

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

**UM PROBLEMA DE DISPERSÃO DE POLUENTES EM RIOS E CANAIS POR
MEIO DO MÉTODO DE SEPARAÇÃO DE VARIÁVEIS**

por

Cheron Silveira Neves

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Modelagem Computacional

Rio Grande, outubro de 2012.

**UM PROBLEMA DE DISPERSÃO DE POLUENTES EM RIOS E CANAIS POR
MEIO DO MÉTODO DE SEPARAÇÃO DE VARIÁVEIS**

Por

Cheron Silveira Neves

Graduada em Licenciatura em Matemática

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, PPGMC, da Universidade Federal do Rio Grande, FURG, como parte dos requisitos necessários para obtenção do Título de

Mestre em Modelagem Computacional

Área de Concentração: Multidisciplinar

Orientador: Prof. Dr. Mario Rocha Retamoso

Coorientadora: Prof. Dra. Bárbara Denicol do Amaral Rodriguez (FURG)

Banca de Avaliação:

Prof. Dra. Camila Pinto da Costa (UFPel)

Prof. Dr. Elizaldo Domingues dos Santos (FURG)

Rio Grande, outubro de 2012.

Dedico este trabalho aos meus pais Sandra e Antonio Neves e
ao meu amor Mauricio Pereira.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por ter trilhado o meu caminho e feito com que coisas boas e pessoas maravilhosas pudessem cruzar o mesmo. Para que, dessa forma, eu pudesse nesse momento agradecê-las também.

Portanto agradeço aos meus pais Antonio e Sandra pela vida, pelo amor, pela educação e pelos exemplos de dedicação e perseverança.

Ao meu esposo Mauricio pelo amor, amizade e companheirismo.

Aos meus professores Mario Retamoso e Bárbara Rodriguez, orientador e co-orientadora respectivamente, por ter acreditado na minha competência, pela paciência e pelos ensinamentos.

Ao meu irmão pela amizade e incentivo.

A outros tantos amigos que de alguma forma ajudaram na realização desse trabalho: Mariléia, Martiela, Ruth, Ella, Ingrid, Nathalia e Joseane.

Aos membros da banca por aceitarem o convite de participar da defesa de minha dissertação.

RESUMO

UM PROBLEMA DE DISPERSÃO DE POLUENTES EM RIOS E CANAIS POR MEIO DO MÉTODO DE SEPARAÇÃO DE VARIÁVEIS.

Neste trabalho obtém-se uma solução analítica para a equação de advecção-difusão aplicada a problemas de dispersão de poluentes em rios e canais. Para tanto, consideram-se os casos unidimensionais e bidimensionais em regime transiente com coeficientes de difusividade e velocidades constantes. A abordagem utilizada para a resolução deste problema é o método de Separação de Variáveis. Os modelos resolvidos foram simulados utilizando o *MatLab*. Apresentam-se os resultados das simulações numéricas em formato gráfico. Os resultados de algumas simulações numéricas existem na literatura e puderam ser comparados. O modelo proposto mostrou-se coerente em relação aos dados considerados. Para outras simulações não foram encontrados comparativos na literatura, todavia esses problemas governados por equações diferenciais parciais, mesmo lineares, não são de fácil solução analítica. Sendo que, muitas delas representam importantes problemas de matemática e física, com diversas aplicações na engenharia. Dessa forma, é de grande importância a disponibilidade de um maior número de problemas-teste para avaliação de desempenho de formulações numéricas, cada vez mais eficazes, já que soluções analíticas oferecem uma base mais segura para comparação de resultados.

Palavras-Chave: solução analítica, dispersão de poluentes, meio aquático, separação de variáveis.

ABSTRACT

A PROBLEM OF DISPERSION OF POLLUTANTS IN RIVERS AND CHANNELS THROUGH THE METHOD OF SEPARATION OF VARIABLES.

In this paper, an analytical solution is obtained for an advection-diffusion equation applied to dispersion of pollutants in rivers and channels. Therefore, it is considered the one-dimensional and two-dimensional cases in transient state with diffusion coefficients and constant speeds. The approach used to solve this problem is the method of separation of variables. The models were simulated using *MatLab*. The results of numerical simulations are presented in a graphical format. The results of some numerical simulations exist in the literature, and they could be compared. The proposed model showed to be consistent with the considered data. For other simulations, existed literature was not found; however, these problems governed by partial differential equations, even linear, are not easy to analytically solve. Being that, many of them represent important problems in Mathematics and Physics, with many applications in Engineering. Thus, it is of great importance the availability of a larger number of test-problems to evaluate the performance of numerical formulations, each time more effectively, since the analytical solutions provide a safer basis for comparison of results.

Keywords: analytical solution, dispersion of pollutants, aquatic environment, separation of variables.

SUMÁRIO

CAPÍTULO I	1
INTRODUÇÃO	1
1.1 Estrutura do Trabalho	4
1.2 Revisão Bibliográfica	5
1.3 Objetivos.....	10
CAPÍTULO II	12
FUNDAMENTOS TEÓRICOS	12
2.1 Dispersão de Efluentes	12
2.2 Descrição dos Modelos.....	12
2.3 A Equação de Advecção-Difusão.....	14
2.4 O Método de Separação de Variáveis.....	16
CAPÍTULO III	18
MODELO UNIDIMENSIONAL EM REGIME TRANSIENTE	18
3.1 Caracterização do problema unidimensional.....	18
3.2 Modelo Unidimensional em Regime Transiente	18
3.3 Equação Unidimensional para a Difusão Pura	19
3.3.1 Condições de Contorno Homogêneas.....	19
3.3.2 Condições de Contorno Não Homogêneas.....	22
3.4 Equação Unidimensional Difusiva-Advectiva	28
CAPÍTULO IV	30
MODELO BIDIMENSIONAL EM REGIME TRANSIENTE	30
4.1 Caracterização do Problema	30

4.1.1 Modelo Bidimensional no Plano Longitudinal e Transversal	30
4.1.2 Modelo Bidimensional no Plano Longitudinal e Vertical	30
4.2 Modelo Bidimensional em Regime Transiente	31
4.3 Equação Bidimensional – Difusão Pura	31
4.3.1 Condição de Contorno Homogênea.....	31
4.3.2 Condição de Contorno Não Homogênea	36
4.3.2.1 Caso 1	38
4.3.3 Equação Bidimensional – Difusão Pura Não Homogênea e Contorno Homogênea	40
4.3.3.1 Caso 2	43
4.4 Equação Bidimensional – Difusão-Advecção	50
CAPÍTULO V	53
RESULTADOS E ANÁLISES	53
5.1 Computação Simbólica.....	53
5.2 Resultados do Modelo Unidimensional.....	53
5.2.1 Caso 1 – Difusão Pura	53
5.2.2 Caso 1 – Advecção-Difusão	55
5.2.3 Caso 2 – Difusão Pura	57
5.2.4 Caso 2 – Advecção-Difusão	61
5.3 Resultados do Modelo Bidimensional.....	64
5.3.1 Caso 1 – Difusão Pura	64
5.3.2 Caso 2 – Difusão Pura	67
CAPÍTULO VI	72
CONCLUSÕES	72

CAPÍTULO VII	74
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	74

LISTA DE SÍMBOLOS

OD	Oxigênio Dissolvido	
DBO	Demanda Bioquímica	
GILTT	Generalized Integral Laplace Transform Technique	
GITT	General Integral Transform Technique	
KDV	Kortweg-de Vries	
Re	Número de Reynolds	
V	Velocidade	(m/s)
L	Dimensão característica	(m)
$\tilde{\nu}$	Viscosidade cinemática	(m ² /s)
$C, C(x, y, t)$	Concentração do poluente	(kg/m ²)
$C(x, t)$	Concentração do poluente	(kg/m)
t	Tempo decorrido desde o despejo do poluente	(s)
x	Distância na direção longitudinal do fluxo	(m)
y	Distância na direção transversal do fluxo	(m)
$u(x, y), u, M$	Perfil de velocidade do fluxo na direção x	(m/s)
$v(x, y), v, N$	Perfil de velocidade do fluxo na direção y	(m/s)
K	Coefficiente de difusão lateral na direção x	(m ² /s)
L	Coefficiente de difusão lateral na direção y	(m ² /s)
MSV	Método de Separação de Variáveis	
$X(x), Y(y),$	Funções provenientes do método de separação de variável	

$T(t)$		
EDP	Equação Diferencial Parcial	
C_0	Concentração inicial do poluente	(kg/m ²)
$f(x), f(x, y),$ $F(x)$	Condição inicial do problema de dispersão de poluente	
n, m	Contadores	
L	Comprimento do rio	(m)
A_n, A_m	Coefficientes de Fourier	
$w(x, y, t),$ $v(x, y, t),$ $g(x, y, t)$	Funções de concentração de poluente	(kg/m ²)
$h_0(t), h_1(t)$	Condições de contorno	
$\phi(x)$	Função de correção	
M, P	Constante de decaimento	(s ⁻¹)
l	Largura do rio	(m)

LISTA DE SÍMBOLOS GREGOS

λ	Constante de decaimento	(s ⁻¹)
$\varepsilon_x(x, y), \varepsilon$	Coeficiente de difusão lateral na direção x	(m ² / s)
$\varepsilon_y(x, y), \omega$	Coeficiente de difusão lateral na direção y	(m ² / s)
ρ, σ	Autovalores	
τ	Variável do intervalo de integração	
μ, γ, θ	Coeficientes da exponencial resultante da advecção	
$\varphi(x, y, t),$ $\psi(x, y, t)$	Funções de concentração de poluente	(kg / m ²)

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 5.1: Gráfico de comparação de resultados para o modelo unidimensional - difusão pura	55
Figura 5.2: Gráfico de comparação de resultados para o modelo unidimensional - advecção-difusão	57
Figura 5.3: Modelo unidimensional de difusão pura para $\epsilon=0.05$ m/s	59
Figura 5.4: Modelo unidimensional de difusão pura para $\epsilon=0.3$ m/s	59
Figura 5.5: Modelo unidimensional de difusão pura para $\epsilon=0.7$ m/s	59
Figura 5.6: Modelo unidimensional de difusão pura para $\epsilon=1.0$ m/s	59
Figura 5.7: Concentração do poluente durante 1h	60
Figura 5.8: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $\lambda=0.2$ s ⁻¹	62
Figura 5.9: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $\lambda=0.5$ s ⁻¹	62
Figura 5.10: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $\lambda=1.0$ s ⁻¹	63
Figura 5.11: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $u=0.17$ m/s	63
Figura 5.12: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $u=0.5$ m/s	63
Figura 5.13: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $u=0.8$ m/s	64
Figura 5.14: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $u=1.0$ m/s	64
Figura 5.15: Modelo Bidimensional de Difusão Pura para $\epsilon=0.05$ m ² /s	66
Figura 5.16: Modelo Bidimensional de Difusão Pura para $\epsilon=0.3$ m ² /s	66
Figura 5.17: Modelo Bidimensional de Difusão Pura para $\epsilon=0.7$ m ² /s	66
Figura 5.18: Modelo Bidimensional de Difusão Pura para $\epsilon=1$ m ² /s	66
Figura 5.19: Modelo bidimensional de difusão pura para $\epsilon=0.001$ m ² /s	68
Figura 5.20: Modelo bidimensional de difusão pura para $\epsilon=0.01$ m ² /s	68
Figura 5.21: Modelo bidimensional de difusão pura para $\epsilon=0.1$ m ² /s	69
Figura 5.22: Modelo bidimensional de difusão pura para $\epsilon=1.0$ m ² /s	69
Figura 5.23: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=14400$ s	70

Figura 5.24: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=28800$ s	70
Figura 5.25: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=43200$ s	70
Figura 5.26: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=57600$ s	70
Figura 5.27: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=72000$ s	71
Figura 5.28: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=86400$ s	71
Figura 5.29: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=2$ dias	71

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1: Caso 1 – difusão pura	54
Tabela 2: Caso 1 – advecção-difusão	56
Tabela 3: Caso 2 – difusão pura	58
Tabela 4: Caso 2 – difusão pura	60
Tabela 5: Caso 2 – advecção-difusão	62
Tabela 6: Caso 1 – difusão pura	65
Tabela 7: Caso 2 - difusão pura	68
Tabela 8: Caso 2 - difusão pura	69

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas vem aumentando consideravelmente a preocupação mundial com a emissão de contaminantes em rios e canais. De acordo com Braga et al. (2003), a poluição é uma “alteração indesejável nas características físicas, químicas ou biológicas na atmosfera, litosfera ou hidrosfera que cause ou possa causar prejuízo à saúde, à sobrevivência ou às atividades dos seres humanos e outras espécies ou ainda deteriorar materiais”.

Apesar de a água ser uma das substâncias mais comuns na natureza e se encontrar disponível em diversas formas, principalmente no estado líquido, a disponibilidade da água doce no planeta é limitada. Em virtude disto, a poluição das águas é um tema, cuja discussão, cresce de forma significativa.

No Brasil, os maiores problemas ambientais relacionados com a poluição das águas surgiram na década de 70 junto com o desenvolvimento industrial. Antigamente, a diluição natural dos cursos de água era suficiente para permitir a manutenção de um sistema satisfatório, mas, atualmente, isto já não é possível, uma vez que há uma crescente demanda no consumo de água.

De acordo com Barros (2004) são fatores que contribuem para a degradação dos corpos hídricos, a falta de saneamento básico, indicado como o maior poluidor, o lançamento de efluentes industriais tratados indevidamente, projetos de irrigação e a exploração dos recursos hídricos para fins energéticos.

A verificação e medição dos parâmetros de qualidade da água é a principal ferramenta utilizada para a avaliação da mesma, onde os principais parâmetros analisados são: oxigênio dissolvido (OD), demanda bioquímica (DBO), e nitrogênio e fósforo (GARCIA, 2009).

O nível de bactérias coliformes tem sua importância relacionada ao controle de doenças transmissíveis e a saúde pública. As concentrações de OD e DBO são parâmetros que representam o equilíbrio do ecossistema aquático e a sobrevivência de espécies animais e vegetais presentes no ambiente hídrico.

A eutrofização é o crescimento excessivo das plantas aquáticas, tanto planctônicas quanto aderidas, a níveis tais que sejam considerados como causadores de interferências com os usos desejáveis do corpo d'água (THOMANN e MUELLER, 1987). O principal fator de estímulo é um nível excessivo de nutrientes no corpo d'água, principalmente nitrogênio e fósforo. Este problema vem se tornando mais crítico devido à presença de tais nutrientes em elevadas concentrações em efluentes industriais que escoam para rios e reservatórios, impactando esses sistemas.

A qualidade da água está fortemente ligada à quantidade de água existente para dissolver, diluir e transportar as substâncias que prejudicam a saúde dos seres humanos (BRAGA et al. 2003). Os cursos d'água possuem a capacidade de autodepuração, desde que as cargas poluidoras respeitem o potencial depurador desse manancial e permitam a manutenção da vida biológica. Fora destes limites, a qualidade das águas encontra-se comprometida.

De acordo com Garcia (2009) a análise das transformações físicas, químicas e biológicas ocorridas no meio aquático e a formulação matemática de tais processos, permitem a construção de um modelo matemático de qualidade da água que relacione a concentração de substâncias e parâmetros desejados com as características hidrológicas do sistema em estudo.

Os parâmetros de qualidade e grande parte das substâncias tóxicas têm seus limites fixados em legislações específicas que determinam o nível de qualidade da água em um sistema hídrico e designam o tipo de uso da água permitido para os locais avaliados.

Desta forma surgiu a necessidade, a nível mundial, de se obter um controle qualitativo e quantitativo das águas. Com este crescente interesse, várias análises de impacto ambiental no contexto da dispersão de poluentes em rios e canais estão sendo feitas confiando em modelos matemáticos e computacionais.

O desenvolvimento de modelos computacionais tem sido de grande interesse na comunidade científica uma vez que estes modelos apresentam custos menores que os de modelos com experimentos. Além disso, têm a vantagem de se adaptar, de maneira fácil e rápida a novos problemas e situações. Isso implica no desenvolvimento de novas técnicas e modelos para elaborar-se uma abordagem mais rigorosa, adicionando-se complexibilidades na formulação do problema que sejam de importância física.

A estimativa da concentração de poluentes em rios e córregos é determinada pela elaboração de modelos de dispersão. Um modelo de dispersão é uma expressão matemática que representa os efeitos das águas sobre os poluentes. De acordo com os problemas ocasionados pela poluição da água é necessário estudar e entender o processo de dispersão desses contaminantes para prever as possíveis consequências de impacto da poluição sobre os diversos ecossistemas.

Estes modelos matemáticos são instrumentos particularmente úteis no entendimento dos fenômenos que controlam o transporte, a dispersão e a transformação físico-química dos contaminantes imersos nos rios e canais. Tais modelos permitem validar o nível observado de poluentes bem como a qualidade da água em um determinado lugar. Podendo também, estimar o impacto de novas fontes poluidoras.

Percebendo a dificuldade em resolver analiticamente equações diferenciais parciais com coeficientes constantes, alguns autores (MACHADO, 2006) utilizam métodos numéricos como sendo um caminho alternativo para a produção de resultados aproximados. Entre estes métodos podemos citar o de diferenças finitas, o de elementos finitos e o de volumes finitos. Tais métodos podem ser encontrados em Maliska (2004), Patankar (1980) e Hughes (1987).

O método de diferenças finitas aproxima as derivadas parciais das equações diferenciais por quocientes de diferenças de valores das variáveis incógnitas escolhidos em pontos discretos do domínio do cálculo. Dependendo da forma como são obtidas as equações de diferenças, o esquema numérico pode ser explícito ou implícito. No esquema explícito, as variáveis incógnitas têm seus valores definidos, em cada ponto do espaço, em função dos valores conhecidos dos intervalos de tempos anteriores. Quando isto não acontece, o esquema é implícito e resultam em sistemas de equações algébricas onde as variáveis incógnitas são resolvidas simultaneamente a cada intervalo de tempo, geralmente em uma linha de espaço com condições de contorno definidas.

O método dos elementos finitos há uma versatilidade na representação de geometrias complexas, uma vez que possui geradores automáticos de malhas triangulares e hexagonais. Desta forma, este método permite uma variação no tamanho dos elementos que compõem a malha e as condições de contorno podem ser facilmente implementadas.

Já o método de volumes finitos está intrinsecamente ligado ao conceito de fluxo entre regiões, ou volumes adjacentes, onde o fluxo de uma grandeza, como massa ou energia, é a quantidade dessa grandeza que atravessa uma determinada fronteira ou volume de controle. A aplicação física direta resultante da aplicação de tal método, bem como a possibilidade de aplicá-lo diretamente sobre malhas com espaçamentos não uniformes são duas de suas vantagens.

Porém ambos os métodos tendem a ter um custo computacional alto, dependendo da complexibilidade do modelo matemático, devido à grande quantidade de memória e ao elevado tempo de processamento.

Machado (2006) utilizou o método de volumes finitos para modelar tridimensionalmente a dispersão de poluentes em rios. Neste estudo, o método foi utilizado para aproximar as equações de massa, de conservação da quantidade de movimento e de espécie química.

