

X-007 - ABORDAGEM ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

Matheus Luan Rossette⁽¹⁾

Estudante de Engenharia Ambiental pela Universidade Federal da Fronteira Sul, Chapecó – SC. Bolsista pelo CNPq.

Janice Teresinha Reichert⁽²⁾

Professora Adjunta da Universidade Federal da Fronteira Sul, UFFS, Chapecó-SC. Email: janice.reichert@uffs.edu.br

Endereço⁽¹⁾: Servidão Chuí, 42 E - Líder - Chapecó - SC - CEP: 89805-174 - Brasil - Tel: (49) 8401-6115 – e-mail: matheusrossette@hotmail.com

RESUMO

Neste trabalho resolvemos analiticamente a equação de difusão-advecção e apresentamos resultados numéricos para a concentração de um poluente, considerando o caso específico de aplicação pontual e instantânea com uma massa M , em uma região com concentração inicial nula. A equação diferencial parcial, que descreve as variações de concentração no espaço e no tempo, é resolvida através da Transformada complexa de Fourier.

PALAVRAS-CHAVE: Dispersão, Poluentes atmosféricos, Transformada de Fourier.

INTRODUÇÃO

Com a expansão do setor industrial e consequente aumento nos impactos ambientais decorrentes da dispersão de poluentes na atmosfera, a necessidade de prever acontecimentos que podem ser danosos ao meio ambiente tornou-se evidente. A modelagem matemática mostra-se eficiente pela sua capacidade de aproximação dos resultados em relação aos verificados empiricamente e seu baixo custo comparado às medições e o estudo detalhado de cada fenômeno de dispersão. Dessa forma, torna-se um ótimo método para avaliar impactos de emissões decorrentes de acidentes ecológicos ou industriais.

Neste trabalho, resolvemos analiticamente a equação de difusão-advecção e apresentamos resultados numéricos para a concentração de um poluente no caso específico de aplicação pontual e instantânea com uma massa M , considerando uma região com concentração inicial nula. Apresentamos alguns resultados e fazemos comparações do modelo com outros encontrados na literatura. A equação diferencial parcial, que descreve as variações de concentração no espaço e no tempo, é deduzida a partir de um balanço de massa e da análise dos fluxos advectivos e difusivos em um volume de controle infinitesimal fixado no espaço.

Para a solução, o único termo advectivo considerado foi o termo que representa a velocidade do vento na direção x . Com as devidas simplificações a solução foi obtida com o uso da Transformada de Fourier e sua inversa. A transformada de Fourier é uma ferramenta matemática capaz de levar o domínio de uma função absolutamente integrável para outro domínio. Esse procedimento pode deixar o problema mais fácil de resolver e então permitir sua solução de forma analítica. Com o problema solucionado no novo domínio a transformada inversa é aplicada para trazer a solução a seu domínio original.

FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

O problema parte da dedução da equação que rege o fenômeno de dispersão, tanto advectivo quanto difusivo. Tomando um volume de controle (VC) infinitesimal de dimensões dx , dy e dz nas direções x , y e z , respectivamente, fixado no espaço tridimensional, deve-se analisar os fluxos advectivos de massa, com suas respectivas velocidades e direções, através de cada face do volume de controle. Considera-se também os fluxos difusivos com seus respectivos coeficientes K_x , K_y e K_z nas direções x , y , e z . As figuras abaixo foram retiradas da dissertação de mestrado de GONÇALVES (2003).

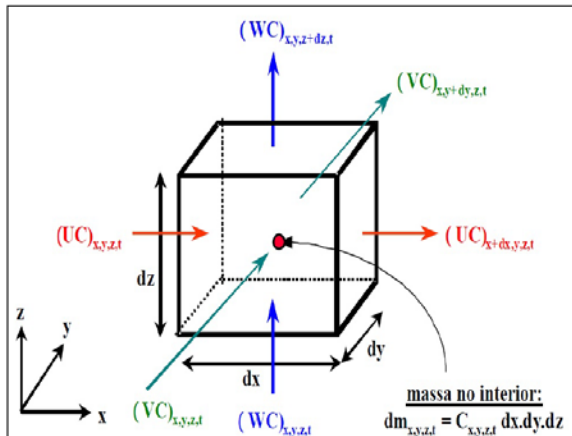


Figura 1: Fluxos advectivos

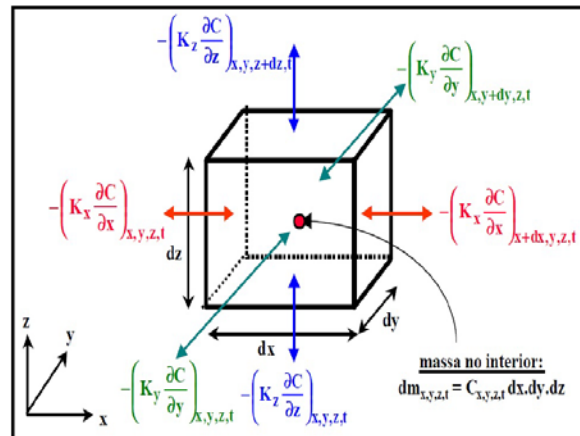


Figura 2: Fluxos difusivos

Segundo o princípio de conservação de massa, pode-se escrever:

