Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 12, n. 1, 2026.

Trabalho apresentado no XLIV CNMAC, Fundação Getulio Vargas - Rio de Janeiro - RJ, 2025.

Transporte e Difusão de Contaminantes em Águas Subterrâneas

Caio F. Teixeira[1], Júlia S. S. Borges[2]
Centro de Ciências da Natureza/UFSCar, Buri, SP

As águas subterrâneas têm grande significância para o abastecimento de setores da economia e da população brasileira. Segundo Hirata (2019) existem mais de 2,5 milhões de poços tubulares no Brasil, com vazões suficientes para abastecer toda a necessidade de água das cidades brasileiras [3]. Embora a água retirada de aquíferos apresente uma qualidade tão boa ou até superior à água majoritariamente utilizada através da captação superficial, a segurança das águas subterrâneas sofre risco constantemente devido à contaminação resultante da geração de resíduos sólidos urbanos e de resíduos agrícolas, de onde destaca-se o uso de agrotóxicos e nutrientes introduzidos no solo devido à produção agroindustrial.

Dada tal condição de risco dos aquíferos, faz-se necessário caracterizar de modo preciso e eficaz o comportamento do transporte e difusão dos contaminantes nas águas subterrâneas. A concentração destes contaminantes pode ser descrita por meio de modelos matemáticos que envolvem equações diferenciais.

Costa e Castro (2005) apresentam um modelo matemático que descreve o problema transiente de transporte de contaminantes unidimensional em um meio poroso homogêneo, isotrópico e saturado com fluxo de água constante [1, 4]. Tal modelo consiste de uma equação diferencial parcial que caracteriza a concentração do contaminante.

Considerando que a Lei de Darcy é válida, que a dispersão molecular e mecânica podem ser tratadas como mecanismos de espalhamento de Fick e considerando que a porosidade, condutividade hidráulica, densidade e viscosidade são constantes no tempo, obtemos o modelo simplificado abaixo:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x}, \tag{1}$$

onde v_x é a velocidade da água no meio poroso e o coeficiente de dispersão hidrodinâmica, D_x, é dado por $D_x = D + \hat{D}$, com D coeficiente de difusão molecular e $\hat{D}$ coeficiente de dispersão mecânica.

Juntamente com a equação diferencial (1) consideraremos fronteira livre e condição de Dirichlet no ponto inicial do domínio $x = 0$. Assim, para $t \geq 0$ temos:

$$\begin{cases} C(0,\, t) = C_{max} \\ C(\infty,\, t) = 0 \end{cases}, \tag{2}$$

onde C_{max} é a concentração máxima do contaminante.

Além disso, vamos considerar junto à equação diferencial e às condições de fronteira, uma condição inicial para o problema que leva em consideração a existência de uma concentração inicial de contaminantes ao longo do domínio espacial unidimensional:

$$C(x,\, 0) = C_0(x). \tag{3}$$

[1]caioteixeira@estudante.ufscar.br
[2]juliaborges@ufscar.br

A solução do problema modelado matematicamente pelas equações (1)-(3) nos possibilita caracterizar e dimensionar os fenômenos de transporte e difusão de contaminantes em águas subterrâneas.

Embora para este modelo simplificado seja possível obter uma solução analítica em alguns casos de condições de fronteira, métodos numéricos podem ser utilizados como uma ferramenta eficiente na busca por solução numérica aproximada. Para tratar computacionalmente e numericamente um problema que envolve equações diferenciais é preciso escolher de forma adequada um método de discretização do domínio, de maneira que este resulte em uma equação de diferença estável e consistente [2].

Soluções numéricas aproximadas serão apresentadas utilizando o Método das Diferenças Finitas através de representações gráficas qualitativas que são úteis para a análise da variação da concentração do contaminante. Será possível, além de analisar o comportamento qualitativo da solução numérica, mostrar a aplicabilidade do Método das Diferenças Finitas no dimensionamento do transporte e difusão de contaminantes no escoamento de águas subsuperficiais em aquíferos.

Referências

[1] C. T. Costa e M. A. H. Castro. "Estudo Unidimensional do transporte de contaminantes utilizando uma metodologia numérico-analítica". Em: **Águas Subterrâneas** 19.2 (2005), pp. 137–148. DOI: `https://doi.org/10.14295/ras.v19i2.8233`.

[2] J. A. Cuminato e M. M. Junior. **Discretização de Equações Diferenciais Parciais: Técnicas de Diferenças Finitas**. 1a. ed. Rio de Janeiro: SBM, 2013. ISBN: 9788583370055.

[3] R. Hirata, A. Suhogusoff, S. S. Marcellini, P. C. Villar e L. Marcellini. **As águas subterrâneas e sua importância ambiental e socioeconômica para o Brasil**. 1a. ed. São Paulo: IGC/USP, 2019. ISBN: 9788563124074.

[4] J. Istok. **Groundwater Modeling by the Finite Element Method**. 1a. ed. Washington DC: American Geophysical Union, 1989. ISBN: 9780875903170.