A propagação de poluentes na água é um problema típico de transporte advectivo-difusivo para o qual a utilização de métodos analíticos e híbridos é particularmente vantajosa em relação às formulações numéricas, possibilitando a obtenção de soluções em forma fechada, desde que o campo de velocidades do corpo hídrico em estudo seja previamente conhecido. Nestes casos, o poluente não afeta o comportamento fluido-dinâmico do escoamento.

1.1 Estrutura do Trabalho

A presente dissertação está estruturada em sete capítulos. No Capítulo I, é feita uma revisão bibliográfica. São apresentados trabalhos referentes à modelagem de dispersão de poluentes em meio aquático.

No Capítulo II, apresenta-se uma breve revisão dos fundamentos teóricos tanto da equação de advecção-difusão, a qual modela o fenômeno de dispersão, como também do método de Separação de Variáveis, utilizado para a resolução da equação.

Em seguida, no Capítulo III, é formulado o caso unidimensional tanto para a hipótese da difusão pura quanto para a de difusão e advecção do poluente. Nesta última hipótese é feita uma redução ao problema de difusão pura através de uma escolha adequada de variáveis.

O caso bidimensional em regime transiente é apresentado e resolvido no Capítulo IV. Neste caso, novamente, mediante uma escolha adequada de variáveis e condições iniciais e de contorno, conseguimos reduzir nosso problema ao caso de difusão pura.

A validação dos resultados, bem como a comparação com outras técnicas encontram-se no capítulo V. Resultados gráficos são apresentados.

As conclusões e sugestões para trabalhos futuros são apresentadas no Capítulo VI.

1.2 Revisão Bibliográfica

Várias soluções numéricas da equação de advecção-difusão podem ser encontradas na literatura. Todavia, a busca de soluções analíticas para este problema ainda é uma das principais direções de pesquisa nesta área, pois todos os parâmetros aparecem explicitamente na solução, permitindo a investigação de suas influências.

Sendo assim, nesta seção, é apresentada uma síntese dos modelos de dispersão de poluentes aquáticos, bem como uma revisão bibliográfica de trabalhos envolvendo soluções numéricas, híbridas e analíticas da equação de advecção-difusão aplicadas em rios e canais. Esses trabalhos foram desenvolvidos através de diferentes técnicas e métodos de solução.

Modelos unidimensionais para a solução da equação de advecção-difusão têm sido extensivamente usados, de forma a obter a solução analítica destes modelos. Na sua maioria, assumem perfil de velocidade e coeficientes constantes. De acordo com Porto et al (1991) uma das maiores contribuições para o estudo da equação de advecção-difusão de poluentes foi a introdução do conceito de dispersão longitudinal, que busca o uso de equações mais simples, com formulação aproximada.

Modelos unidimensionais são utilizados quando o tempo após o lançamento de um poluente é suficientemente grande. Mas para que isto ocorra é necessário um conhecimento prévio da estimativa do tempo necessário para que os dejetos se distribuam uniformemente ao

longo das direções y (transversal) e z (vertical). Desta forma, modelos unidimensionais podem ser úteis para uma primeira estimativa.

Gandolfi et al (2001) utilizou um modelo unidimensional de dispersão, advecção e decaimento com coeficientes constantes para o transporte de solutos em um rio, formulando um problema com uma fonte pontual variável no tempo, resolvido analiticamente através do uso da Transformada de Laplace.

Dias (2003) mostrou seus estudos, para um modelo unidimensional, na obtenção de uma solução analítica da equação de advecção-difusão com decaimento de primeira ordem pelo método da transformação de similaridade generalizada. O método proposto proporciona uma forma sistemática de encontrar as variáveis de similaridade que reduzem o problema a uma equação diferencial ordinária com solução conhecida, o que completa a obtenção da solução desejada.

Muito embora o modelo unidimensional seja bastante utilizado devido a sua simplicidade e habilidade em se obter resultados satisfatórios, ele é bastante limitado. Em situações mais críticas, como o lançamento de um poluente químico antes do local onde o processo de dispersão comece a ocorrer, a formulação unidimensional torna-se inadequada.

Outro aspecto a ser considerado é que modelos longitudinais unidimensionais não devem ser aplicados para simular o processo inicial de descarga de um poluente em um canal. Nestes casos utilizam-se com mais frequência modelos com duas ou até três dimensões.

O tipo de fonte poluidora também é levado em consideração para se determinar qual modelo de dispersão deverá ser utilizado. Existem basicamente três tipos de fontes, a plana, linear ou pontual.

A forma dessas fontes poluidoras tem importância fundamental nos estudos de impacto ambiental. As fontes pontuais são as que atingem o aquífero através de um ponto. O exemplo mais comum deste tipo de fonte é o das indústrias. Estas fontes são responsáveis por poluições altamente concentradas na forma de plumas. Já as fontes lineares são provocadas pela infiltração de águas superficiais de rios e canais contaminados. A possibilidade desta poluição ocorrer dependerá do sentido do fluxo hidráulico existente entre o curso d'água e o aquífero subjacente. Por fim, as fontes planas ou difusas são as que contaminam áreas

extensas. A poluição proveniente das fontes difusas caracteriza-se por ser de baixa concentração e atingir grandes áreas.

As aplicações de modelos bidimensionais e tridimensionais dependem, também, da configuração geométrica do rio, do trecho no qual se deseja analisar e das razões de aspectos entre a profundidade e a largura (BARROS, 2004).

Trabalhos com modelos bidimensionais podem ser encontrados na literatura, estes modelos podem ser divididos em processos de transporte onde são considerados o transporte no plano x (direção longitudinal) e y (direção transversal) e processos com transporte no plano x (direção longitudinal) e z (direção vertical). A escolha destes dois modelos depende do tipo de fonte poluidora e da ordem de grandeza dos fluxos difusivos.

Modelos bidimensionais para o caso de direções longitudinais e transversais são utilizados para rios muito largos e/ou para os casos em que o fluxo difusivo na direção vertical é muito menor que o fluxo na direção transversal. Este tipo de modelo assume que o poluente ao ser despejado no rio se difunde instantaneamente para o leito do rio.

Trabalhos como o de Vilhena et al (1985) apresentam a solução para modelos bidimensionais. Neste trabalho experimental, com o objetivo de validar o modelo bidimensional teórico, a equação abordada apresenta coeficientes constantes, velocidade e coeficiente de difusão turbulenta uniformes e a técnica empregada foi a Transformada de Laplace.

A hipótese para o modelo bidimensional, na direção horizontal, de que haja mistura completa do poluente na seção transversal, só é válida quando a razão de aspecto da largura pela profundidade seja grande e que o efeito da distribuição de velocidades na direção lateral seja mais significativo que o efeito do perfil de velocidades na profundidade (BASHA, 1997).

Zabadal et al (2006) apresentaram resultados para problemas difusivos bidimensionais em regime permanente, utilizando métodos híbridos, em meio aquático. Esses métodos aplicam variáveis complexas a fim de executar mapeamentos sobre a equação diferencial a ser resolvida bem como sobre o domínio considerado. O mapeamento sobre a equação diferencial converte o operador laplaciano bidimensional em uma derivada cruzada de segunda ordem na

variável espacial. O mapeamento do domínio transforma, com eficácia, regiões de formato complexo em regiões retangulares.

Poffal (2005) estudou dois métodos analíticos para obtenção de soluções, em forma fechada, da equação advectivo-difusiva em coordenadas cartesianas que descreve problemas de dispersão de poluentes tanto na água quanto na atmosfera. Um dos métodos está baseado em regras de manipulação de exponenciais de operadores diferenciais, e o outro consiste na aplicação de simetrias de Lie admitidas por uma equação diferencial parcial linear. Nas aplicações referentes à dispersão de poluentes na água, resolve-se a equação advectivo-difusiva bidimensional com coeficientes variáveis, realizando uma mudança de variáveis de modo a reescrevê-la em termos do potencial velocidade e da função corrente correspondentes ao respectivo escoamento potencial, estendendo a solução para domínios de contornos arbitrários.

Fernandez (2007) mostrou estudos utilizando as transformações de Bäcklund, essas transformações produzem mapeamentos entre soluções de duas equações diferenciais. Se a solução exata de uma equação diferencial, denominada equação auxiliar, é conhecida, torna-se possível transformá-la em solução de uma outra equação diferencial, denominada equação alvo, pela aplicação de operadores diferenciais. Quando a equação auxiliar e a equação alvo são idênticas, este procedimento é denominado transformação auto-Bäcklund. Neste trabalho, soluções exatas da equação advectiva-difusiva bidimensional em regime estacionário foram obtidas pelo emprego de transformações auto-Bäcklund a fim de simular a dispersão de poluentes em corpos hídricos.

Ribeiro et al (2009) apresentaram uma nova formulação analítica para a resolução de problemas de poluição aquática. O método aplicado baseava-se no emprego da transformada de Fourier, onde condições de contorno de segunda espécie eram incluídas na formulação a fim de que pudessem ser obtidas distribuições de concentração e substâncias químicas em corpos hídricos com formato complexo. Neste trabalho foi elaborado um algoritmo híbrido que utiliza a Transformada de Fourier na obtenção de soluções aproximadas em forma analítica para a equação de dispersão em duas dimensões.

Ribeiro et al (2010) apresentaram um novo método analítico, utilizando redução de ordem, para a resolução de problemas em poluição aquática. O método realiza a simulação

utilizando duas restrições diferenciais de primeira ordem, a partir das quais são encontradas transformações auto-Bäcklund para a equação advectiva-difusiva bidimensional em regime estacionário.

Buske et al (2010) apresentaram uma solução analítica da equação bidimensional de advecção-difusão no plano longitudinal e vertical em regime permanente para a dispersão de contaminantes na água. Neste estudo, foi aplicado a técnica GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique).

Habitualmente, costuma-se utilizar modelos tridimensionais próximos a fonte poluidora, uma vez que o poluente se difunde para o fundo e no decorrer do processo ele espalha-se na direção transversal do rio devido ao processo de difusão que suaviza os gradientes de concentração.

Um modelo que inclua informações sobre a variação do campo de velocidades é de grande interesse. Neste sentido, alguns trabalhos, como por exemplo, o de Wang et al. (1978) já têm apresentado modelos que incluam essa não uniformidade na velocidade. Porém, ainda é escasso na literatura modelos que incluam variações também no campo da difusividade turbulenta em modelos para rios rasos. Neste caso, a estrutura turbulenta do fluxo de água em rios rasos é caracterizada pela existência de turbulência.

Barros (2004) estudou modelos multidimensionais para a dispersão de contaminantes em rios e canais através de soluções híbridas por transformação integral. Em seu trabalho foi utilizada a técnica GITT (Técnica da Transformada integral Generalizada) com um regime permanente de dispersão.

Dependendo das características físicas do rio a ser analisada, o trecho imediatamente a jusante do lançamento do poluente pode definir o comportamento dispersivo do poluente. Normalmente, o processo de dispersão nestes casos, nos trechos iniciais, tem características tridimensionais. Esse processo tridimensional pode se estender por quilômetros até que se torne bidimensional e subsequentemente unidimensional. Neste caso, devem-se empregar modelos matemáticos que contenham informações sobre todas as direções espaciais.

Garcia (2009) apresentou soluções exatas, para um modelo difusivo de dispersão de poluentes, baseado na equação KDV (Kortweg-de Vries). O método utilizado baseia-se em

três restrições diferenciais de primeira ordem a partir das quais são encontradas transformações auto-Bäcklund para a equação advectiva-difusiva tridimensional em regime estacionário.

Feita a revisão bibliográfica foi possível concluir aspectos importantes para o problema de dispersão de poluentes em rios e canais. Entre eles podemos citar que resultados experimentais, encontrados na literatura, indicam que os coeficientes de difusão variam na direção longitudinal do escoamento assim como na direção vertical e transversal. Não há uniformidades no campo de velocidade, uma vez que a distribuição da velocidade ao longo de uma margem para a outra podem apresentar assimetria devido a topologia do rio ou canal, e pode existir a variação no perfil de velocidade, em certos trechos do canal onde a profundidade varia.

Portanto, no presente trabalho, o procedimento de modelagem do problema de dispersão de poluentes em rios e canais seguirá as seguintes etapas. A partir do problema real um modelo físico será idealizado e através dele hipóteses serão discutidas para adicionar a complexibilidade necessária para se obter resultados mais realísticos que contribuam com o problema real inicial. Após esta etapa o modelo físico será traduzido em equações que descrevem o fenômeno, que neste caso é a equação de advecção-difusão. O método utilizado para a solução das equações será o de separação de variáveis, já citado anteriormente, seguido da implementação do algoritmo computacional utilizando a linguagem de programação *MatLab*. Finalmente os resultados serão comparados com os já existentes na literatura.

1.3 Objetivos

Devido à importância do problema em questão, pretendeu-se, nesta dissertação, estender a aplicação do método de separação de variáveis para modelar a dispersão de poluentes em rios e canais. Desta forma, será considerado um problema de uma central energética dispersando seus contaminantes em um rio, analisado aqui, com perfil retangular.

Pretende-se neste trabalho obter uma solução para a equação de advecção-difusão tanto para o modelo unidimensional quanto para o bidimensional, ambos em regime transiente, apresentando perfil de velocidade e coeficientes de difusão constantes.

Apresentam-se duas formulações para o modelo unidimensional. O primeiro caso trata de um problema cujas condições de contorno, não homogêneas, são constantes. Este caso serve para validar o método de solução já que existem resultados na literatura que permitem a sua comparação.

Já os demais casos, cujos resultados não foram encontrados na literatura, representam novas recomendações que podem ser usadas na verificação de modelos numéricos. Portanto, o segundo caso unidimensional mostra um problema cujas condições de contorno têm características lineares.

Para as formulações do modelo bidimensional também são apresentados dois casos. O primeiro trata de um problema cujas condições de contorno, não homogêneas, são lineares e o segundo caso possui condições de contorno de forma que a concentração varie parabolicamente.

Desta maneira, apresentamos soluções analíticas para a concentração de poluentes em meio aquático. Estas expressões analíticas foram implementadas no software *MatLab*, cujas vantagens encontram-se no seu baixo custo computacional, em virtude das inúmeras bibliotecas oferecidas pelo programa.

CAPÍTULO II

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Neste capítulo apresenta-se uma breve revisão dos fundamentos teóricos para a equação que modela a dispersão de poluentes em rios e córregos bem como para o método de separação de variáveis que é usualmente utilizado para resolver problemas com equações diferenciais ordinárias e parciais.

2.1 Dispersão de Efluentes

A dispersão é definida como o fenômeno de transporte de efluentes causado pela ocorrência conjunta de difusão molecular e/ou turbulenta e da convecção (também chamada de advecção). O transporte difusivo ocorre quando as moléculas do efluente se dispersam entre as camadas do fluido devido ao gradiente de concentração existente entre as diferentes regiões do escoamento. Os parâmetros que levam em consideração a difusão do efluente são chamados coeficientes de dispersão.

Já a dispersão convectiva ocorre devido às componentes de velocidades existentes. A convecção ocorre, por exemplo, em regimes turbulentos devido à existência de velocidades paralelas, mas pode existir no regime laminar também. Embora estes fenômenos estejam sempre presentes durante a dispersão dos efluentes, existem situações em que apenas um predomina.

2.2 Descrição dos Modelos

Os problemas de maior interesse em poluição aquática são divididos em dois conjuntos de cenários típicos de dispersão de poluentes. O primeiro conjunto de cenários descreve problemas de deriva de mancha, isto é, cenários transientes nos quais um despejo instantâneo é efetuado em um determinado local do corpo hídrico, produzindo uma mancha

que é transportada pela correnteza, sofrendo simultaneamente difusão e eventualmente degradação, evaporação ou precipitação.

Segundo Garcia (2009) os modelos transientes são utilizados em derramamentos de poluentes advindos de acidentes no transporte rodoviário e hidroviário, e em rompimentos de tubulações, de tanques de armazenamento de substâncias químicas e de estações de tratamento de efluentes líquidos. Além de estimar a correta duração de uma emergencial interrupção da captação das águas de um corpo hídrico atingido por derramamentos acidentais, haja vista os transtornos da pura e simples suspensão do abastecimento, os modelos matemáticos para descargas acidentais são essenciais à análise de riscos de fontes potenciais de degradação ambiental, para definição das melhores medidas de salvaguardas.

O segundo conjunto de cenários é descrito por problemas tipicamente estacionários nos quais dutos de esgoto e de transporte de substâncias químicas efetuam o lançamento de carga contínua num determinado local do corpo hídrico produzindo uma pluma.

Os modelos estacionários são empregados nas situações em que o campo de velocidades pode ser considerado permanente. Nesses casos, é possível resolver a equação de advecção-difusão sem o termo de variação temporal da concentração. Obtendo-se assim a solução da equação de transporte de massa resultante representada pela distribuição espacial de concentrações das substâncias de interesse no domínio correspondente.

Em ambos os casos se faz necessário que as soluções da equação advectivo-difusiva contenham apenas uma função arbitrária de um argumento específico. Isto ocorre por que nestes cenários a equação advectivo-difusiva está sujeita a duas condições de contorno, sendo que apenas uma delas especifica a função arbitrária.

A primeira condição de contorno, de primeira espécie, descreve a conformação aproximada de um despejo instantâneo no caso de cenários envolvendo acidentes com cargas tóxicas, ou a conformação da seção transversal da pluma que descreve um lançamento contínuo em regime estacionário. Essa condição de contorno particulariza a função arbitrária presente na solução.

A segunda condição de contorno especifica o mecanismo de propagação do poluente junto às margens do corpo hídrico, e correspondem a condições de segunda ou terceira

espécie, conforme o tipo de interface água-solo considerado. Essa condição de contorno especifica apenas constantes arbitrárias que eventualmente figurem na solução obtida.

2.3 A Equação de Advecção-Difusão

O problema estudado é abordado pelo princípio da conservação de massa do poluente transportado, e os escoamentos de maior interesse para os pesquisadores em geral têm caráter turbulento, como é o caso de canais, oceanos e lagos. Nestes casos é necessário que se obtenha uma equação que governe o processo de mistura do poluente com o meio.

O escoamento turbulento tem por características a irregularidade, a difusividade, altos números de Reynolds, a tridimensionalidade da vorticidade, a dissipação, o escoamento contínuo e características do escoamento (MÖLLER e SILVESTRINI, 2004). Uma vez que o processo de transporte de massa ocorra em um escoamento turbulento as distribuições tanto para a concentração do poluente quanto para a velocidade são irregulares. Essa irregularidade dificulta o cálculo exato e instantâneo do potencial fazendo com que seus valores de instante a instante oscilem muito em torno de seus valores médios.

Em virtude deste problema, Reynolds (MALISKA, 2004) propôs um modelo conceitual em 1985 com uma abordagem estatística amplamente utilizada até os dias de hoje. O conhecido Número de Reynolds permite avaliar o tipo de escoamento, ou seja, a estabilidade do fluxo, ou seja, ele é um parâmetro para mensurar a relação entre força motriz (advecção e gradiente de concentração) sobre as forças viscosas. Este número pode ser deduzido por:

$$R_e = \frac{VL}{\tilde{\nu}}.$$

Onde:

V é a velocidade (m/s);

L é a dimensão característica (m);

$\tilde{\nu}$ é a viscosidade cinemática (m^2/s).

Para o caso específico de dutos e canais o escoamento é dito laminar se o número de Reynolds for menor que 2000 ($\text{Re} < 2000$) e é dito turbulento se este número for maior que 2300 ($\text{Re} > 2300$)(SCHILICHTING, 1979).