“Massa que entra no VC durante dt – Massa que sai do VC durante dt = Variação de massa que ocorre em VC durante dt ”

Com isso, primeiramente, obtêm-se cada termo de entrada por advecção e difusão:

- ✦ Massa que entra no volume de controle por advecção durante dt :

$$(UC)_{x,y,z,t} dydzdt + (VC)_{x,y,z,t} dx dzdt + (WC)_{x,y,z,t} dx dydt$$

- ✦ Massa que entra no volume de controle por difusão durante dt :

$$\left(-K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{x,y,z,t} dydzdt + \left(-K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right)_{x,y,z,t} dx dzdt + \left(-K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)_{x,y,z,t} dx dydt$$

- ✦ Massa que sai do volume de controle por advecção durante dt :

$$(UC)_{x+dx,y,z,t} dydzdt + (VC)_{x,y+dy,z,t} dx dzdt + (WC)_{x,y,z+dz,t} dx dydt$$

- ✦ Massa que sai do volume de controle por difusão durante dt :

$$\left(-K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{x+dx,y,z,t} dydzdt + \left(-K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right)_{x,y+dy,z,t} dx dzdt + \left(-K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)_{x,y,z+dz,t} dx dydt$$

As massas que entram e saem do volume de controle nas três direções, tanto de forma advectiva quanto difusiva, podem ser relacionados pela expansão com série de Taylor e truncadas no primeiro termo. Elas são análogas e são escritas na forma abaixo:

- ✦ Fluxo mássico advectivo que sai do volume de controle na direção x :

$$(UC)_{x+dx,y,z,t} = (UC)_{x,y,z,t} + \left[\frac{\partial (UC)}{\partial x} \right]_{x,y,z,t} dx$$

- ✦ Fluxo mássico difusivo que sai do volume de controle na direção x :

$$\Delta \left(-K_x \frac{\delta C}{\delta x} \right)_{x+dx, y, z, t} = \left(-K_x \frac{\delta C}{\delta x} \right)_{x, y, z, t} + \left[\frac{\delta}{\delta x} \left(-K_x \frac{\delta C}{\delta x} \right) \right]_{x, y, z, t} dx$$

Como dito antes, para y e z as expansões são análogas e com os fluxos descritos, chega-se à expressão que define o termo à esquerda da equação de conservação de massa já descrita anteriormente.

Massa que entra no VC durante dt menos a massa que sai do VC durante dt é igual a:

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\delta(UC)}{\delta x} + \frac{\delta}{\delta x} \left(K_x \frac{\delta C}{\delta x} \right) \right]_{x, y, d, t} dx dy dz dt \\ & + \left[-\frac{\delta(VC)}{\delta y} + \frac{\delta}{\delta y} \left(K_y \frac{\delta C}{\delta y} \right) \right]_{x, y, d, t} dx dy dz dt \\ & + \left[-\frac{\delta(WC)}{\delta z} + \frac{\delta}{\delta z} \left(K_z \frac{\delta C}{\delta z} \right) \right]_{x, y, d, t} dx dy dz dt \end{aligned}$$

A variação de massa no interior do volume de controle no instante dt é obtida através da expansão de Taylor, assim como nos fluxos, em função do tempo

$$m_{x, y, z, t+dt} = m_{x, y, z, t} + \left(\frac{\delta m}{\delta t} \right)_{x, y, z, t} dt$$

porém, por definição a massa é relacionada à concentração e ao volume

$$m_{x, y, z, t} = C_{x, y, z, t} dx dy dz$$

então a variação de massa no volume de controle durante dt é:

$$m_{x, y, z, t+dt} - m_{x, y, z, t} = \left(\frac{\delta C}{\delta t} \right)_{x, y, z, t} dx dy dz dt$$

com os termos já deduzidos, pode-se escrever a equação de conservação de massa da seguinte forma

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\delta(UC)}{\delta x} + \frac{\delta}{\delta x} \left(K_x \frac{\delta C}{\delta x} \right) \right]_{x, y, d, t} dx dy dz dt + \left[-\frac{\delta(VC)}{\delta y} + \frac{\delta}{\delta y} \left(K_y \frac{\delta C}{\delta y} \right) \right]_{x, y, d, t} dx dy dz dt \\ & + \left[-\frac{\delta(WC)}{\delta z} + \frac{\delta}{\delta z} \left(K_z \frac{\delta C}{\delta z} \right) \right]_{x, y, d, t} dx dy dz dt = \left(\frac{\delta C}{\delta t} \right)_{x, y, z, t} dx dy dz dt \end{aligned}$$

dividindo todos os termos por $dx dy dz dt$ para simplificar e reorganizando-os temos

$$\frac{\delta C}{\delta t} + \frac{\delta(UC)}{\delta x} + \frac{\delta(VC)}{\delta y} + \frac{\delta(WC)}{\delta z} = \frac{\delta}{\delta x} \left(K_x \frac{\delta C}{\delta x} \right) + \frac{\delta}{\delta y} \left(K_y \frac{\delta C}{\delta y} \right) + \frac{\delta}{\delta z} \left(K_z \frac{\delta C}{\delta z} \right)$$

