor normal no limite. Para a situação de água subterrânea, o vetor campo de interesse é o fluxo q, ou, quase a mesma coisa, ao menos no caso isotrópico, o gradiente da função de superfície, que difere apenas pela multiplicação da constante – K. Deste modo, sendo a água totalmente incompressível, no caso de se trabalhar em uma região onde não há fontes, o fluxo da rede através dos limites de qualquer região fechada deve ser 0.

A classe geral de problemas de valores de limites considerados nesta seção é conhecida como problemas inversos. Melhor do que ter como dados já fornecidos e fixados de propriedades hidrológicas é questionar que parâmetros hidrológicos e suposições de fluxo levarão aos valores de saída observados e ou condições de contorno. Suposições alternativas sobre o regime de fluxo podem ser consistentes em relação às condições de contorno, assim tais problemas inversos estão providos da complicação adicional de que suas soluções podem não ser únicas! Um princípio geral para este tipo de é que se deve tentar utilizar as suposições mais simples possíveis.

## 15. INTRODUÇÃO A MODELAGEM NUMÉRICA

Nesta última parte da pesquisa foi introduzida a questão de como resolver a equação de Laplace (e outras equações diferenciais parciais) numericamente, significando que não se procura uma equação exata para a função solução para qualquer pontos ou para todos os pontos, mas é satisfatório encontrar valores aproximados para a solução desconhecida, pelo menos para números finitos de pontos específicos. Para isso, retorna-se a um dos mais básicos conceitos dos cálculos elementares, a definição da derivada de uma função f(x):

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (40) \quad \text{ou} \quad f'(x) \approx \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (41)$$

a aproximação (apresentada a direita) será relativamente correta para valores de  $\Delta x$  que são relativamente pequenos. O lado esquerdo da equação de aproximação é simplesmente o grau

de inclinação da linha tangente à curva no ponto  $(x, f(x))$ , e o lado direito da equação é o grau da linha secante demonstrada conectando os pontos  $(x, f(x))$  e  $(x+\Delta x, f(x+\Delta x))$ . Mas uma análise aprofundada sugeriu o que aparentava ser uma melhor aproximação à derivada. Esta aproximação tomou a forma

$$f'(x) \approx \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x} \quad (42)$$

Esta aproximação, conhecida como aproximação diferencial central foi o método preferido ao tempo em que foi possível utilizá-la em casos particulares. Foi então utilizado a mesma aproximação para aproximar a segunda derivada de  $f$ .

$$f''(x) \approx \frac{f'\left(x + \frac{\Delta x}{2}\right) - f'\left(x - \frac{\Delta x}{2}\right)}{\Delta x} \quad (43)$$

Agora se observa que a equação original para  $f'(x)$  pode ser atualmente interpretada como uma aproximação diferencial central para. Utilizando estas aproximações em nossa equação aproximada para  $f''(x)$ , obtemos

$$f''(x) \approx \frac{\frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} - \frac{f(x) - f(x-\Delta x)}{\Delta x}}{\Delta x} \quad (44)$$

Que reduz para

$$f''(x) = \frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} \quad (45)$$

Chama-se então esta de aproximação diferencial central para derivada segunda.

Com o conhecimento anterior de como se pode facilmente aproximar primeiras e segundas derivadas utilizando expressões algébricas, procedendo com o contexto de equações bidimensionais de Laplace para ver como as derivadas parciais em tal equação podem também ser representadas de um modo similar.

Objetivou-se estimar as derivadas parciais de  $h(x,y)$  no ponto  $(x,y)$  sabendo os valores da função  $h$  em pontos adicionais e sabendo o valor de  $h(x, y+\Delta y)$  e os valores de  $h$  nos outros pontos ao redor de  $(x,y)$ , assim como o valor de  $h$  no ponto atual  $(x,y)$ . Por aplicação direta da fórmula diferencial central da segunda derivada em ambas direções  $x$  e  $y$  separadamente, é possível escrever a seguinte aproximação:

$$h_{xx}(x, y) \approx \frac{h(x+\Delta x, y) - 2h(x, y) + h(x-\Delta x, y)}{(\Delta x)^2} \quad (46)$$

$$h_{yy}(x, y) \approx \frac{h(x, y+\Delta y) - 2h(x, y) + h(x, y-\Delta y)}{(\Delta y)^2} \quad (47)$$

Pode-se então aplicar as idéias para uma solução numérica do problema da água subterrânea. Entretanto, há também uma interessante categoria de métodos bastante poderosos conhecidos como métodos iterativos que são de certa forma análogos ao caminho do Método de Newton utilizado em cálculos elementares a fim de prover com sucesso melhores aproximações a solução de uma equação. Estes são chamados de métodos indiretos. O assunto de análise numérica é dedicado em parte ao calculo de diferentes aproximações para resolver equações, tomando em conta o desenvolvimento de vários tipos de erros (erros de truncamento e erros de arredondamento) e eficiência (levando a soluções sem uso excessivo de recursos computacionais).

Métodos iterativos são muito importantes para resolver sistemas lineares com grande número de variáveis. Se tais equações são resolvidas pelos métodos usuais, os pequenos erros gerados em cada computação podem começar a ser adicionados e afetar a validade dos resultados.

### Referências

- BIEMBENGUT, Maria Salett. Modelagem Matemática & Implicações no Ensino Aprendizagem da Matemática. Blumenau: Edifurb, 1999.
- HADLOCK, Charles R. Mathematical Modeling in the Enviroment. Washington: The Mathematical Assoaciation of America, 1998.