Desta forma, utiliza-se o princípio de conservação da massa para prever o transporte de contaminantes em corpos de água. Este princípio pode ser descrito conceitualmente como “a variação por unidade de tempo de massa de contaminante dentro do volume de controle, é igual ao fluxo de entrada menos o fluxo de saída, mais a massa resultante das reações de produção ou consumo no interior do volume na unidade de tempo”, (DE ALMEIDA et al., 1997).

Em linhas gerais, assumindo um caso transiente bidimensional, o balanço de massa do contaminante é representado pela seguinte equação governante de advecção-difusão (BARROS 2004):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u(x, y)\frac{\partial C}{\partial x} + v(x, y)\frac{\partial C}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\varepsilon_x(x, y)\frac{\partial C}{\partial x}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[\varepsilon_y(x, y)\frac{\partial C}{\partial y}\right] - \lambda C.$$

Onde:

C é a concentração (kg/m^3);

x é a distância na direção do fluxo (m);

y é a distância na direção transversal (m);

t é o tempo decorrido desde a emissão do contaminante (s);

$u(x, y)$ é o perfil de velocidade do fluxo na direção x (m/s);

$v(x, y)$ é o perfil de velocidade do fluxo na direção y (m/s);

$\varepsilon_x(x, y)$ é o coeficiente de difusão lateral na direção x (m^2/s);

$\varepsilon_y(x, y)$ é o coeficiente de difusão lateral na direção y (m^2/s);

λ é a constante de decaimento (s^{-1}).

A propagação do poluente pode ser dividida em duas importantes fases do transporte de massa. Do lado esquerdo da equação, o segundo e o terceiro termos descrevem o transporte devido à advecção. Isto é, o movimento das partículas devido ao movimento global do fluido, onde as partículas são carregadas pelo próprio movimento do escoamento. Já no lado direito, o primeiro e o segundo termos representam a difusão turbulenta, ou seja, é o movimento de partículas devido à diferença do gradiente de concentração molecular.

2.4 O Método de Separação de Variáveis

O problema central das equações diferenciais, em sua forma mais simples, é determinar qual é a função cuja derivada é conhecida. Neste sentido, alguns métodos são utilizados para resolver este problema, porém eles são aplicados de acordo com as características de cada equação diferencial.

A metodologia empregada neste trabalho para resolver tanto o modelo matemático unidimensional quanto o modelo matemático bidimensional para a dispersão de contaminantes em rios e córregos é o Método de Separação de Variáveis (MSV).

Este método é de grande utilidade para resolver problemas de valor de contorno no campo da física-matemática para problemas homogêneos e foi detalhadamente descrito em Ozisik (1993).

Tal método foi formulado com base nos conceitos e processos físicos que governam o fenômeno e é válido para perfis de velocidades e difusividade constantes tanto para o modelo unidimensional quanto para o modelo bidimensional.

De acordo com Leithold (1994) este método pode ser resumido da seguinte maneira: o Método de Separação de Variáveis substitui a função inicial, antes dependente de duas variáveis, por um produto de duas novas funções, cada uma delas dependente somente de uma variável. Assim a função do problema central deste estudo pode ser representada por:

$$C(x, t) = X(x) \cdot T(t).$$

A estratégia para aplicar o método dá-se da seguinte maneira:

1. Se $\Omega = (a, b) \times (c, d)$ e $(x, t) \in \Omega$, então procuraremos soluções clássicas $C = C(x, t)$, não nulas do tipo:

$$C(x, y) = X(x) \cdot T(t),$$

tal que $X : (a, b) \rightarrow \mathfrak{R}$ e $T : (c, d) \rightarrow \mathfrak{R}$ são funções com a mesma classe de diferenciabilidade que a equação diferencial parcial (EDP) requer.

2. Deveremos determinar as funções X e T .
3. Após determinarmos as funções X e T obteremos uma solução clássica para a EDP.
4. O método pode ser aplicado independente do número de variáveis independentes envolvidas e dessa forma funciona para problemas com uma, duas e três variáveis espaciais, podendo inclusive ser generalizada para mais variáveis.

Entre as condições necessárias para a aplicação do MSV exige-se a linearidade da equação diferencial parcial e a homogeneidade nas condições de fronteira. Entretanto, esta última condição pode ser contornada, contanto que se adicione uma nova função auxiliar que se responsabilize pela obediência às condições não homogêneas.

A partir do emprego deste método, estamos buscando uma solução analítica para a equação de advecção-difusão do problema de dispersão de poluentes em rios e canais, ressaltando que as componentes de velocidade e a difusividade sejam constantes, bem como os coeficientes envolvidos.

CAPÍTULO III

MODELO UNIDIMENSIONAL EM REGIME TRANSIENTE

3.1 Caracterização do problema unidimensional

Modelos unidimensionais são usualmente empregados para obtenção da solução da equação de advecção-difusão quando o tempo após o lançamento de um poluente é suficientemente grande. O lançamento dos dejetos passa de características tridimensionais, no início do processo de dispersão, e pode estender-se por quilômetros, passando para um modelo bidimensional até chegar a um modelo unidimensional (BARROS, 2004).

Todavia os modelos unidimensionais são bastante úteis para uma primeira estimativa em virtude de sua simplicidade e habilidade em se obter resultados satisfatórios.

3.2 Modelo Unidimensional em Regime Transiente

Consideremos o modelo de dispersão de poluentes unidimensional em regime transiente e sendo os coeficientes de difusividade e o de velocidade constantes.

De acordo com Ozisik (1993) a equação de advecção-difusão que modela a dispersão de poluentes é dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \lambda C. \quad (3.1)$$

As condições iniciais e de contorno de nosso interesse serão:

- $C(x,0) = 0$, para $0 < x < L$ (3.2)

- $C(0,t) = C_0$, para $t > 0$ (3.3)

- $C(L,t) = 0$, para $t > 0$ (3.4)

Este é um caso geral, com condições de contorno não homogêneas, da equação de advecção-difusão para um modelo unidimensional. Para equacionar a solução desse problema,

vamos dividi-lo em problemas mais simples cujas soluções conduzem à solução do problema aqui posto.

3.3 Equação Unidimensional para a Difusão Pura

Nesta seção trataremos de problemas com condições de contorno homogêneas e de problemas com condições de contorno não homogêneas. O objetivo aqui é mostrar que o problema cujas condições de contorno são não homogêneas pode ser reduzido ao problema com condições homogêneas.

3.3.1 Condições de Contorno Homogêneas

Para o caso de um modelo unidimensional de difusão pura a equação não apresenta o coeficiente de advecção, logo passa a ser escrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (3.5)$$

A equação (3.5) está sujeita à condição inicial:

- $C(x,0) = f(x)$, para $0 < x < L$ (3.6)

e às seguintes condições de contorno:

- $C(0,t) = 0$, para $t > 0$ (3.7)

- $C(L,t) = 0$, para $t > 0$ (3.8)

Para esse problema a solução é clássica encontrada por Fourier (FIGUEIREDO, 1987) para o problema da condução de calor numa barra homogênea. Vejamos seu desenvolvimento:

Mediante o processo de separação de variáveis (OZISIK, 1993) podemos reescrever a função de concentração do poluente como o produto de duas funções provenientes do método, a saber:

$$C(x,t) = X(x)T(t). \quad (3.9)$$

Substituindo (3.9) em (3.5) e dividindo ambos os lados da equação por $\varepsilon[X(x)T(t)]$ teremos:

$$\frac{T'(t)}{\varepsilon T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)}. \quad (3.10)$$

Considerando que a razão acima seja uma constante, temos que:

$$\frac{T'(t)}{\varepsilon T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = \rho \quad (3.11)$$

de onde tiramos:

$$\frac{T'(t)}{\varepsilon T(t)} = \rho; \quad (3.12)$$

$$\frac{X''(x)}{X(x)} = \rho. \quad (3.13)$$

De (3.12) implica em:

$$T(t) = e^{\varepsilon \rho t}. \quad (3.14)$$

A partir de (3.13) estamos interessados na solução não trivial, que satisfaça:

- $X''(x) - \rho X(x) = 0$ (3.15)

- $X(0) = X(L) = 0$ (3.16)

Podendo, desta forma, considerarmos três possibilidades:

i) $\rho = 0$

Para este caso teremos $X(x) = 0$, a solução trivial que não nos interessa.

ii) $\rho > 0$

Supomos $\rho = \lambda^2$, então substituindo em (3.15) temos:

$$X''(x) - \lambda^2 X(x) = 0. \quad (3.17)$$

A solução geral para este caso é

$$X(x) = A_1 e^{\lambda x} + A_2 e^{-\lambda x}. \quad (3.18)$$

De (3.16) implica que $A_1 = A_2 = 0$. Mais uma vez obtemos a solução trivial $X(x) = 0$.

iii) $\rho < 0$

Façamos $\rho = -\lambda^2$. Substituindo novamente em (3.15) temos:

$$X''(x) + \lambda^2 X(x) = 0. \quad (3.19)$$

A solução geral para este caso é dada por:

$$X(x) = A_1 \cos(\lambda x) + A_2 \sin(\lambda x). \quad (3.20)$$

Aplicando as condições de contorno teremos:

- $X(0) = A_1 = 0$ (3.21)

- $X(L) = A_2 \sin(\lambda L) = 0$ (3.22)

Para que isto ocorra precisamos que $\sin(\lambda L) = 0$, de onde resultará que:

$$\lambda L = n\pi \quad (3.23)$$

isto é,

$$\lambda = \frac{n\pi}{L} \quad (3.24)$$

ou seja,

$$\rho = -\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2. \quad (3.25)$$

Assim:

$$X_n(x) = A_n \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \text{ para } n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.26)$$

Portanto a solução geral para o problema (3.5), sujeito a condição inicial (3.6) e condições de contorno (3.7) e (3.8) é:

$$C(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cdot e^{\frac{-n^2 \pi^2 \varepsilon t}{L^2}} \cdot \operatorname{sen}\frac{n\pi x}{L}. \quad (3.27)$$

Para que seja satisfeita a condição inicial (3.6), devemos ser capazes de determinarmos os coeficientes A_n de modo que:

$$f(x) = C(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (3.28)$$

que de acordo com a ortogonalidade das funções envolvidas fornecerá os coeficientes A_n como:

$$A_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \operatorname{sen}\frac{n\pi x}{L} dx. \quad (3.29)$$

3.3.2 Condições de Contorno Não Homogêneas

O caso em estudo, supondo a difusão pura, consiste em um problema com condições de fronteira não homogêneas, desta forma, devemos reduzi-lo ao caso já conhecido com condições de fronteira homogêneas.

Para isso consideremos o problema para $C(x, t)$ cujas condições de contorno são não homogêneas:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3.30)$$

- $C(0, t) = h_0(t)$, em $t > 0$ (3.31)

- $C(L,t) = h_1(t)$, em $t > 0$ (3.32)

- $C(x,0) = f(x)$, para $0 < x < L$ (3.33)

Consideraremos uma função $v(x,t)$ que possua derivadas parciais contínuas em relação à x até a segunda ordem e derivada de primeira ordem contínua em relação à t e que, além disso, satisfaça as condições de fronteira (3.31) e (3.32), isto é:

- $v(0,t) = h_0(t)$, em $t > 0$ (3.34)

- $v(L,t) = h_1(t)$, em $t > 0$ (3.35)

A partir disso definamos a função:

$$w(x,t) = C(x,t) - v(x,t). \quad (3.36)$$

Nesse caso teremos:

$$\varepsilon \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \varepsilon \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}, \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial t} - \frac{\partial v}{\partial t}. \quad (3.38)$$

Da equação (3.30) resulta que a função $w(x,t)$ será solução da equação diferencial parcial:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \underbrace{\varepsilon \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{\partial v}{\partial t}}_{g(x,t)} \quad (3.39)$$

sujeita às condições de fronteira:

- $w(0,t) = C(0,t) - v(0,t) = h_0(t) - h_0(t) = 0$, em $t > 0$ (3.40)

- $w(L,t) = C(L,t) - v(L,t) = h_1(t) - h_1(t) = 0$, em $t > 0$ (3.41)

e à seguinte condição inicial:

$$w(x,0) = C(x,0) - v(x,0) = f(x) - v(x,0). \quad (3.42)$$

Quando a própria função $v(x,t)$ é também uma solução da equação diferencial parcial (3.30), sujeita a condição inicial:

$$v(x,0) = F(x) \quad (3.43)$$

então $g(x,t) = 0$ e $w(x,t)$ é a solução do problema homogêneo fundamental:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad (3.44)$$

$$\bullet \quad U(0,t) = 0 \quad (3.45)$$

$$\bullet \quad U(L,t) = 0 \quad (3.46)$$

$$\bullet \quad U(x,0) = f(x) - F(x) \quad (3.47)$$

isto é:

$$U(x,t) = w(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cdot e^{\frac{-n^2 \pi^2 \varepsilon t}{L^2}} \cdot \text{sen} \frac{n\pi x}{L} \quad (3.48)$$

sendo que os coeficientes A_n são dados pela integral:

$$A_n = \frac{2}{L} \int_0^L [f(x) - F(x)] \text{sen} \frac{n\pi x}{L} dx. \quad (3.49)$$

Isso significa que conhecemos a função $w(x,t)$. Como assumimos ser conhecida a função $v(x,t)$, a função $C(x,t) = v(x,t) + w(x,t)$ será a solução procurada para o problema (3.30), sujeito às condições de contorno (3.31) e (3.32) e à condição inicial (3.33).

Porém não é uma tarefa simples determinar uma função $v(x,t)$ que satisfaça as condições de contorno (3.31) e (3.32) dadas em forma arbitrária e que ainda por cima satisfaça a equação diferencial parcial (3.30). Mas para certos tipos de funções $h_0(t)$ e $h_1(t)$, pode-se solucionar o problema de forma até certo ponto elementar. Vejamos uma formulação que abrange diversos casos de condições de contorno:

Assumindo que $g(x,t) \neq 0$ façamos:

$$v(x,t) = \frac{[h_1(t) - h_0(t)]}{L} x + h_0(t), \quad (3.50)$$

e teremos:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{[h_1'(t) - h_0'(t)]}{L} x + h_0'(t) \quad (3.51)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = 0 \quad (3.52)$$

Substituindo (3.51) e (3.52) em (3.39) teremos:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - \left\{ \frac{[h_1'(t) - h_0'(t)]}{L} x + h_0'(t) \right\} \quad (3.53)$$

Uma vez que estamos considerando que $g(x,t) \neq 0$, procuramos por:

$$g(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} g_n(t) \text{sen} \frac{n\pi x}{L} \quad (3.54)$$

e escrevemos:

$$w(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} w_n(t) \text{sen} \frac{n\pi x}{L} \quad (3.55)$$

inspirados na solução (3.27) do problema fundamental (3.6), (3.7) e (3.8). Na equação (3.27) as componentes $w_n(t)$ são as funções exponenciais acompanhadas dos coeficientes A_n .

Assim:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} w_n'(t) \text{sen} \frac{n\pi x}{L} \quad (3.56)$$

$$\frac{\partial w}{\partial x} = \sum_{n=1}^{\infty} w_n(t) \frac{n\pi}{L} \cos \frac{n\pi x}{L} \quad (3.57)$$

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = -\sum_{n=1}^{\infty} w_n(t) \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \text{sen} \frac{n\pi x}{L} \quad (3.58)$$

Substituindo (3.56), (3.58) e (3.54) em (3.39) temos:

$$\sum_{n=1}^{\infty} w'_n(t) \text{sen} \frac{n\pi x}{L} = -\varepsilon \sum_{n=1}^{\infty} w_n(t) \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \text{sen} \frac{n\pi x}{L} + \sum_{n=1}^{\infty} g_n(t) \text{sen} \frac{n\pi x}{L}. \quad (3.59)$$

Das relações de ortogonalidade temos que:

$$w'_n(t) = -\varepsilon \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 w_n(t) + g_n(t), \quad (3.60)$$

ou seja:

$$g_n(t) = w'_n(t) + \varepsilon \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 w_n(t). \quad (3.61)$$

Usando o fator integrante $e^{\frac{n^2\pi^2\varepsilon t}{L^2}}$ teremos:

$$e^{\frac{n^2\pi^2\varepsilon t}{L^2}} g_n(t) = e^{\frac{n^2\pi^2\varepsilon t}{L^2}} w'_n(t) + e^{\frac{n^2\pi^2\varepsilon t}{L^2}} \varepsilon \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 w_n(t). \quad (3.62)$$

É o mesmo que dizer que:

$$e^{\frac{n^2\pi^2\varepsilon t}{L^2}} g_n(t) = \frac{d}{dt} \left\{ e^{\frac{n^2\pi^2\varepsilon t}{L^2}} w_n(t) \right\}. \quad (3.63)$$

Integrando ambos os lados, desde $\tau = 0$ até $\tau = t$, como segue:

$$\int_0^t e^{\frac{n^2\pi^2\varepsilon\tau}{L^2}} g_n(\tau) d\tau = \int_0^t \frac{d}{d\tau} \left\{ e^{\frac{n^2\pi^2\varepsilon\tau}{L^2}} w_n(\tau) \right\} d\tau. \quad (3.64)$$

Teremos:

$$\int_0^t e^{\frac{n^2\pi^2\varepsilon\tau}{L^2}} g_n(\tau) d\tau = e^{\frac{n^2\pi^2\varepsilon t}{L^2}} w_n(t) - \underbrace{w_n(0)}_0. \quad (3.65)$$

Portanto

$$w_n(t) = \int_0^t e^{\frac{n^2 \pi^2 \varepsilon (\tau-t)}{L^2}} g_n(\tau) d\tau. \quad (3.66)$$

Buscamos, agora, quem são os coeficientes da expansão.

$$g(x,t) = \frac{[h'_0(t) - h'_1(t)]}{L} x - h'_0(t) = \sum_{n=1}^{\infty} g_n(t) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}. \quad (3.67)$$

Utilizando o método de projeções ortogonais, que permite obter cada um dos coeficientes da expansão, multiplicaremos a equação (3.67) por $\operatorname{sen}\left(\frac{i\pi x}{L}\right)$, com i fixo de ambos os lados, e teremos:

$$\int_0^L \underbrace{\left\{ \frac{[h'_0(t) - h'_1(t)]}{L} x - h'_0(t) \right\}}_{ax+b} \operatorname{sen}\left(\frac{i\pi x}{L}\right) dx = \sum_{n=1}^{\infty} g_n(t) \underbrace{\int_0^L \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L} \operatorname{sen} \frac{i\pi x}{L} dx}_{\frac{L}{2}} \quad (3.68)$$

$$\frac{bL}{i\pi} [1 - (-1)^i] - \frac{aL^2}{i\pi} (-1)^i = g_i(t) \frac{L}{2} \quad (3.69)$$

$$g_i(t) = 2 \left\{ \frac{b}{i\pi} [1 - (-1)^i] - \frac{aL}{i\pi} (-1)^i \right\} \quad (3.70)$$

Portanto

$$g_i(t) = \frac{2}{i\pi} \left\{ -h'_0(t) + h'_1(t)(-1)^i \right\}. \quad (3.71)$$

Assim:

$$w_n(t) = \int_0^t e^{\frac{n^2 \pi^2 \varepsilon (\tau-t)}{L^2}} \frac{2}{i\pi} \left\{ -h'_0(\tau) + h'_1(\tau)(-1)^i \right\} d\tau. \quad (3.72)$$

Logo a solução do problema (3.30), sujeito às condições de contorno (3.31) e (3.32) e com condição inicial (3.33) passa a ser:

$$C(x,t) = \underbrace{\frac{[h_1(t) - h_0(t)]}{L} x + h_0(t)}_{v(x,t)} + \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} w_n(t) \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}}_{w(x,t)}, \quad (3.73)$$

onde $w_n(t)$ é dado por (3.72).