Para um fluido incompressível pode-se demonstrar que a equação de conservação de massa em um fluido transportador é dada pela equação da continuidade (INCROPERA, 2008), ou seja:

$$\frac{\delta U}{\delta x} + \frac{\delta V}{\delta y} + \frac{\delta W}{\delta z} = 0$$

dessa forma, utilizando as duas equações anteriores e considerando a turbulência homogênea, a equação de conservação de massa de um constituinte devido à advecção e difusão fica completa

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$$

Na equação anterior, não são consideradas as trocas de massa devido às emissões ou retiradas de constituinte e qualquer reação que possa produzir uma variação de massa. Esses fenômenos podem ser incluídos à equação com a adição de um termo G , chamado de fonte ou sumidouro, que é específico para cada tratamento. Sendo assim, a equação geral tomará a forma abaixo:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + G$$

Para a solução da equação anterior, foram impostas algumas considerações:

- ▲ Turbulência homogênea: K_x , K_y e K_z são constantes;
- ▲ Turbulência anisotrópica: $K_x \neq K_y \neq K_z$;
- ▲ Advecção somente na direção x com velocidade constante U ;
- ▲ Termo de fonte/sumidouro genérico $G(x, y, z, t)$.

Com isso, a equação do problema é dada por

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + G$$

A condição inicial e de contorno do problema são:

$$C(-\infty < x < \infty, -\infty < y < \infty, -\infty < z < \infty, t=0) = F(x, y, z)$$

$$C(x, y, z, t)_{x \rightarrow \pm \infty} = \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow \pm \infty} = 0$$

$$C(x, y, z, t)_{y \rightarrow \pm \infty} = \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial y} \Big|_{y \rightarrow \pm \infty} = 0$$

$$C(x, y, z, t)_{z \rightarrow \pm \infty} = \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{z \rightarrow \pm \infty} = 0$$

SOLUÇÃO ATRAVÉS DA TRANSFORMADA DE FOURIER

Para a solução do problema apresentado anteriormente, deve-se conhecer o método de resolução proposto. A Transformada de Fourier de uma função $f(x)$ é definida como sendo a função $F(\alpha)$ que associa cada função absolutamente integrável $f(x): \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ a função $F(\alpha): \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ definida pela expressão:

$$\tau\{f(x)\} = F(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i\alpha x} dx$$

ou seja, com o auxílio dessa expressão, consegue-se transformar uma função de x em uma função de α . Essa mudança de domínio pode ser necessária quando se tem um problema com difícil solução em x . A solução no domínio original da função pode ser obtida aplicando-se a transformada inversa de Fourier. Ela consiste na função que associa cada função $F(\alpha): \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ pertencente ao conjunto imagem de $\tau\{f(x)\}$ a função absolutamente integrável $f(x): \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ definida pela seguinte expressão:

$$\tau^{-1}\{F(\alpha)\} = f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\alpha) e^{-i\alpha x} d\alpha$$

Conhecendo a ferramenta matemática para a solução, primeiramente aplica-se a transformada de Fourier para a função concentração em relação a x

$$C_1(\alpha, y, z, t) = \int e^{i\alpha x'} C(x', y, z, t) dx'$$

Então

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial C}{\partial t} e^{i\alpha x'} dx' + U \int \frac{\partial C}{\partial x} e^{i\alpha x'} dx' = K_x \int \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} e^{i\alpha x'} dx' \\ + K_y \int \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} e^{i\alpha x'} dx' + K_z \int \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} e^{i\alpha x'} dx' + \int G(x, y, z, t) e^{i\alpha x'} dx' \end{aligned}$$

Seguindo as propriedades da transformada de derivadas, a expressão acima fica na forma,

$$\frac{\partial C}{\partial t} - i\alpha U C_1 = -K_x \alpha^2 C_1 + K_y \frac{\partial^2 C_1}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C_1}{\partial z^2} + G_1(\alpha, y, z, t)$$

Da mesma forma feita para x , aplica-se a transformada para y e z

$$C_2(\alpha, \beta, z, t) = \int e^{i\alpha y'} C(\alpha, y', z, t) dy'$$

$$C_3(\alpha, \beta, \gamma, t) = \int e^{i\alpha z'} C(\alpha, \beta, z', t) dz'$$