3.4 Equação Unidimensional Difusiva-Advectiva

Nesta seção abordaremos o caso mais geral do problema unidimensional, no qual há o termo advectivo da função de advecção-difusão. Consideraremos, portanto, a equação:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \lambda C \quad (3.74)$$

sujeita às condições:

- $C(x,0) = 0$, para $0 < x < L$ (3.75)

- $C(0,t) = C_0$, para $t > 0$ (3.76)

- $C(L,t) = 0$, para $t > 0$ (3.77)

Será mostrado que esse problema pode ser reduzido ao problema de difusão pura mediante uma escolha adequada de variáveis e com condições iniciais e de contorno adequadas.

Para isso considera-se a equação:

$$C_t = KC_{xx} + MC_x + NC \quad (3.78)$$

onde K , M e N são constantes.

Introduz-se uma nova função $\varphi(x,t)$ relacionada com a função $C(x,t)$ pela equação:

$$C(x,t) = e^{\mu x + \gamma t} \varphi(x,t), \quad (3.79)$$

na qual μ e γ são constantes a serem determinadas.

Substituindo-se (3.79) em (3.78), obtemos:

$$\varphi_t = K\varphi_{xx} + (M + 2\mu K)\varphi_x + (N + M\mu + K\mu^2 - \gamma)\varphi. \quad (3.80)$$

Esta equação, por sua vez, se reduz $\varphi_t = K\varphi_{xx}$, pela escolha adequada de μ e γ , a saber:

$$\mu = -\frac{M}{2K} \text{ e } \gamma = \frac{4KN - M^2}{4K}. \quad (3.81)$$

Portanto, o problema (3.74) de advecção-difusão pode ser reduzido ao problema de difusão pura considerando,

$$\mu = \frac{u}{2\varepsilon} \text{ e } \gamma = -\frac{4\varepsilon\lambda + u^2}{4\varepsilon}. \quad (3.82)$$

Quanto às condições de fronteira (3.76) e (3.77), elas serão satisfeitas por $C(x,t) = e^{\mu x + \gamma t} \varphi(x,t)$ se e somente se:

$$C(0,t) = e^{\gamma t} \varphi(0,t) = \varphi_0, \text{ ou seja, } \varphi(0,t) = e^{-\gamma t} \varphi_0, \quad (3.83)$$

$$C(L,t) = e^{\mu L + \gamma t} \varphi(L,t) = 0, \text{ ou seja, } \varphi(L,t) = 0. \quad (3.84)$$

Deve ser ressaltado que o problema, com as considerações descritas acima, foi transformado num problema matematicamente mais simples de tratar, semelhante ao problema de difusão pura, mas no qual as condições de fronteira não são homogêneas e ainda dependentes do tempo, embora seja homogênea a condição inicial. A literatura consultada (FIGUEIREDO, 1987) também aborda essa formulação de maneira satisfatória e podemos resolver esse problema ainda mediante a técnica de separação de variáveis.

CAPÍTULO IV

MODELO BIDIMENSIONAL EM REGIME TRANSIENTE

4.1 Caracterização do Problema

Modelos bidimensionais podem ser divididos em modelos com planos longitudinal e vertical e modelos com planos longitudinal e transversal.

4.1.1 Modelo Bidimensional no Plano Longitudinal e Transversal

Neste caso os fluxos de massa são maiores na direção transversal do que na direção vertical. Modelos bidimensionais horizontais são os mais usados, uma vez que os modelos bidimensionais verticais assumem uma homogeneidade lateral, perdendo assim informação geralmente relevante do processo de dispersão em rios.

Os modelos bidimensionais horizontais são utilizados com bastante frequência na engenharia ambiental e a escolha desse modelo baseia-se na constatação de que o poluente despejado tende a se distribuir de forma muito mais rápida na direção vertical do que na horizontal.

4.1.2 Modelo Bidimensional no Plano Longitudinal e Vertical

Este é um modelo bidimensional de transporte normalmente utilizado para rios ou canais cuja profundidade tem um papel relevante no processo de difusão e advecção da massa. Estes modelos podem ser usados para rios estreitos e profundos cuja difusão turbulenta lateral é muito menor que a vertical dependendo, obviamente, do tipo de fonte poluidora (BARROS, 2004).

4.2 Modelo Bidimensional em Regime Transiente

O modelo de dispersão de poluente bidimensional utilizado será o longitudinal e transversal e será aplicado em regime transiente, considerando tanto os coeficientes de difusividade quanto os de velocidades constantes.

A equação de advecção-difusão que modela a dispersão de poluentes é dada por (OZISIK, 1993):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \omega \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \lambda C. \quad (4.1)$$

O caso geral para a equação de um modelo bidimensional de advecção-difusão apresenta condições de contorno não homogêneas. Para equacionar a solução desse problema, vamos, assim como no modelo unidimensional, separá-lo em problemas mais simples cujas soluções conduzem à solução desse problema aqui posto.

4.3 Equação Bidimensional – Difusão Pura

Nesta seção trataremos de problemas com condições de contorno homogêneas e de problemas com condições de contorno não homogêneas. O objetivo aqui é mostrar que o problema cujas condições de contorno são não homogêneas pode ser reduzido ao problema com condições homogêneas.

4.3.1 Condição de Contorno Homogênea

Será seguido o mesmo procedimento adotado no modelo unidimensional para encontrar a solução do modelo bidimensional puramente difusivo com condições de contorno homogêneas.

A equação que representa este modelo é dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \omega \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \quad (4.2)$$

sujeita à seguinte condição inicial:

$$\bullet \quad C(x, y, 0) = f(x, y), \text{ para } 0 < x < L \text{ e } 0 < y < l \quad (4.3)$$

e com as seguintes condições de contorno:

$$\bullet \quad C(0, y, t) = 0, \text{ para } t > 0 \quad (4.4)$$

$$\bullet \quad C(L, y, t) = 0, \text{ para } t > 0 \quad (4.5)$$

$$\bullet \quad C(x, 0, t) = 0, \text{ para } t > 0 \quad (4.6)$$

$$\bullet \quad C(x, l, t) = 0, \text{ para } t > 0 \quad (4.7)$$

Considera-se aqui que ε e ω são constantes iguais. De tal forma que a equação passe a ser escrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right). \quad (4.8)$$

Mediante o processo de separação de variáveis, bem sucedido na resolução do problema em uma dimensão espacial, escreve-se:

$$C(x, y, t) = X(x)Y(y)T(t). \quad (4.9)$$

Substituindo (4.9) em (4.8) tem-se:

$$X(x)Y(y)T'(t) = \varepsilon [X''(x)Y(y)T(t) + X(x)Y''(y)T(t)]. \quad (4.10)$$

Dividindo ambos os lados da equação (4.10) por $\varepsilon [X(x)Y(y)T(t)]$ resultará:

$$\frac{T'(t)}{\varepsilon T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} + \frac{Y''(y)}{Y(y)}. \quad (4.11)$$

Também aqui, pelas mesmas razões expostas no caso unidimensional, deve-se ter a razão acima constante. Portanto, seja:

$$\frac{T'(t)}{\varepsilon T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} + \frac{Y''(y)}{Y(y)} = \rho. \quad (4.12)$$

Então:

$$T'(t) - \varepsilon \rho T(t) = 0 \quad (4.13)$$

implica que $T(t) = e^{\varepsilon \rho t}$.

Da mesma razão tiramos que:

$$\frac{X''(x)}{X(x)} = \rho - \frac{Y''(y)}{Y(y)} \quad (4.14)$$

também é uma constante que designaremos por γ . Isto é:

$$\frac{X''(x)}{X(x)} = \rho - \frac{Y''(y)}{Y(y)} = \gamma. \quad (4.15)$$

Desse modo teremos:

$$\bullet \quad X''(x) - \gamma X(x) = 0 \quad (4.16)$$

$$\bullet \quad Y''(y) - (\rho - \gamma)Y(y) = 0 \quad (4.17)$$

que são equações diferenciais ordinárias lineares de segunda ordem com coeficientes constantes. De modo análogo ao caso unidimensional, também aqui se prova que:

- i) Não podemos ter $\gamma \in \mathbb{C}$;
- ii) Não podemos ter $\gamma \in \mathfrak{R}$ com $\gamma \geq 0$;
- iii) Necessariamente $\gamma \in \mathfrak{R}$ e $\gamma < 0$.

Por razões similares:

- i) Não podemos ter $\rho - \gamma \in \mathbb{C}$;
- ii) Não podemos ter $\rho - \gamma \in \mathfrak{R}$ com $\rho - \gamma \geq 0$;

iii) Necessariamente $\rho - \gamma \in \Re$ e $\rho - \gamma < 0$.

Designando $\gamma = -\lambda^2$ e $\rho - \gamma = \rho + \lambda^2 = -\mu^2$.

Com essa notação, as equações diferenciais ordinárias (4.16) e (4.17) escrevem-se:

$$\bullet \quad X''(x) + \lambda^2 X(x) = 0 \quad (4.18)$$

$$\bullet \quad Y''(y) + \mu^2 Y(y) = 0 \quad (4.19)$$

Dessas considerações resultará que:

$$X(x) = A_1 \cos(\lambda x) + A_2 \operatorname{sen}(\lambda x) \quad (4.20)$$

$$Y(y) = B_1 \cos(\mu y) + B_2 \operatorname{sen}(\mu y) \quad (4.21)$$

Para que as condições de contorno (4.4), (4.5), (4.6) e (4.7) sejam satisfeitas deve-se ter:

$$C(0, y, t) = 0 \Leftrightarrow X(0)Y(y)T(t) = 0 \quad \forall y, t \Leftrightarrow X(0) = 0 \quad (4.22)$$

ou equivalentemente:

$$X(0) = A_1 \cos(\lambda 0) + A_2 \operatorname{sen}(\lambda 0) = 0 \Leftrightarrow A_1 = 0. \quad (4.23)$$

Analogamente:

$$C(L, y, t) = 0 \Leftrightarrow X(L)Y(y)T(t) = 0 \quad \forall y, t \Leftrightarrow X(L) = A_2 \operatorname{sen}(\lambda L) = 0 \quad (4.24)$$

Como não podemos ter $A_2 = 0$, pois isso nos levaria a solução trivial $X(x) = 0$, necessariamente deve ser satisfeita a condição:

$$\lambda L = n\pi. \quad (4.25)$$

Por razões inteiramente análogas, chega-se à conclusão de que:

$$C(x, 0, t) = 0 \Leftrightarrow X(x)Y(0)T(t) = 0 \quad \forall x, t \Leftrightarrow Y(0) = 0 \quad (4.26)$$

ou equivalentemente:

$$Y(0) = B_1 \cos(\mu 0) + B_2 \operatorname{sen}(\mu 0) = 0 \Leftrightarrow B_1 = 0 \quad (4.27)$$

de onde segue a razão $B_2 \neq 0$. Logo:

$$B_2 \operatorname{sen}(\mu l) = 0 \Leftrightarrow \mu l = m\pi. \quad (4.28)$$

Desse modo:

$$\lambda = \frac{n\pi}{L} \text{ e } \mu = \frac{m\pi}{l}. \quad (4.29)$$

Isso significa que as constantes de separação γ e ρ satisfazem as relações:

$$\gamma = -\lambda^2 = -\frac{n^2\pi^2}{L^2} \text{ e } \rho = -\left(\frac{n^2\pi^2}{L^2} + \frac{m^2\pi^2}{l^2}\right). \quad (4.30)$$

Dessa forma para cada par de inteiros n e m tem-se:

$$A_{nm}(x, y, t) = X_n(x)Y_m(y)T_{nm}(t) \quad (4.31)$$

como solução da EDP com condições de fronteira homogêneas. Mediante o Princípio de Superposição a solução do problema é a série:

$$C(x, y, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\varepsilon \left[\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{l}\right)^2 \right] t} \cdot A_{nm} \cdot \operatorname{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \operatorname{sen} \frac{m\pi}{l} y. \quad (4.32)$$

Para que seja satisfeita a condição inicial (4.3), deve-se determinar os coeficientes A_{nm} de modo que:

$$f(x, y) = C(x, y, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right) \operatorname{sen} \left(\frac{m\pi y}{l} \right) \quad (4.33)$$

que de acordo com a ortogonalidade das funções envolvidas fornecerá os coeficientes A_{nm} como:

$$A_{nm} = \frac{4}{L \cdot l} \int_0^L \int_0^l f(x, y) \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y \, dy \, dx . \quad (4.34)$$

Porém, o problema em estudo possui condições de fronteira não homogêneas, desta forma, assim como no modelo unidimensional, deve ser reduzido ao caso apresentado com condições de contorno homogêneas.

4.3.2 Condição de Contorno Não Homogênea

Nessa seção resolveremos o problema:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \quad (4.35)$$

no retângulo:

$$\Omega := \{(x, y) \in \mathfrak{R}^2; 0 < x < L \text{ e } 0 < y < l\} \quad (4.36)$$

com condições de fronteira:

$$\bullet \quad C(0, y, t) = A(y, t), \text{ para } t > 0 \quad (4.37)$$

$$\bullet \quad C(L, y, t) = B(y, t), \text{ para } t > 0 \quad (4.38)$$

$$\bullet \quad C(x, 0, t) = D(x, t), \text{ para } t > 0 \quad (4.39)$$

$$\bullet \quad C(x, l, t) = E(x, t), \text{ para } t > 0 \quad (4.40)$$

e com condição inicial:

$$\bullet \quad C(x, y, 0) = f(y, t). \quad (4.41)$$

Supondo que $\psi(x, y, t)$ seja uma função que satisfaça as condições de fronteira do problema acima, isto é:

$$\bullet \quad \psi(0, y, t) = A(y, t), \text{ para } t > 0 \quad (4.42)$$

- $\psi(L, y, t) = B(y, t)$, para $t > 0$ (4.43)

- $\psi(x, 0, t) = D(x, t)$, para $t > 0$ (4.44)

- $\psi(x, l, t) = E(x, t)$, para $t > 0$ (4.45)

A partir disso defini-se a função $w(x, y, t)$ onde:

$$w(x, y, t) = C(x, y, t) - \psi(x, y, t). \quad (4.46)$$

Sujeita às seguintes condições de contorno:

- $w(0, y, t) = C(0, y, t) - \psi(0, y, t) = A(y, t) - A(y, t) = 0$ (4.47)

- $w(L, y, t) = C(L, y, t) - \psi(L, y, t) = B(y, t) - B(y, t) = 0$ (4.48)

- $w(x, 0, t) = C(x, 0, t) - \psi(x, 0, t) = D(x, t) - D(x, t) = 0$ (4.49)

- $w(x, l, t) = C(x, l, t) - \psi(x, l, t) = E(x, t) - E(x, t) = 0$ (4.50)

e condição inicial:

- $w(x, y, 0) = C(x, y, 0) - \psi(x, y, 0) = f(x, y) - \psi(x, y, 0)$ (4.51)

e as seguintes propriedades:

$$\varepsilon \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) = \varepsilon \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) - \varepsilon \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) \quad (4.52)$$

e

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial t} - \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (4.53)$$

de onde decorre que:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \varepsilon \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) + \underbrace{\varepsilon \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right)}_{g(x, y, t)} - \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (4.54)$$

Quando a própria função $\psi(x, y, t)$ é também solução da equação diferencial parcial (4.35) sujeita a uma condição inicial:

$$\psi(x, y, 0) = F(x, y). \quad (4.55)$$

Então $g(x, y, t) = 0$ e $w(x, y, t)$ é a solução do problema bidimensional homogêneo fundamental. Isto é,

$$w(x, y, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\varepsilon \left[\left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{m\pi}{l} \right)^2 \right] t} \cdot A_{nm} \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y \quad (4.56)$$

sendo os coeficientes A_{nm} dados pelas integrais:

$$A_{nm} = \frac{4}{L \cdot l} \int_0^L \int_0^l [f(x, y) - F(x, y)] \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y \, dy \, dx. \quad (4.57)$$

Portanto, conhecendo a função $w(x, y, t)$ e assumindo ser conhecida a função $\psi(x, y, t)$, a função

$$C(x, y, t) = \psi(x, y, t) + w(x, y, t) \quad (4.58)$$

será a solução procurada para o problema (4.35), sujeito às condições de contorno (4.37), (4.38), (4.39) e (4.40), e à condição inicial (4.41).

4.3.2.1 Caso 1

Vejamos um problema formulado para simular a difusão de determinado poluente para a situação em que as condições de contorno variam linearmente.

Vamos considerar uma nova função $C(x, y, t)$ cujas condições de contorno são não homogêneas:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \quad (4.59)$$

- $C(0, y, t) = a + \frac{(c-a)}{l} y$, para $t > 0$ (4.60)

- $C(L, y, t) = b + \frac{(d-b)}{l} y$, para $t > 0$ (4.61)

- $C(x, 0, t) = a + \frac{(b-a)}{L} x$, para $t > 0$ (4.62)

- $C(x, l, t) = c + \frac{(d-c)}{L} x$, para $t > 0$ (4.63)

sujeita à seguinte condição inicial:

- $C(x, y, 0) = F(x, y)$. (4.64)

Seja $\psi(x, y)$, independente do tempo definida por:

$$\psi(x, y) = a + \frac{(b-a)}{L} x + \frac{y}{l} \left[\frac{(d-c) - (b-a)}{L} x + c - a \right]. \quad (4.65)$$

Percebe-se que por ser independente de t , $\frac{\partial \psi}{\partial t} = 0$. Além disso, claramente temos:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0 \text{ e } \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0 \quad (4.66)$$

e portanto:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0. \quad (4.67)$$

Além disso:

- $\psi(x, 0) = a + \frac{(b-a)}{L} x = C(x, 0, t)$ (4.68)

- $\psi(x, l) = c + \frac{(d-c)}{L} x = C(x, l, t)$ (4.69)

- $\psi(0, y) = a + \frac{(c-a)}{l} y = C(0, y, t)$ (4.70)

- $\psi(L, y) = b + \frac{(d-b)}{l} y = C(L, y, t)$ (4.71)

Ou seja, são satisfeitas as mesmas condições de contorno do problema formulado para $C(x, y, t)$. Assim:

$$w(x, y, t) = C(x, y, t) - \psi(x, y, t) \quad (4.72)$$

satisfaz o Problema Homogêneo Fundamental. Portanto:

$$C(x, y, t) = a + \frac{(b-a)}{L} x + \frac{y}{l} \left[\frac{(d-c) - (b-a)}{L} x + c - a \right] + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm} \cdot e^{-\varepsilon \left[\left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{m\pi}{l} \right)^2 \right] t} \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y \quad (4.73)$$

com

$$A_{nm} = \frac{4}{L \cdot l} \int_0^L \int_0^l \left[f(x, y) - \left\{ a + \frac{(b-a)}{L} x + \frac{y}{l} \left[\frac{(d-c) - (b-a)}{L} x + c - a \right] \right\} \right] \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y \, dy \, dx \quad (4.74)$$

será a solução procurada para este problema bidimensional.

4.3.3 Equação Bidimensional – Difusão Pura Não Homogênea e Contorno Homogênea

Chamaremos de problema de difusão pura não homogênea e condições de contorno homogêneas à EDP:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \varepsilon \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) + g(x, y, t) \quad (4.75)$$

sujeito às condições de contorno homogêneas:

- $w(0, y, t) = 0$, para $t > 0$ (4.76)

- $w(L, y, t) = 0$, para $t > 0$ (4.77)

- $w(x, 0, t) = 0$, para $t > 0$ (4.78)

- $w(x, l, t) = 0$, para $t > 0$ (4.79)

e à condição inicial:

- $w(x, y, 0) = f(x, y)$. (4.80)

Se não houvesse a presença do termo $g(x, y, t)$ na equação diferencial, pela seção anterior saberíamos que a solução seria:

$$w(x, y, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\varepsilon \left[\left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{m\pi}{l} \right)^2 \right] t} \cdot A_{nm} \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y. \quad (4.81)$$

Isso conduz a pensar na solução do problema como tendo a forma:

$$w(x, y, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} w_{nm}(t) \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y. \quad (4.82)$$

Isso leva naturalmente a pensar na expansão em série:

$$g(x, y, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} g_{nm}(t) \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y. \quad (4.83)$$

Admitindo-se para $w(x, y, t)$ as condições segundo as quais é permitida a derivação termo-a-termo da série que a define e que essa série de derivadas converge para a respectiva derivada da função $w(x, y, t)$, obtém-se:

$$\frac{\partial w}{\partial x} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{n\pi}{L} w_{nm}(t) \cdot \cos \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y \quad (4.84)$$

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = - \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 w_{nm}(t) \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y \quad (4.85)$$

$$\frac{\partial w}{\partial y} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{m\pi}{l} w_{nm}(t) \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \cos \frac{m\pi}{l} y \quad (4.86)$$

$$\frac{\partial^2 w}{\partial y^2} = - \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{m\pi}{l} \right)^2 w_{nm}(t) \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y \quad (4.87)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} w'_{nm}(t) \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y. \quad (4.88)$$

Dessa forma:

$$\varepsilon \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) = -\varepsilon \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{n^2 \pi^2}{L^2} + \frac{m^2 \pi^2}{l^2} \right) \cdot w_{nm}(t) \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y \quad (4.89)$$

e pela ortogonalidade das funções:

$$\text{sen} \frac{n\pi}{L} x \text{ e } \text{sen} \frac{m\pi}{l} y \quad (4.90)$$

obtem-se, para cada n e m :

$$-\varepsilon \left(\frac{n^2 \pi^2}{L^2} + \frac{m^2 \pi^2}{l^2} \right) \cdot w_{nm}(t) \cdot g_{nm}(t) = w'_{nm}(t) \quad (4.91)$$

a qual é uma equação diferencial ordinária linear. Uma vez que para $t = 0$ tem-se:

$$w(x, y, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} w_{nm}(0) \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y \quad (4.92)$$

vale a condição inicial:

$$w_{nm}(0) = \frac{4}{L \cdot l} \int_0^L \int_0^l F(x, y) \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y \, dy \, dx \quad (4.93)$$

conforme já se sabe da expansão de $F(x, y)$ em Série de Fourier.

Isso dá o apanhado completo sobre o método de abordagem ao problema de difusão pura não homogênea, mas com condições de contorno homogêneas.

4.3.3.1 Caso 2

Aqui formulamos um problema que pretende simular a difusão de determinado produto poluente em um canal muito longo, mas cuja largura não pode ser desprezada. Há uma fonte poluidora localizada no início do rio, que joga para o leito do rio produtos poluentes com uma concentração $C(x, y, t)$. A concentração varia parabolicamente com a posição e o produto é periodicamente lançado no leito do rio com 16 horas entre uma emissão e outra. Nessas condições podemos formular o problema da seguinte maneira:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \quad (4.94)$$

sujeito à:

- $C(0, y, t) = \phi(t) \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l} \right)$ (4.95)

- $C(L, y, t) = 0$ (4.96)

- $C(x, 0, t) = 0$ (4.97)

- $C(x, l, t) = 0$ (4.98)

e condição inicial:

- $C(x, y, 0) = 0$ (4.99)

na qual:

$$\phi(t) = 0 \text{ para } 0 \leq t < 28800; \quad (4.100)$$

$$\phi(t) = -\text{sen} \left(\frac{\pi t}{28800} \right) \text{ para } 28800 \leq t < 57600; \quad (4.101)$$

$$\phi(t) = 0 \text{ para } 57600 \leq t < 86400. \quad (4.102)$$

Conforme a seção anterior, definindo:

$$\psi(x, y, t) = -\text{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right). \quad (4.103)$$

tem-se:

$$\psi_x = \text{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l}\right) \frac{1}{L} \quad (4.104)$$

$$\psi_{xx} = 0 \quad (4.105)$$

$$\psi_y = -\text{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right) \left(\frac{1}{l} - \frac{2y}{l^2}\right) \quad (4.106)$$

$$\psi_{yy} = \frac{2}{l^2} \text{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right) \quad (4.107)$$

$$\psi_t = -\frac{\pi}{28800} \cos\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right) \quad (4.108)$$

Façamos:

$$g(x, y, t) = \varepsilon \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (4.109)$$

Explicitando-as temos:

$$g(x, y, t) = \frac{2\varepsilon}{l^2} \text{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right) + \frac{\pi}{28800} \cos\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right) \quad (4.110)$$

Portanto, pelas considerações da seção anterior, devemos resolver a equação diferencial parcial:

$$\varepsilon \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) + g(x, y, t) = \frac{\partial w}{\partial t} \quad (4.111)$$

sujeito à:

- $w(0, y, t) = 0$ (4.112)

- $w(L, y, t) = 0$ (4.113)

- $w(x, 0, t) = 0$ (4.114)

- $w(x, l, t) = 0$ (4.115)

e condição inicial:

$$w(x, y, 0) = 0. \quad (4.116)$$

Para resolvê-la deve-se expressar a função $g(x, y, t)$ como uma Série Dupla de Fourier, isto é:

$$\begin{aligned} 2 \frac{\varepsilon}{l^2} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right) + \frac{\pi}{28800} \cos\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right) = \\ = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} g_{nm}(t) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \operatorname{sen}\left(\frac{m\pi}{l} y\right) \end{aligned} \quad (4.117)$$

Utilizando o método de projeções ortogonais, que permite obter cada um dos coeficientes da expansão, multiplicaremos a equação (4.117) por $\operatorname{sen}\left(\frac{i\pi x}{L}\right)$, com i fixo de ambos os lados e teremos:

$$\begin{aligned} \left[2 \frac{\varepsilon}{l^2} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right) + \frac{\pi}{28800} \cos\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right) \right] \operatorname{sen}\left(\frac{i\pi x}{L}\right) = \\ = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} g_{nm}(t) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \operatorname{sen}\left(\frac{m\pi}{l} y\right) \operatorname{sen}\left(\frac{i\pi x}{L}\right) \end{aligned} \quad (4.118)$$

Integra-se a equação (4.118) na variável x de 0 até L , no lado esquerdo da equação resultará:

$$\begin{aligned}
& \int_0^L g(x, y, t) \operatorname{sen}\left(\frac{i\pi x}{L}\right) dx = \\
& = \left[\frac{2\varepsilon}{l^2} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) + \frac{\pi}{28800} \cos\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l}\right) \right] \underbrace{\int_0^L \left(1 - \frac{x}{L}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{i\pi x}{L}\right) dx}_{\frac{L}{i\pi}}
\end{aligned} \tag{4.119}$$

$$\begin{aligned}
& \int_0^L g(x, y, t) \operatorname{sen}\left(\frac{i\pi x}{L}\right) dx = \\
& = \frac{L}{i\pi} \left[\frac{2\varepsilon}{l^2} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) + \frac{\pi}{28800} \cos\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l}\right) \right].
\end{aligned} \tag{4.120}$$

A mesma operação de integração no intervalo $0 \leq x \leq L$, no lado direito da equação (4.118) resultará:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left[\sum_{m=1}^{\infty} g_{nm}(t) \operatorname{sen}\left(\frac{m\pi y}{l}\right) \right] \underbrace{\int_0^L \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{i\pi x}{L}\right) dx}_{\frac{L}{2}}. \tag{4.121}$$

Analisando a integral presente na equação (4.121), percebe-se que ela se anulará toda vez que $n \neq i$, graças a ortogonalidade das funções

$$\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \text{ e } \operatorname{sen}\left(\frac{i\pi x}{L}\right). \tag{4.122}$$

Uma vez que n é o índice da série de senos na variável x e i foi fixado, em algumas oportunidades teremos $n = i$ e, portanto o resultado da integração será: $\frac{L}{2}$.

Juntando os resultados das equações (4.118), (4.120) e (4.121) resulta:

$$\begin{aligned} \frac{L}{i\pi} \left[\frac{2\mathcal{E}}{l^2} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) + \frac{\pi}{28800} \cos\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l}\right) \right] = \\ = \frac{L}{2} \sum_{m=1}^{\infty} g_{im}(t) \operatorname{sen}\left(\frac{m\pi y}{l}\right). \end{aligned} \quad (4.123)$$

Relembrando o processo de projeção ortogonal segundo cada componente senoidal da Série de Fourier, será realizado esse processo novamente. Para isso, agora multiplicaremos a equação (4.123) por $\operatorname{sen}\left(\frac{j\pi y}{l}\right)$ e integraremos na variável y de 0 até l .

No lado esquerdo da equação (4.123) resultará:

$$\begin{aligned} \frac{2\mathcal{E}}{i\pi^2} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \underbrace{\int_0^l \operatorname{sen}\left(\frac{j\pi y}{l}\right) dy}_{\frac{l}{j\pi} [1 - (-1)^j]} + \frac{1}{28800i} \cos\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \underbrace{\int_0^l \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{j\pi y}{l}\right) dy}_{\frac{2l^3}{j^3\pi^3} [1 - (-1)^j]} \\ (4.124) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{2\mathcal{E}}{ij\pi^2 l} [1 - (-1)^j] \operatorname{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) + \frac{l^3}{14400ij^3\pi^3} [1 - (-1)^j] \cos\left(\frac{\pi t}{28800}\right). \\ (4.125) \end{aligned}$$

No lado direito da equação (4.123) resultará:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} g_{im}(t) \underbrace{\int_0^l \operatorname{sen}\left(\frac{m\pi y}{l}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{j\pi y}{l}\right) dy}_{\substack{0 \text{ se } m \neq j \text{ e } \\ \frac{l}{2} \text{ se } m=j}} \\ (4.126) \end{aligned}$$

$$\frac{l}{4} g_{ij}(t) \quad (4.127)$$

Juntando os resultados das equações (4.123), (4.25) e (4.127) tem-se:

$$\begin{aligned} [1 - (-1)^j] \left[\frac{2\mathcal{E}}{ij\pi^2 l} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) + \frac{l^3}{14400ij^3\pi^3} \cos\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \right] = \frac{l}{4} g_{ij}(t) \\ (4.128) \end{aligned}$$

ou ainda mais explicitamente:

$$g_{ij}(t) = [1 - (-1)^j] \left[\frac{8\varepsilon}{ij\pi^2 l^2} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) + \frac{l^2}{3600ij^3 \pi^2} \cos\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \right]. \quad (4.129)$$

Dessa forma, para determinarmos a solução $w(x, y, t)$ em forma de Série de Fourier deverá ter seus coeficientes, dependentes apenas de t , satisfazendo a EDO:

$$\begin{aligned} w'_{ij}(t) + \varepsilon \left(\frac{i^2}{L^2} + \frac{j^2}{l^2} \right) \pi^2 w_{ij}(t) &= \\ &= [1 - (-1)^j] \left[\frac{8\varepsilon}{ij\pi^2 l^2} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi t}{28800}\right) + \frac{l^2}{3600ij^3 \pi^2} \cos\left(\frac{\pi t}{28800}\right) \right]. \end{aligned} \quad (4.130)$$

Para resolvê-la, multiplicamos pelo fator integrante:

$$e^{\varepsilon \left(\frac{i^2}{L^2} + \frac{j^2}{l^2} \right) \pi^2 \tau} \quad (4.131)$$

e integramos desde $\tau = 0$ e $\tau = t$, como segue:

$$\begin{aligned} e^{\varepsilon \left(\frac{i^2}{L^2} + \frac{j^2}{l^2} \right) \pi^2 \tau} w'_{ij}(\tau) + \varepsilon \left(\frac{i^2}{L^2} + \frac{j^2}{l^2} \right) \pi^2 e^{\varepsilon \left(\frac{i^2}{L^2} + \frac{j^2}{l^2} \right) \pi^2 \tau} w_{ij}(\tau) &= \\ &= [1 - (-1)^j] e^{\varepsilon \left(\frac{i^2}{L^2} + \frac{j^2}{l^2} \right) \pi^2 \tau} \left[\frac{8\varepsilon}{ij\pi^2 l^2} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi \tau}{28800}\right) + \frac{l^2}{3600ij^3 \pi^2} \cos\left(\frac{\pi \tau}{28800}\right) \right] \end{aligned} \quad (4.132)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \left[e^{\varepsilon \left(\frac{i^2}{L^2} + \frac{j^2}{l^2} \right) \pi^2 \tau} w_{ij}(\tau) \right] &= \frac{8\varepsilon}{ij\pi^2 l^2} [1 - (-1)^j] e^{\varepsilon \left(\frac{i^2}{L^2} + \frac{j^2}{l^2} \right) \pi^2 \tau} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi \tau}{28800}\right) + \\ &+ \frac{l^2}{3600ij^3 \pi^2} [1 - (-1)^j] e^{\varepsilon \left(\frac{i^2}{L^2} + \frac{j^2}{l^2} \right) \pi^2 \tau} \cos\left(\frac{\pi \tau}{28800}\right) \end{aligned} \quad (4.133)$$

$$\begin{aligned}
\int_0^t \frac{d}{d\tau} \left[e^{\varepsilon \left(\frac{i^2}{L^2} + \frac{j^2}{l^2} \right) \pi^2 \tau} w_{ij}(\tau) \right] d\tau &= + \frac{8\varepsilon}{ij\pi^2 l^2} [1 - (-1)^j] \int_0^t e^{\varepsilon \left(\frac{i^2}{L^2} + \frac{j^2}{l^2} \right) \pi^2 \tau} \operatorname{sen} \left(\frac{\pi \tau}{28800} \right) d\tau \\
&+ \frac{l^2}{3600ij^3 \pi^2} [1 - (-1)^j] \int_0^t e^{\varepsilon \left(\frac{i^2}{L^2} + \frac{j^2}{l^2} \right) \pi^2 \tau} \operatorname{cos} \left(\frac{\pi \tau}{28800} \right) d\tau
\end{aligned} \tag{4.134}$$

Designando, para facilidade de escrita:

$$\beta := \varepsilon \left(\frac{i^2}{L^2} + \frac{j^2}{l^2} \right) \pi^2 \text{ e } \theta := \frac{\pi}{28800}. \tag{4.135}$$

Então:

$$\begin{aligned}
\int_0^t \frac{d}{d\tau} [e^{\beta \tau} w_{ij}(\tau)] d\tau &= \frac{8\varepsilon}{ij\pi^2 l^2} [1 - (-1)^j] \int_0^t e^{\beta \tau} \operatorname{sen}(\theta \tau) d\tau + \\
&+ \frac{l^2}{3600ij^3 \pi^2} [1 - (-1)^j] \int_0^t e^{\beta \tau} \operatorname{cos}(\theta \tau) d\tau.
\end{aligned} \tag{4.136}$$

As integrais são elementares e depois de resolvidas resultarão em:

$$\begin{aligned}
e^{\beta \tau} w_{ij}(\tau) \Big|_{\tau=0}^t &= e^{\beta t} w_{ij}(t) - \underbrace{w_{ij}(0)}_0 = \\
&= [1 - (-1)^j] \left\{ \frac{8\varepsilon}{ij\pi^2 l^2} \left[\frac{\beta e^{\beta t} \operatorname{sen}(\theta t) - \theta e^{\beta t} \operatorname{cos}(\theta t) + \theta}{\beta^2 + \theta^2} \right] + \right. \\
&\left. + \frac{l^2}{3600ij^3 \pi^3} \left[\frac{\theta e^{\beta t} \operatorname{sen}(\theta t) + \beta e^{\beta t} \operatorname{cos}(\theta t) - \beta}{\beta^2 + \theta^2} \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{4.137}$$

Portanto tem-se:

$$\begin{aligned}
w_{ij}(t) &= [1 - (-1)^j] \left\{ \frac{8\varepsilon}{ij\pi^2 l^2} \left[\frac{\beta \operatorname{sen}(\theta t) - \theta \operatorname{cos}(\theta t) + \theta e^{-\beta t}}{\beta^2 + \theta^2} \right] + \right. \\
&\left. + \frac{l^2}{3600ij^3 \pi^3} \left[\frac{\theta \operatorname{sen}(\theta t) + \beta \operatorname{cos}(\theta t) - \beta e^{-\beta t}}{\beta^2 + \theta^2} \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{4.138}$$

Conforme exposto nas colocações das seções anteriores, a solução $C(x, y, t)$ do problema:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \quad (4.139)$$

sujeito à:

- $C(0, y, t) = \phi(t) \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l} \right) \quad (4.140)$

- $C(L, y, t) = 0 \quad (4.141)$

- $C(x, 0, t) = 0 \quad (4.142)$

- $C(x, l, t) = 0 \quad (4.143)$

e condição inicial:

- $C(x, y, 0) = 0 \quad (4.144)$

é a função:

$$C(x, y, t) = w(x, y, t) + \psi(x, y, t) \quad (4.145)$$

onde $w(x, y, t)$ é uma dupla Série de Fourier de senos cujos coeficientes são os $w_{ij}(t)$ e $\psi(x, y, t)$ é a função auxiliar já definida anteriormente.

4.4 Equação Bidimensional – Difusão-Advecção

Nessa seção mostraremos que o estudo do fenômeno com presença de advecção pode ser reduzido ao estudo do modelo de difusão pura, por uma mudança adequada de coordenadas, desde que sejam constantes as componentes de velocidade e de dispersão no modelo advectivo-difusivo.

A equação que descreve o modelo bidimensional de difusão-advecção em regime transiente é dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \omega \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \lambda C. \quad (4.146)$$

sujeita às condições:

$$\bullet \quad C(x, y, 0) = f(y, t) \quad (4.147)$$

$$\bullet \quad C(0, y, t) = A(y, t), \text{ para } t > 0 \quad (4.148)$$

$$\bullet \quad C(L, y, t) = B(y, t), \text{ para } t > 0 \quad (4.149)$$

$$\bullet \quad C(x, 0, t) = D(x, t), \text{ para } t > 0 \quad (4.150)$$

$$\bullet \quad C(x, l, t) = E(x, t), \text{ para } t > 0 \quad (4.151)$$

Como no modelo unidimensional precisamos reduzir este problema a um problema de difusão pura mediante uma escolha adequada de variáveis e com condições iniciais e de contorno adequadas.