Portanto, a transformada nas três dimensões espaciais fica,

$$\frac{dC_3}{dt} - i\alpha U C_3 = -K_x \alpha^2 C_3 - K_y \beta^2 C_3 - K_z \gamma^2 C_3 + G_3(\alpha, \beta, \gamma, t) \quad (4.28)$$

Agrupando os termos têm-se,

$$\frac{dC_3}{dt} + (-i\alpha U + K_x \alpha^2 + K_y \beta^2 + K_z \gamma^2) C_3 = G_3$$

visto que, a transformada da condição inicial é dada por

$$C_3(\alpha, \beta, \gamma, t=0) = \int \int \int F(x', y', z') e^{i\alpha x'} e^{i\beta y'} e^{i\gamma z'} dx' dy' dz' = F(\alpha, \beta, \gamma)$$

Para obter a solução de C_3 deve-se resolver a equação linear de primeira ordem correspondente. Fazendo $(-i\alpha U + K_x \alpha^2 + K_y \beta^2 + K_z \gamma^2) = A$:

$$\frac{dC_3}{dt} + AC_3 = G_3$$

Pelo método do fator integrante, sendo $P(t) = A$ e portanto $\mu(t) = e^{At}$, têm-se

$$\frac{dC_3}{dt} e^{At} + AC_3 e^{At} = G_3 e^{At} \Rightarrow \int [C_3 e^{At}]' dt = \int G_3 e^{At} dt$$

Isolando C_3 e aplicando a condição inicial

$$C_3 = e^{-At} \left[\int G_3 e^{At'} dt' + F_3 \right]$$

ou seja,

$$C_3 = e^{-\left(-iaU + K_x \alpha^2 + K_y \beta^2 + K_z \gamma^2\right)t} \left[\int G_3(\alpha, \beta, \gamma, t') e^{-\left(-iaU + K_x \alpha^2 + K_y \beta^2 + K_z \gamma^2\right)t'} dt' + F_3(\alpha, \beta, \gamma) \right]$$

Agora, usa-se a transformada inversa para voltar às variáveis originais e consequentemente à solução geral. Primeiramente inverte-se C_3 em relação à γ para obter C_2 , portanto,

$$C_2(\alpha, \beta, z, t) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\gamma z} C_3(\alpha, \beta, \gamma, t) d\gamma$$

da mesma maneira, inverte-se C_2 em relação à β para que se obtenha C_1 , então,

$$C_1(\alpha, y, z, t) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\beta y} C_2(\alpha, \beta, z, t) d\beta$$

e a última transformada para C_1 em relação à α para obter C , portanto,

$$C(x, y, z, t) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\alpha x} C_1(\alpha, y, z, t) d\alpha$$

Agrupando os termos e substituindo C_3 obtêm-se

$$\begin{aligned} C(x, y, z, t) = & \frac{1}{8\pi^3} \int e^{-i\alpha x} \int e^{-i\beta y} \int e^{-i\gamma z} e^{-\left(-iaU + K_x \alpha^2 + K_y \beta^2 + K_z \gamma^2\right)t} F_3 d\gamma d\beta d\alpha \\ & + \frac{1}{8\pi^3} \int e^{-i\alpha x} \int e^{-i\beta y} \int e^{-i\gamma z} e^{-\left(-iaU + K_x \alpha^2 + K_y \beta^2 + K_z \gamma^2\right)t} \\ & \int G_3(\alpha, \beta, \gamma, t') e^{-\left(-iaU + K_x \alpha^2 + K_y \beta^2 + K_z \gamma^2\right)t'} dt' d\gamma d\beta d\alpha \end{aligned}$$

Para a substituição de F_3 e G_3 a equação para a concentração foi dividida em dois termos separados por uma soma, C_A (referente ao termo com a função F_3) e C_B (referente ao termo com a função G_3), onde $C = C_A + C_B$

$$\begin{aligned} C_A = & \frac{1}{8\pi^3} \int e^{-i\alpha x} \int e^{-i\beta y} \int e^{-i\gamma z} e^{-\left(-iaU + K_x \alpha^2 + K_y \beta^2 + K_z \gamma^2\right)t} \\ & \int \int \int F(x', y', z') e^{i\alpha x'} e^{i\beta y'} e^{i\gamma z'} dx' dy' dz' d\gamma d\beta d\alpha \end{aligned}$$

Para a integração, seleciona-se a seguinte ordem: γ , β , α , x' , y' e z' . Então,

$$\begin{aligned} C_A = & \frac{1}{8\pi^3} \int \int \int F(x', y', z') \int e^{-i\alpha x} \int e^{-i\beta y} \int e^{-i\gamma z} \\ & e^{-\left(-iaU + K_x \alpha^2 + K_y \beta^2 + K_z \gamma^2\right)t + i\alpha x' + i\beta y' + i\gamma z'} d\gamma d\beta d\alpha dx' dy' dz' \end{aligned}$$