Portanto considere que

$$\frac{\partial C}{\partial t} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + M \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + N \frac{\partial C}{\partial x} + P \frac{\partial C}{\partial y} + QC \quad (4.152)$$

onde K , M , N , P e Q são constantes.

Introduzimos uma nova função $\varphi(x, y, t)$ relacionada com a função $C(x, y, t)$ pela equação:

$$C(x, y, t) = e^{\mu x + \gamma y + \theta t} \cdot \varphi(x, y, t) \quad (4.153)$$

na qual μ , γ e θ são constantes a serem determinadas. Substituindo-se (4.153) em (4.152) obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = & K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + M \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + (2K\lambda + N) \frac{\partial C}{\partial x} + (2M\mu + P) \frac{\partial C}{\partial y} + \\ & + (K\lambda^2 + M\mu^2 + N\lambda + P\mu + Q - \theta)C \end{aligned} \quad (4.154)$$

Esta equação, por sua vez, se reduz a $\frac{\partial \varphi}{\partial t} = K \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + M \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}$, pela escolha adequada

de μ , γ e θ , a saber:

$$\mu = \frac{-N}{2K}, \quad \gamma = \frac{-P}{2M} \quad \text{e} \quad \theta = Q - \frac{N^2}{4K} - \frac{P^2}{4M}. \quad (4.155)$$

Portanto este problema pode ser reduzido a um problema de difusão pura considerando:

$$\mu = \frac{u}{2\varepsilon}, \quad \gamma = \frac{v}{2\omega} \quad \text{e} \quad \theta = -\lambda - \frac{u^2}{4\varepsilon} - \frac{v^2}{4\omega}. \quad (4.156)$$

Quanto às condições de contorno (4.148), (4.149), (4.150) e (4.151), elas serão satisfeitas por $C(x, y, t) = e^{\mu x + \gamma y + \theta t} \cdot \varphi(x, y, t)$ se e somente se:

$$\bullet \quad C(0, y, t) = e^{\gamma y + \theta t} A(x, y) \quad (4.157)$$

$$\bullet \quad C(L, y, t) = e^{\mu L + \gamma y + \theta t} B(x, y) \quad (4.158)$$

$$\bullet \quad C(x, 0, t) = e^{\mu x + \theta t} D(x, y) \quad (4.159)$$

$$\bullet \quad C(x, l, t) = e^{\mu x + \gamma l + \theta t} E(x, y) \quad (4.160)$$

Novamente deve-se ressaltar que o problema, com considerações descritas acima, foi transformado num problema matematicamente mais simples de tratar, semelhante ao problema de difusão pura. Porém as condições de fronteira não são homogêneas e ainda dependentes do tempo, embora seja homogênea a condição inicial.

CAPÍTULO V

RESULTADOS E ANÁLISES

Uma vez obtidos os modelos propostos, o presente capítulo tem como objetivo apresentar resultados gerados através da computação simbólica. As simulações foram realizadas no software *MatLab*. Posteriormente apresentaremos algumas comparações com resultados existentes na literatura.

5.1 Computação Simbólica

De acordo com COTTA ET AL. (1997), a ciência da computação foi fortemente marcada com o desenvolvimento da computação simbólica. A grande vantagem do uso da computação simbólica é que a mesma utiliza símbolos para representar objetos matemáticos e as suas computações são exatas de acordo com as regras algébricas. Em outras palavras, esta avaliação automática de expressões simbólico-analíticas é de grande importância, pois fornece uma imensa redução de esforço dedutivo humano. Esta redução torna-se possível através da linguagem simbólica presente no software *MatLab* (MOLER, 2004).

5.2 Resultados do Modelo Unidimensional

5.2.1 Caso 1 – Difusão Pura

Vejamos um problema formulado para simular a difusão de um determinado poluente para uma situação em que as condições de contorno são não homogêneas e com características constantes.

Dada $C(x, t)$ temos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (5.1)$$

- $C(0,t) = h_0(t) = B_0$ (constante), em $t > 0$ (5.2)

- $C(L,t) = h_1(t) = B_1$ (constante), em $t > 0$ (5.3)

- $C(x,0) = f(x)$, para $0 < x < L$ (5.4)

De acordo com as considerações do capítulo III, a solução do problema, com difusão pura, é dada por:

$$C(x,t) = \underbrace{B_0 + \frac{(B_1 - B_0)}{L}x}_{v(x,t)} + \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{\frac{-n^2\pi^2\epsilon t}{L^2}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}}_{w(x,t)} \quad (5.5)$$

na qual:

$$A_n = \frac{2}{L} \int_0^L \left[f(x) - B_0 - \frac{(B_1 - B_0)}{L}x \right] \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L} dx. \quad (5.6)$$

Esse primeiro caso teste consiste numa descarga de poluente no início de um rio. Esta descarga é considerada contínua e constante. Considera-se ainda que no final deste rio não haja mais concentração de poluente. O coeficiente de difusividade na direção longitudinal é considerado constante e os dados de entrada estão definidos na tabela 1:

Dados de Entrada

B_0 (m/s)	1
B_1 (m/s)	0
L (m)	10
ϵ (m/s)	1

Tabela 1: Caso 1 – difusão pura

O gráfico abaixo ilustra os resultados obtidos para a concentração do poluente em instantes de tempo arbitrários de $t=1,0$ s e $t=10,0$ s.

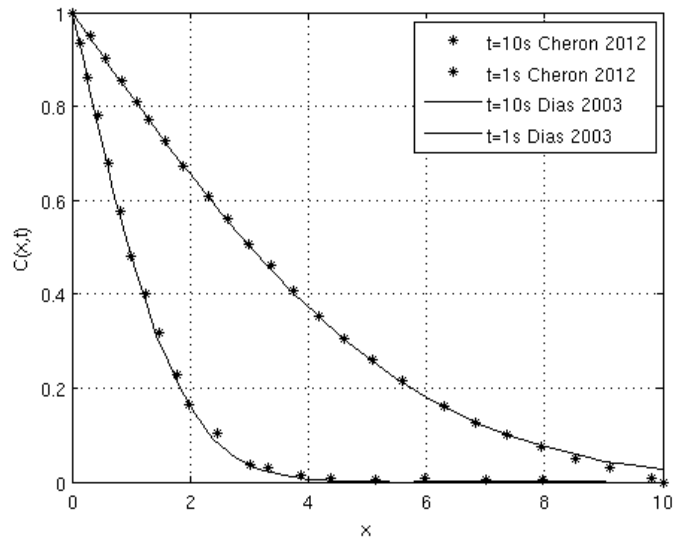


Figura 5.1: Gráfico de comparação de resultados para o modelo unidimensional - difusão pura

Verifica-se que há uma boa concordância com os resultados gráficos encontrados por Dias (2003), como mostra a figura 5.1.

5.2.2 Caso 1 – Advecção-Difusão

Vejam os o mesmo problema acima, mas agora com o termo da advecção.

Dada $C(x,t)$ temos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \lambda C \quad (5.7)$$

- $C(0,t) = h_0(t) = B_0$ (constante), em $t > 0$ (5.8)

- $C(L,t) = h_1(t) = B_1$ (constante), em $t > 0$ (5.9)

- $C(x,0) = f(x)$, para $0 < x < L$ (5.10)

De acordo com as considerações do capítulo III, a solução do problema, com difusão pura, é dada por:

$$C(x,t) = e^{\mu x + \gamma t} \left\{ \underbrace{\left[B_0 + \frac{(B_1 - B_0)}{L} x \right]}_{v(x,t)} e^{-\gamma t} + \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} w_n(t) \text{sen} \frac{n\pi x}{L}}_{w(x,t)} \right\} \quad (5.11)$$

na qual:

$$w_n(t) = \frac{2\gamma e^{-\frac{n^2\pi^2\varepsilon t}{L^2}}}{n\pi \left(\gamma + \frac{n^2\pi^2\varepsilon}{L^2} \right)} \left[e^{\left(\gamma + \frac{n^2\pi^2\varepsilon}{L^2} \right) t} - 1 \right]. \quad (5.12)$$

Para o caso do problema com advecção temos as mesmas características do problema de difusão pura, sendo acrescentado para esse caso o perfil de velocidade. Os dados de entrada estão definidos na tabela 2:

Dados de Entrada

B_0 (m/s)	1
B_1 (m/s)	0
L (m)	10
ε (m/s)	1
u (m/s)	1

Tabela 2: Caso 1 – advecção-difusão

O gráfico a seguir ilustra os resultados obtidos para a concentração do poluente em instante de tempo arbitrário de $t=10$ s.

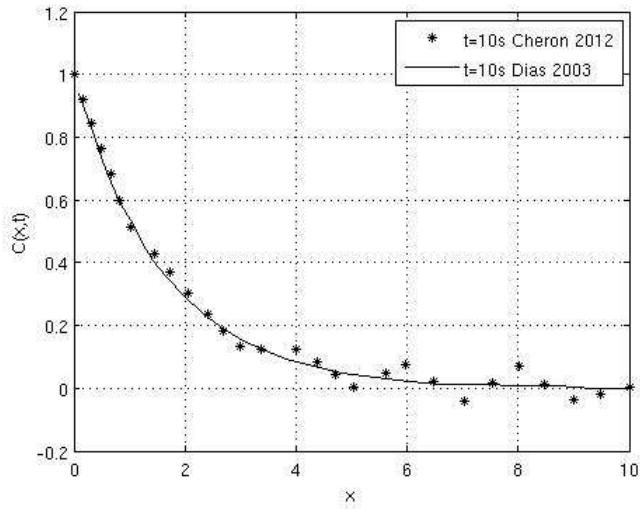


Figura 5.2: Gráfico de comparação de resultados para o modelo unidimensional - advecção-difusão

Verifica-se que há uma boa concordância com os resultados gráficos encontrados por Dias (2003), como mostra a figura 5.2. A inclusão de mais termos na série atenuaria ainda mais as oscilações existentes no presente resultado.

5.2.3 Caso 2 – Difusão Pura

Agora formularemos um problema que simule novamente a dispersão de um poluente sob condições de contorno não homogêneas, porém desta vez vamos fazer com que essas condições de contorno variem linearmente com o tempo.

Dada $C(x,t)$ temos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (5.13)$$

- $C(0,t) = h_0(t) = A_0 t + B_0$, em $t > 0$ (5.14)

- $C(L,t) = h_1(t) = A_1 t + B_1$, em $t > 0$ (5.15)

- $C(x,0) = f(x)$, para $0 < x < L$ (5.16)

Mais uma vez, conforme as considerações do capítulo III, a solução para o problema acima é dada por:

$$C(x,t) = A_0t + B_0 + \frac{[(A_1t + B_1) - (A_0t + B_0)]}{L}x + \phi(x) + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cdot e^{-\frac{n^2\pi^2\epsilon t}{L^2}} \cdot \text{sen} \frac{n\pi x}{L} \quad (5.18)$$

Onde $\phi(x)$ é uma correção à função $v(x,t)$ de modo que satisfaça as condições de fronteira.

Portanto a função $\phi(x)$ é definida por:

$$\phi(x) = \frac{(A_1 - A_0)}{6\epsilon L} (x^2 - L^2)x + \frac{A_0}{2\epsilon} (x - L)x. \quad (5.19)$$

Como $C(x,0) = f(x)$ os coeficientes A_n são definidos por:

$$A_n = \frac{2}{L} \int_0^L \left[f(x) - B_0 - \frac{(B_1 - B_0)}{L}x - \phi(x) \right] \text{sen} \frac{n\pi x}{L} dx. \quad (5.20)$$

O segundo caso teste a ser analisado consiste, novamente, numa descarga de poluente no início de um rio. As condições de contorno têm comportamento linear. Considera-se ainda que no final deste rio não haja mais concentração de poluente. O coeficiente de difusividade na direção longitudinal é considerado constante e os dados de entrada estão definidos na tabela 3:

Dados de Entrada

A_0	1
A_1	0
B_0	1
B_1	0
L (m)	10
t (s)	10

Tabela 3: Caso 2 – difusão pura

Os gráficos abaixo ilustram os resultados obtidos para diferentes coeficientes de difusão em instantes de tempo arbitrários que variam de $t=0$ s até $t=10$ s.

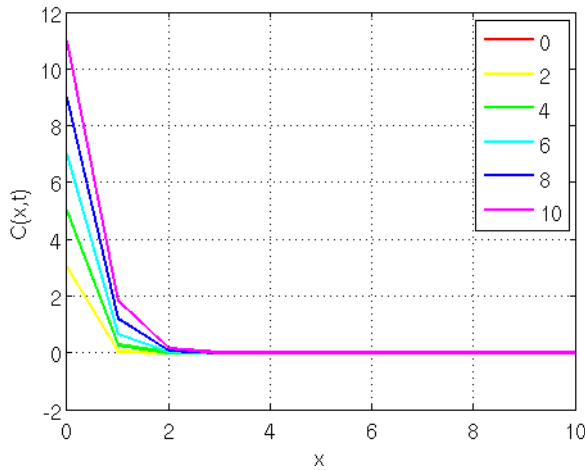


Figura 5.3: Modelo unidimensional de difusão pura para $\varepsilon = 0.05$ m/s

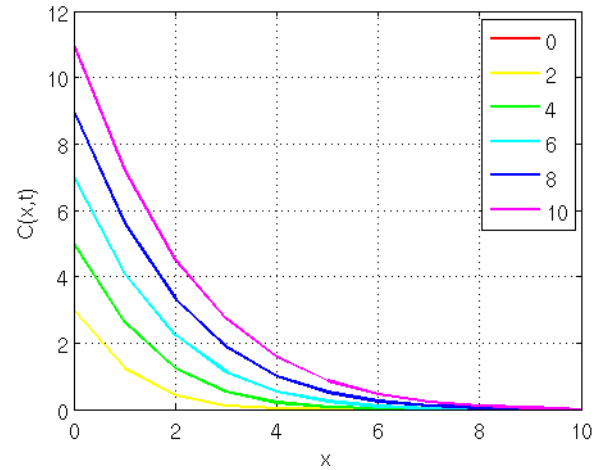


Figura 5.5: Modelo unidimensional de difusão pura para $\varepsilon = 0.7$ m/s

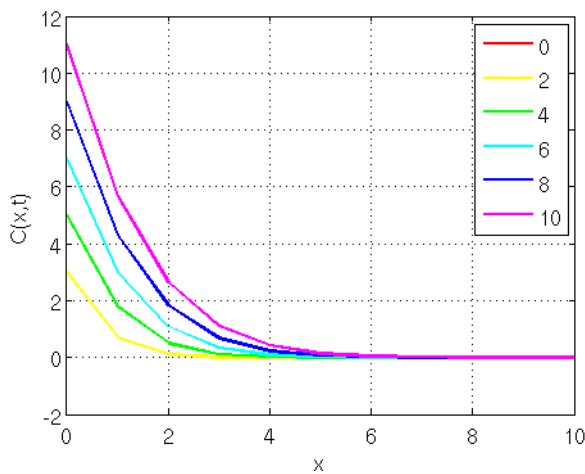


Figura 5.4: Modelo unidimensional de difusão pura para $\varepsilon = 0.3$ m/s

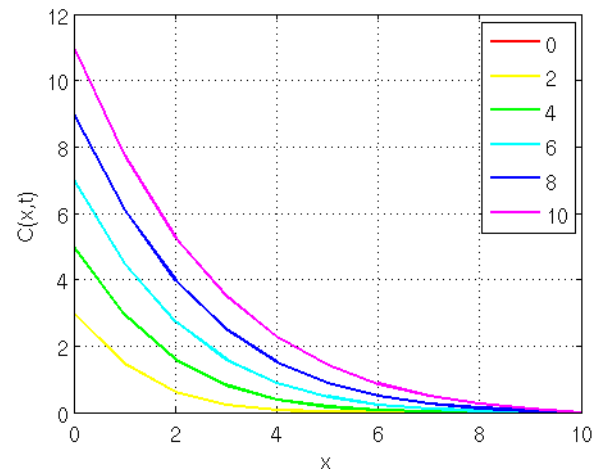


Figura 5.6: Modelo unidimensional de difusão pura para $\varepsilon = 1.0$ m/s

Com esses resultados gráficos podemos perceber que quanto maior o coeficiente de difusão maior é a difusão do poluente no meio aquático. O que corrobora a afirmação de que o coeficiente de difusividade representa a facilidade com que cada soluto em particular se move em um determinado solvente.

Considerando o comportamento da dispersão de um poluente para o coeficiente de difusividade da figura 8, podemos agora construir um problema físico com um rio de 200 m de comprimento e 5 m de largura e ainda com os seguintes dados de entrada:

Dados de Entrada

A_0	1
A_1	0
B_0	1
B_1	0
ε (m/s)	1.0
t (s)	3600

Tabela 4: Caso 2 – difusão pura

O gráfico abaixo ilustra o resultado gerado para a concentração de um poluente de acordo com os dados acima:

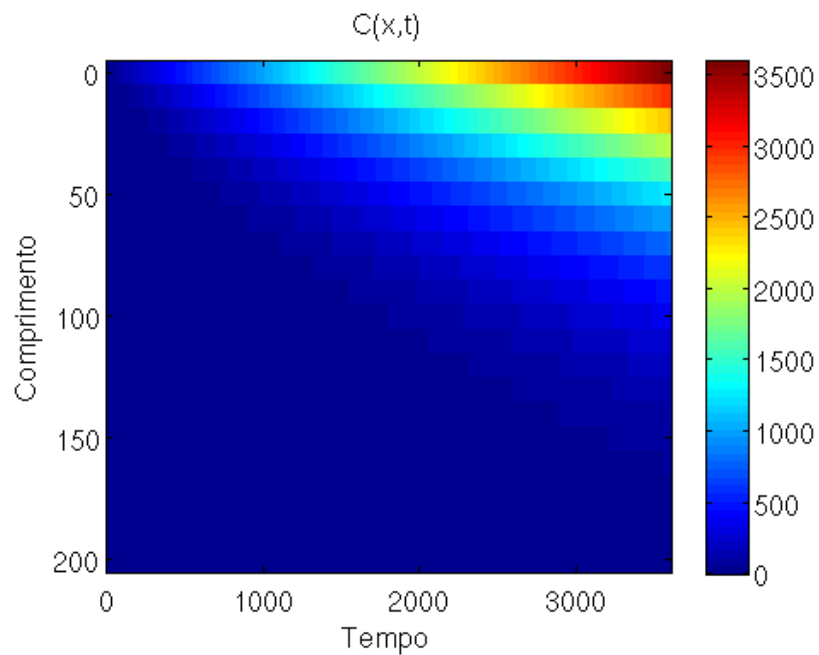


Figura 5.7: Concentração do poluente durante 1h

5.2.4 Caso 2 – Advecção-Difusão

Vejam os o mesmo problema acima, mas agora com o termo de advecção.

Dada $C(x, t)$ temos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \lambda C \quad (5.21)$$

- $C(0, t) = h_0(t) = A_0 t + B_0$, em $t > 0$ (5.22)

- $C(L, t) = h_1(t) = A_1 t + B_1$, em $t > 0$ (5.23)

- $C(x, 0) = f(x)$, para $0 < x < L$ (5.24)

De acordo com as considerações do capítulo III, a solução do problema, com difusão pura, é dada por:

$$C(x, t) = e^{\mu x + \gamma t} \left\{ \underbrace{\left[A_0 t + B_0 + \frac{[A_1 t + B_1 - (A_0 t + B_0)]}{L} x \right]}_{v(x, t)} e^{-\gamma t} + \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} w_n(t) \text{sen} \frac{n\pi x}{L}}_{w(x, t)} \right\} \quad (5.25)$$

na qual:

$$w_n(t) = \frac{-2e^{-\frac{n^2 \pi^2 \varepsilon t}{L^2}}}{n\pi} \left\{ \frac{e^{\left(\frac{n^2 \pi^2 \varepsilon}{L^2} - \gamma\right)t} [1 - \gamma(t+1) + \gamma - 1]}{\frac{n^2 \pi^2 \varepsilon}{L^2} - \gamma} + \frac{\gamma \left[e^{\left(\frac{n^2 \pi^2 \varepsilon}{L^2} - \gamma\right)t} - 1 \right]}{\left(\frac{n^2 \pi^2 \varepsilon}{L^2} - \gamma\right)^2} \right\}. \quad (5.26)$$

Novamente para o caso do problema com advecção temos as mesmas características do problema de difusão pura, sendo acrescentado para esse caso o perfil de velocidade. Os dados de entrada estão definidos na tabela 5:

Dados de Entrada

A_0	1
A_1	0
B_0	1
B_1	0
L (m)	10
ε (m/s)	1.0
u (m/s)	0.17
t (s)	10

Tabela 5: Caso 2 – advecção-difusão

Os gráficos abaixo ilustram os resultados obtidos para diferentes valores da constante de decaimento em instantes de tempo arbitrários que variam de $t=0$ s até $t=10$ s.

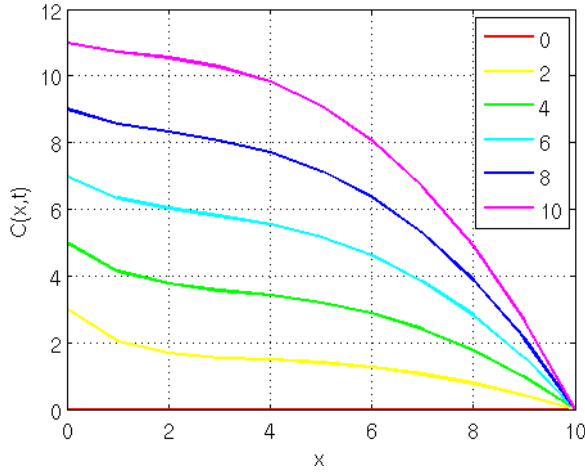


Figura 5.8: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $\lambda=0.2 \text{ s}^{-1}$

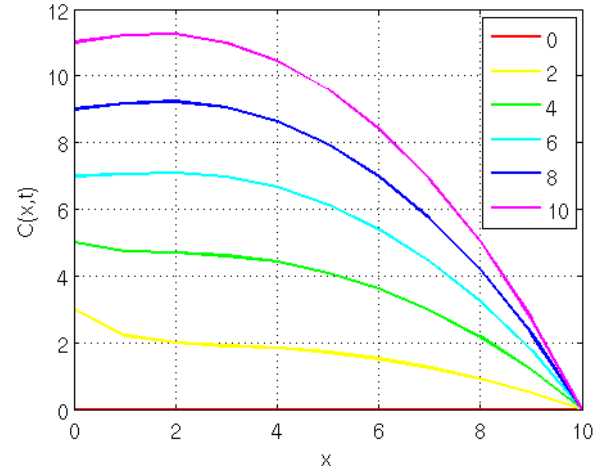


Figura 5.9: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $\lambda=0.5 \text{ s}^{-1}$

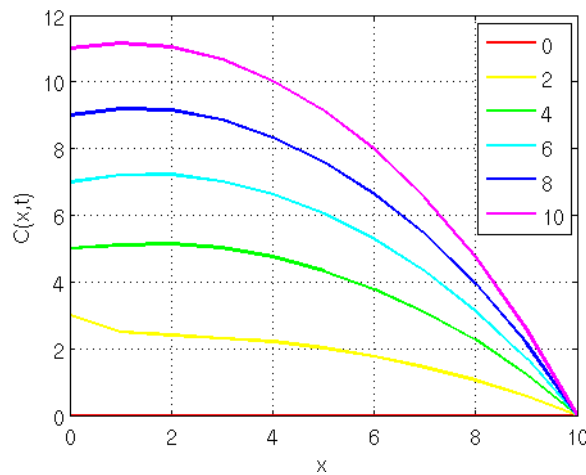


Figura 5.10: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $\lambda = 1.0 \text{ s}^{-1}$

Os resultados apresentados para diferentes valores da constante de decaimento confirmam a definição de que a constante de decaimento indica a velocidade com que o material orgânico é degradado em meio ao rio. Quanto maior o valor da constante mais rápido o material orgânico é degradado e, conseqüentemente, melhor é o desempenho do processo (COSTA et al 2007).

Fixando a constante de decaimento em $\lambda = 1.0 \text{ s}^{-1}$ e assumindo os mesmos valores da tabela 5, os gráficos abaixo ilustram os resultados obtidos para diferentes valores de velocidade, novamente em instantes de tempo arbitrários que variam de $t=0 \text{ s}$ até $t=10 \text{ s}$.

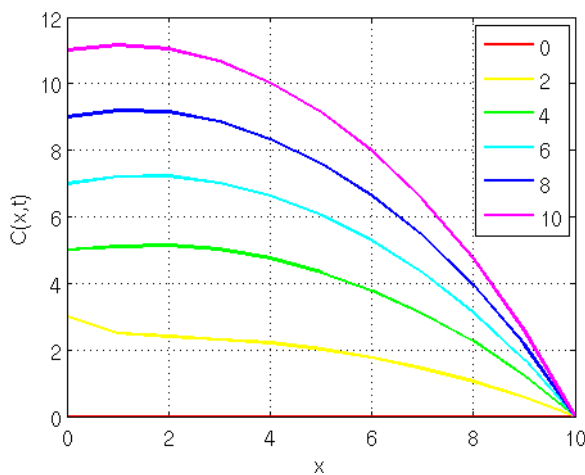


Figura 5.11: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $u=0.17 \text{ m/s}$

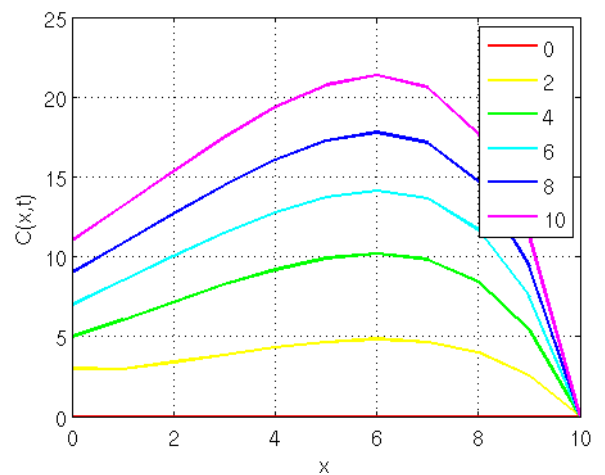


Figura 5.12: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $u=0.5 \text{ m/s}$

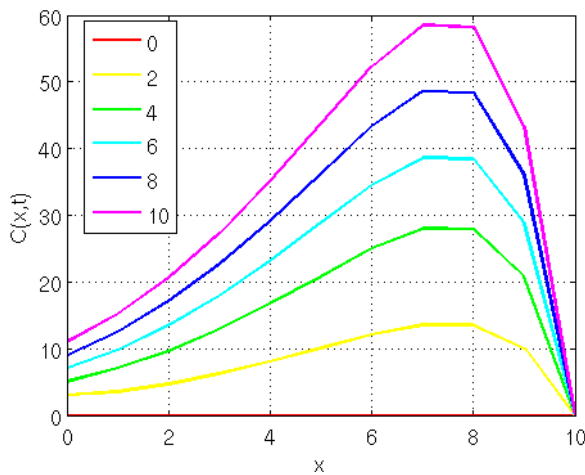


Figura 5.13: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $u=0.8$ m/s

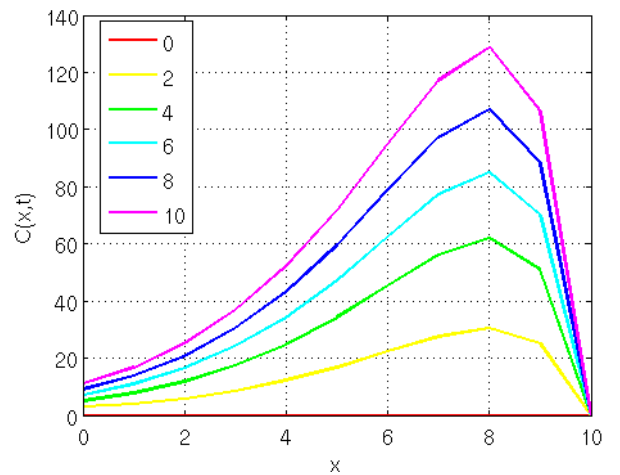


Figura 5.14: Modelo unidimensional de advecção-difusão para $u=1.0$ m/s

5.3 Resultados do Modelo Bidimensional

5.3.1 Caso 1 – Difusão Pura

Dada $C(x,t)$ temos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \quad (5.27)$$

- $C(0, y, t) = a + \frac{(c-a)}{l} y$, para $t > 0$ (5.28)

- $C(L, y, t) = b + \frac{(d-b)}{l} y$, para $t > 0$ (5.29)

- $C(x, 0, t) = a + \frac{(b-a)}{L} x$, para $t > 0$ (5.30)

- $C(x, l, t) = c + \frac{(d-c)}{L} x$, para $t > 0$ (5.31)

sujeita à seguinte condição inicial:

- $C(x, y, 0) = F(x, y).$ (5.32)

De acordo com as considerações do capítulo IV, a solução do problema, com difusão pura, é dada por:

$$C(x, y, t) = a + \frac{(b-a)}{L}x + \frac{y}{l} \left[\frac{(d-c) - (b-a)}{L}x + c - a \right] + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm} \cdot e^{-\varepsilon \left[\left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{m\pi}{l} \right)^2 \right] t} \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L}x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l}y$$
 (5.33)

na qual:

$$A_{nm} = \frac{4}{L \cdot l} \int_0^L \int_0^l \left[f(x, y) - \left\{ a + \frac{(b-a)}{L}x + \frac{y}{l} \left[\frac{(d-c) - (b-a)}{L}x + c - a \right] \right\} \right] \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L}x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l}y \, dy \, dx$$
 (5.34)

Este primeiro caso teste do modelo bidimensional trata novamente de uma descarga de poluente no início de um rio. Esta descarga é considerada contínua e regida linearmente. Os coeficientes de difusividade nas direções longitudinal e transversal são considerados constantes e os dados de entrada estão definidos na tabela 6:

Dados de Entrada

a	1
b	0
c	0
d	0
L (m)	15
l (m)	4

Tabela 6: Caso 1 – difusão pura

Os gráficos abaixo ilustram os resultados obtidos para diferentes valores do coeficiente de difusividade.

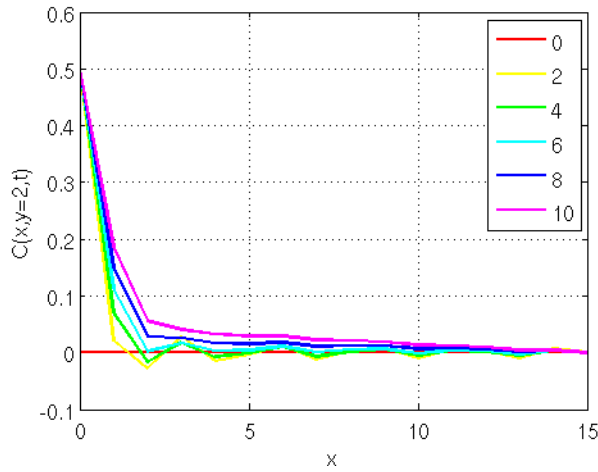


Figura 5.15: Modelo Bidimensional de Difusão Pura para $\varepsilon = 0.05 \text{ m}^2 / \text{s}$

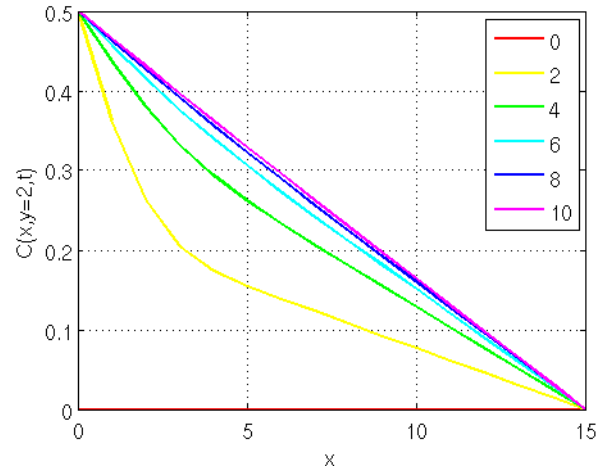


Figura 5.17: Modelo Bidimensional de Difusão Pura para $\varepsilon = 0.7 \text{ m}^2 / \text{s}$

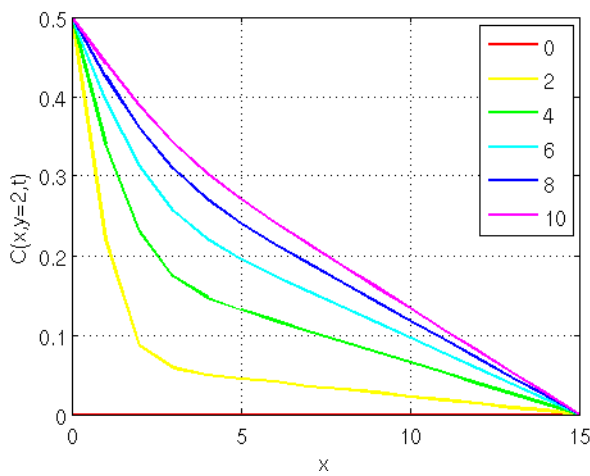


Figura 5.16: Modelo Bidimensional de Difusão Pura para $\varepsilon = 0.3 \text{ m}^2 / \text{s}$

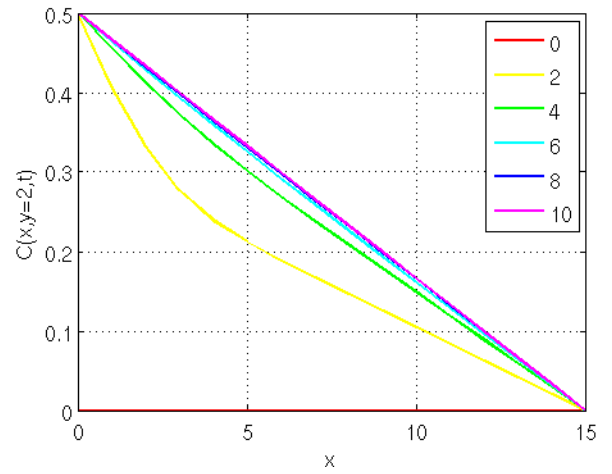


Figura 5.18: Modelo Bidimensional de Difusão Pura para $\varepsilon = 1 \text{ m}^2 / \text{s}$

5.3.2 Caso 2 – Difusão Pura

Dada $C(x, t)$ temos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \quad (5.35)$$

sujeito à:

$$\bullet \quad C(0, y, t) = \phi(t) \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l} \right) \quad (5.36)$$

$$\bullet \quad C(L, y, t) = 0 \quad (5.37)$$

$$\bullet \quad C(x, 0, t) = 0 \quad (5.38)$$

$$\bullet \quad C(x, l, t) = 0 \quad (5.39)$$

e condição inicial:

$$\bullet \quad C(x, y, 0) = 0 \quad (5.40)$$

De acordo com as considerações do capítulo IV, a solução do problema, com difusão pura, é dada por:

$$C(x, y, t) = -\text{sen} \left(\frac{\pi t}{28800} \right) \frac{y}{l} \left(1 - \frac{y}{l} \right) \left(1 - \frac{x}{L} \right) + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} w_{nm}(t) \cdot \text{sen} \frac{n\pi}{L} x \cdot \text{sen} \frac{m\pi}{l} y \quad (5.41)$$

na qual:

$$w_{nm}(t) = [1 - (-1)^m] \left\{ \frac{8\varepsilon}{nm\pi^2 l^2} \left[\frac{\beta \text{sen}(\theta t) - \theta \cos(\theta t) + \theta e^{-\beta t}}{\beta^2 + \theta^2} \right] + \frac{l^2}{3600nm^3 \pi^3} \left[\frac{\theta \text{sen}(\theta t) + \beta \cos(\theta t) - \beta e^{-\beta t}}{\beta^2 + \theta^2} \right] \right\} \quad (5.42)$$

O segundo caso teste do modelo bidimensional trata de uma fonte poluidora localizada no início do rio, a qual joga para o leito do rio produtos com uma concentração $C(x, y, t)$ de um determinado poluente. A concentração varia parabolicamente com a posição e o produto é periodicamente lançado no leito do rio com 16 horas entre uma emissão e outra.

Os coeficientes de difusividade nas direções longitudinal e transversal são considerados constantes e os dados de entrada são definidos na tabela 7:

Dados de Entrada

L (m)	200
l (m)	5
t (s)	720

Tabela 7: Caso 2 - difusão pura

Os gráficos abaixo ilustram os resultados obtidos para diferentes valores do coeficiente de difusão.