As integrais em γ , β e α são resolvidas com a ajuda das seguintes relações:

$$\int e^{-i\alpha(x-x'-Ut)-K\alpha^2 t} d\alpha = \sqrt{\frac{\pi}{Kt}} \exp\left\{-\frac{[(x-x')-Ut]^2}{4Kt}\right\} e$$

$$\int e^{-i\gamma(z-z')-K\gamma^2 t} d\gamma = \sqrt{\frac{\pi}{Kt}} \exp\left[\frac{-(z-z')^2}{4Kt}\right]$$

portanto, reorganizando as integrais por meio de propriedades de expoentes obtém-se I_A como resultado das integrais em C_A

$$I_A = \sqrt{\frac{\pi^3}{K_x K_y K_z t^3}} \exp\left\{\frac{[(x-x')-Ut]^2}{4K_x t}\right\} \exp\left[\frac{-(y-y')^2}{4K_y t}\right] \exp\left[\frac{-(z-z')^2}{4K_z t}\right]$$

Levando I_A em C_A

$$C_A = \frac{1}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z t^3}} \int \int \int F(x', y', z') \exp\left\{\frac{[(x-x')-Ut]^2}{4K_x t}\right\} \exp\left[\frac{-(y-y')^2}{4K_y t}\right] \exp\left[\frac{-(z-z')^2}{4K_z t}\right] dx' dy' dz'$$

Agora deve-se resolver C_B . Substituindo G_3 em C_B obtém-se

$$C_B = \frac{1}{8\pi^3} \int e^{-i\alpha x} \int e^{-i\beta y} \int e^{-i\gamma z} e^{-\left(-i\alpha U + K_x \alpha^2 + K_y \beta^2 + K_z \gamma^2\right)t} \int \int \int G(x', y', z', t) e^{i\alpha x'} e^{i\beta y'} e^{i\gamma z'} dx' dy' dz' e^{-\left(-i\alpha U + K_x \alpha^2 + K_y \beta^2 + K_z \gamma^2\right)t'} dt' d\gamma d\beta d\alpha$$

agrupando os expoentes de C_B de forma apropriada à resolução tem-se

$$-i\alpha x - i\beta y - i\gamma z - \left(-i\alpha U + K_x \alpha^2 + K_y \beta^2 + K_z \gamma^2\right)t + i\alpha x' + i\beta y' + i\gamma z' + \left(-i\alpha U + K_x \alpha^2 + K_y \beta^2 + K_z \gamma^2\right)t' = .$$

$$i\alpha(-x+x'+Ut-Ut') + \alpha^2(-K_x t + K_x t') + i\beta(-y+y') + \beta^2(-K_y t + K_y t') + i\gamma(-z+z') + \gamma^2(-K_z t + K_z t') = .$$

$$-i\alpha(x-x') + i\alpha U(t-t') - \alpha^2 K_x(t-t') - i\beta(y-y') - \beta^2 K_y(t-t') - i\gamma(z-z') - \gamma^2 K_z(t-t')$$

A integral a ser resolvida, chamada de I_B , fica da forma

$$I_B = \int e^{-i\alpha[(x-x')-U(t-t')]-\alpha^2 K_x(t-t')} d\alpha \int e^{-i\beta(y-y')-\beta^2 K_y(t-t')} d\beta \int e^{-i\gamma(z-z')-\gamma^2 K_z(t-t')} d\gamma$$

a relação que ajuda a resolver essas integrais está descrita abaixo

$$\int e^{-i\alpha[(x-x')-U(t-t')]-\alpha^2 K_x t} d\alpha = \sqrt{\frac{\pi}{K_x(t-t')}} \exp\left\{-\frac{[(x-x')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\}$$

Portanto a solução de I_B é

$$I_B = \sqrt{\frac{\pi}{K_x(t-t')}} \exp\left\{-\frac{[(x-x')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} \sqrt{\frac{\pi}{K_y(t-t')}} \exp\left\{-\frac{(y-y')^2}{4K_y(t-t')}\right\} \sqrt{\frac{\pi}{K_z(t-t')}} \exp\left\{-\frac{(z-z')^2}{4K_z(t-t')}\right\}$$

então a solução de C_B é

$$C_B = \frac{1}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z}} \int \int \int \int G(x', y', z', t') \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{[(x-x')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{(y-y')^2}{4K_y(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{(z-z')^2}{4K_z(t-t')}\right\} dx' dy' dz' dt'$$

Substituindo C_A e C_B em $C = C_A + C_B$ obtém-se a solução geral descrita abaixo

$$C(x, y, z, t) = \frac{1}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z t^3}} \int \int \int F(x', y', z') \exp\left\{-\frac{[(x-x')-Ut]^2}{4K_x t}\right\} \exp\left\{-\frac{(y-y')^2}{4K_y t}\right\} \exp\left\{-\frac{(z-z')^2}{4K_z t}\right\} dx' dy' dz' + \frac{1}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z}} \int \int \int \int G(x', y', z', t') \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{[(x-x')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{(y-y')^2}{4K_y(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{(z-z')^2}{4K_z(t-t')}\right\} dx' dy' dz' dt'$$

Esta solução representa a concentração de algum poluente dependente do espaço tridimensional e do tempo. Também, pode-se observar que esta concentração é dependente de dois termos da equação, um é referente à influência da fonte/sumidouro, $G(x, y, z, t)$, do poluente e outro é referente à influência da condição inicial, $F(x, y, z)$, do problema.

RESULTADOS NUMÉRICOS

Abaixo serão apresentados resultados numéricos para $C(x, y, z, t)$ no caso específico em que a aplicação é pontual e instantânea com uma massa M em uma região com concentração inicial nula. Para isso, estabelecem-se as seguintes condições:

- ▲ Termo fonte/sumidouro $G(x, y, z, t) = M\delta(x)\delta(y)\delta(z)\delta(t)$, onde $\delta(x)$, $\delta(y)$, $\delta(z)$ e $\delta(t)$ representa a função delta de Dirac e M é uma massa constante;
- ▲ Condição inicial: $C(-\infty < x < \infty, -\infty < y < \infty, -\infty < z < \infty, t=0) = F(x, y, z) = 0$.

com isso, a função para a concentração será:

$$C(x,y,z,t) = \frac{M}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z t^3}} \exp\left[\frac{-(x-Ut)^2}{4K_x t}\right] \exp\left(\frac{-y^2}{4K_y t}\right) \exp\left(\frac{-z^2}{4K_z t}\right)$$

Com o auxílio do software matemático Maple 12, resultados foram obtidos para algumas situações. Como exemplo inicial, considerou-se massa $M = 1$; altura da fonte imóvel $z = 10$; velocidade $U = 0$; condição espacial $y = 0$; coeficientes de dispersão $K_x = K_y = K_z = 1$. Com isso, o gráfico da figura 3 demonstra a tendência da concentração em relação a x e t em uma variação de 0 a 100:

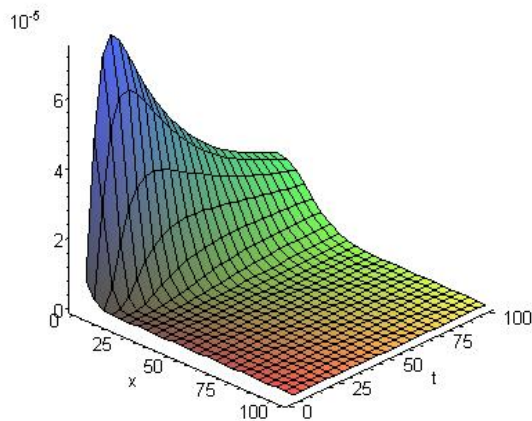


Figura 3: Concentrações dependentes de x e t

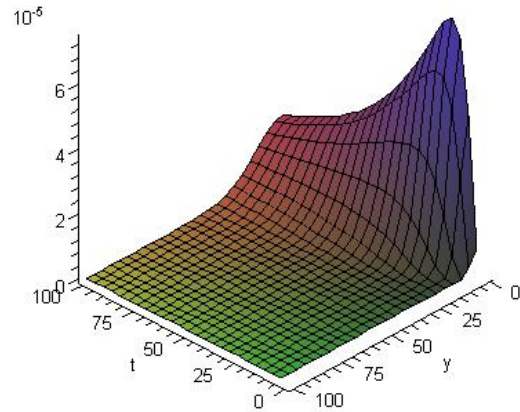


Figura 4: Concentrações dependentes de y e t

Observa-se que em uma posição afastada da fonte e em um instante próximo ao inicial têm-se uma concentração quase nula, assim como esperado. À medida que o tempo passa nessa posição, a concentração aumenta gradativamente em decorrência do espalhamento das partículas. Em posições próximas à fonte, a concentração cresce rapidamente com o tempo. Analogamente, para y , o gráfico na figura 4 seguem a mesma tendência para a concentração, visto que é intuitivo imaginar esse comportamento tendo em vista as condições do problema, $U = 0$ e concentração inicial nula, que não afetam o padrão da dispersão.

No gráfico da figura 5 e na tabela 1 há uma análise da concentração conforme o tempo em um espaço fixo e sem velocidade U , então $x = 0$, $y = 0$, $z = 10$ e $U = 0$. A tabela demonstra a tendência de crescimento nos dez primeiros instantes de tempo e este crescimento contradiria o fenômeno da dispersão. Nos instantes 15, 20 e 25 já se confirma um decrescimento da função. O gráfico deixa claro o decaimento da concentração a partir de seu ponto máximo.