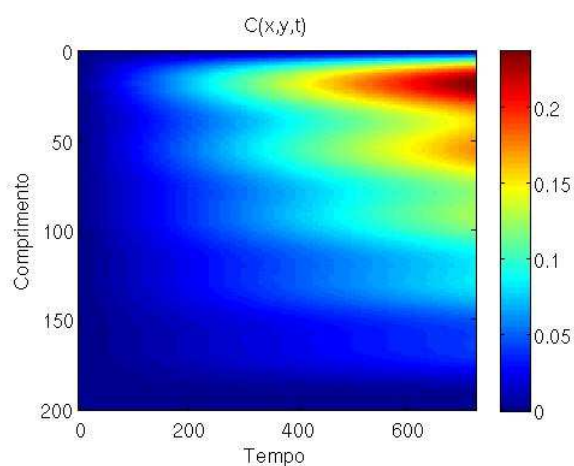


Figura 5.19: Modelo bidimensional de difusão pura para $\epsilon = 0.001 \text{ m}^2 / \text{s}$

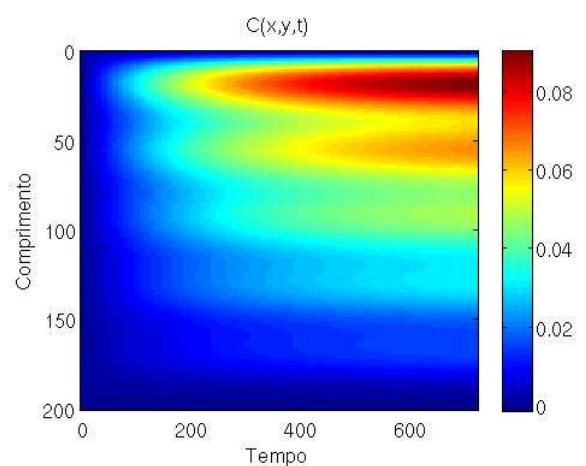


Figura 5.20: Modelo bidimensional de difusão pura para $\epsilon = 0.01 \text{ m}^2 / \text{s}$

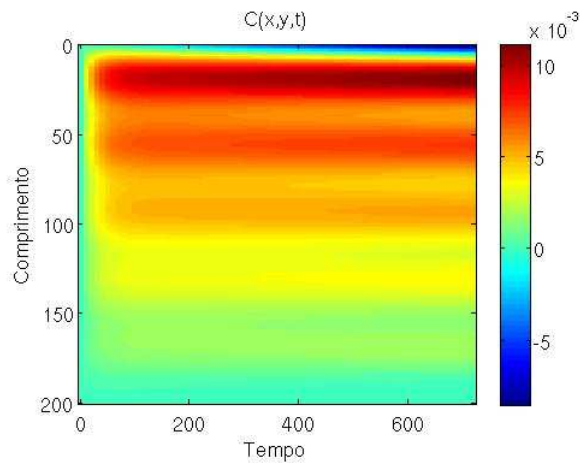


Figura 5.21: Modelo bidimensional de difusão pura para $\epsilon=0.1 \text{ m}^2 / \text{s}$

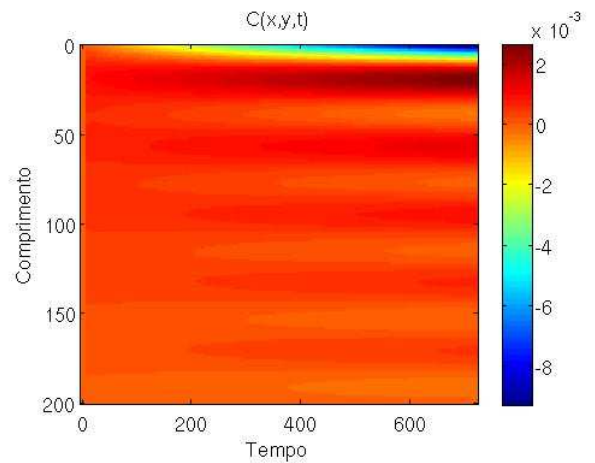


Figura 5.22: Modelo bidimensional de difusão pura para $\epsilon=1.0 \text{ m}^2 / \text{s}$

Novamente esses resultados gráficos mostram que quanto maior o coeficiente de difusão maior é a difusão do poluente no meio aquático. O que corrobora a afirmação de que o coeficiente de difusividade representa a facilidade com que cada soluto em particular se move em um determinado solvente.

Outro aspecto importante é verificar como comporta-se a concentração do poluente em relação ao tempo. Os dados de entrada são definidos na tabela 8:

Dados de Entrada

L (m)	200
l (m)	5
ϵ (m^2 / s)	1.0

Tabela 8: Caso 2 - difusão pura

Os gráficos abaixo ilustram os resultados obtidos para diferentes valores de tempo.

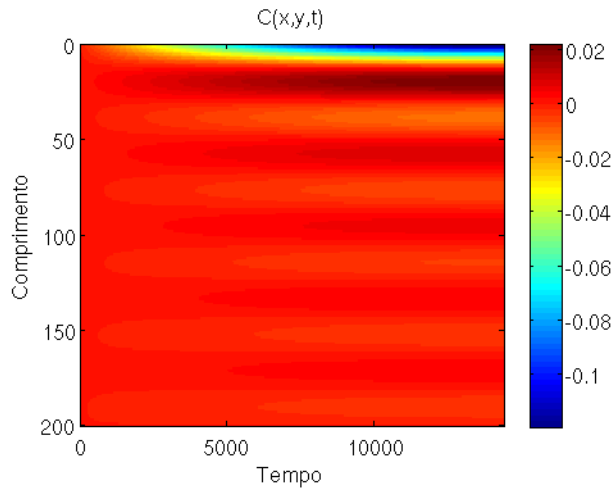


Figura 5.23: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=14400$ s

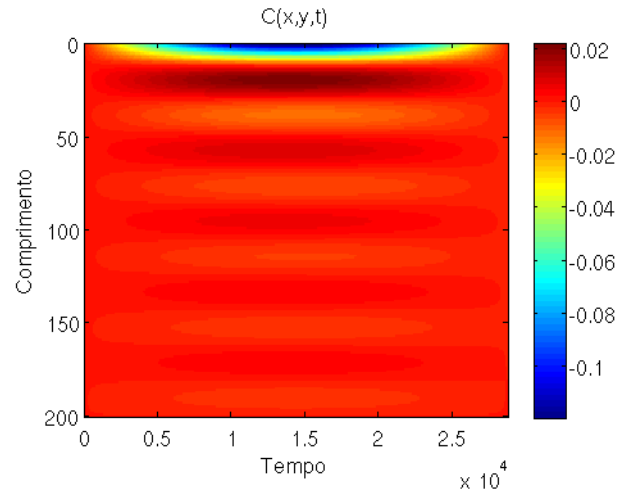


Figura 5.24: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=28800$ s

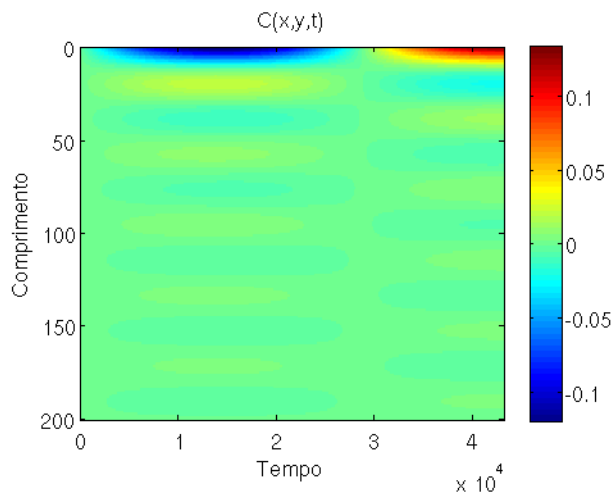


Figura 5.25: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=43200$ s

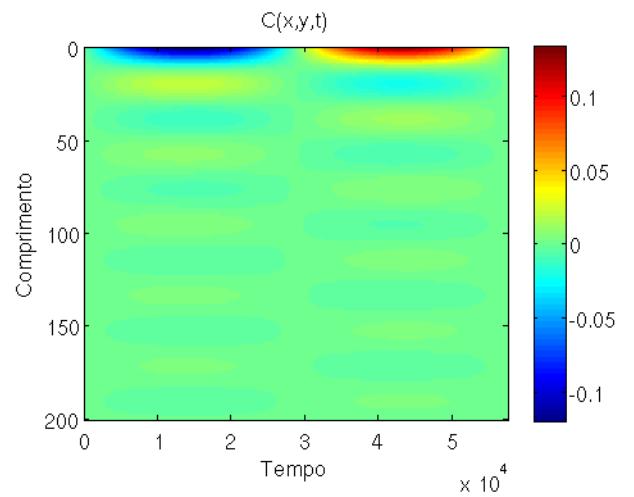


Figura 5.26: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=57600$ s

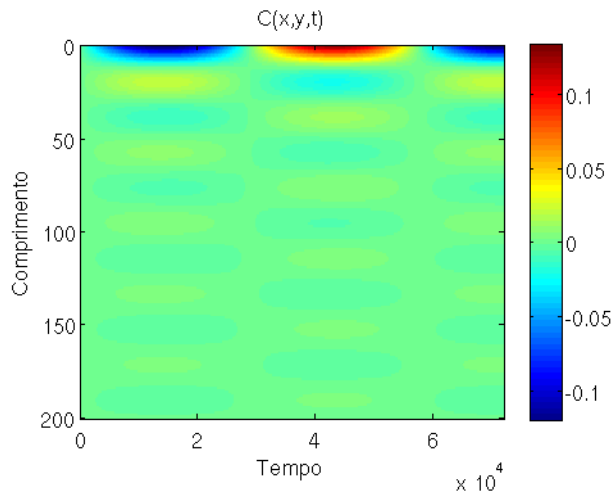


Figura 5.27: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=72000$ s

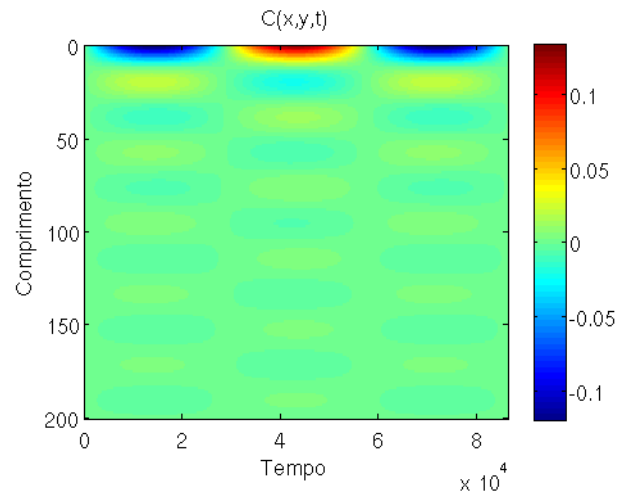


Figura 5.28: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=86400$ s

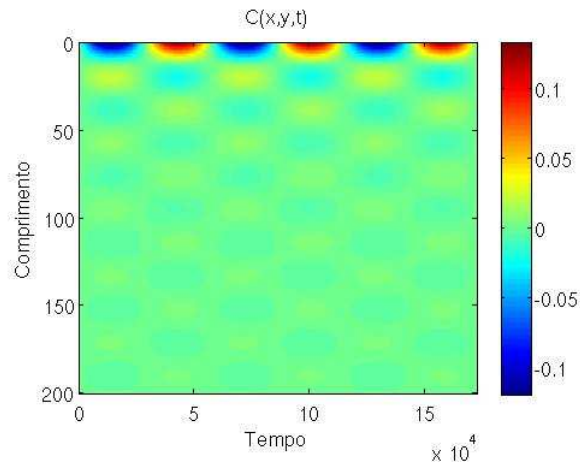


Figura 5.29: Modelo bidimensional de difusão pura para $t=2$ dias

Os resultados gráficos acima mostram o comportamento da concentração do poluente para um período inteiro de dois dias. Neste sentido podemos perceber que a concentração do poluente fixa-se próximo a fonte, uma vez que não temos o termo de advecção.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES

Este capítulo resume as principais conclusões obtidas através dos resultados apresentados no capítulo V. O trabalho proposto visava um maior entendimento do problema de dispersão de poluentes em rios e canais por meio do método de separação de variáveis, suas aplicações e restrições.

Utilizamos tal método para resolver os modelos unidimensionais e bidimensionais para a dispersão de poluentes em rios e canais. Estes modelos foram desenvolvidos para perfis de velocidade e difusividade constantes. Os resultados apresentados foram gerados a partir de formulações em regime transiente.

O método de separação de variáveis se mostrou eficaz na obtenção das soluções apresentadas nos capítulos III e IV. Tal método possibilitou a obtenção de soluções robustas que contornam os custos computacionais associados a métodos puramente numéricos. Estas soluções foram implementadas pelo uso da computação simbólica através do software *MatLab* que reduziu de forma considerável o tempo de processamento para obtenção dos resultados gráficos.

A principal limitação do método proposto reside no fato de não ser um método aplicável a modelos de dispersão com perfis de velocidade e de difusividade variáveis. Nestes casos novos métodos já vêm sendo desenvolvidos e aprimorados.

O objetivo deste trabalho foi propor um método analítico como solução ao problema em questão. Com os resultados do capítulo anterior, o método se mostrou adequado e com resultados satisfatórios. Os resultados provenientes do código computacional construído para o caso1 do modelo unidimensional foram verificados graficamente, além de verificados através da comparação com resultados já existentes na literatura.

Portanto, podemos perceber, através do modelo unidimensional, a eficácia do método utilizado por meio de uma boa aproximação com resultados existentes na literatura e expandir

essa aplicação para o modelo bidimensional, obtendo assim novos resultados que podem ser usados na verificação de modelos numéricos.

Pretende-se dar prosseguimento ao presente trabalho concluindo os resultados bidimensionais com presença de advecção e considerando os modelos apresentados em regime estacionário. Outra extensão natural deste estudo é a consideração de um modelo tridimensional de dispersão de contaminantes tanto em regime estacionário quanto em regime transiente.

Posteriormente, outras considerações relevantes são as que dizem respeito aos perfis de velocidades e de difusividades serem variáveis e sendo assim qual seria o melhor método a ser empregado.

CAPÍTULO VII

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BARROS, F.P.J., 2004. “Modelos Multidimensionais para Dispersão de Contaminantes em Rios e Canais: Soluções Híbridas por Transformação Integral”, Dissertação de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ.

BARROS, F.P., COTTA, R.M., 2007, “Integral transforms for three-dimensional steady turbulent dispersion in Rivers and channels”. *Applied Mathematical Modeling*, vol. 31, pp. 2719-2732.

BASHA, H.A., 1997, “Analytical model of two dimensional dispersion in laterally non-uniform axial velocity”, *Journal of Hydraulic Engineering*, Vol. 123, pp. 853-862.

BEJAN, A., “Heat Transfer”. John Wiley & Sons, New York, 2 edition, 1993.

BRAGA, B., HESPANHOL, I., CONEJO, J.G.L., DE BARROS, M.T.L., SPENCER, M., PORTO, M., NUCCI, P., JULIANO, N., EIGER, S., 2003, “Introdução á Engenharia Ambiental”, Prentice Hall, São Paulo.

BUSKE, D., FURTADO, I., QUADROS, R., WEYMAR, G., 2010, “Solução de um Modelo Bidimensional para a Dispersão de Contaminantes em Rios e Canais”, Artigo, FURG, Rio Grande, RS.

COSTA, M.J., SOUSA, J., LEITE, V., LOPES, W., SANTOS, K., 2007, “Co-digestão anaeróbia de substâncias surfactantes, óleo e lodo de esgoto”, *Engenharia Sanitária e Ambiental.*, Vol. 12, n 4, Rio de Janeiro.

COTTA, R.M., MIKHAILOV, M.D., 1997, “Heat Conduction: Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation”, John Wiley & Sons.

CULLEN, M.R., ZILL, D.G., “Equações Diferenciais”, Vol. 1, Editora Pearson, 3 edição, 2001. São Paulo, SP.

DIAS, N., 2003, “Obtenção de uma solução Analítica da Equação de Difusão-Advecção com Decaimento de Primeira Ordem pelo Método da Transformação de Similaridade Generalizada”, Revista Brasileira de Recursos Hídricos, Vol. 8, pp. 181-188.

FERNANDEZ, L., 2007, “Simulação da Propagação de Poluentes utilizando Transformação de Bäcklund – Modelo Bidimensional”, Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, RS.

FIGUEIREDO, D.G., 1987, “Análise de Fourier e Equações Diferenciais Parciais”. Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2 edição, 2004. Rio de Janeiro, RJ.

GANDOLFI, C., FACCHI, A., 2001, “On the relative role of hydrodynamic dispersion for river water quality”, Water Resources Research, Vol. 37, No. 9, pp. 2365 – 2375.

GARCIA, R., 2009, “Soluções Exatas para Problemas de Dispersão de Poluentes – Modelo Difusivo Baseado na Equação KDV”, Tese de Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, RS.

HUGHES, T.J.R., 1987, “The Finite Element Method”, Prentice-Hall, New Jersey, USA.

INCROPERA, F.P., DEWITT, D.P., “Fundamentals of Heat and Mass Transfer”. John Wiley & Sons, New York, 5 edition.

LEITHOLD, L., “O Cálculo com Geometria Analítica”, Vol. 2. Editora Harbra, 3 edição, 1994. São Paulo, SP.

LOEFFLER, C.F., SANTOS, J.C., “Solução Analítica de um Problema Difusivo-Advectivo Bidimensional através do Método de Separação de Variáveis”, Programa de pós-graduação em Engenharia mecânica, UFES, Vitória, ES.

MACHADO, M.B., 2006, “Modelagem Tridimensional da Dispersão de Poluentes em Rios”, Tese de Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, UNICAMP, Campinas, SP.

MALISKA, C.R., “Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacionais”. Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2 edição, 2004. Rio de Janeiro, RJ.

MEIRELES, A.C., BARRETO, F.M., SOUSA, I.V., LIMA, C.H., “Estudo da Solução da Equação Difusiva-Advectiva, para Rios Naturais, Utilizando o Método das Diferenças Finitas”. UFC, Fortaleza, CE.

MOLER, C., 2004, “Numerical Computing with MATLAB”, Society for Industrial and Applied Mathematics.

MÖLLER, S.V., SILVESTRINI, J.H., 2004, “Turbulência”, Volume 4, Editores: Möller, S.V. e Silvestrini, J.H., Associação Brasileira de Ciências Mecânicas, Rio de Janeiro, Brasil.

OZISIK, M.N., 1993, “Heat Conduction”, John Wiley & Sons.

PATANKAR, S.V., 1980, “Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”, McGraw-Hill, New York, USA.

POFFAL, C., 2005, “Solução da Equação Advectivo-Difusiva Utilizando Regras para Manipulação de Exponenciais de Operadores Diferenciais e Simetrias de Lie: Aplicações em Engenharia Ambiental”, Tese de Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, RS.

PORTO, R.L.L., BRANCO, S.M., CLEARY, R.W., COIMBRA, R.M., EIGER, S., LUCA, S. J., NOGUEIRA, V.P.Q., PORTO, M.F.A., 1992, “Hidrologia Ambiental”, Coleção ABRH de Recursos Hídricos, Parte 2, Ed. USP.

RIBEIRO, V., POFFAL, C., ZABADAL, J., 2009, “Uma Nova Formulação Analítica para a Resolução de Problemas de Poluição Aquática”, Revista Liberato. Vol. 10, pp. 35-51.

RIBEIRO, V., ZABADAL, J., GARCIA, R., VAN der LAAN, F., 2010, “Simulação da propagação de poluentes em meio aquático utilizando redução de ordem”, Revista de Sistemas de Informação da FSMA. Vol. 6, pp. 42-48.

SOUZA, M.D., 2005, “Implementação Computacional do Método dos Elementos de Contorno para Solução de Problemas de Difusão-Advecção pelo uso combinado da Solução Fundamental Dependente com a Solução Independente do Tempo”, Tese de Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ.

THOMANN, R.V., MUELLER, J.A., 1987, “Principles of Surface Water Quality Modeling and Control”, Harper Collins Publishers Inc. New York.

VILHENA, M.T., SEFIDVASH, F., 1985, “Two dimensional treatment of dispersion of pollutants in Rivers”, Int. J. Appl. Radiot. Isot. Vol. 36, pp. 569-572.

ZABADAL, J., BECK, D., GARCIA, R., LERSCH, E., HOFFMANN, C., 2006, “Problemas Difusivos Bidimensionais em Regime Permanente com Fonte Arbitrária – Soluções Exatas”, Engenharia Sanitária Ambiental. Vol. 11, pp. 125-132.

WANG, S.T., MCMILLAN, A.F., CHEN, B.H., 1978, “Dispersion of pollutants in channels with non-uniform velocity distribution”, Water Research, V.12, PP. 389-394.