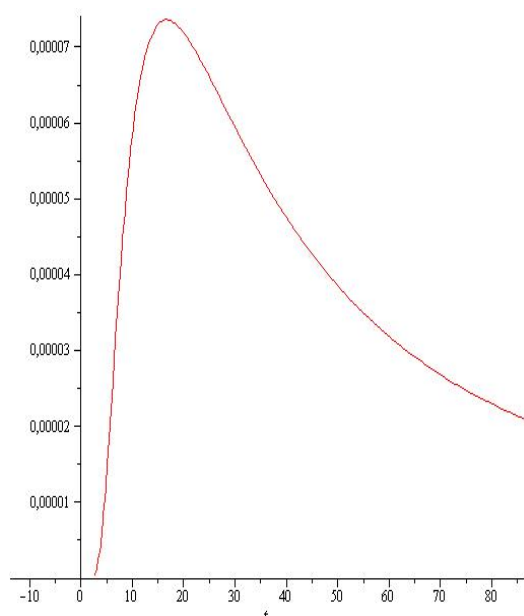


Figura 5: Concentração em função do tempo

Tabela 1: Concentração em função do tempo
Tabela para tempo versus concentração

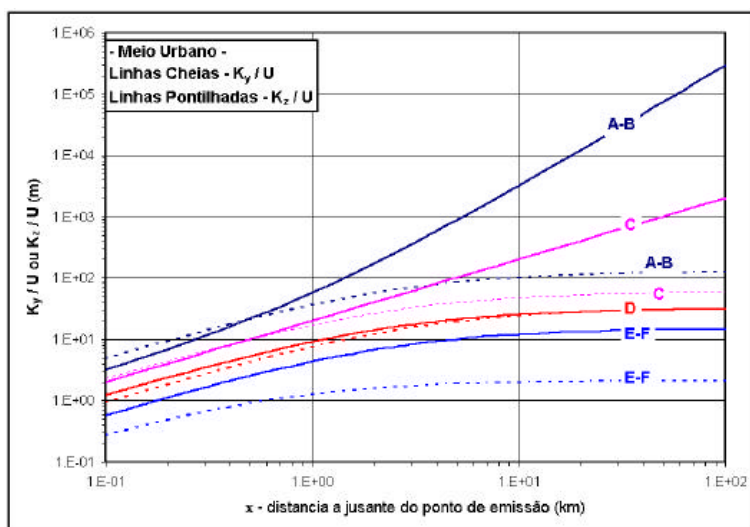
tempo	Concentração
1	$3,1174 \times 10^{-13}$
2	$2,9575 \times 10^{-8}$
3	$1,0384 \times 10^{-6}$
4	$5,4166 \times 10^{-6}$
5	$1,3528 \times 10^{-5}$
6	$2,3677 \times 10^{-5}$
7	$3,4076 \times 10^{-5}$
8	$4,3585 \times 10^{-5}$
9	$5,1689 \times 10^{-5}$
10	$5,8265 \times 10^{-5}$
15	$7,2973 \times 10^{-5}$
20	$7,1900 \times 10^{-5}$
25	$6,6060 \times 10^{-5}$
30	$5,9369 \times 10^{-5}$

Para uma melhor análise do modelo, alguns resultados numéricos para a concentração foram gerados a partir de dados encontrados na literatura e depois comparados aos valores medidos em campo. Os dados utilizados são do experimento de Copenhagen, BUSKE (2004):

- ▲ Velocidade do vento e distância da fonte: relacionadas entre si em cada medição de concentração feita no experimento e citadas na tabela abaixo;
- ▲ Concentrações normalizadas pela vazão: é a concentração encontrada normalizada pela vazão da fonte, 100 g/s encontrada na literatura;
- ▲ Altura da fonte: utilizada a altura de 115 m (fonte alta do experimento);
- ▲ Tipo de relevo: para determinar os coeficientes de dispersão K_x , K_y e K_z ;
- ▲ Altura de medição da concentração: em Copenhagen as concentrações foram medidas no solo, portanto, utilizamos uma altura z muito próxima de zero;

Os coeficientes de dispersão K_x , K_y e K_z , foram determinados com a ajuda dos gráficos encontrados na dissertação de mestrado de GONÇALVES (2003) e que relacionam a distância da fonte com os coeficientes de dispersão normalizados pela velocidade do vento. Utilizou-se os gráficos referentes às áreas urbanas em vez de área rural pelo fato do experimento de Copenhagen referir-se a uma área residencial. Esses gráficos apresentam classes de estabilidade referentes ao clima da região para a aplicação do modelo, elas vão de A-B (classes mais instáveis) a E-F (classes mais estáveis) e são apresentadas na figura abaixo.

3. Gráfico: Coeficientes de dispersão normalizados em função da distância da fonte



Os resultados da tabela 2 abaixo foram obtidos com a equação de concentração anteriormente deduzida e considerando o tempo tendendo ao infinito, assim sendo, a concentração não depende mais do tempo de dispersão. A equação utilizada toma essa forma:

$$C = \frac{Q}{4\pi \sqrt{K_x K_y K_z \left(\frac{x^2}{K_x} + \frac{y^2}{K_y} + \frac{(z-H)^2}{K_z} \right)}} e^{\left[\frac{U_x}{2K_x} - \sqrt{\frac{U^2}{4K_x} \left(\frac{x^2}{K_x} + \frac{y^2}{K_y} + \frac{(z-H)^2}{K_z} \right)} \right]}$$

A vazão utilizada será de 1 g/s, pois deve-se normalizar as concentrações encontradas dividindo-se pela vazão. Há também a consideração para a classe de estabilidade do local para a utilização dos gráficos referentes aos coeficientes de dispersão. Aqui foram consideradas duas classes de estabilidade para K_x e K_y , classes AB e C, e para K_z somente a classe C. A classe AB é instável e a classe C é uma classificação mediana para a relação climática do local. Com as razões encontradas no gráfico, o programa Calc Broffice foi utilizado para a multiplicação delas com as respectivas velocidades do vento bem como a organização e conversão de unidades dos coeficientes. O programa Maple 12 foi utilizado para a implementação da equação para a obtenção das concentrações normalizadas. Na tabela 2, abaixo, estão listados os resultados medidos no experimento de Copenhague e resultados obtidos nesse trabalho para a classe de estabilidade AB (coluna Obtida para AB) e classe C (coluna Obtida para C).

Tabela 2: Comparação dos dados obtidos com os dados de Copenhague

Exp	U (m/s)	Dados para Copenhague			
		Dist	Observada	Obtida para AB	Obtida para C
1	3,4	1900	6,48E-004	2,54E-004	3,50E-004
		3700	2,31E-004	8,67E-005	1,09E-004
2	10,6	2100	5,38E-004	6,75E-005	8,82E-005
		4200	2,95E-004	2,05E-005	2,46E-005
3	5	1900	8,20E-004	1,73E-004	2,38E-004
		3700	6,22E-004	5,90E-005	7,38E-005
		5400	4,30E-004	2,95E-005	3,49E-005
4	4,6	4000	1,17E-003	5,19E-005	6,32E-005
5	6,7	2100	6,72E-004	1,07E-004	1,40E-004
		4200	5,84E-004	3,24E-005	3,89E-005
		6100	4,97E-004	1,77E-005	2,08E-005
6	13,2	2000	3,96E-004	5,99E-005	8,07E-005
		4200	2,22E-004	1,64E-005	1,97E-005
		5900	1,83E-004	9,80E-006	1,16E-005
7	7,6	2000	6,70E-004	1,04E-004	1,40E-004
		4100	3,25E-004	3,01E-005	3,64E-005
		5300	2,23E-004	2,01E-005	2,38E-005
8	9,4	1900	4,16E-004	9,18E-005	1,27E-004
		3600	2,02E-004	3,31E-005	4,18E-005
		5300	1,52E-004	1,62E-005	1,92E-005
9	10,5	2100	4,58E-004	6,82E-005	8,91E-005
		4200	3,11E-004	2,07E-005	2,48E-005
		6000	2,59E-004	1,18E-005	1,39E-005

Conforme podemos observar obtemos uma boa concordância com os dados observados experimentalmente. Acreditamos que a diferença encontrada em alguns casos refere-se principalmente as simplificações utilizadas no modelo.

CONCLUSÕES

Podemos observar que a solução analítica traz algumas vantagens, tendo em mente a exatidão da solução analítica, pode-se dizer que o cálculo da concentração do poluente por este tipo de solução está livre do erro à exceção do erro de truncamento. Consequentemente, o erro neste trabalho fica restrito às incertezas impostas ao modelo.

Há muitos outros casos que podem ser aplicados ao mesmo modelo, tais como a dispersão de poluentes por uma fonte móvel ou também o uso de uma vazão, característica de dispersão muito mais real do que uma massa constante, pontual e instantânea, porém, o maior desafio encontrado, para a maioria dos casos, é a obtenção dos coeficientes de dispersão (K_x , K_y , e K_z). Deve-se aprofundar o estudo destas constantes e analisar como seria a adição de turbulência ao problema. Neste sentido, focaliza-se a atenção futura para as melhorias do modelo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. GONÇALVES, José M Ferreira, 2003. Modelagem da qualidade do ar: revisão de modelos e proposta para a consideração do efeito da movimentação de fontes móveis. Itajubá: Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica. Dissertação de mestrado, UNIFEI.
2. KREYSZIG, E. Matemática superior. Vol. 3. Rio de Janeiro : Livros Técnicos e Científicos
3. KAPLAN, Wilfred, Cálculo Avançado, vol.1 e 2, Edgard Blücher Editora e EDUSP, (1972), São Paulo, Brasil.
4. INCROPERA, Frank P. Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa. Rio de Janeiro: LTC, 2008.
5. BOYCE, William E. & DIPRIMA, Richard C.. Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno. 7ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 1992.
6. APOSTOL, Tomm M. Calculus. vol.II. John Wiley & Sons, 1969.
7. BUSKE, Daniela. Solução Analítica da equação de difusão-advecção pelo método GILTT aplicada à dispersão de poluentes atmosféricos. Dissertação de mestrado, PROMEC-UFRGS. Porto Alegre, 2004.